



This document was created with Win2PDF available at <http://www.daneprairie.com>.
The unregistered version of Win2PDF is for evaluation or non-commercial use only.



دانشگاه پیام نور
خراسان رضوی
بسمه تعالی

دانشگاه پیام نور مشهد

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

شیمی معدنی

عنوان :

سنتز و شناسایی و مطالعه نظری کمپلکس‌هایی از پلاتین(II)، پالادیم(II)، نیکل(II) و

مس(II) با لیگاند شیف باز چهار دندانه متقارن ۲و۴ دی هیدروکسی سالوفن

استاد راهنما :

دکتر علیرضا اکبری

استاد مشاور :

دکتر محمدعلی ناصری

نگارش :

سارا شریعتی

شهریور ۱۳۹۰



تاریخ: ۱۳۹۰ / ۷ / ۳
شماره: ۱۳۴۱/۲۵۶۶
پیوست:

صورتجلسه دفاع از پایان نامه

پایان نامه تحت عنوان: " سنتز، شناسایی و مطالعه نظری کمپلکس‌های پلاتین(II)، پالادیم(II)، نیکل(II)، مس(II) با لیگاند شیفباز چهاردندانه متقارن ۴,۲ دی هیدوکسی سالوفن " که توسط خانم سارا شریعتی دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی معدنی مرکز مشهد تهیه و به هیات داوران ارائه گردیده است مورد تایید می باشد.

درجه ارزشیابی: عالی

نمره: نوزده و نیم

تاریخ دفاع: ۹۰/۶/۳۰

امضاء	مرتبۀ علمی	مستولیت	اعضاء هیات داوران:
-----	-----	-----	نام و نام خانوادگی
	استادیار	استاد راهنما	دکتر علیرضا اکبری
	استادیار	استاد مشاور	دکتر محمدعلی ناصری
	استادیار	استاد داور	دکتر نورالله فیضی
	دانشیار	نماینده گروه آموزشی	دکتر محمد حکیمی

تغییرات لازم:

صفحه	فهرست مطالب	عنوان
۱		چکیده
	فصل اول	
	تاریخچه	
۳		۱-۱- شیف بازها
۴		۲-۱- روشهای تهیه شیف بازها
۴		۳-۱- انواع مختلف شیف بازها
۵		۴-۱- شیوه‌های کئوردیناسیون کمپلکس‌های شیف بازها
۷		۵-۱- توتومری در شیف بازها
۸		۶-۱- کاربرد شیف بازها و کمپلکس‌های آنها
۸		۷-۱- بررسی شیف باز کمپلکس‌های سنتز شده
۸		۱-۷-۱- بررسی خصوصیات الکترونی و ساختاری کمپلکس‌های Ni (II) و Cu(II) سالوفن
۱۱		۲-۷-۱- بررسی خصوصیات الکترونی و ساختاری کمپلکس‌های جدید Pd(II) سالن
۱۳		۳-۷-۱- سنتز، خصوصیات الکتروشیمیایی و خصوصیات حرارتی کمپلکس‌های شیف باز ۴ دندانه

۱۶	۴-۷-۱	سنتز و شناسایی و فعالیت بیولوژیکی کمپلکس‌های پلاتین (II) با شیف بازهای مشتق شده از سالیسیلیدآلدئید و فنیلین دی آمین
۱۷	۵-۷-۱	سنتز و شناسایی شیف باز مشتق شده از ۲-آمینو بنزیل آمین و کمپلکس Cu (II) آن
۱۸	۶-۷-۱	سنتز و شناسایی خصوصیات الکتروشیمیایی کمپلکس‌های شیف باز و Co(III) با ساختار کریستالی clo ₄ [Co(III) Salophen (4-picoline ₂)]
۲۰	۷-۷-۱	سنتز و شناسایی شیف باز LH و کمپلکس‌های آن با فلزات Co, Ni, Cu, Zn
۲۴	۸-۷-۱	بررسی نظری و تجربی لیگاند و شیف باز N و N' دی پیریدوکسیل ۱ و ۴ بوتادی آمین و کمپلکس مس (II)
۲۶	۸-۱	شیمی محاسباتی
۲۷	۹-۱	نرم افزار ADF
۲۷	۱۰-۱	نظریه‌ی تابع چگال آمستردام
۲۹	۱۱-۱	تابع PW91
۲۹	۱۲-۱	سری‌های پایه در نرم افزار ADF
۳۱	۱۳-۱	بارهای اتمی در ADF
۳۲	۱-۱۳-۱	روش بارهای مولیکن

۳۲	۱-۱۳-۲ - روش ورونی (VDD)
۳۳	۱-۱۳-۳ - روش Hiershsfeld.
۳۵	۱-۱۴ - کاربرد نرم افزار

