

مرکز پژوهش‌های شیمی و مهندسی شیمی ایران
پژوهشکده مواد معدنی، کاتالیزگرها و شیمی فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد
گرایش معدنی

عنوان:

ستتر و شناسایی لیگاند‌های هتروسیکلی نیتروژن دار و بررسی
رفتار آنها در مقابل فلزات نقره (I) و پالادیم(II)

استاد راهنما:

دکتر میترا قاسم زاده

استاد مشاور:

دکتر علی اکبر طرانی

نگارش:

فاطمه آخوندپور

۱۳۸۹ بهمن ماه

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

تقدیم به:

پدر و مادر بزرگوارم همراه با بوسه بر دستان پرمهرشان،
همسر عزیزم به خاطر تمام محبت‌ها و حمایت‌هایش،
دو فرشته کوچک زندگی‌ام که بی صبرانه منتظر آمدنشان هستم.

با تقدیر و تشکر از:

استاد گرامی سرکار خانم دکتر میترا قاسمزاده که در انجام پروژه حاضر با راهنمایی هایشان مرا یاری

نمودند و همیشه با آرامشی مثال زدنی پشتوانه گرمی در پیشبرد این پروژه برایم بوده اند.

جناب آقای دکتر رعیتی که داوری این پایان نامه را عهده دار بودند.

استاد مشاور جناب آقای دکتر علی اکبر طرانی که تصحیح این پایان نامه را بر عهده داشتند.

پروفسور Bernhard Neümller استاد دانشگاه Marburg (آلمان)، که در تعیین ساختار تک بلور

لیگاند و کمپلکس ها به وسیله کریستالو گرافی پراش اشعه X مرا یاری نمودند.

از خانم مهندس سمیرا با همت، خانم ندا نوروززاده، خانم عفت متفرکی و آقای محمد رسیدی، آقای

علی گوران و آقای سعید شیرخانی به خاطر تمام کمک هایی که در آزمایشگاه به من نمودند،

سپاسگزارم. همچنین از دوستان خوبم خانم مونیکا جوهربیان، خانم رخساره نوری و خانم الهام خدایی

بسیار سپاسگذارم.

اعضای هیئت علمی، مسئولین کتابخانه و کامپیوتر و تمامی کسانی که به نحوی در پیشبرد این پروژه مرا

یاری نمودند.

به علاوه از تمامی اعضای خانواده ام بویزه پدر و مادر عزیزم و همسر عزیزم که در طول تحصیل همیشه

پشتیبان و مشوق من بوده اند، نهایت تشکر را دارم.

چکیده

چکیده

در چند دهه اخیر به شیمی ترکیبات ناجور حلقوی نیتروژن دار به ویژه ۴،۲،۱-تری آزول ها و ۴،۲،۱-تری آزین ها، مشتقات و کمپلکس های فلزی آنها توجه خاصی شده است.

در این پژوهه با استفاده از مشتق سازی ترکیبات ۴-آمینو-۳-متیل-۱H-۴،۲،۱-تری آزول-(4H)-تیون (AMTT) و ۴-آمینو-۶-متیل-۳-تیوكسو-۴،۲،۱-تری آزین-(2H)-اون (AMTTO) از طریق انجام واکنش جانشینی، ترکیبات بسیار ناجور حلقه جدیدی سنتز شده است. از طریق واکنش ترفال دی آلدھید با ترکیب ۴-آمینو-۳-متیل-۱H-۴،۲،۱-تری آزول-(4H)-تیون (AMTT) ترکیب بیس هتروسیکلی جدید L₂ و از واکنش ترکیب ایزوفال دی آلدھید با ترکیب AMTT ترکیب بیس هتروسیکلی جدید L₃ و از واکنش ترکیب ترفال دی آلدھید با ترکیب ۴-آمینو-۶-متیل-۳-تیوكسو-۴،۲،۱-تری آزین-(2H)-اون (AMTTO)، ترکیب بیس هتروسیکلی جدید L₄ سنتز و شناسایی شدند و ساختار مولکولی ترکیبات حاصل توسط پراش اشعه ایکس نیز تعیین شد.

از واکنش میان ترکیب (AMTT) L₀ به عنوان لیگاند با نمک فلزی نیترات نقره به نسبت های مولی (۱:۱) کمپلکسی جدید با فرمول [PPh₃)Ag(L₀)₂] (NO₃)₂ حاصل شد که از طریق شناسایی های طیف سنجی ساختار آن بدست آمده است. همچنین از واکنش میان لیگاند (AMTT) L₀ با نمک فلزی PdCl₂ به نسبت (۱:۱) نیز کمپلکس [Pd(Cl)(PPh₃)(L₀)Pd(Cl)(PPh₃)₂]Cl . 3MeOH حاصل شد.

