

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

١٠١٨٣٤



دانشگاه بلوچستان
تحصیلات تکمیلی

پایان نامه کارشناسی ارشد در شیمی معدنی

عنوان:

تهیه، شناسایی و تعیین ساختار مولکولی
کمپلکسهای Ni(II) ، Sn(II) ، Zn(II) با
لیگاندهای جدید به دست آمده از واکنش
۶،۲-پیریدین دی کربوکسیلیک اسید با
پذیرنده های پروتون متفاوت

استاد راهنما:

دکتر علیرضا رضوانی

استاد مشاور:

دکتر ابوالقاسم مقیمی

تحقیق و نگارش:

خالد قاسمی

خرداد ۱۳۸۷



۳۳۸۷ / ۱۵ / ۲۸



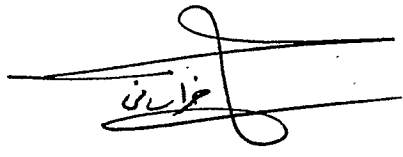
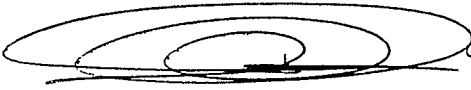

۱۰۸۳۳

بسمه تعالی

این پایان نامه با عنوان . تهیه، شناسایی و تعیین ساختار مولکولی کمپلکسهای Sn(II) , Ni(II) , Zn(II) با لیگاندهای جدید به دست آمده از ۲، ۶-پیریدین دی کربوکسیلیک اسید با آمینهای متفاوت قسمتی از برنامه آموزشی دوره کارشناسی ارشد شیمی معدنی توسط دانشجو خالد قاسمی تحت راهنمایی استاد پایان نامه دکتر علیرضا رضوانی تهیه شده است. استفاده از مطالب آن به منظور اهداف آموزشی با ذکر مرجع و اطلاع کتبی به حوزه تحصیلات تکمیلی دانشگاه سیستان و بلوچستان مجاز می باشد.

(نام و امضاء دانشجو)
خالد قاسمی
۸۷/۲/۲۰

این پایان نامه ۱ واحد درسی شناخته می شود و در تاریخ ۸۷/۳/۲۰ توسط هیئت داوران بررسی و درجه عالی به آن تعلق گرفت.

نام و نام خانوادگی	امضاء	تاریخ
استاد راهنما: دکتر علیرضا رضوانی		
استاد مشاور: دکتر ابوالقاسم مقیمی		
داور ۱: دکتر مزگان خراسانی مطلق		
داور ۲: دکتر حسن منصوری ترشیزی		
نماینده تحصیلات تکمیلی: دکتر حمیدرضا شاطریان		



تعهدنامه اصالت اثر

اینجانب خالد قاسمی تأیید می‌کنم که مطالب مندرج در این پایان‌نامه حاصل کار پژوهشی اینجانب است و به دستاوردهای پژوهشی دیگران که در این نوشته از آن استفاده شده است مطابق مقررات ارجاع گردیده است. این پایان‌نامه پیش از این برای احراز هیچ مدرک هم سطح یا بالاتر ارائه نشده است.

کلیه حقوق مادی و معنوی این اثر متعلق به دانشگاه سیستان و بلوچستان می‌باشد.

نام و نام خانوادگی دانشجو: خالد قاسمی

امضاء

تقدیم به:

پدر و مادرم که اشتیاق نگاهشان و تعالی روح بزرگ مهربا نیشان در تمام مراحل
زندگانییم خاطر را آرام می کرد و تقدیم به برادران و خواهران عزیزم و تقدیم به
همسر مهربانم که وجودش گرمابخش زندگی ام خواهد بود.

سپاسگزاری

با سپاس از خداوندگار هستی

با تشکر از استاد راهنمای بزرگوار و عزیزم جناب آقای دکتر رضوانی و استاد مشاور
گرانقدرم جناب آقای دکتر ابوالقاسم مقیمی که در این مدت از هیچ کوششی دریغ
نکردند.

