



دانشگاه پیام نور

دانشکده علوم پایه

پایان نامه

برای دریافت مدرک کارشناسی ارشد

رشته شیمی تجزیه

گروه علمی شیمی

عنوان:

مطالعه اسپکتروفتومتری کمپلکس های انتقال بار یک باز شیف تازه سنتزی و

۲- آمینوفنل با چند الکترون پذیرنده مختلف در چند حلال غیر آبی

دانشجو:

فائزه رحیمی

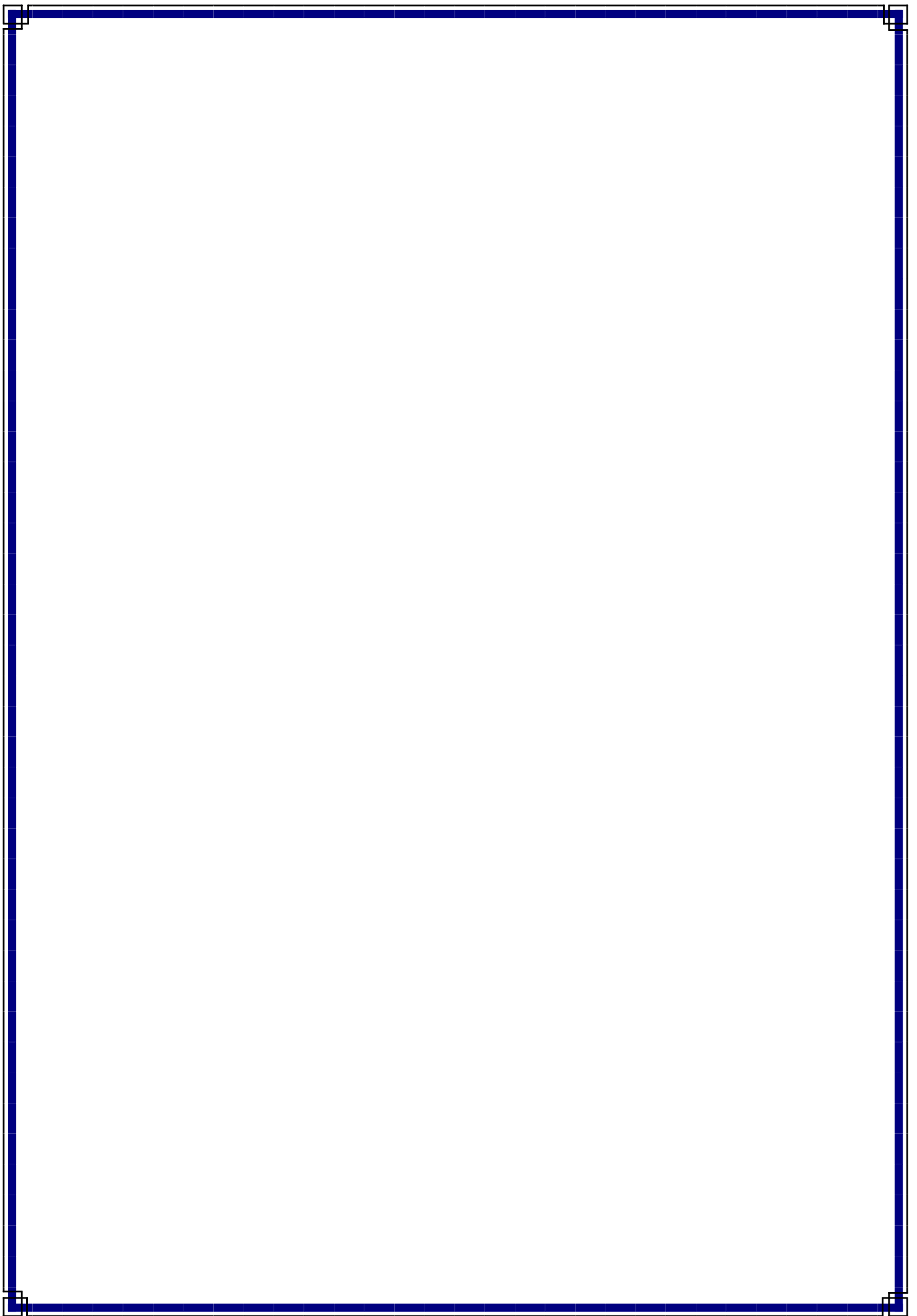
استاد راهنما:

پروفسور عباس افخمی

استاد مشاور:

دکتر اسماعیل تماری

شهریور ۱۳۸۹



تاریخ.....  
شماره.....



