

١٢١٥



دانشگاه عالی سینما

دانشکده شیمی  
پایان نامه کارشناسی ارشد  
گرایش شیمی معدنی

تحت عنوان:

سنتر و شناسایی لیگاندهای بازشیف (بزرگ حلقه و باز حلقه)  
حاوی آمین های آروماتیک و کمپلکس های مربوطه آن ها با  
تعدادی از یون های فلزی

استاد راهنما:  
پروفسور حسن کی پور

استاد مشاور:  
پروفسور سید جواد صابونچی

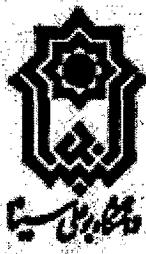
پژوهشگر:  
عبدالحسین شریفی راد

۱۳۸۸/۱۱/۱۵

جعفر علامت مولوی سعید  
دانشگاه عالی سینما

تابستان ۱۳۸۷

همه امتیاز های این پایان نامه به دانشگاه بو علی سینا تعلق دارد. در صورت استفاده از تمام یا بخشی از مطالب پایان نامه در مجلات، کنفرانس ها و یا سخنرانی ها، باید نام دانشگاه بو علی سینا (یا استاد یا اساتید راهنمای پایان نامه) و نام دانشجو با ذکر مأخذ و ضمن کسب مجوز کتبی از دفتر تحصیلات تکمیلی دانشگاه ثبت شود. در غیر این صورت مورد پیگرد قانونی قرار خواهد گرفت.



## دانشکده شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد شیمی (گرایش معدنی)

تحت عنوان:

# سنتز و شناسایی لیگاندهای باز شیف (بزرگ حلقه و باز حلقه) حاوی آمین های آروماتیک و کمپلکس های مربوطه آن ها با تعدادی از یون های فلزی

استاد راهنما:

پروفسور حسن کی پور

استاد مشاور:

پروفسور سید جواد سید زاده صابونچی

توسط:

عبدالحسین شریفی راد

کمیته ارزیابی پایان نامه:

استاد شیمی معدنی

استاد شیمی معدنی

۲- استاد مشاور: پروفسور سید جواد سید زاده صابونچی

دانشیار شیمی معدنی

۳- استاد مدعو: دکتر صادق صالح زاده

استادیار شیمی معدنی

۴- استاد مدعو: دکتر رضا آزادبخت



## دانشکده شیمی

جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

عبدالحسین شریفی راد

در رشته شیمی (گرایش معدنی)

تحت عنوان:

### سنتز و شناسایی لیگاند های بازشیف (بزرگ حلقه و باز حلقه) حاوی آمین های آروماتیک و کمپلکس های مربوطه آن ها با تعدادی از یون های فلزی

به ارزش ۸ واحد در روز سه شنبه ۸۷/۴/۲۵ ساعت ۱۰ صبح در محل سالن آمفی تئاتر ۲ دانشکده  
شیمی و با حضور اعضای هیأت داوران زیر برگزار گردید و با نمره  
درجه به تصویب رسید.

کمیته ارزیابی پایان نامه:

استاد شیمی معدنی

۱ - استاد راهنما: پروفسور حسن کی پور (رئیس کمیته)

استاد شیمی معدنی

۲ - استاد مشاور: پروفسور سید جواد سیدزاده صابونچی

دانشیار شیمی معدنی

۳ - استاد مدعو: دکتر صادق صالح زاده

استاد یار شیمی معدنی

۴ - استاد مدعو: دکتر رضا آزاد بخت

تقدیر میم به:

شہدائی انقلاب اسلامی

## به نام خدا

### سپاس و قدر دانی

منت خدای را، عزّ و جلّ که طاعتش موجب قربت است و به شکر اندرش مزید نعمت. پس از حمد و ثنا به درگاه خدای مهربان از بزرگوارانی که مرا مورد لطف خویش قرار دادند تشکر و قدردانی می کنم.

از استاد راهنمای دلسوز و ارجمندم، جناب آقای پروفسور حسن کی پور که در طول این مدت همواره با راهنمایی های ارزشمند خود و صبر و حوصله در انجام این پژوهه و نگارش این پایان نامه مرا یاری فرمودند از صمیم قلب تشکر می کنم.

از استاد مشاور گرانقدرم، جناب آقای پروفسور صابونچی که مرا مورد لطف و مرحمت خود قرار دادند صمیمانه تشکر می کنم.