با سپاس و تشکر از سرکار خانم دکتر سراوانی، که فداکارانه در این مسیر مرا همراهی
کردند.

با تشکر از سرکار خانم اکبر زاده و دوست عزیزم آقای هادی اسفندیاری به خاطر
زحمات فراوان و همکاری صمیمانه شان و با سپاس از دانشجویان دکتری آقایان
منصوری و صالحی و دوست عزیزم آقای صادقی

از تمام کسانی که در این مسیر یاور و همراه من بوده اند کمال تشکر را دارم.

چکیده

تهیه، شناسایی و تعیین ساختارهای مولکولی ترکیبات کئوردیناسیون سیستمهای خود مجموعه ساز انجام شد. این ترکیبات بوسیله واکنشهای انتقال پروتون تهیه شدند. در این واکنشهای انتقال پروتون ۶،۲-پیریدین دی کربوکسیلیک اسید (pydcH_2)، به عنوان دهنده پروتون و ۲،۱-فنیل دی آمین (phda) به عنوان پذیرنده پروتون انتخاب شدند. برای اساس دو ترکیب (phdaH)(pydcH) و (phdaH) $_2$ (pydc) به دست آمد و شناسایی این ترکیبها به وسیله طیف سنجی IR، $^1\text{H NMR}$ و $^{13}\text{C NMR}$ انجام شد. از طرف دیگر واکنش بین ۶،۲-پیریدین دی کربوکسیلیک اسید (pydcH_2) با ۱،۱-فنانتروлін-۵،۶-دیون (phen-dione) و ۲،۲-دی پیریدیل آمین (dpa) تنها دو ترکیب خنثی (phen-dion)(pydcH_2) و (dpa)(pydcH_2) شکل گرفت که به عنوان هم بلور متبلور شدند. این دو ترکیب بوسیله طیف سنجی IR و NMR شناسایی شدند. در میان این ترکیبها ساختار بلوری ترکیب (phen-dione)(pydcH_2). $4\text{H}_2\text{O}$ بوسیله پراش پرتو-X تعیین شد. این ترکیب در سیستم بلوری تری کلینیک و گروه فضایی $P\bar{1}$ با دو واحد مولکولی در سلول واحد متبلور می شود. فرمول تجربی برای این ترکیب $\text{C}_{19}\text{H}_{19}\text{N}_3\text{O}_{10}$ است پارامترهای سلول واحد عبارتند از:

$$\begin{aligned} a &= 8.7689(9)\text{\AA} & \alpha &= 101.408(5)^\circ \\ b &= 10.5701(12)\text{\AA} & \beta &= 95.301(5)^\circ \\ c &= 11.911(2)\text{\AA} & \gamma &= 113.633(5)^\circ \end{aligned}$$

مقدار R برای ۵۱۶۹ انعکاس، ۰/۰۲۶۳ است ساختار بلوری این ترکیب سیستم هم بلوری بین واحد های ۶،۲-پیریدین دی کربوکسیلیک اسید (pydcH_2) و ۱،۱-فنانتروлін-۵،۶-دیون را تایید می کند مهمترین ویژگی این ساختار حضور سیستم خنثی مولکولی می باشد که تنها به وسیله پیوند های هیدروژنی کنار یکدیگر قرار گرفته اند.

کمپلکس [phdaH] $_2$ [$\text{Zn}(\text{pydc})_2$] از واکنش (phdaH) $_2$ (pydc) و روی کلراید تهیه و بوسیله طیف سنجی IR و $^1\text{HNMR}$ شناسایی شد. واکنش هم بلور (phen-dione)(pydcH_2). $4\text{H}_2\text{O}$ با دو نمک فلز ZnCl_2 و SnCl_2 به ترتیب [$\text{Sn}(\text{phen-dione})(\text{pydc})$] و [$\text{Zn}(\text{phen-dione})(\text{pydcH})\text{Cl}$]. $2\text{H}_2\text{O}$ شکل گرفت. این کمپلکسها بوسیله طیف سنجی IR و NMR شناسایی شدند.