دانشگاه پیام نور

بسمه تعالی

## صور تجلسه دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد

جلسه دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد خانم فائزه رحیمی دانشجوی رشته شیمی تجزیه به شماره دانشجویی ۸۶۷۱۰۴۳۱۲۰ تحت عنوان «مطالعه اسپکتروفتومتری کمپلکس های انتقال بار یک باز شیف تازه سنتزی و ۲-آمینوفنل با چند الکترون پذیرنده مختلف در چند حلال غیرآبی» با حضور هیات داوران در روز سه شنبه مورخ ۱۳۸۹/۶/۱۶ ساعت ۹ در محل ساختمان آمفی تئاتر دانشگاه پیام نور برگزار شد و پس از بررسی، پایان نامه مذکور با نمره به عدد ۱۹/۷۵ به حروف نوزده و هفتاد و پنج صدم با درجه عالی مورد تایید واقع شد.

ردیف	نام و نام خانوادگی	هیات داوران	مرتبه دانشگاهی	دانشگاه/موسسه	امضاء
۱	دکتر عباس افخمی	استاد راهنما	استاد	بوعلی سینا	
۲	دکتر اسماعیل تماری	استاد مشاور	استاد یار	پیام نور همدان	
۳	دکتر رضا آزادبخت	استاد داور داخلی	استاد یار	پیام نور همدان	
۴	دکتر طیبه مدرکیان	استاد داور خارجی	دانشیار	بوعلی سینا	
۵	دکتر زهرا رستمی	نماینده گروه	استاد یار	پیام نور همدان	
۶	دکتر عباس امیری منش	مدیر تحصیلات تکمیلی	استاد یار	پیام نور همدان	

## چکیده

موضوع پایان نامه: مطالعه اسپکتروفتومتری کمپلکس های انتقال بار یک باز شیف تازه سنتزی و

۲-آمینوفنل با چند الکترون پذیرنده مختلف در چند حلال غیر آبی

هدف ها: مطالعه کمپلکس های انتقال بار و به دست آوردن ثلثت های سرعت است.

روش تحقیق و یافته ها: کمپلکس های انتقال بار بین ۲-آمینوفنل و لیگاند تازه سنتزی ۲-بیس اتوکسی

بنزیدین آمینوفنل (EAP) به عنوان الکترون دهنده با DDQ، ید و پیکریک اسید به عنوان الکترون

پذیرنده به روش اسپکتروفتومتری در دمای اتاق و در چند حلال غیر آبی مورد مطالعه قرار گرفت.

مطالعه روی بر هم کنش ها در سیستم DDQ و ید با EAP نشان داد که جذب کمپلکس در همه

حلال ها به زمان وابسته است. ثابت های سرعت در حلال استونیتریل، دی کلرومتان و مخلوط این دو

حلال با داده های جذب- زمان و با برازش داده ها در برنامه KINFIT به دست آمد. تاثیر ویژگی های

حلال بر روی سینتیک تشکیل کمپلکس نیز مورد مطالعه قرار گرفت. استوکیومتری و ثابت تشکیل برای

کمپلکس با روش نسبت مولی و با استفاده از برنامه KINFIT تعیین شد.

بررسی بر روی سیستم ۲-آمینوفنل نشان داد که جذب در بعضی از کمپلکس ها به زمان وابسته است.

ثابت سرعت شبه درجه اول برای این کمپلکس ها از داده های جذب- زمان و با استفاده از برنامه

KINFIT محاسبه شد. اثر حلال ها بر روی ثابت تشکیل کمپلکس نیز مورد بررسی قرار گرفت.

در سیستم های EAP-پیکریک اسید و ۲-آمینوفنل- پیکریک اسید هیچ وابستگی بین نوار جذبی

کمپلکس ها با زمان برای کمپلکس ها مشاهده نشد. استوکیومتری و ثابت پایداری برای کمپلکس ها با

روش نسبت مولی و با استفاده از برنامه KINFIT تعیین شد.

واژگان کلیدی: کمپلکس انتقال بار-باز شیف-الکتون پذیرنده

عنوان	صفحه
.....مقدمه	
.....فصل اول: مقدمه و مروری بر کارهای انجام	
.....۱-۱-کمپلکس های انتقال بار	۲
.....۱-۱-۱-تاریخچه ی کمپلکس های انتقال بار	۲
.....۱-۱-۲-خصوصیات کمپلکس های انتقال بار	۳
.....۱-۱-۳-دسته بندی کمپلکس انتقال بار	۵
.....۱-۱-۴-عوامل موثر بر پایداری کمپلکس انتقال بار	۵
.....۱-۱-۴-۱-اثر دما	۶
.....۱-۱-۴-۲-اثر حلال	۶
.....۱-۱-۴-۳-اثر فشار	۷
.....۱-۱-۵-کاربرد کمپلکس های انتقال بار	۷
.....۱-۱-۵-۱-کاربردهای بیولوژیکی	۸
.....۱-۱-۵-۲-کاربرد های صنعتی	۸
.....۱-۲-ید و کمپلکس های انتقال بار آن	۹
.....۱-۳-DDQ و کمپلکس های انتقال بار	۱۳
.....۱-۴-پیکریک اسید و کمپلکس های انتقال با آن	۱۷
.....فصل دوم: بخش تجربی	
.....۱-۲-مواد شیمیایی	۲۱