از واکنش میان لیگاند L₁ با نمک فلزی PdCl₂ به نسبت (۱:۱) و نمک فلزی نیترات نقره به نسبت (۱:۱) به ترتیب کمپلکس C₁₁ و C₁₂ حاصل شدند. از واکنش میان لیگاند L₃ با نمک فلزی پالادیم کلرید به نسبت (۱:۱) نیز کمپلکس C₃₁ بدست آمد.

ساختار بلوری لیگاندها و برخی از کمپلکس های آنها به وسیله پراش سنج تک بلور پرتوی ایکس مشخص شدند. لازم به ذکر است که اطلاعات اولیه برای شناسایی ترکیبات سنتز شده به وسیله بررسی های تجزیه عنصری، طیف سنجی زیر قرمز، اسپکتروسکوپی جرمی و رزونانس مغناطیسی هسته انجام شده است.

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فصل اول: بخش تئوری	۲
۱-۱- ترکیبات هتروسیکل یا ناجور حلقه	۲
۱-۲- لیگاندهای تیون هتروسیکل و کمپلکس‌های آنها	۵
۱-۳- لیگاندهای آزولی	۷
۱-۴- لیگانهای شیف-باز و کمپلکس‌های آنها	۲۱
۱-۵- لیگاندهای شیف-باز مشتق شده از ترکیب (AMTTO)	۳۰
فصل دوم: بخش تجربی	۳۸
۲-۱- مراحل تجربی کار	۳۸
۲-۲- مواد شیمیایی مورد استفاده	۳۸
۲-۳- دستگاه‌های مورد استفاده	۳۸
۲-۴- تهیه ترکیب تیوکربوهدرازید (TCH)	۳۹
۲-۴-۱- داده طیفی ترکیب TCH	۳۹
۲-۵- تهیه ترکیب ۴-آمینو-۶-متیل-۳-تیوکسو-۱،۲،۴-تریآزین-(2H)-اون (AMTTO)	۴۰
۲-۵-۱- روش تهیه ترکیب (AMTTO)	۴۰
۲-۵-۲- داده طیفی ترکیب (AMTTO)	۴۰
۲-۶- تهیه و شناسایی ترکیب ۴-آمینو-۳-متیل-۱،۲،۴-تریآزول-۵-تیون (L_0 / L) (AMTT)	۴۱
۲-۶-۱- روش تهیه ترکیب (L_0 / L) (AMTT)	۴۱
۲-۶-۲- داده طیفی ترکیب (L_0 / L) (AMTT)	۴۱
۲-۷- تهیه و شناسایی ترکیب (L_1)	۴۲
۲-۷-۱- روش تهیه ترکیب (L_1)	۴۲
۲-۷-۲- داده‌های طیفی ترکیب (L_1)	۴۳
۲-۷-۳- تجزیه و تحلیل داده‌های طیفی ترکیب (L_1)	۴۳
۲-۸- تهیه و شناسایی ترکیب (L_2)	۴۴
۲-۸-۱- روش تهیه ترکیب (L_2)	۴۴
۲-۸-۲- داده‌های طیفی ترکیب (L_2)	۴۵
۲-۸-۳- تجزیه و تحلیل داده‌های طیفی ترکیب (L_2)	۴۵
۲-۸-۴- بررسی داده‌های بلورشناسی تک بلور ترکیب (L_2)	۴۹
۲-۹- تهیه و شناسایی ترکیب (L_3)	۵۰
۲-۹-۱- روش تهیه ترکیب (L_3)	۵۰