کمپلکس $[\text{Ni}(\text{phen})(\text{pydc})\text{H}_2\text{O}]\cdot 4\text{H}_2\text{O}$ از واکنش ۶،۲-پیریدین دی کربوکسیلیک اسید و ۱،۱-فنانترولین با $\text{NiCl}_2\cdot 6\text{H}_2\text{O}$ بدست آمد. این کمپلکس بوسیله طیف سنجی IR و Uv-vis شناسایی شد. ساختار بلوری آن بوسیله اشعه-X تعیین شد. این کمپلکس در سیستم بلوری تری کلینیک و گروه فضایی $P\bar{1}$ با دو واحد مولکولی در سلول واحد متبلور می شود. فرمول تجربی برای ترکیب کمپلکس $\text{C}_{19}\text{H}_{21}\text{N}_3\text{NiO}_9$ است پارامترهای سلول واحد عبارتند از:

$$\begin{array}{ll} a=7.9131(4) \text{ \AA} & \gamma=111.099(1)^\circ \\ b=10.6006(6) \text{ \AA} & \beta=96.158(1)^\circ \\ c=13.2268(7) \text{ \AA} & \gamma=111.099(1)^\circ \end{array}$$

مقدار R برای ۴۶۷۷ انعکاس، ۰/۰۳۴۰ است.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱	فصل اول: مقدمه
۲	۱-۱ ویژگی‌های ساختاری پیوند هیدروژنی
۳	۱-۲ نقش پیوند هیدروژنی در سیستم‌های انتقال پروتون
۵	۱-۳ هم بلوری‌ها (Cocrystals)
۱۰	۱-۴ شیمی کئوردیناسیون لیگاند ۶،۲- پیریدین دی کربوکسیلیک اسید
۱۱	۱-۵ مروری بر برخی از ترکیب‌های انتقال پروتون تهیه شده از ۶،۲-پیریدین دی کربوکسیلیک اسید و کمپلکس‌های آن
۱۳	۱-۶ هدف پروژه
۱۴	فصل دوم: کارهای تجربی.
۱۵	۲-۱ مواد شیمیایی مورد استفاده
۱۵	۲-۲ دستگاه‌های مورد استفاده
۱۶	۲-۳ لیگاندهای تهیه شده
۱۶	۲-۴ طرز تهیه ترکیب لیگاندها و کمپلکس‌های تهیه شده
۱۶	۲-۴-۱ لیگاند حاصل از واکنش انتقال پروتون بین ۶،۲-پیریدین دی کربوکسیلیک اسید و ۲،۱-فنیلن دی آمین
۱۶	الف) تهیه $[\text{ph}(\text{NH}_2)(\text{NH}_3)^+][\text{pydcH}]^-$
۱۷	ب) تهیه $[\text{ph}(\text{NH}_2)(\text{NH}_3)]_2[\text{pydc}]^{2-}$
۱۸	۲-۴-۲ لیگاند حاصل از واکنش بین ۶،۲-پیریدین دی کربوکسیلیک اسید و ۲،۱-۲-دی پیریدیل آمین
۱۹	۲-۴-۳ تهیه و شناسایی کمپلکس به دست آمده از ترکیب انتقال پروتون