عنوان	صفحه
۱-۱-۲-گونه های الکترون دهنده.....	۲۱
۱-۲-۲-گونه های الکترون پذیرنده.....	۲۲
۳-۱-۲-حلال ها.....	۲۳
۲-۲-وسایل و تجهیزات.....	۲۴
۳-۲-تهیه ی محلول ها.....	۲۴
۴-۲-روش محاسباتی پارامترها.....	۲۶
۱-۴-۲-محاسبه ثابت سرعت تک مرحله ای.....	۲۶
۲-۴-۲-محاسبه ثابت سرعت دو مرحله ای.....	۲۶
۳-۴-۲-روش محاسباتی پارامترهای ترمودینامیکی.....	۲۸

**فصل سوم: بحث و نتیجه گیری.....**

۱-۳-کمپلکس های انتقال بار DDQ با لیگاند EAP و ۲-آمینو فنل.....	۳۰
۱-۱-۳-بررسی سینتیک تشکیل کمپلکس انتقال بار DDQ با EAP در حلال های مختلف.....	۳۰
۲-۱-۳-تعیین ثابت سرعت تشکیل کمپلکس انتقال بار DDQ با EAP.....	۳۳
۳-۱-۳-بررسی سینتیکی کمپلکس انتقال بار DDQ با لیگاند ۲-آمینو فنل در حلال های آلی.....	۳۶
۴-۱-۳-تعیین ثابت سرعت تشکیل کمپلکس انتقال بار DDQ با لیگاند ۲-آمینو فنل.....	۴۱
۵-۱-۳-اثر حلال ها بر روی ثابت سرعت تشکیل کمپلکس بین DDQ با لیگاند ۲-آمینوفنل.....	۴۴
۲-۲-۳-بررسی کمپلکس های انتقال بار ید با ۲-آمینوفنل و EAP.....	۴۴
۱-۲-۳-بررسی سینتیکی تشکیل کمپلکس انتقال بار ید با ۲-آمینو فنل در حلال های مختلف آلی.....	۴۴
۲-۲-۳-تعیین ثابت سرعت تشکیل کمپلکس انتقال بار ید با ۲-آمینو فنل.....	۴۹

عنوان	صفحه
۳-۲-۳- اثر حلال ها بر روی ثابت سرعت تشکیل کمپلکس بین $I_2$ و لیگاند ۲- آمینوفنل.....	۵۲
۳-۲-۴- بررسی سینتیکی تشکیل کمپلکس انتقال لویید با EAP در حلال های مختلف .....	۵۲
۳-۲-۵- تعیین ثابت سرعت تشکیل کمپلکس انتقال بار یید با EAP.....	۵۴
۳-۳-۳- بررسی ثابت تشکیل کمپلکس DDQ و یید با لیگاند EAP در حلال دی کلرومتان .....	۵۶
۳-۳-۱- بررسی ثابت تشکیل کمپلکس DDQ با لیگاند EAP در حلال دی کلرومتان .....	۵۶
۳-۳-۱- تعیین ثابت پایداری کمپلکس انتقال بار DDQ با لیگاند EAP در حلال دی کلرومتان .....	۵۸
۳-۳-۳- بررسی ثابت تشکیل کمپلکس یید با لیگاند EAP در حلال دی کلرومتان .....	۵۹
۳-۳-۴- تعیین ثابت پایداری کمپلکس انتقال بار یید با لیگاند EAP در حلال دی کلرومتان .....	۶۱
۳-۴-۳- بررسی ترمودینامیکی تشکیل کمپلکس های انتقال بار پیکریک اسید.....	۶۲
۳-۴-۱- بررسی ترمودینامیکی تشکیل کمپلکس انتقال بار پیکریک اسید با لیگاند ۲- آمینوفنل در حلال استونیتریل.....	۶۲
۳-۴-۲- تعیین ثابت پایداری کمپلکس انتقال بار پیکریک اسید با لیگاند ۲- آمینوفنل در حلال استونیتریل.....	۶۵
۳-۴-۳- بررسی ترمودینامیکی تشکیل کمپلکس انتقال بار پیکریک اسید با لیگاند EAP در حلال استونیتریل.....	۶۷
۳-۴-۴- تعیین ثابت پایداری کمپلکس انتقال بار پیکریک اسید و EAP در حلال استونیتریل .....	۶۹
۳-۵- نتیجه گیری.....	۷۰
منابع.....	۷۲