از استاد گرامی، جناب آقای دکتر صادق صالح زاده، جناب آقای دکتر رضا آزاد بخت که رحمت مطالعه و داوری این پایان نامه را قبول فرمودند تشکر می کنم. همچنین از سرکار خانم قائمی نماینده تحصیلات تكمیلی تشکر می کنم.

از ریاست محترم دانشکده شیمی جناب آقای دکتر صاین و مسئول تحصیلات تكمیلی دانشکده شیمی جناب آقای دکتر هاشمی تشکر می کنم.

از جناب آقای پروفسور ایلوخانی و پروفسور حبیبی و سایر استاد بزرگواری که در این مدت در خدمت آن ها کسب فیض کرده ام تشکر می کنم.

از آقایان زیر جدیان و مصنفات و خانم رنجبران به خاطر همکاری های خوب و رحمت های که در حق اینجانب کشیده اند تشکر می کنم.

از بزرگواران و دوستان عزیزم آقایان: رضایی والا، دهقان، گودرزی، دفتری، نعمت طلب، دادرس، گلبداغی، بیات، جعفر زاده، امیری، حاتمی و شوشتاری تشکر می کنم.

و با تشکر فراوان از خانم ها: شایسته، عسکری، صادق پور، راهپیما، ارزنگی، لیاقتی و اخلاقی. در پایان از سایر دوستان عزیزی که در آزمایشگاه هایمعدنی، آلی، تجزیه، شیمی فیزیک و کاربردی مرا مورد لطف و محبت خود قرار داده اند تشکر می کنم.

نام خانوادگی: شریفی راد	نام: عبد الحسین
عنوان پایان نامه:	
سنتر و شناسائی لیگاندهای بازشیف (بزرگ حلقه و باز حلقه) حاوی آمین های آромاتیک و کمپلکس های مربوطه آن ها با تعدادی از یون های فلزی	
استاد مشاور: پروفسور سید جواد صابونچی	استاد راهنما: پروفسور حسن کی پور
مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد دانشگاه: بولیسینا همدان	رشته: شیمی دانشکده: شیمی
تعداد صفحه: ۱۶۹	گرایش: معدنی
واژه های کلیدی: دی آمین، لیگاند بازشیف، کمپلکس بازشیف زنجیر باز، کمپلکس بازشیف بزرگ حلقه، گوسین	
چکیده:	
<p>در این پژوهه، دی آمین های ۲،۱-بیس (۲-آمینو فنوکسی)-۴-ترشیو بوتیل بنزن و ۲،۱-بیس (آمینوفنوکسی) بنزن و ۲،۲-[اتان-۱-دی ایل بیس (تیو)] دی آنیلین در ابتدا از کتکول و ۴-ترشیو بوتیل کتکول و ۱-فلوئورو-۲-نیترو بنزن و ۱-کلرو-۲-نیترو بنزن و ۱-اتان دی تیول در حضور پتابسیم کربنات (<math>K_2CO_3</math>) با استفاده از واکنش جانشینی هسته دوستی ترکیبات نیترو مربوطه تهیه و سپس توسط پودر روی و آمونیم کلرید (<math>NH_4Cl</math>) گروه های نیترو احیا شده و دی آمین های ذکر شده سنتر شدند.</p> <p><math>L_3</math>, <math>L_4</math>, <math>L_5</math>, <math>L_6</math> و <math>L_7</math> که از نوع لیگاند بازشیف زنجیر باز شش دندانه (<math>N_2O_4</math>), (<math>N_2S_2O_2</math>) و (<math>N_2S_4</math>) هستند با استفاده از دی آمین های مربوطه و ۵-برموسالسیل آلدھید یا ارتو وانیلین یا تایوفن کربالدھید تهیه شدند، اما در تهیه و خالص سازی لیگاندهای <math>L_1</math> و <math>L_2</math>، که از نوع لیگاند بازشیف زنجیر باز شش دندانه (<math>N_4O_2</math>) هستند، به مقدار کافی جهت گرفتن طیف توفیقی حاصل نشد.</p> <p>کمپلکس های <math>Zn^{2+}</math>, <math>Cd^{2+}</math>, <math>Mn^{2+}</math>, <math>Hg^{2+}</math> و <math>Cu^{2+}</math> از لیگاند های <math>L_1</math> و <math>L_2</math> سنتر شدند.</p> <p>کمپلکس های بزرگ حلقه بازشیف از واکنش تمپلت ۲،۱-بیس (آمینوفنوکسی) بنزن و ۲،۶-دی فرمیل - ۴-متوكسی فنول در حضور نمک های فلزی <math>Ni^{2+}</math>, <math>Zn^{2+}</math> و <math>Cd^{2+}</math> تهیه شدند.</p> <p>سنتر ترکیبات دی نیتروها، دی آمین ها، لیگاندها و کمپلکس های زنجیر باز روی و کادمیم به وسیله روش های اسپکتروسکوپی (IR, NMR) و تکنیک تجزیه عنصری تأیید شده اند.</p> <p>سنتر سایر کمپلکس ها به وسیله IR و تکنیک تجزیه عنصری و ساختار کمپلکس <math>MnL_2Cl_2</math> با اسپکتروسکوپی X-ray تأیید شده اند.</p> <p>به وسیله نرم افزار گوسین، محاسبات (ab initio) برای برخی ترکیبات به عمل آمد و طیف IR و رaman تعدادی از آن ها در فاز گاز رسم شد.</p>	