- $Zn(NO_3)_2 \cdot 6 H_2O$ و $[ph(NH_2)(NH_3)] [pydcH]$
- ۱۹ ۴-۴-۲ تهیه و شناسایی کمپلکس به دست آمده از ترکیب انتقال پروتون
 $ZnCl_2$ و $[ph(NH_2)(NH_3)]_2[pydc]$
- ۲۰ ۵-۴-۲ تهیه و شناسایی هم بلور حاصل از واکنش بین ۶،۲-پیریدین دی
 کربوکسیلیک اسید و ۱۰،۱-فنانترولین ۶،۵-ایون $(phen-dione)(pydcH_2)$
- ۲۱ ۶-۴-۲ تهیه و شناسایی کمپلکس به دست آمده از هم بلور
 $SnCl_2$ و $(phen-dione)(pydcH_2) \cdot 4H_2O$
- ۲۲ ۷-۴-۲ تهیه و شناسایی کمپلکس به دست آمده از هم بلور
 $ZnCl_2$ و $(pydcH_2)(phen-dione) \cdot 4H_2O$
- ۲۲ ۸-۴-۲ تهیه و شناسایی کمپلکس $[Ni(phen)(pydc) \cdot H_2O] \cdot 4H_2O$
- ۲۴ فصل سوم: بحث و نتیجه گیری
- ۲۵ بخش اول: تهیه و شناسایی ترکیبهای $[ph(NH_2)(NH_3)][pydcH]$
- $[ph(NH_2)(NH_3)]_2[pydc]$ ، $[dpa][pydc]$ و کمپلکسهای به دست آمده از واکنش
 $Zn(II)$ با ترکیبهای $[ph(NH_2)(NH_3)][pydcH]$ و $[ph(NH_2)(NH_3)][pydc]$
- ۲۶ ۱-۳ تهیه و شناسایی ترکیب $[ph(NH_2)(NH_3)][pydcH]$
- ۲۶ ۱-۱-۳ فرایند تهیه
- ۲۶ ۲-۱-۳ بررسی طیفهای 1H MNR و ^{13}C NMR
- ۲۹ ۳-۱-۳ بررسی طیف IR
- ۳۰ ۲-۳ تهیه و شناسایی کمپلکس بدست آمده از واکنش $Zn(NO_3)_2$ و ترکیب انتقال
 پروتون $[ph(NH_2)(NH_3)][pydcH]$
- ۳۰ ۱-۲-۳ فرایند تهیه
- ۳۰ ۲-۲-۳ بررسی طیف 1H NMR
- ۳۲ ۳-۲-۳ بررسی طیف IR

۳۲	۳-۳ تهیه و شناسایی ترکیب $[ph(NH_3)(NH_2)]_2 [pydc]$
۳۲	۳-۳-۱ فرایند تهیه
۳۳	۳-۳-۲ بررسی طیفهای 1H MNR و ^{13}C NMR
۳۶	۳-۳-۳ بررسی طیف IR
۳۶	۴-۳ تهیه و شناسایی کمپلکس بدست آمده از واکنش $ZnCl_2$ و ترکیب انتقال پروتون $[ph(NH_3)(NH_2)]_2 [pydc]$
۳۷	۴-۳-۱ بررسی طیف 1H NMR
۳۷	۴-۳-۲ بررسی طیف IR
۳۸	۴-۳-۳ ساختار پیشنهادی
۴۱	۵-۳ لیگاند حاصل از واکنش بین ۲،۶-پیریدین دی کربوکسیلیک اسید و ۲،۴-دی پیریدیل آمین
۴۱	۵-۳-۱ بررسی طیف 1H NMR
۴۱	۵-۳-۲ بررسی طیف IR
۴۵	بخش دوم: تهیه، شناسایی و تعیین ساختار بلوری و مولکولی ترکیب $(phen-dione)(pydcH_2).4H_2O$ و شناسایی کمپلکسهای به دست آمده از واکنش $Zn(II)$ و $Sn(II)$ با این ترکیب
۴۶	۶-۳ تهیه و شناسایی ترکیب $(phen-dione)(pydcH_2).4H_2O$
۴۶	۶-۳-۱ فرایند تهیه
۴۶	۶-۳-۲ بررسی طیفهای 1H MNR و ^{13}C NMR
۴۹	۶-۳-۳ بررسی طیف IR
۴۹	۶-۳-۴ داده های پراش پرتو-X و تحلیل ساختار
۵۶	۶-۳-۵ پیوندهای هیدروژنی
۵۸	۷-۳ تهیه و شناسایی کمپلکس بدست آمده از $SnCl_2$ و ترکیب هم