عنوان	صفحه
شکل (۱-۲) ساختار شیمیایی ۲-بیس (۲-اتوکسی بنزلیدین آمینوفنل).....	۲۱
شکل (۲-۲) ساختار شیمیایی ۲-آمینوفنل.....	۲۲
شکل (۲-۳) ساختار شیمیایی DDQ.....	۲۲
شکل (۴-۲) ساختار شیمیایی پی‌کویک اسید.....	۲۳
شکل (۱-۳) طیف جذبی (۱) DDQ ( $4/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) ؛ (۲) EAP ( $4/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) ؛ (۳) مخلوط DDQ ( $4 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) و EAP ( $4 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) در حلال دی کلرومتان در دما ی اتاق ( $25^{\circ}\text{C}$ ) بلافاصله بعد از مخلوط کردن؛ (۴) بعد از ۱۶ دقیقه.....	۳۱
شکل (۲-۳) طیف جذبی (۱) DDQ ( $4/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) ؛ (۲) EAP ( $4/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) ؛ (۳) مخلوط DDQ ( $4/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) و EAP ( $4/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) در حلال استون نیتریل در دما ی $25^{\circ}\text{C}$ بلافاصله بعد از مخلوط کردن؛ (۴) بعد از ۱۶ دقیقه.....	۳۲
شکل (۳-۳) طیف جذبی (۱) DDQ ( $4/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) ؛ (۲) EAP ( $4/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) ؛ (۳) مخلوط DDQ ( $4/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) و EAP ( $4/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) در مخلوط ۳۰:۷۰ (v/v) حلال های استون نیتریل و دی کلرومتان در دما ی $25^{\circ}\text{C}$ بلافاصله بعد از مخلوط کردن (۴) بعد از ۱۶ دقیقه.....	۳۳



عنوان	صفحه
شکل (۳-۴) نمودار جذب بر حسب زمان برای مخلوط DDQ ( $4/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) و EAP ( $\text{molL}^{-1}$ ) در حلال های (۱) دی کلرومتان در طول موج $392 \text{ nm}$ و (۲) استونیتریل در طول موج $392 \text{ nm}$ (۴/۰ × ۱ <sup>-۵</sup> ) مخلوط ۳۰:۷۰ (v/v) استونیتریل: دی کلرومتان در طول موج $405 \text{ nm}$ در دمای C	۲۵.....۳۴
شکل (۳-۵) نمونه‌ای از برازش کامپیوتری داده‌های جذب-زمان برای مخلوط DDQ ( $\text{molL}^{-1}$ ) و EAP ( $4/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) در دمای $25^\circ \text{C}$ و در طول موج $392 \text{ nm}$ در حلال استونیتریل توسط برنامه KINFIT.....	۳۴.....
شکل (۳-۶) طیف جذبی (۱) DDQ ( $8/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ؛ ۲) لیگاند ۲-آمینوفنل ( $8/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ؛ ۳) مخلوط DDQ ( $8/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) و لیگاند ۲-آمینوفنل ( $8/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) در حلال استونیتریل در دمای اتاق ( $25^\circ \text{C}$ ) بلافاصله بعد از مخلوط کردن؛ (۴) بعد از ۱۵ دقیقه.....	۳۷.....
شکل (۳-۷) طیف جذبی (۱) DDQ ( $8/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ؛ ۲) لیگاند ۲-آمینوفنل ( $8/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ؛ ۳) مخلوط DDQ ( $8/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) و لیگاند ۲-آمینوفنل ( $8/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) در حلال دی کلرومتان در دمای اتاق ( $25^\circ \text{C}$ ) بلافاصله بعد از مخلوط کردن؛ (۴) بعد از ۱۵ دقیقه.....	۳۸.....
شکل (۳-۸) طیف جذبی (۱) DDQ ( $8/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ؛ ۲) لیگاند ۲-آمینوفنل ( $8/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ؛ ۳) مخلوط DDQ ( $8/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) و لیگاند ۲-آمینوفنل ( $8/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) در مخلوط ۳۰:۷۰ (v/v) استونیتریل: دی کلرومتان در دمای $25^\circ \text{C}$ بلافاصله بعد از مخلوط کردن؛ (۴) بعد از ۱۵ دقیقه.....	۳۹.....