## فهرست مطالب

صفحه

عنوان

مقدمه

فصل اول : تئوری و مروری بر پژوهش های قبلی	۱
۱-۱- آریل هالیدها	۲
۲-۱- واکنش پذیری آریل هالیدها	۲
۲-۲- ساختار آریل هالیدها	۲
۳-۱- جانشینی هسته دوستی آروماتیکی	۴
۴-۱- تهیه اترهای تاجی و دی آمین ها از کنکول و مشتقات آن	۷
۵-۱- لیگاندهای بزرگ حلقه و کمپلکس های آن ها	۱۰
۵-۲- اندازه حفره	۱۲
۵-۳- سنتز لیگاندهای بزرگ حلقه	۱۴
۶-۱- سنتز لیگاندهای بزرگ حلقه توسط روش با رقت بالا	۱۵
۶-۲- چه وقت استفاده از روش سنتز با رقت بالا ضروری نمی باشد؟	۱۵
۶-۳- سنتز کمپلکس های بزرگ حلقه	۱۶
۶-۴- سنتز لیگاند در حین تشکیل کمپلکس (روش تمپلت)	۱۶
۶-۵- سنتز مستقیم لیگاند و سپس تشکیل کمپلکس	۱۷
۶-۶- بازشیف	۱۸
۶-۷- احیای بازشیف	۱۹
۶-۸- روش های ممکن برای تشکیل بزرگ حلقه های بازشیف	۲۰
۶-۹- لیگاندهای بزرگ حلقه بازشیف و غیر بازشیف	۲۲

## فهرست مطالب

صفحه

عنوان

۱-۸-۱- لیگاندهای بزرگ حلقه با اتم‌های دهنده اکسیژن و نیتروژن ..... ۲۲
۱-۹- لیگاندهای پلی آمین گوگرددار و اهمیت بیولوژیکی آن‌ها ..... ۲۴
۱-۱۰- مروری بر کارهای انجام شده توسط گروه پژوهشی دکتر کی پور ..... ۲۶
۱-۱۰-۱- لیگاند های حاوی حلقه فنول ..... ۲۹
۱-۱۱- مروری بر شیمی محاسباتی ..... ۳۰
۱-۱۱-۱- مکانیک مولکولی ..... ۳۰
۱-۱۱-۱- روش‌های ساختار الکترونی ..... ۳۲
۱-۱۱-۱- روش‌های عاملی دانسته ..... ۳۳
۱-۱۱-۱- مدل شیمی ..... ۳۴
۱-۱۱-۱- تعریف مدل شیمی ..... ۳۶
۱-۱۱-۱- روش (Method) ..... ۳۶
۱-۱۱-۱- سری پایه (Basisset) ..... ۳۷
۱-۱۱-۱- لایه پسته و باز ..... ۳۸
۱-۱۱-۱- مدل‌های ترکیبی ..... ۴۰
<b>فصل دوم: کارهای تجربی</b>
مواد شیمیایی ..... ۴۲
وسایل و تجهیزات ..... ۴۲
۱-۱- تهیه ۲، ۶ - دی فرمیل - ۴- متوكسی فنل (Dfm) ..... ۴۳
۱-۲- روش عمومی تهیه ترکیبات نیترو از ۱-فلوئورو -۲- نیترو بنزن ..... ۴۳
۱-۲-۱- تهیه ۱، ۲ - بیس (۲- نیترو فنوكسی) بنزن ..... ۴۴
۱-۲-۲- تهیه ۱، ۲ - بیس (۲- نیتروفنوكسی) -۴- ترشیو بوتیل بنزن ..... ۴۴

## فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۴۵	- تهیه ۱ ، ۱ - [اتان-۲،۱-دی ایل بیس (تیو)] بیس (۲-نیتروبنزن)
۴۵	- روش عمومی تهیه دی آمین ها از ترکیبات نیترو
۴۵	- ۱-۴-۲- تهیه ۱ ، ۲ - بیس (۲-آمینوفنولکسی) بنزن
۴۶	- ۲-۴-۲- تهیه ۱ ، ۲ - بیس (۲-آمینوفنولکسی) - ۴ - ترشیو بوتیل بنزن
۴۷	- ۳-۴-۲- تهیه ۱ ، ۲ - [اتان-۲،۱-دی ایل بیس (تیو)] دی آنیلین
۴۷	- ۵- روش عمومی تهیه لیگاند های باز شیف
۴۷	- ۱-۵- تهیه لیگاند بازشیف زنجیره باز $L_1$
۴۸	- ۲-۵- تهیه لیگاند بازشیف زنجیره باز $L_2$
۴۹	- ۲-۳-۵- تهیه لیگاند بازشیف زنجیره باز $L_3$
۴۹	- ۲-۴-۵- تهیه لیگاند بازشیف زنجیره باز $L_4$
۵۰	- ۲-۵-۵- تهیه لیگاند بازشیف زنجیره باز $L_5$
۵۰	- ۲-۶-۵- تهیه لیگاند بازشیف زنجیره باز $L_6$
۵۱	- ۲-۷-۵- تهیه لیگاند بازشیف زنجیره باز $L_7$
۵۲	- ۶- تهیه کمپلکس های برخی از یون های فلزی با لیگاند $L_1$
۵۲	- ۶-۱- روش عمومی
۵۲	- ۶-۲- کمپلکس $Cd^{2+}$
۵۲	- ۶-۳- کمپلکس $Mn^{2+}$
۵۲	- ۶-۴- کمپلکس $Zn^{2+}$
۵۲	- ۷- تهیه کمپلکس های برخی از یون های فلزی با لیگاند $L_2$
۵۳	- ۷-۱- روش عمومی

## فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۵۳	$\text{Cu}^{2+}$ -۳-۷-۲-کمپلکس
۵۳	$\text{Mn}^{2+}$ -۴-۷-۲-کمپلکس
۵۴	۸-۸-تهیه کمپلکس های برخی از یون های فلزی با دی آلدید Dfm و آمین ۱، ۲، بیس (۲-آمینوفنوكسی) بنزن به روش تمیلت
۵۴	۱-۸-۲-روش عمومی
۵۴	$\text{Ni}^{2+}$ -۴-۸-۲-کمپلکس
۵۵	$\text{Zn}^{2+}$ -۳-۸-۲-کمپلکس
۵۵	$\text{Cd}^{2+}$ -۴-۸-۲-کمپلکس
۵۶	فصل سوم: بحث و نتیجه گیری
۵۷	۳-۱-بررسی سنتز ۲، ۶-۴-دی فرمیل-۴-متوكسی فنل (Dfm)
۵۸	۳-۲-بررسی سنتز ۱، ۲-بیس (۲-نیتروفنوكسی) بنزن
۵۹	۳-۳-بررسی سنتز ۲، ۱-بیس (۲-نیتروفنوكسی)-۴-ترشیو بوتیل بنزن
۶۰	۳-۴-بررسی سنتز ۱، ۲-بیس (۲-آمینوفنوكسی) بنزن
۶۲	۳-۵-بررسی سنتز ۱، ۲-بیس (۲-آمینوفنوكسی)-۴-ترشیو بوتیل بنزن
۶۳	۳-۶-بررسی سنتز ۱، ۱-[اتان-۱-۲-دی ایل بیس (تیو)] بیس (۲-نیتروبنزن)
۶۴	۳-۷-بررسی سنتز ۲، ۲-[اتان-۱-۲-دی ایل بیس (تیو)] دی آنیلین
۶۴	۳-۸-بررسی سنتز لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_3$
۶۶	۳-۹-بررسی سنتز لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_4$
۶۸	۳-۱۰-بررسی سنتز لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_5$
۶۹	۳-۱۱-بررسی سنتز لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_6$