	بلور (phen-dione)(pydcH ₂).4H ₂ O
۵۸	۳-۷-۱ فرایند تهیه
۵۸	۳-۷-۲ بررسی طیفهای ¹ H NMR و ¹³ C NMR
۶۱	۳-۷-۳ بررسی طیف IR
۶۲	۳-۸ تهیه و شناسایی کمپلکس به دست آمده از هم بلور ZnCl ₂ و ione).4H ₂ O
۶۲	۳-۸-۱ فرایند تهیه
۶۲	۳-۸-۲ بررسی طیف ¹ H NMR
۶۴	۳-۸-۳ بررسی طیف IR
۶۵	بخش سوم: تهیه، شناسایی و تعیین ساختار بلوری و مولکولی کمپلکس [Ni(phen)(pydc)H ₂ O]. 4H ₂ O
۶۶	۳-۹ تهیه، شناسایی و تعیین ساختار بلوری و مولکولی کمپلکس [Ni(phen)(pydc)].4H ₂ O
	۳-۹-۱ فرایند تهیه
۶۶	۳-۹-۲ بررسی طیف IR
۶۶	۳-۹-۳ بررسی طیف UV-vis
۶۷	۳-۹-۴ داده های پراش پرتو-X و تحلیل ساختار
۶۹	۳-۹-۵ پیوند های هیدروژنی
۷۰	نتیجه گیری
۷۵	پیوست ها
۷۶	مراجع
۱۰۲	چکیده

فهرست جدول ها

صفحه	عنوان جدول
۵۰	جدول ۱-۳ داده های بلوری ترکیب $(\text{phen-dione})(\text{pydcH}_2) \cdot 4\text{H}_2\text{O}$
۵۱	جدول ۲-۳ برخی از طول (\AA)، زاویه های پیوندی ($^\circ$) و زاویه های پیچشی ($^\circ$) ترکیب هم بلور $(\text{phen-dione})(\text{pydcH}_2) \cdot 4\text{H}_2\text{O}$
۵۷	جدول ۳-۳ داده های مربوط به پیوندهای هیدروژنی برای ترکیب $(\text{phen-dione})(\text{pydcH}_2) \cdot \text{H}_2\text{O}$
۶۶	جدول ۴-۳ نتایج تجزیه عنصری کمپلکس $[\text{Ni}(\text{phen})(\text{pydc})\text{H}_2\text{O}] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$
۷۱	جدول ۵-۳ داده های بلوری کمپلکس $[\text{Ni}(\text{phen})(\text{pydc})\text{H}_2\text{O}] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$
۷۲	جدول ۶-۳ برخی از طول (\AA)، زاویه های پیوندی ($^\circ$) و زاویه های پیچشی ($^\circ$) کمپلکس $[\text{Ni}(\text{phen})(\text{pydc})\text{H}_2\text{O}] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$
۷۴	جدول ۷-۳ داده های مربوط به پیوندهای هیدروژنی برای ترکیب $[\text{Ni}(\text{phen})(\text{pydc})\text{H}_2\text{O}] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$