عنوان	صفحه
شکل (۳-۹) طیف جذب ی (۱) DDQ ( $10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ; ۲) ۲-آمینوفنل ( $10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ; ۳) مخلوط DDQ ( $10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) و ۲-آمینوفنل ( $10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) در مخلوط ۵۰:۵۰ استونیتریل و دی کلرومتان در دمای $25^{\circ}\text{C}$ بلافاصله بعد از مخلوط کردن؛ (۴) بعد از ۱۵ دقیقه.....	۴۰
شکل (۳-۱۰) طیف جذبی (۱) DDQ ( $10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ; ۲) لیگاند ۲-آمینوفنل ( $10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ; ۳) مخلوط DDQ ( $10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) و ۲-آمینوفنل ( $10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) در مخلوط ۶۰:۴۰ حلال های استونیتریل و دی کلرومتان در دما ی $25^{\circ}\text{C}$ بلافاصله بعد از مخلوط کردن؛ (۴) بعد از ۱۵ دقیقه.....	۴۰
شکل (۳-۱۱) نمودار جذب برحسب زمان برای مخلوط DDQ ( $10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) و لیگاند ۲-آمینوفنل ( $10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) در حلال های (۱) استونیتریل در طول موج ۴۳۰ nm (۲) دی کلرومتان در طول موج ۴۳۹ nm (۳) مخلوط ۳۰:۷۰ (v/v) استونیتریل :دی کلرومتان (۴) مخلوط ۶۰:۴۰ (v/v) استونیتریل :دی کلرومتان (۵) مخلوط ۵۰:۵۰ (v/v) استونیتریل:دی کلرومتان در طول موج ۴۳۰ nm در دما ی $25^{\circ}\text{C}$ .....	۴۱
شکل (۳-۱۲) نمونه ای از برازش کامپیوتری داده های جذب- زمان برای مخلوط DDQ ( $10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) و لیگاند ۲-آمینوفنل ( $10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) در دمای $25^{\circ}\text{C}$ و در طول موج ۴۳۰ nm در حلال استونیتریل توسط برنامه KINFIT.....	۴۲
شکل (۳-۱۳) نمونه ای از برازش کامپیوتری داده های جذب- زمان برای مخلوط DDQ ( $10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) و لیگاند ۲-آمینوفنل ( $10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) در دمای $25^{\circ}\text{C}$ و در طول موج ۴۳۰ nm در مخلوط ۶۰:۴۰ (v/v) استونیتریل:دی کلرومتان توسط برنامه KINFIT.....	۴۴

شکل (۳-۱۴) طیف جذبی (۱) ید ( $8/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ )؛ (۲) ۲-آمینوفنل ( $8/0 \times 10^{-6} \text{ molL}^{-1}$ )؛ (۳) مخلوط ید ( $8/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) و ۲-آمینوفنل ( $8/0 \times 10^{-6} \text{ molL}^{-1}$ ) در حلال استونیتریل در دمای اتاق ( $25^\circ\text{C}$ ) بلافاصله بعد از مخلوط کردن (۴) بعد از ۱۲ دقیقه..... ۴۵

شکل (۳-۱۵) طیف جذبی (۱) ید ( $3/2 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ )؛ (۲) ۲-آمینوفنل ( $3/2 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ )؛ (۳) مخلوط ید ( $3/2 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) و ۲-آمینوفنل ( $3/2 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) در مخلوط ۳۰:۷۰ (v/v) استونیتریل : دی کلرومتان در دمای اتاق ( $25^\circ\text{C}$ ) بلافاصله بعد از مخلوط کردن (۴) بعد از ۱۲ دقیقه..... ۴۷

شکل (۳-۱۶) طیف جذبی (۱) ید ( $3/2 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ )؛ (۲) ۲-آمینوفنل ( $3/2 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ )؛ (۳) مخلوط ید ( $3/2 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) و ۲-آمینوفنل ( $3/2 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) در مخلوط ۵۰:۵۰ استونیتریل و دی کلرومتان در دمای  $25^\circ\text{C}$  بلافاصله بعد از مخلوط کردن؛ (۴) بعد از ۱۵ دقیقه..... ۴۸

شکل (۳-۱۷) طیف جذبی (۱) ید ( $3/2 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ )؛ (۲) لیگاند ۲-آمینوفنل ( $3/2 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ )؛ (۳) مخلوط ید ( $3/2 \times 10^{-4} \text{ mol L}^{-1}$ ) و ۲-آمینوفنل ( $3/2 \times 10^{-5} \text{ mol L}^{-1}$ ) در مخلوط ۶۰:۴۰ استونیتریل و دی کلرومتان در دمای  $25^\circ\text{C}$  بلافاصله بعد از مخلوط کردن؛ (۴) بعد از ۱۵ دقیقه..... ۴۸

شکل (۳-۱۸) نمودار جذب برحسب زمان برای مخلوط ید ( $8/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) و ۲-آمینوفنل ( $8/0 \times 10^{-6} \text{ molL}^{-1}$ ) در حلال استونیتریل در طول موج ۴۳۰nm در دمای محیط..... ۴۹