۵۱	۲-۹-۲-داده‌های طیفی ترکیب (L ₃)
۵۱	۳-۹-۲-تجزیه و تحلیل داده‌های طیفی ترکیب (L ₃)
۵۵	۴-۹-۲-بررسی داده‌های بلورشناسی تک بلور ترکیب (L ₃)
۵۷	۱۰-۲-تهیه و شناسایی ترکیب (L ₄)
۵۷	۱۰-۲-روش تهیه ترکیب (L ₄)
۵۸	۱۰-۲-داده‌های طیفی ترکیب (L ₄)
۵۹	۱۰-۲-تجزیه و تحلیل داده‌های طیفی ترکیب (L ₄)
۶۲	۱۰-۲-بررسی داده‌های بلورشناسی تک بلور ترکیب (L ₄)
۶۳	۱۱-۲-تهیه و شناسایی ترکیب (L ₅)
۶۳	۱۱-۲-روش تهیه ترکیب (L ₅)
۶۴	۱۱-۲-داده‌های طیفی ترکیب (L ₅)
۶۴	۱۱-۲-تجزیه و تحلیل داده‌های طیفی ترکیب (L ₅)
۶۶	۱۲-۲-تهیه و شناسایی کمپلکس ۱:۱ پالادیم کلرید(II) با لیگاند L ₁ (کمپلکس C ₁₁)
۶۶	۱۲-۲-روش تهیه کمپلکس C ₁₁
۶۶	۱۲-۲-داده‌های طیفی کمپلکس C ₁₁
۶۶	۱۲-۲-تجزیه و تحلیل داده‌های طیفی کمپلکس C ₁₁
۶۸	۱۳-۲-تهیه و شناسایی کمپلکس ۱:۱ نیترات نقره(I) با لیگاند L ₁ (کمپلکس C ₁₂)
۶۸	۱۳-۲-روش تهیه کمپلکس C ₁₂
۶۸	۱۳-۲-داده‌های طیفی کمپلکس C ₁₂
۶۸	۱۳-۲-تجزیه و تحلیل داده‌های طیفی کمپلکس C ₁₂
۷۰	۱۴-۲-تهیه و شناسایی کمپلکس ۱:۱ پالادیم کلرید(II) با لیگاند L ₃ (کمپلکس C ₃₁)
۷۰	۱۴-۲-روش تهیه کمپلکس C ₃₁
۷۰	۱۴-۲-داده‌های طیفی کمپلکس C ₃₁
۷۰	۱۴-۲-تجزیه و تحلیل داده‌های طیفی کمپلکس C ₃₁
۷۲	۱۵-۲-تهیه و شناسایی کمپلکس نیترات نقره(I) با تری فنیل فسفین و لیگاند تری آزول
۷۲	۱۵-۲-روش تهیه کمپلکس نیترات نقره(I) با تری فنیل فسفین و لیگاند تری آزول
۷۳	۱۵-۲-داده‌های طیفی کمپلکس
۷۳	۱۵-۲-تجزیه و تحلیل داده‌های طیفی کمپلکس
۷۵	۱۵-۲-بررسی داده‌های بلورشناسی کمپلکس
۷۷	۱۶-۲-تهیه و شناسایی کمپلکس پالادیم کلرید(II) با تری فنیل فسفین و لیگاند تری آزول
۷۷	۱۶-۲-روش تهیه کمپلکس پالادیم کلرید(II) با تری فنیل فسفین و لیگاند تری آزول
۷۸	۱۶-۲-داده‌های طیفی کمپلکس
۷۸	۱۶-۲-تجزیه و تحلیل داده‌های طیفی کمپلکس