## فهرست مطالع

صفحه

عنوان

۶۹	۱۲- بررسی سنتز لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_7$	۳
۷۰	۱۳- بررسی سنتز لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_1$ و $L_2$	۳
۷۰	۱۴- بررسی کمپلکس های سنتز شده با لیگاند بازشیف $L_1$	۳
۷۰	۱۴-۱- کمپلکس $Mn^{2+}$	۳
۷۲	۱۴-۲- کمپلکس $Zn^{2+}$	۳
۷۳	۱۴-۳- کمپلکس $Cd^{2+}$	۳
۷۵	۱۵- بررسی کمپلکس های سنتز شده با لیگاند بازشیف $L_2$	۳
۷۵	۱۵-۱- کمپلکس $Mn^{2+}$	۳
۷۷	۱۵-۲- کمپلکس $Cd^{2+}$	۳
۷۹	۱۵-۳- کمپلکس $Cu^{2+}$	۳
۸۰	۱۵-۴- کمپلکس $Hg^{2+}$	۳
۸۱	۱۶-۱- کمپلکس $Cd^{2+}$	۳
۸۲	۱۶-۲- کمپلکس $Co^{2+}$	۳
۸۳	۱۶-۳- کمپلکس $Cu^{2+}$	۳
۸۳	۱۷-۱- کمپلکس $Cd^{2+}$	۳
۸۴	۱۷-۲- کمپلکس $Ni^{2+}$	۳
۸۵	۱۷-۳- کمپلکس $Zn^{2+}$	۳
۸۶	۱۸-۱- کمپلکس $Zn^{2+}$	۳

ضمائم

منابع

چکیده انگلیسی

## فهرست طیف ها

عنوان

صفحه

		صفحه
۸۸.....	طیف (۱-۳): طیف IR دی آلدھید Dfm	۸۸
۸۹.....	طیف (۲-۳): طیف $^1\text{HNMR}$ دی آلدھید Dfm	۸۹
۹۰.....	طیف (۳-۳): طیف $^{13}\text{CNMR}$ دی آلدھید Dfm	۹۰
۹۱.....	طیف (۴-۳): طیف IR ۱، ۲ - بیس (۲-نیتروفنوکسی) بنزن در KBr	۹۱
۹۲.....	طیف (۴-۵): طیف $^1\text{HNMR}$ ۱، ۲ - بیس (۲-نیتروفنوکسی) بنزن	۹۲
۹۳.....	طیف (۶-۳): طیف $^{13}\text{CNMR}$ ۱، ۲ - بیس (۲-نیتروفنوکسی) بنزن	۹۳
۹۴.....	طیف (۷-۳): طیف IR ۱، ۲ - بیس (۲-نیتروفنوکسی) -۴- ترشیو بوتیل بنزن	۹۴
۹۵.....	طیف (۸-۳): طیف $^1\text{HNMR}$ ۱، ۲ - بیس (۲-نیتروفنوکسی) -۴- ترشیو بوتیل بنزن	۹۵
۹۶.....	طیف (۹-۳): طیف $^{13}\text{CNMR}$ ۱، ۲ - بیس (۲-نیتروفنوکسی) -۴- ترشیو بوتیل بنزن	۹۶
۹۷.....	طیف (۱۰-۳): طیف IR ۱، ۲ - بیس (۲-آمینو فنوکسی) بنزن	۹۷
۹۸.....	طیف (۱۱-۳): طیف $^1\text{HNMR}$ ۱، ۲ - بیس (۲-آمینو فنوکسی) بنزن	۹۸
۹۹.....	طیف (۱۲-۳): طیف $^{13}\text{CNMR}$ ۱، ۲ - بیس (۲-آمینو فنوکسی) بنزن	۹۹
۱۰۰.....	طیف (۱۳-۳): طیف IR ۱، ۲ - بیس (۲-آمینو فنوکسی) -۴- ترشیو بوتیل بنزن	۱۰۰
۱۰۱.....	طیف (۱۴-۳): طیف $^1\text{HNMR}$ ۱، ۲ - بیس (۲-آمینو فنوکسی) -۴- ترشیو بوتیل بنزن	۱۰۱
۱۰۲.....	طیف (۱۵-۳): طیف $^{13}\text{CNMR}$ ۱، ۲ - بیس (۲-آمینو فنوکسی) -۴- ترشیو بوتیل بنزن	۱۰۲
۱۰۳.....	طیف (۱۶-۳): طیف IR ۱، ۱ - [اتان-۱، ۲- دی ایل بیس (تیو)] بیس (۲-نیتروبنزن)	۱۰۳
۱۰۴.....	طیف (۱۷-۳): طیف IR ۱، ۲ - [اتان-۱، ۲- دی ایل بیس (تیو)] دی آنیلین	۱۰۴
۱۰۵.....	طیف (۱۸-۳): طیف $^1\text{HNMR}$ ۱، ۲ - [اتان-۱، ۲- دی ایل بیس (تیو)] دی آنیلین	۱۰۵