فهرست شکل ها

صفحه	عنوان شکل
۶	شکل ۱-۱ پیوندهای هیدروژنی و هالوژنی بین گروههای عاملی یکسان و غیر یکسان
۷	شکل ۲-۱ تریمری از هتروسنتون که برهمکنش $\pi-\pi$ عامل و نیروهای واندروالس عامل پایداری شبکه هم بلوری آن است
۸	شکل ۳-۱ دیمری از هتروسنتون که برهمکنش $\pi-\pi$ -staging عامل عامل پایداری شبکه هم بلوری ی آن است
۸	شکل ۴-۱ ساختار هم بلوری ی ۴،۴- بی پیریدین ۴،۱- دی یدو بنزن که عامل پایداری شبکه بلوری پیوندهای هالوژنی است
۹	شکل ۵-۱ تشکیل نمک بین سولفامتوکسازول (SMX) و تریمتوپریم (TMP) و تشکیل هم بلوری بین سولفادیمیدین (SD) و تریمتوپریم را نشان می دهد
۱۱	شکل ۶-۱ الگوهای مختلف کثوردینه شدن ۶،۲- پیریدین دی کربوکسیلیک اسید زمانیکه به صورت یک دی آنیون به فلز کثوردینه می شود
۲۷	شکل ۱-۳ طیف $^1\text{H NMR}$ ترکیب $[\text{ph}(\text{NH}_2)(\text{NH}_3)][\text{pydcH}]$ در DMSO-d_6
۲۸	شکل ۲-۳ طیف $^{13}\text{C NMR}$ ترکیب $[\text{ph}(\text{NH}_2)(\text{NH}_3)][\text{pydcH}]$ در DMSO-d_6
۲۹	شکل ۳-۳ طیف IR ترکیب انتقال پروتون $[\text{ph}(\text{NH}_2)(\text{NH}_3)][\text{pydcH}]$ با استفاده از قرص KBr
۳۱	شکل ۴-۳ طیف $^1\text{H NMR}$ ترکیب $[\text{ph}(\text{NH}_2)(\text{NH}_3)][\text{pydcH}]$ با $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ در DMSO-d_6
۳۲	شکل ۵-۳ طیف IR ترکیب $[\text{ph}(\text{NH}_2)(\text{NH}_3)][\text{pydcH}]$ با $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2$ با استفاده از قرص KBr

- ۳۴ شکل ۳-۶ طیف $^1\text{H NMR}$ ترکیب $[\text{ph}(\text{NH}_3)(\text{NH}_2)]_2 [\text{pydc}]$ در DMSO-d_6
- ۳۵ شکل ۳-۷ طیف $^{13}\text{C NMR}$ ترکیب $[\text{ph}(\text{NH}_3)(\text{NH}_2)]_2 [\text{pydc}]$ در DMSO-d_6
- ۳۶ شکل ۳-۸ طیف IR برای ترکیب $[\text{ph}(\text{NH}_3)(\text{NH}_2)]_2 [\text{pydc}]$ با استفاده از قرص KBr
- ۳۸ شکل ۳-۹ طیف IR ترکیب $[\text{ph}(\text{NH}_3)(\text{NH}_2)]_2 [\text{pydc}]$ با ZnCl_2 با استفاده از قرص KBr
- ۴۰ شکل ۳-۱۰ طیف $^1\text{H NMR}$ برای کمپلکس $\text{Zn}(\text{II})$ به دست آمده از انتقال پروتون ترکیب $[\text{ph}(\text{NH}_3)(\text{NH}_2)]_2 [\text{pydc}]$ در DMSO-d_6
- ۴۲ شکل ۳-۱۱ طیف $^1\text{HNMR}$ ترکیب حاصل از واکنش ۶،۲- پیریدین دی کربوکسیلیک اسید و ۲،۲- دی پیریدیل آمین در DMSO-d_6
- ۴۳ شکل ۳-۱۲ طیف و شده $^1\text{HNMR}$ ترکیب حاصل از واکنش ۶،۲- پیریدین دی کربوکسیلیک اسید و ۲،۲- دی پیریدیل آمین در DMSO-d_6
- ۴۴ شکل ۳-۱۳ طیف IR ترکیب حاصل از واکنش ۶،۲- پیریدین دی کربوکسیلیک اسید و ۲،۲- دی پیریدیل آمین با استفاده از قرص KBr
- ۴۷ شکل ۳-۱۴ طیف $^1\text{H NMR}$ ترکیب $(\text{phen-dione})(\text{pydcH}_2).4\text{H}_2\text{O}$ در DMSO-d_6
- ۴۸ شکل ۳-۱۵ طیف $^{13}\text{C NMR}$ ترکیب $(\text{phen-dione})(\text{pydcH}_2).4\text{H}_2\text{O}$ در DMSO-d_6
- ۴۹ شکل ۳-۱۶ طیف IR ترکیب $(\text{phen-dione})(\text{pydcH}_2).4\text{H}_2\text{O}$ با استفاده از قرص KBr
- ۵۲ شکل ۳-۱۷ ساختار مولکولی ترکیب هم بلور $(\text{phen-dione})(\text{pydcH}_2).4\text{H}_2\text{O}$ با نمایش پیوند هیدروژنی
- ۵۲ شکل ۳-۱۸ ساختار مولکولی ترکیب هم بلور $(\text{phen-dione})(\text{pydcH}_2).4\text{H}_2\text{O}$ بدون پیوند هیدروژنی
- ۵۳ شکل ۳-۱۹ مدل فضا پرکن ترکیب هم بلور $(\text{phen-dione})(\text{pydcH}_2).4\text{H}_2\text{O}$
- ۵۳ شکل ۳-۲۰ منظره سه بعدی نمودار انباشتگی ترکیب هم بلور $(\text{phen-dione})(\text{pydcH}_2)$ با نمایش پیوند هیدروژنی