۸۲

فصل سوم: بحث و نتیجه گیری

۸۷

فصل چهارم: مراجع

۹۲

فصل پنجم: پیوست

فهرست پیوست

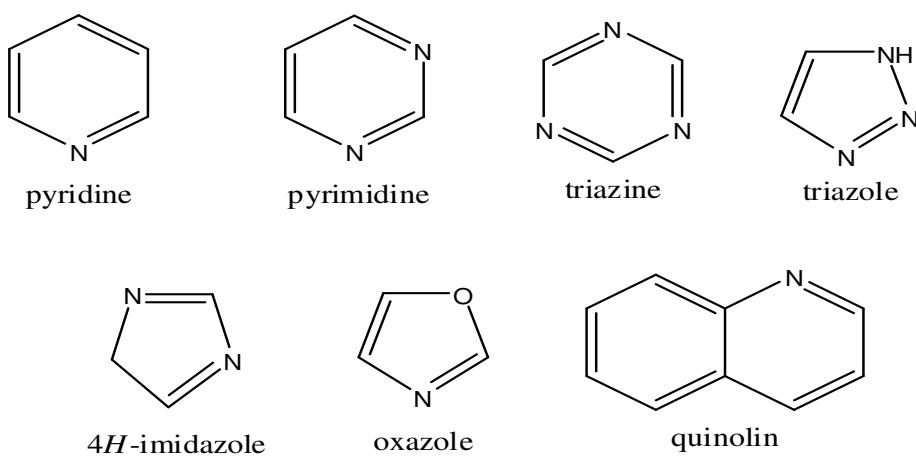
۹۳	شكل ۱- طیف MASS ترکیب L_1
۹۴	شكل ۲- طیف 1H -NMR ترکیب L_2
۹۵	شكل ۳- طیف ^{13}C -NMR ترکیب L_2
۹۵	شكل ۴- طیف MASS ترکیب L_2
۹۶	شكل ۵- طیف 1H -NMR ترکیب L_3
۹۶	شكل ۶- طیف ^{13}C -NMR ترکیب L_3
۹۷	شكل ۷- طیف IR ترکیب L_3
۹۷	شكل ۸- طیف MASS ترکیب L_3
۹۸	شكل ۹- طیف 1H -NMR ترکیب L_4
۹۸	شكل ۱۰- طیف ^{13}C -NMR ترکیب L_4
۹۹	شكل ۱۱- طیف IR ترکیب L_4
۹۹	شكل ۱۲- طیف MASS ترکیب L_4
۱۰۰	شكل ۱۳- طیف IR ترکیب L_5
۱۰۰	شكل ۱۴- طیف MASS ترکیب L_5
۱۰۱	شكل ۱۵- طیف IR کمپلکس C_{11}
۱۰۱	شكل ۱۶- طیف MASS کمپلکس C_{11}
۱۰۲	شكل ۱۷- طیف IR کمپلکس C_{12}
۱۰۲	شكل ۱۸- طیف MASS کمپلکس C_{12}
۱۰۳	شكل ۱۹- طیف IR کمپلکس C_{31}
۱۰۳	شكل ۲۰- طیف MASS کمپلکس C_{31}
۱۰۴	شكل ۲۱- طیف IR کمپلکس $[(PPh_3)Ag(L_0)]_2(NO_3)_2$
۱۰۴	شكل ۲۲- طیف MASS کمپلکس $[(PPh_3)Ag(L_0)]_2(NO_3)_2$
۱۰۵	شكل ۲۳- طیف 1H -NMR کمپلکس $[Pd(Cl)(PPh_3)(L_0)Pd(Cl)(PPh_3)_2]Cl \cdot 3MeOH$
۱۰۶	شكل ۲۴- طیف IR کمپلکس $[Pd(Cl)(PPh_3)(L_0)Pd(Cl)(PPh_3)_2]Cl \cdot 3MeOH$

- شکل ۲۵-طیف MASS کمپلکس $[Pd(Cl)(PPh_3)(L_0)Pd(Cl)(PPh_3)_2]Cl \cdot 3MeOH$
- جدول ۱: داده‌های بلورنگاری ترکیبات (L_2) و (L_3)
- جدول ۲: داده‌های بلورنگاری ترکیب (L_4)
- جدول ۳: داده‌های بلورنگاری ترکیبات $\{ (PPh_3)Ag(L_0) \}_2 [NO_3]_2$ و $[Pd(Cl)(PPh_3)(L_0)Pd(Cl)(PPh_3)_2]Cl \cdot 3MeOH$

فصل اول: بخش تئوری

۱-۱- ترکیبات هتروسیکل یا ناجور حلقه

ترکیباتی را ناجور حلقه می‌نامند که از سیستمی حلقوی با حداقل یک اتم غیر کربنی تشکیل شده باشد. عناصری که معمولاً به همراه کربن در سیستم حلقوی وجود دارند، نیتروژن، اکسیژن و گوگرد می‌باشند [۱]. در شکل (۱-۱) تعدادی از این دسته ترکیبات را مشاهده می‌کنیم که حاوی اتم‌های N و O هستند.