## فهرست طیف ها

صفحه	عنوان
۱۰۶.....	طیف (۱۹-۳): طیف $^{13}\text{CNMR}$ ۲، ۲- [اتان-۱، ۲- دی ایل بیس (تیو)] دی آنیلین
۱۰۷.....	طیف (۲۰-۳): طیف IR لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_3$
۱۰۸.....	طیف (۲۱-۳): طیف $^1\text{HNMR}$ لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_3$
۱۰۹.....	طیف (۲۲-۳): طیف $^{13}\text{CNMR}$ لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_3$
۱۱۰.....	طیف (۲۳-۳): طیف IR لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_4$
۱۱۱.....	طیف (۲۴-۳): طیف $^1\text{HNMR}$ لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_4$
۱۱۲.....	طیف (۲۵-۳): طیف $^{13}\text{CNMR}$ لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_4$
۱۱۳.....	طیف (۲۶-۳): طیف IR لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_5$
۱۱۴.....	طیف (۲۷-۳): طیف $^1\text{HNMR}$ لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_5$
۱۱۵.....	طیف (۲۸-۳): طیف IR لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_6$
۱۱۶.....	طیف (۲۹-۳): طیف $^1\text{HNMR}$ لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_6$
۱۱۷.....	طیف (۳۰-۳): طیف IR کمپلکس $Mn^{2+}$ با لیگاند بازشیف $L_1$
۱۱۸.....	طیف (۳۱-۳): طیف IR کمپلکس $Zn^{2+}$ با لیگاند بازشیف $L_1$
۱۱۹.....	طیف (۳۲-۳): طیف $^1\text{HNMR}$ کمپلکس $Zn^{2+}$ با لیگاند بازشیف $L_1$
۱۲۰.....	طیف (۳۳-۳): طیف $^{13}\text{CNMR}$ کمپلکس $Zn^{2+}$ با لیگاند بازشیف $L_1$
۱۲۱.....	طیف (۳۴-۳): طیف IR کمپلکس $Cd^{2+}$ با لیگاند بازشیف $L_1$
۱۲۲.....	طیف (۳۵-۳): طیف $^1\text{HNMR}$ کمپلکس $Cd^{2+}$ با لیگاند بازشیف $L_1$
۱۲۳.....	طیف (۳۶-۳): طیف $^{13}\text{CNMR}$ کمپلکس $Cd^{2+}$ با لیگاند بازشیف $L_1$
۱۲۴.....	طیف (۳۷-۳): طیف IR کمپلکس $Mn^{2+}$ با لیگاند بازشیف $L_2$

خ

## فهرست طیف ها

عنوان

صفحه

۱۲۵	طیف (۳۸-۳): طیف IR کمپلکس $Cd^{2+}$ با لیگاند بازشیف $L_2$
۱۲۶	طیف (۳۹-۳): طیف $^1\text{HNMR}$ کمپلکس $Cd^{2+}$ با لیگاند بازشیف $L_2$
۱۲۷	طیف (۴۰-۳): طیف $^{13}\text{CNMR}$ کمپلکس $Cd^{2+}$ با لیگاند بازشیف $L_2$
۱۲۸	طیف (۴۱-۳): طیف IR کمپلکس $Cu^{2+}$ با لیگاند بازشیف $L_2$
۱۲۹	طیف (۴۲-۳): طیف IR کمپلکس بازشیف ماکروایسیکل $Zn^{2+}$ به روش تمپلت با دی آلهید Dfm
۱۳۰	طیف (۴۳-۳): طیف IR کمپلکس بازشیف ماکروایسیکل $Cd^{2+}$ به روش تمپلت با دی آلهید Dfm
۱۳۱	طیف (۴۴-۳): طیف IR کمپلکس بازشیف ماکروایسیکل $Ni^{2+}$ به روش تمپلت با دی آلهید Dfm
۱۳۲	طیف (۴۵-۳): طیف IR لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_7$
۱۳۳	طیف (۴۶-۳): طیف $^1\text{HNMR}$ لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_7$
۱۳۴	طیف (۴۷-۳): طیف IR کمپلکس $Cd^{2+}$ با لیگاند بازشیف $L_6$
۱۳۵	طیف (۴۸-۳): طیف $^1\text{HNMR}$ کمپلکس $Cd^{2+}$ با لیگاند بازشیف $L_6$
۱۳۶	طیف (۴۹-۳): طیف IR کمپلکس $Co^{2+}$ با لیگاند بازشیف $L_6$
۱۳۷	طیف (۵۰-۳): طیف IR کمپلکس $Cu^{2+}$ با لیگاند بازشیف $L_6$
۱۳۸	طیف (۵۱-۳): طیف IR کمپلکس $Hg^{2+}$ با لیگاند بازشیف $L_2$
۱۳۹	طیف (۵۲-۳): طیف $^1\text{HNMR}$ کمپلکس $Hg^{2+}$ با لیگاند بازشیف $L_2$
۱۴۰	طیف (۵۳-۳): طیف IR کمپلکس $Zn^{2+}$ با لیگاند بازشیف $L_5$
۱۴۱	طیف (۵۴-۳): طیف $^1\text{HNMR}$ کمپلکس $Zn^{2+}$ با لیگاند بازشیف $L_5$
۱۴۲	طیف (۳-L <sub>5</sub> ): طیف IR محاسبه شده به روش B3LYP/STO-3G برای لیگاند $L_5$
۱۴۳	طیف (۳-L <sub>5</sub> ): طیف IR محاسبه شده به روش B3LYP/6-31G* برای لیگاند $L_5$
۱۴۴	طیف (۳-L <sub>6</sub> ): طیف IR محاسبه شده به روش B3LYP/STO-3G برای لیگاند $L_6$