عنوان	صفحه
شکل (۳-۱۹) نمودار جذب برحسب زمان برای مخلوط ید ( $3/2 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) و ۲-آمینوفنل ( $\text{molL}^{-1}$ ) $3/2 \times 10^{-5}$ (۱) مخلوط ۳۰:۷۰ (v/v) استونیتریل:دی کلرومتان (۲) مخلوط ۵۰:۵۰ (v/v) استونیتریل:دی کلرومتان (۳) مخلوط ۶۰:۴۰ (v/v) استونیتریل:دی کلرومتان در طول موج ۳۶۶ nm در دما ی محیط.....	۵۰
شکل (۳-۲۰) نمونه ای از برازش کامپیوتری داده‌های جذب-زمان برای مخلوط ید ( $8/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) ولیگانند-۲-آمینوفنل ( $8/0 \times 10^{-6} \text{ molL}^{-1}$ ) در دمای $25^\circ\text{C}$ و در طول موج ۴۳۰ nm در حلال استونیتریل توسط برنامه KINFIT.....	۵۰
شکل (۳-۲۱) نمونه‌ای از برازش کامپیوتری داده‌های جذب - زمان برای مخلوط ید ( $3/2 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) و ۲-آمینوفنل ( $3/2 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) در دمای $25^\circ\text{C}$ و در طول موج ۳۶۶ nm در مخلوط ۶۰:۴۰ (v/v) استونیتریل: دی کلرومتان توسط برنامه KINFIT.....	۵۱
شکل (۳-۲۲) طیف جذب ی (۱) ید ( $4/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ )؛ EAP ( $4/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ )؛ (۳) مخلوط ید ( $4/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) و EAP ( $4/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) در حلال استونیتریل در دمای اتاق ( $25^\circ\text{C}$ ) بلافاصله بعد از مخلوط کردن؛ (۴) بعد از ۳۵ دقیقه.....	۵۳
شکل (۳-۲۳) طیف جذب ی (۱) ید ( $2/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ )؛ (۲) EAP ( $3/2 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ )؛ (۳) مخلوط ید ( $2/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) و EAP ( $3/2 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) در حلال دی کلرومتان در دمای اتاق ( $25^\circ\text{C}$ ) بلافاصله بعد از مخلوط کردن؛ (۴) بعد از ۳۵ دقیقه.....	۵۳

عنوان	صفحه
شکل (۳-۲۴) طیف جذبی (۱) ید ( $2/4 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) EAP ( $2/4 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ )؛ (۳) مخلوط ید ( $2/4 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) و ( $2/4 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) EAP در مخلوط ۳۰:۷۰ (v/v) استونیتریل: دی کلرومتان در دمای اتاق ( $25^{\circ}\text{C}$ )؛ (۴) بعد از ۳۵ دقیقه.....	۵۴
شکل (۳-۲۵) نمودار جذب برحسب زمان برای مخلوط ید و EAP در حلال های (۱) استونیتریل در طول موج ۴۲۵ nm دی کلرومتان در طول موج ۴۳۰ nm مخلوط ۳۰:۷۰ (v/v) دی کلرومتان: استونیتریل در طول موج ۳۷۰ nm در دمای محیط.....	۵۵
شکل (۳-۲۶) نمونه‌ای از برازش کامپیوتری داده‌های جذب- زمان برای مخلوط ید ( $2/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) و EAP ( $1/6 \times 10^{-6} \text{ molL}^{-1}$ ) در دمای $25^{\circ}\text{C}$ و در طول موج ۴۳۰ nm در حلال دی کلرومتان توسط برنامه KINFIT.....	۵۶
شکل (۳-۲۷) نمودار جذب برحسب نسبت مولی DDQ و EAP (روش نسبت مولی) در حلال دی کلرومتان در دمای محیط و در طول موج ۴۲۰ nm (غلظت محلول DDQ ( $8/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) می باشد).....	۵۸
شکل (۳-۲۸) نمونه‌ای از برازش کامپیوتری داده‌های جذب بر حسب نسبت مولی توسط برنامه KINFIT برای کمپلکس DDQ و EAP در حلال دی کلرومتان غلظت محلول DDQ ( $4/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) می باشد.....	۵۹
شکل (۳-۲۹) نمودار جذب برحسب نسبت مولی ید و EAP (روش mole ratio) در حلال دی کلرومتان در دمای محیط و طول موج ۴۶۹ nm (غلظت محلول ید $2/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) می باشد.....	۶۱