شکل (۱-۶)- ساختمان چند نمونه از لیگاند‌های تیون هتروسیکل

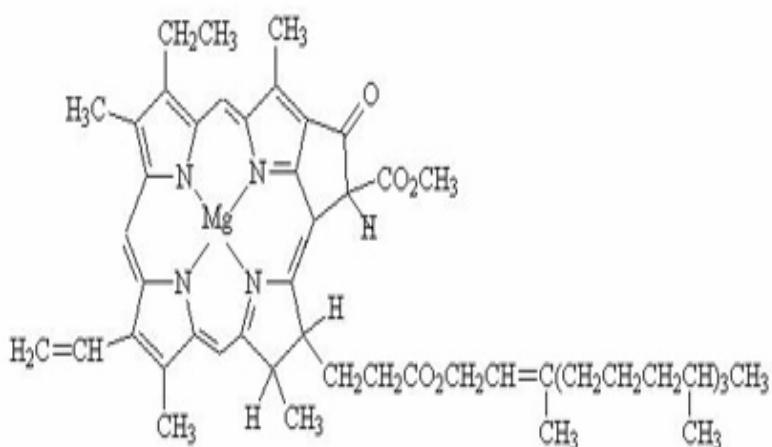
ترکیبات ناجور حلقه محدوده استفاده وسیعی دارند و در میان انواع ترکیبات دارویی، دامپزشکی و شیمی گیاهی سهم عمده ای دارند. آنها به عنوان عوامل شفاف کننده نوری، ضد اکسایش، ضد خوردگی، افزودنی ها و بسیاری از عوامل دیگر به کار می‌روند [۲-۶].

یکی از ویژگی‌های مهم در ترکیبات ناجور حلقه، امکان ظهور گروه‌های فعال به صورت استخلاف در بخشی از خود سیستم ناجور حلقه است. برای مثال، اتم‌های نیتروژن بازی می‌توانند هم به صورت استخلاف آمینو و هم به صورت بخشی از حلقه در ترکیب ناجور حلقه ظاهر شوند. به این ترتیب، گروه‌های استخلافی روی حلقه یا اتم‌های ناجور داخل حلقه موجب ایجاد ساختارهای متنوع در ناجور حلقه‌ها می‌شوند. [۷-۱۵]

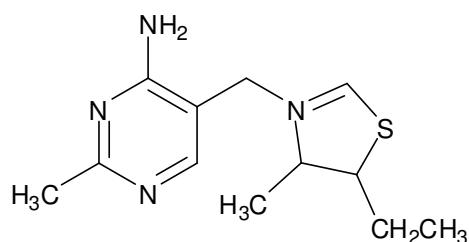
در دهه‌های اخیر استفاده از ترکیبات ناجور حلقه به عنوان حد بواسطه‌های سنتزهای آلی نیز روند فزاینده‌ای یافته است. بسیاری از آنها دارای اهمیت اساسی در سیستم موجودات زنده می‌باشند. به عنوان مثال، می‌توان

به اسیدهای نوکلئیک اشاره کرد که مشتقاتی از سیستم‌های پیریمیدینی و پورینی هستند و شرکت آنها در رونویسی^۱ قطعیت یافته است. کلروفیل (شکل ۲-۱) و هم که مشتقات سیستم حلقوی پورفیرینی هستند، از اجزای لازم برای فتوسنتز و انتقال اکسیژن در گیاهان عالی و حیوانات می‌باشد.

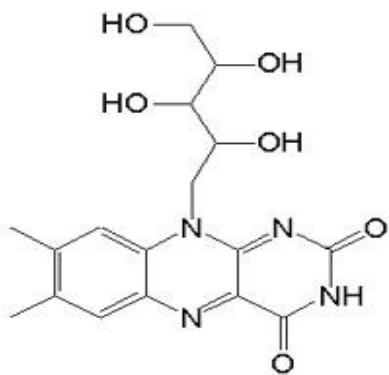
اجزای ضروری ترکیب رژیم غذایی مثل تیامین (ویتامین ب ۱) شکل (۳-۱)، ریبوفلاوین (ویتامین ب ۲) شکل (۴-۱)، پیریدوکسول (ویتامین ب ۶)، نیکوتینامید (ویتامین ب ۳) و اسید آسکوربیک (ویتامین ث) از دیگر ترکیبات ناجورحلقه هستند. از میان بیست آمینواسیدی که معمولاً در پروتئین‌ها یافت می‌شوند، سه اسید آمینه به نام‌های هیستیدین شکل (۵-۱)، پرولین و تریپتوفان شکل (۶-۱) ترکیبات ناجورحلقه‌ای هستند. بنابراین تعجب آور نیست که حجم عده کارهای تحقیقاتی جاری به روش‌های سنتز و خصوصیات ترکیبات ناجورحلقه اختصاص یافته است. در زیر شکل ساختمان چند نمونه از این ترکیبات را مشاهده می‌کنید.