- شکل ۳-۲۱ الف و ب تصویرهایی از نمودار انباشتگی ترکیب هم بلور
 ۵۴ $(phen-dione)(pydcH_2).4H_2O$ در سلول واحد با نمایش فاصله های بین دو حلقه
 $phen-dione$
- شکل ۳-۲۲ تصویری از نمودار انباشتگی ترکیب هم بلور
 ۵۵ $(phen-dione)(pydcH_2).4H_2O$ که دو واحد $pydcH_2$ و دو واحد
 $phen-dione$ که نسبت به یکدیگر وضعیت نپوشیده دارند.
- شکل ۳-۲۳ پیوند هیدروژنی گروههای نشان داده با مولکول آب مجاور قویترین
 ۵۵ پیوندها ست
- شکل ۳-۲۴ طیف 1H NMR ترکیب $[Sn(phen-dione)(pydc)H_2O]$ در $DMSO-d_6$
 ۵۹
- شکل ۳-۲۵ طیف ^{13}C NMR ترکیب $[Sn(phen-dione)(pydc)H_2O]$ در $DMSO-d_6$
 ۶۰
- شکل ۳-۲۶ طیف IR کمپلکس $[Sn(phen-dione)(pydc)H_2O]$ با استفاده از قرص
 ۶۱ KBr
- شکل ۳-۲۷ طیف 1H NMR ترکیب $[Zn(phen-dione)(pydcH)H_2O]Cl.H_2O$ در
 ۵۳ $DMSO-d_6$
- شکل ۳-۲۸ طیف IR ترکیب $[Zn(phen-dione)(pydcH)H_2O]Cl.H_2O$ با استفاده از
 ۶۴ قرص KBr
- شکل ۳-۲۹ طیف IR ترکیب $[Ni(phen)(pydc)H_2O].4H_2O$ با استفاده از قرص KBr
 ۶۷
- شکل ۳-۳۰ طیف الکترونی کمپلکس $[Ni(phen)(pydc)H_2O].4H_2O$ در غلظت
 ۶۸ $10^{-2} M$ در $DMSO-d_6$
- شکل ۳-۳۱ طیف الکترونی کمپلکس $[Ni(phen)(pydc)H_2O].4H_2O$ در غلظت
 ۶۸ $10^{-5} M$ در $DMSO-d_6$
- شکل ۳-۳۲ ساختار مولکولی کمپلکس $[Ni(phen)(pydc)H_2O].4H_2O$ با نمایش
 ۷۳ پیوند هیدروژنی
- شکل ۳-۳۳ ساختار مولکولی کمپلکس $[Ni(phen)(pydc)H_2O].4H_2O$ بدون نمایش
 ۷۳