## فهرست طیف ها

صفحه

عنوان

---

طیف (۳-A <sub>b</sub> ): طیف IR محاسبه شده به روش MP3/STO-3G برای ۲،۲- [اتان-۱،۲- دی ایل بیس (تیو)] دی آنلین	۱۴۵
طیف (۳-A): طیف رامان محاسبه شده به روش HF/3-21G* برای ۲،۱ بیس (۲-آمینو فنوکسی)-۴-ترشیو بوتیل بنزن	۱۴۶
طیف (۳-A): طیف IR محاسبه شده به روش HF/3-21G* برای ۱،۲ بیس (۲-آمینو فنوکسی)-۴-ترشیو بوتیل بنزن	۱۴۷
طیف (۳-C): طیف رامان محاسبه شده به روش HF/6-31G . Zn + L <sub>5</sub> برای کمپلکس	۱۴۸
طیف (۳-C): طیف IR محاسبه شده به روش HF/6-31G . Zn + L <sub>5</sub> برای کمپلکس	۱۴۹

ذ

## فهرست شکل ها

عنوان	صفحه
شکل (۱-۱): فرم های رزونانسی فلوئور و بنزن	۲
شکل (۲-۱): فرم های رزونانسی مربوط به ترکیب حد واسط در واکنش نوکلئوفیلی فلوئور و بنزن	۳
شکل (۳-۱): مکانیسم واکنش نوکلئوفیلی	۴
شکل (۴-۱): کربن چهار وجهی و گروه الکترون کشنده	۵
شکل (۴-۵): شکل های رزونانسی فلوئور و نیترو بنزن	۶
شکل (۴-۶): پایداری کربانیون توسط اثر رزونانس گروه نیترو	۶
شکل (۷-۱): چهار روش متفاوت برای تهیه پلی اترهای حلقوی	۷
شکل (۸-۱): نمونه های از اترهای تاجی که از کتکول ساخته شده اند	۸
شکل (۹-۱): مقایسه اندازه حفره	۱۲
شکل (۱۰-۱): مقایسه اندازه حفره	۱۳
شکل (۱۱-۱): واکنش حلقوی شدن در حضور یک یون فلزی (سنتر تمپلت)	۱۷
شکل (۱۲-۱): روش های ممکن برای تشکیل بزرگ حلقه های بازشیف	۲۱
شکل (۱۳-۱): لیگاند های بزرگ حلقه بازشیف	۲۲
شکل (۱۴-۱): تعدادی از لیگاند های بزرگ حلقه باز شیف با اتم دهنده اکسیژن و نیتروژن	۲۳
شکل (۱۵-۱): تعدادی از لیگاند های بزرگ حلقه غیر بازشیف و ساختار $L^3$ با مس $x-ray$	۲۳
شکل (۱۶-۱): لیگاند های بازشیف گوگرد دار	۲۷
شکل (۱۷-۱): لیگاند های بازشیف	۲۷
شکل (۱۸-۱): کمپلکس های بازشیف	۲۸
شکل (۱۹-۱): کمپلکس بازشیف	۲۸
شکل (۲۰-۱): لیگاند بازشیف	۲۹