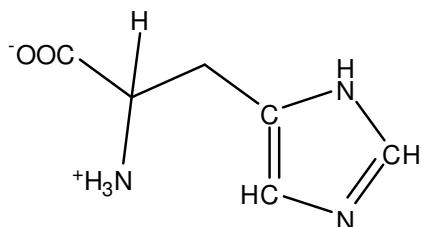
شکل (۲-۱)-مولکول کلروفیل



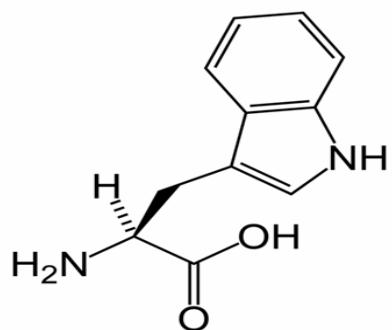
شكل (۱-۳)- تركيب تيامين



شكل (۱-۴)- تركيب ريبوفلاوين



شكل (۱-۵)- تركيب هيستيدين



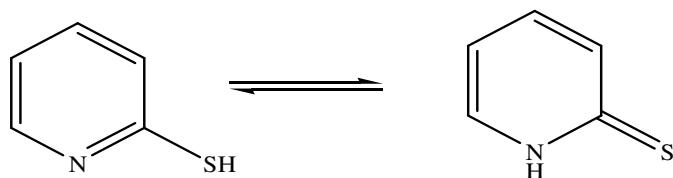
شکل (۶-۱)-ترکیب تریپتوفان

با توجه به تنوع بسیار زیاد ترکیبات ناجور حلقه، در اینجا به توضیحاتی در مورد شیمی ترکیبات ناجور حلقه حاوی ۳ اتم دهنده نیتروژن پرداخته می‌شود.

۱-۲-لیگاندهای تیون هتروسیکل و کمپلکس‌های آنها

ترکیبات دارای گروه تیوآمید ($-NH-C=S-$) در هتروسیکلهای نیتروژن‌دار را لیگاندهای تیون هتروسیکلی می‌نامند.

ویژگی مهم این لیگاندها وجود حالت توتومری تیون-تیول در آنها می‌باشد که این خصوصیت باعث ایجاد تنوع زیادی از مشتقات مفید، حاوی اتم‌های کوئوردینه شونده گوناگون با خواص بیوشیمیایی فراوان شده است [۲۵-۱۶].



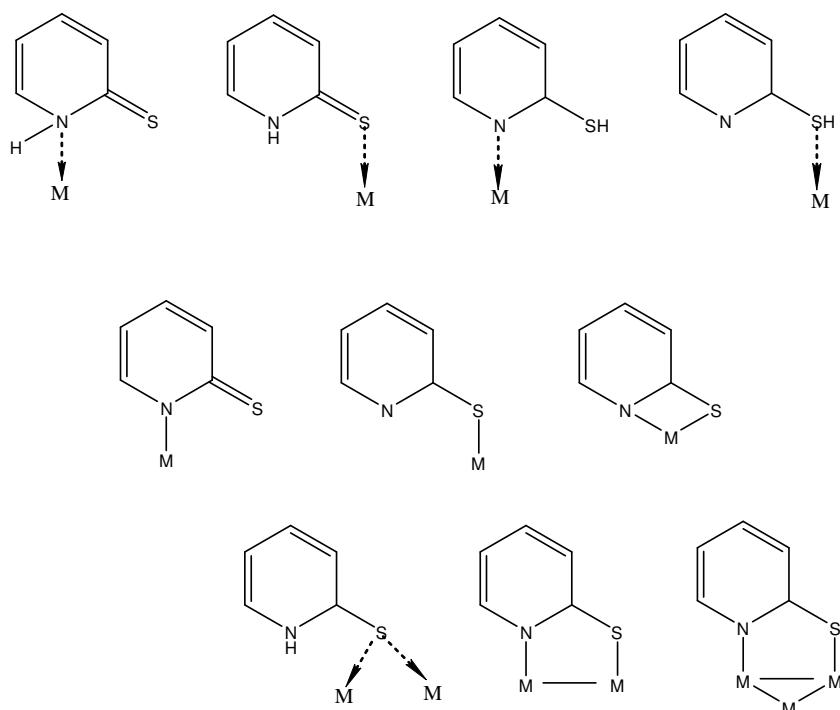
شکل (۱-۷)- توتومری بین تیول و تیون در لیگاندهای تیون ناجور حلقه