عنوان	صفحه
شکل (۳۰-۳) نمونه‌ای از برازش کامپیوتری داده‌های جذب بر حسب نسبت مولی توسط برنامه KINFIT برای کمپلکس ید و EAP در حلال دی کلرومتان غلظت محلول ید ( $2/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) می باشد.....	۶۲
شکل (۳۱-۳) طیف جذبی (۱) پیکریک اسید با غلظت ( $1/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) مخلوط ۲-آمینوفنل و پیکریک اسید با نسبت مولی ۱/۱، ۰/۲، ۰/۲۲، ۰/۳، ۰/۳۳، ۰/۴، ۰/۵، ۰/۵۵، ۰/۶، ۰/۷، ۰/۸، ۰/۹، ۱، ۱/۱، ۱/۳، ۱/۵، ۱/۷، ۲.....	۶۳
شکل (۳۲-۳) نمودار جذب بر حسب نسبت مولی پیکریک اسید و لیگاند ۲-آمینوفنل (روش نسبت مولی) در حلال استونیتریل در دمای محیط و طول موج ۳۸۰ nm (غلظت محلول پیکریک اسید $1/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) می باشد.....	۶۵
شکل (۳۳-۳) نمونه‌ای از برازش کامپیوتری داده‌های جذب بر حسب نسبت مولی توسط برنامه KINFIT برای کمپلکس پیکریک اسید و لیگاند ۲-آمینوفنل در حلال استونیتریل غلظت محلول پیکریک اسید ( $1/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) می باشد.....	۶۶
شکل (۳۴-۳) طیف جذبی (۱) پیکریک اسید با غلظت ( $1/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) مخلوط EAP و پیکریک اسید با نسبت مولی ۱/۱، ۰/۲، ۰/۳، ۰/۳۳، ۰/۴، ۰/۵، ۰/۶، ۰/۶۶، ۰/۷، ۰/۸، ۱، ۱/۲، ۱/۳، ۱/۴، ۱/۵.....	۶۷
شکل (۳۵-۳) نمودار جذب بر حسب نسبت مولی پیکریک اسید و EAP (روش نسبت مولی) در حلال استونیتریل و در دمای محیط و طول موج ۳۶۸ nm (غلظت محلول پیکریک اسید $1/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) می باشد.....	۶۹

صفحه

عنوان

شکل (۳-۳۶) نمونه‌ای از برازش کامپیوتری داده‌های جذب بر حسب نسبت مولی توسط برنامه KINFIT برای کمپلکس پیکریک اسید و لیگاند ۲-آمینوفنل در حلال استونیتریل غلظت محلول پیکریک اسید ( $1/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) می باشد..... ۷۰

عنوان	صفحه
جدول (۱-۲) خواص فیزیکی حلال‌های مورد استفاده.....	۲۳
جدول (۱-۳) مقادیر ثابت های سرعت مربوط به سیستم DDQ ( $4/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) - EAP در حلال های دی کلرومتان، استونیتریل و مخلوط ۳۰:۷۰ (v/v) استونیتریل : دی کلرومتان در دمای $25^{\circ}\text{C}$ .....	۳۵
جدول (۲-۳) مقادیر ثابت های سرعت مربوط به سیستم DDQ ( $8/0 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) - لیگاند ۲-آمینوفنل ( $8/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) در حلال‌های دی کلرومتان، استونیتریل و مخلوط ۳۰:۷۰، ۵۰:۵۰، ۶۰:۴۰ (v/v) استونیتریل: دی کلرومتان در دمای $25^{\circ}\text{C}$ .....	۴۳
جدول (۳-۳) مقادیر ثابت‌های سرعت مربوط به سیستم ید ( $8/0 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) - ۲-آمینوفنل در استونیتریل و سیستم ید ( $3/2 \times 10^{-4} \text{ molL}^{-1}$ ) - ۲-آمینوفنل ( $3/2 \times 10^{-5} \text{ molL}^{-1}$ ) در مخلوط ۳۰:۷۰، ۵۰:۵۰، ۶۰:۴۰ (v/v) استونیتریل: دی کلرومتان در دمای $25^{\circ}\text{C}$ .....	۵۱
جدول (۴-۳) داده های تغییرات جذب برحسب نسبت مولی DDQ و EAP در حلال د ی کلرومتان و در دمای آزمایشگاه.....	۵۷
جدول (۵-۳) داده های تغییرات جذب برحسب نسبت م ولی ید و EAP در حلال دی کلرومتان در دمای آزمایشگاه.....	۶۰
جدول (۶-۳) داده های تغییرات جذب برحسب نسبت مولی پیکریک اسید و لیگند ۲-آمینوفنل در حلال استونیتریل در دمای آزمایشگاه.....	۶۴



صفحه

عنوان

جدول (۳-۷) داده های تغییرات جذب برحسب نسبت مولی EAP و پیکریک اسید در حلال استونیتریل  
و در دمای محیط..... ۶۸