پیوند هیدروژنی

۷۴ شکل ۳-۳ نمودار انباشتگی کمپلکس $[\text{Ni}(\text{phen})(\text{pydc})\text{H}_2\text{O}]\cdot 4\text{H}_2\text{O}$ در سلول واحد با نمایش پیوندهای هیدروژنی

فهرست علائم

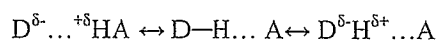
نشانه	علامت
1,2-phenylendiamin	phda
1,10-phenanthrpline	phen
1,10-phenanthroline-5,6-dione	phen-dione
2,2'-dipyridylamin	dpa
2,6-pyridindicarboxylicacid	pydcH2
2,6-pyridindiamin	pyda
creatin	creat

فصل اول

مقدمه

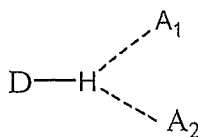
۱-۱ ویژگیهای ساختاری پیوند هیدروژنی

مفهوم پیوند هیدروژنی از اوایل قرن بیستم مطرح شده تا ویژگیهای شیمیایی، طیف سنجی، ساختاری، ترمودینامیکی و الکتریکی مواد به وسیله آن توجیه شود. مشخص است که تحت شرایط معینی یک اتم هیدروژن به وسیله ی نیروهای به نسبت قوی، دو اتم را جذب می کند، به طوری که ممکن است تصور شود که اتم هیدروژن به عنوان یک پیوند بین دو اتم عمل کرده است. زمانی هم تصور می شد که پیوند هیدروژنی نتیجه تشکیل دو پیوند کووالانسی به وسیله ی اتم هیدروژن است که با گسترش نظریه مکانیک کوانتوم ظرفیت، این دیدگاه رد شد. پائولینگ^۱ در کتاب معروفش (نظریه پیوند) نوشت: "حالا مشخص است که اتم هیدروژن با یک اربیتال پایدار (اربیتال 1s) فقط می تواند یک پیوند کووالانس تشکیل بدهد که پیوند هیدروژنی از نظر ماهیت بیشتر یونی است و بین دو اتم که الکترونگاتیوترین اتم ها هستند تشکیل می شود". بنابراین پیوندهای هیدروژنی می توانند به عنوان رزونانس سه ساختار زیر در نظر گرفته شوند [۲۱و۲].



D یک دهنده و A یک پذیرنده ی پیوند هیدروژنی مانند O، N و حتی هالوژنها هستند). قدرت پیوند هیدروژنی (که انعکاس آن در طول پیوند H...A مشاهده می شود) بستگی به بار جزئی مستقر روی D، H، و A دارد (با تشکیل پیوند هیدروژنی و تحت تاثیر قطبیت آن، اتم H مثبت تر و اتمهای D و A منفی تر می شوند). در مقایسه با پیوندهای کووالانسی که طول، قدرت و جهت گیری مشخصی دارند، پیوندهای هیدروژنی حدود ۲۰ تا ۳۰ مرتبه ضعیفتر هستند. (انرژی پیوند هیدروژنی بین ۵۰-۵ KJ/mol است). بنابراین اتمها بیشتر مستعد کشش و خم شدن هستند و همین امر سبب ایجاد شکلهای هندسی متفاوت برای D-H...A می شود.

پیوند هیدروژنی ضعیف وقتی به وجود می آید که دو گروه پذیرنده A₁ و A₂ در رقابت با همان اتم هیدروژن پیوند سه مرکزی یا دو شاخه تشکیل دهند.



1. Pauling