وجود توتومری بین دو حالت تیون و تیول سبب می‌شود که این لیگاندها هم به عنوان لیگاند تک دندانه و هم به عنوان لیگاند چند دندانه عمل کنند [۲۶، ۲۷]. به این ترتیب که این ترکیبات می‌توانند از طریق اتم نیتروژن یا اتم گوگرد به صورت یک دندانه به یون فلزی کوئوردینه شوند و یا از طریق اتم‌های نیتروژن و گوگرد به صورت دو دندانه در کمپلکس ظاهر شوند [۲۸]. در مواردی هم از طریق پل زدن ارتباط بین چند فلز را برقرار می‌نمایند که در این حالت می‌تواند بین یون‌های فلزی شرکت کننده در کمپلکس پیوند فلزی ایجاد شود. برخی از اتصالات نسبت به برخی دیگر استحکام بیشتری داشته و در کمپلکس‌ها بیشتر دیده می‌شوند. در مواردی که اتصال از طریق اتم‌های نیتروژن و گوگرد انجام شود می‌تواند منجر به ایجاد حلقه‌های

چهار، پنج و شش عضوی شود و ترکیب حاصل می‌تواند پایدارتر باشد و یا به دلیل پیچش‌هایی در حلقه

ناپایدار باشد. در شکل زیر، تعدادی از طرق اتصال شناخته شده ترکیبات تیون هتروسیکل نمایش داده شده

است [۲۹-۳۰].



شکل (۸-۱)- نحوه اتصال لیگاندهای تیون هتروسیکلی به یون فلزی

۱-۳-لیگاندهای آزولی

سیستم های حلقوی با بیش از یک ناجوراتم ساختارهای متنوعی تولید می کنند. تفاوت در جایگیری و تعداد اتم ها باعث ایجاد ساختمان های گوناگونی شده و حضور ناجوراتم اضافی در سیستم تاثیرات مهمی را در خواص ترکیب خواهد داشت. در اینجا به معرفی چند نمونه از این سیستم ها می پردازیم.

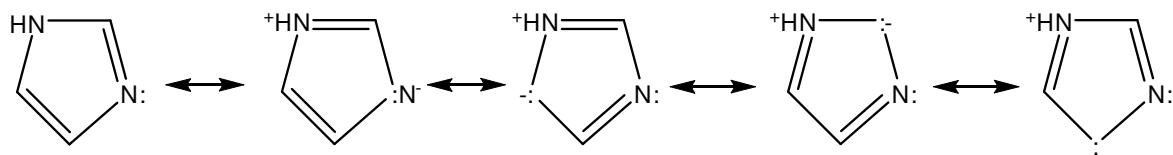
ترکیب ایمیدازول در سال ۱۸۵۸ برای اولین بار توسط هنریش دبس^۱ سنتز شد در حالی که مشتقات مختلف ایمیدازول در ۱۸۴۰ تهیه شده بودند. ایمیدازول یک هتروسیکل مسطح ۵ عضوی با انرژی رزونانس قابل توجه و کمی بیشتر از پیروول می باشد. ساده ترین عضو این خانواده ایمیدازول می باشد که در حالت جامد به رنگ زرد کمرنگ دیده می شود. ایمیدازول ها عموماً حلالیت ضعیفی در آب دارند اما در محلول های آلی مثل کلروفرم، پروپیلن گلیکول، روغن پلی اتوکسیلات به خوبی حل می شوند. وجود اتم نیتروژن در حلقه ها آثار مهمی بر خواص حلقه می گذارد. اتم های نیتروژن اضافی دارای جفت الکترون تنها در سطح حلقه ها می باشند. این الکترون ها در سیستم π دخالت نداشته و بدین ترتیب محل مناسبی را برای حمله پروتون ها و سایر الکترون دوست ها فراهم می کنند. علاوه بر این اتم های نیتروژن باعث کاهش سطوح انرژی اوربیتال های π می گردند. در نتیجه حمله الکترون دوستی بر روی اتم کربن در مقایسه با پیروول، فوران یا تیوفن مشکل تر می گردد. از سوی دیگر اتم های نیتروژن اضافی اثر القائی الکترون کشنده کی دارند و باعث پایداری بیشتر حدواتسطه ای با بار منفی در واکنش می شوند.

اثر اتم های نیتروژن اضافی را می توان در خواص اسیدی و بازی این هتروسیکل ها نیز مشاهده کرد. جفت الکترون موجود بر روی اتم نیتروژن آن را برای پروتونه شدن مناسب می کند و به این دلیل اغلب آزول ها بازهای قویتری نسبت به پیروول هستند.