## مقدمه

کمپلکس های انتقال بار، عمدتاً از دو جزء مولکولی مستقل تشکیل شده اند که توسط نیروهای ضعیف بین مولکولی در کنار هم قرار می گیرند این دو جزء ماهیتاً الکترون گیرنده و الکترون دهنده می باشند. در سال ۱۹۴۹ بنسی و هیلد براند مقاله تاریخی خود را تحت عنوان طیف UV-Vis محلول ید در بنون به چاپ رساندند در این مقاله کمپلکس های انتقال بار مولکول ید و بنزن مورد بررسی قرار گرفته است. کمپلکس های انتقال بار در چرخه های فوتوسنتزی نقش اساسی دارند . بسیاری از داروها و سموم بر اساس این نوع برهم کنش طراحی می شوند . در بسیاری از واکنش های شیمیایی چنین کمپلکس هایی به عنوان حد واسط به کار می روند. تشکیل کمپلکس انتقال بار از مطالعه خصوصیات فیزیکی نظیر ذوب، ویسکوزیته، ثابت دی الکتریک، ضریب شکست، جذب ناحیه مرئی و فرابنفش، اندازه گیری ممان دو قطبی و IR مشخص می شود . در این پایان نامه بررسی اسپکتروفتومتری تشکیل کمپلکس انتقال بار DDQ، I<sub>2</sub> و پیکریک اسید با دو لیگاند سنتزی در حلال های غیر آبی صورت گرفته است .

فصل اول  
مقدمه و مروری بر  
کارهای انجام شده

### ۱-۱-۱- کمپلکس های انتقال بار<sup>۱</sup>

کمپلکس های انتقال بار، کمپلکس های مولکولی می باشند که توسط برهم کنش های ضعیف بین مولکولی بین الکترون دهنده ها و الکترون گیرنده ها تشکیل می شوند. یک الکترون دهنده (D) می تواند به عنوان مولکولی که دارای دانسیته الکترونی بالایی است تعریف شود و یک الکترون گیرنده (A) مولکولی است که دارای دانسیته الکترونی پایینی است. مشخصه فراگیر تمامی کمپلکس های انتقال بار در محدوده تجربی ظهور طیف های جذبی جدید است که به تنهایی در هیچ یک از مولکول های مادر مشاهده نمی شود و عامل پیدایش چنین طیف های جدیدی انتقال یک الکترون از مولکول دهنده به مولکول گیرنده می باشد. خصوصیات کمپلکس های الکترون دهنده - پذیرنده<sup>۲</sup> (EDA) می تواند توسط مکانیک کوانتومی توضیح داده شود اما نظریه ای که تاکنون بیشترین کاربرد را داشته است، تئوری پیوند والانس مولیکن<sup>۳</sup> می باشد. مولیکن ابتدا این نظریه را برای کمپلکس های ساده ۱:۱ مطرح کرد [۱]. در واقع مشاهده نوار جذبی جدید در محلول بنزن و ید حل شده در n-هپتان توسط بنسی<sup>۴</sup> و هیلدبراند<sup>۵</sup> مطلبی جدید راجع به این کمپلکس ها بود [۲]. این مشاهده اساس تئوری مولیکن بود که در سال ۱۹۵۱ ارائه شد. ویژگی های مشاهده شده در طیف بنزن - ید توافق خوبی با تئوری انتقال بار مولیکن داشت [۳]. مولیکن چنین کمپلکس های را EDA نامگذاری کرد و طیف مربوط به آنها را طیف انتقال بار نامید، همچنین نیرویی را که سبب تشکیل کمپلکس می گردد نیروی انتقال بار نامگذاری کرد [۴].

### ۱-۱-۱-۱- تاریخچه کمپلکس های انتقال بار

با توجه به وجود آمدن رنگ های شدید در ارتباط با پاره ای از ترکیبات مولکولی که عملاً در هیچ کدام از مولکول های مادر مشاهده نمی شد شرییدان ها بر آن شدند که به شناخت این پدیده که به انتقال بار مربوط می شد پردازند. اما به دلیل آن که پدیده انتقال بار با قوانین ساده نظریه ظرفیت قابل توجیه نبود، توسعه آن تا سال ها به تعویق افتاد. نخستین بررسی ها توسط فیفر<sup>۶</sup> در سال ۱۹۳۰ انجام شد [۵]. نظریه سودبرگ<sup>۷</sup> به دلیل کوشش های اولیه قابل توجه می باشد که علت پایداری غیرمعمول کمپلکس های انتقال بار را نتیجه مستقیم یک پیوند کووالانسی دانست چون توسط سایر نیروهای بین

1- charge transfer complexes    2- Electron donor- acceptor complexes    3- Mullikan  
4- Benesi    5- Hildebrand    6- Pfeiffer    7- Sudborough