## فهرست شکل ها

### صفحه

### عنوان

۳۹	..... شکل (۱-۲۱): مدل های الکترونی باز و بسته
۴۳	..... شکل (۲-۱): تهیه ۶،۲ - دی فرمیل -۴- متوكسی فنل (Dfm)
۴۴	..... شکل (۲-۲): تهیه ۱،۲ - بیس (۲- نیترو فنوکسی) بنزن
۴۴	..... شکل (۲-۳): تهیه ۱،۲ - بیس (۲- نیترو فنوکسی) -۴- ترشیو بوتیل بنزن
۴۵	..... شکل (۲-۴): تهیه ۱،۱ - [اتان-۱،۲- دی ایل بیس (تیو)] بیس (۲- نیترو بنزن)
۴۶	..... شکل (۲-۵): تهیه ۱،۲ - بیس (۲- آمینوفنوکسی) بنزن
۴۶	..... شکل (۲-۶): تهیه ۱،۲ - بیس (۲- آمینوفنوکسی) -۴- ترشیو بوتیل بنزن
۴۷	..... شکل (۲-۷): تهیه ۱،۲ - [اتان-۱،۲- دی ایل بیس (تیو)] دی آنیلین
۴۸	..... شکل (۲-۸): تهیه لیگاند بازشیف زنجیره باز $L_1$
۴۸	..... شکل (۲-۹): تهیه لیگاند بازشیف زنجیره باز $L_2$
۴۹	..... شکل (۲-۱۰): تهیه لیگاند بازشیف زنجیره باز $L_3$
۵۰	..... شکل (۲-۱۱): تهیه لیگاند بازشیف زنجیره باز $L_4$
۵۰	..... شکل (۲-۱۲): تهیه لیگاند بازشیف زنجیره باز $L_5$
۵۱	..... شکل (۲-۱۳): تهیه لیگاند بازشیف زنجیره باز $L_6$
۵۱	..... شکل (۲-۱۴): تهیه لیگاند بازشیف زنجیره باز $L_7$
۵۴	..... شکل (۲-۱۵): کمپلکس $Ni^{2+}$
۵۵	..... شکل (۲-۱۶): کمپلکس $Zn^{2+}$
۵۵	..... شکل (۲-۱۷): کمپلکس $Cd^{2+}$
۵۷	..... شکل (۳-۱): ۶- دی فرمیل -۴- متوكسی فنل (Dfm)
۵۸	..... شکل (۳-۲): ۲،۱ - بیس (۲- نیترو فنوکسی) بنزن
۶۰	..... شکل (۳-۳): ۲،۱ - بیس (۲- نیترو فنوکسی) -۴- ترشیو بوتیل بنزن

## فهرست شکل ها

### صفحه

### عنوان

..... ۶۱	شکل (۳-۴): ۱،۲ - بیس (۲-آمینو فنوكسی) بنزن
..... ۶۳	شکل (۳-۵): ۲،۱ - بیس (۲-آمینو فنوكسی) -۴-ترشیو بوتیل بنزن
..... ۶۳	شکل (۳-۶): ۱-۱،۲ - [اتان-۲،۱- دی ایل بیس (تیو)] بیس (۲- نیتروبنزن)
..... ۶۴	شکل (۳-۷): ۲،۱-۲ - [اتان-۱- دی ایل بیس (تیو)] دی آنیلین
..... ۶۵	شکل (۳-۸): لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_3$
..... ۶۸	شکل (۳-۹): لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_4$
..... ۶۸	شکل (۳-۱۰): لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_5$
..... ۶۹	شکل (۳-۱۱): لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_6$
..... ۷۰	شکل (۳-۱۲): لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_7$
..... ۷۰	شکل (۳-۱۳): لیگاند زنجیره باز بازشیف $L_1$ و $L_2$
..... ۷۱	شکل (۳-۱۴): کمپلکس $Mn^{2+}$
..... ۷۲	شکل (۳-۱۵): کمپلکس $Zn^{2+}$
..... ۷۴	شکل (۳-۱۶): کمپلکس $Cd^{2+}$
..... ۷۶	شکل (۳-۱۷): کمپلکس $Mn^{2+}$
..... ۷۸	شکل (۳-۱۸): کمپلکس $Cd^{2+}$
..... ۸۰	شکل (۳-۱۹): کمپلکس $Cu^{2+}$
..... ۸۱	شکل (۳-۲۰): کمپلکس $Hg^{2+}$
..... ۸۲	شکل (۳-۲۱): کمپلکس $Cd^{2+}$
..... ۸۲	شکل (۳-۲۲): کمپلکس $Co^{2+}$
..... ۸۳	شکل (۳-۲۳): کمپلکس $Cu^{2+}$
..... ۸۴	شکل (۳-۲۴): کمپلکس $Cd^{2+}$