¹. Henrich Debs

از سوی دیگر پایداری آنیون‌های آزولید خیلی بیشتر از آنیون‌های پیرولید بوده و بنابراین آزول‌های حاوی گروههای NH اسیدهای قوی‌تری نسبت به پیرول می‌باشند. ایمیدازول یک باز نسبتاً قوی است اما سایر آزول‌ها بازهای ضعیفی هستند. خواص بازی معمولاً با افزایش اتم‌های نیتروژن کاهش می‌یابد که به دلیل اثر الکترون‌کشندگی اتم‌های نیتروژن اضافی است.

تحرک آسان پروتون‌ها در ترکیبات آزولی فاقد استخلاف روی اتم نیتروژن نتیجه پیوندهای هیدروژنی گسترده در این ترکیبات در حالت مایع و جامد است. پیوند هیدروژنی در آزول‌های دارای استخلاف روی نیتروژن یا در اکسازول‌ها و تیازول‌ها ممکن نیست. نتیجه مهم دیگر تحرک پروتون این است که در دی آزول‌ها، تری آزول‌ها و تراآزول‌های فاقد استخلاف روی اتم نیتروژن به دلیل انتقال بین مولکولی پروتون، اشکال متعدد توتومری وجود دارد. انتقالات پروتونی در این ترکیبات معمولاً بقدرتی سریع است که امکان جداسازی ساختمان‌های مجزا را نمی‌دهد ولی ممکن است یکی از اشکال توتومرها در محلول شکل غالب باشد. حلقه ایمیدازول دارای ساختارهای رزونانسی زیر می‌باشد.



شکل (۹-۱)- ساختارهای رزونانسی ایمیدازول

ایمیدازول در بسیاری از مولکول‌های مهم زیستی دیده شده است. در ساختمان اسیدآمینه ضروری هیستیدین و محصول کربوکسیل‌زدایی آن -هیستامین- حضور دارد. ایمیدازول آزاد یک باز آلی نسبتاً قوی است و

می‌تواند به عنوان یک اسید ضعیف نیز فعالیت کند. در برخی از آنزیم‌ها که عملکرد آنها کاتالیز انتقال

پرتوون است، سیستم ایمیدازول می‌تواند هم به عنوان اسید و هم به عنوان باز عمل کند.

بسیاری از ترکیبات مهم صنعتی و فنی دارای مشتقات ایمیدازول می‌باشند. به عنوان مثال "پلی بنزومیدازول"

دارای ایمیدازول متصل به حلقه بنزن بوده که در برابر حرارت مقاوم می‌باشد و در صنعت به عنوان عامل

بازدارنده خوردگی برای فلزاتی مانند مس در سیستم‌های آبی بکار برد می‌شود. از این ماده در ترکیبات

گوناگون مورد استفاده در عکاسی و الکترونیک نیز استفاده می‌شود.

حلقه ایمیدازول بخش مهمی را در بسیاری از داروها از جمله داروهای ضد فشار خون و داروهای ضد قارچی

و قارچ‌کش به خود اختصاص داده است. ایمیدازول‌ها فعالیت ضد باکتری، ضد قارچی، ضد پرتوزاوی و ضد

انگلکی دارند.

مشتقات فنیلی ایمیدازول‌ها دارای اثرات ضد قارچی گسترده‌ای بر مخمرها و قارچ‌های رشته‌ای بوده و در

درمان بسیاری از بیماری‌های موضعی و سیستمیک ناشی از این عوامل به کار می‌روند. "تیابندازول"

(شکل ۱-۱۰) یک ضد انگل بوده که یک ایمیدازول می‌باشد و خاصیت ضد قارچی نیز دارد. اولین بار در

سال ۱۹۴۴ اثرات ضد قارچی بتزایمیدازول (شکل ۱-۱۱) گزارش گردید.

"کلروبنتزیل ایمیدازول" اولین آزولی بود که کرم موضعی ۵ درصد آن وارد بازار شد و روی بسیاری از

قارچ‌ها و باکتری‌های گرم مثبت مؤثر بود. اهمیت ایمیدازول‌های ضد قارچ با معرفی سه ترکیب

کلوتریمازول (شکل ۱-۱۲)، میکونازول (شکل ۱-۱۳) و اکونازول (شکل ۱-۱۴) در سال ۱۹۶۹ مشخص

گردید و با ارائه کتوکونازول (شکل ۱-۱۵) در سال ۱۹۸۱ پیشرفت قابل ملاحظه‌ای پیدا کرد.