فصل دوم

روش های آزمایشگاهی

۳۷	۱-۲ - مواد مصرفی
۳۷	۲-۲ - دستگاه ها و وسایل مورد استفاده
۳۸	۱-۳-۲ - روش عملی مرحله اول : سنتز لیگاند
۳۹	۲-۳-۲ - مرحله دوم سنتز و شناسایی کمپلکس های پلاتین (II)، پالادیم (II)، نیکل (II) و مس (II) با لیگاند چهاردندانه (2,4 DHS).
۴۰	۱-۱ ۲-۳-۲ - شناسایی کمپلکس پلاتین (II)
۴۲	۲ ۲-۳-۲ - سنتز کمپلکس [Pd(OH) ₂ Salophen]
۴۴	۳ ۲-۳-۲ - سنتز کمپلکس [Ni (OH) ₂ Salophen]
۴۵	۱-۳ ۲-۳-۲ - شناسایی کمپلکس نیکل (II)
۴۶	۴ ۳-۳-۲ - سنتز کمپلکس [Cu(OH) ₂ Salophen]

۴۷	۱-۴ ۳-۳-۲ شناسایی کمپلکس مس (II)
۴۸	۴-۲ محاسبات نرم افزاری

فصل سوم بحث و نتیجه گیری

۵۱	۳- مقدمه
۵۲	۱-۳ شناسایی کمپلکس پلاتین
۵۲	۱-۱-۳ بررسی طیف مادون قرمز IR کمپلکس پلاتین
۵۷	۱-۱-۳-۱ بررسی اتصال دندانان N ایمنی لیگاند به فلز پلاتین
۵۸	۱-۱-۳-۲ بررسی اتصال دندانان O فنولی لیگاند به فلز پلاتین
۶۰	۱-۱-۳-۳ بررسی طول و زوایای پیوندی کمپلکس پلاتین (II)
۶۳	۲-۱-۳ بررسی طیف الکترونی UV-Vis کمپلکس پلاتین (II)
۶۷	۳-۱-۳ بررسی سطوح انرژی HOMO و LUMO کمپلکس پلاتین (II) با کمک نرم افزار ADF
۷۱	۴-۱-۳ بررسی بارهای اتمی برای کمپلکس پلاتین در ADF
۷۳	۲-۳ شناسایی کمپلکس پالادیم سالوفن

۷۳	۱-۲-۳	بررسی طیف مادون قرمز IR کمپلکس پالادیم (II)
۷۶	۱ ۱-۲-۳	بررسی اتصال دندانان N ایمنی لیگاند به فلز پالادیم
۷۷	۲ ۱-۲-۳	بررسی اتصال دندانان O فنولی لیگاند به فلز پالادیم
۷۸	۲ ۱-۲-۳	بررسی طول و زوایای پیوندی کمپلکس پالادیم (II)
۸۰	۲-۲-۳	بررسی طیف الکترونی UV-Vis کمپلکس پالادیم (II)
۸۳	۳-۲-۳	بررسی سطوح انرژی HOMO و LUMO کمپلکس پالادیم (II) با کمک نرم افزار ADF
۸۷	۴-۲-۳	بارهای اتمی برای کمپلکس پالادیم (II)
۸۸	۳-۳	شناسایی کمپلکس نیکل سالوفن (II)
۸۸	۱-۳-۳	بررسی طیف مادون قرمز IR کمپلکس نیکل (II)
۹۰	۱ ۱-۳-۳	بررسی اتصال دندانان N ایمنی لیگاند به فلز نیکل
۹۱	۲ ۱-۳-۳	بررسی اتصال دندانان O فنولی لیگاند به فلز نیکل
۹۲	۳ ۱-۳-۳	بررسی طول و زوایای پیوندی کمپلکس نیکل (II)
۹۵	۲-۳-۳	بررسی طیف الکترونی UV-Vis کمپلکس نیکل
۹۶	۳-۳-۳	بررسی سطوح انرژی HOMO و LUMO کمپلکس نیکل (II) با کمک نرم افزار ADF
۹۹	۴-۳	شناسایی کمپلکس مس (II)
۹۹	۱-۴-۳	بررسی طیف مادون قرمز IR کمپلکس مس (II)

۱۰۲	۱-۴-۳	بررسی اتصال دندان N ایمنی لیگاند به فلز مس
۱۰۳	۲-۴-۳	بررسی اتصال دندان O فنولی لیگاند به فلز مس
۱۰۴	۳-۴-۳	بررسی طول و زوایای پیوندی کمپلکس مس (II).
۱۰۶	۲-۴-۳	بررسی طیف الکترونی UV-Vis کمپلکس مس (II)
۱۰۸	۳-۴-۳	بررسی سطوح انرژی HOMO و LUMO کمپلکس مس (II) با کمک نرم افزار ADF
۱۱۰	۵-۳	محاسبه کمیت‌های ترمودینامیکی
۱۱۲		نتیجه گیری
۱۱۳		پیشنهادات
۱۱۴		مراجع

فهرست شکل ها

۴	۱-۱	نمونه‌هایی از شیف بازها
۵	۲-۱	طبقه بندی لیگاندهای شیف باز
۵	۳-۱	انواع شیوه های کوئوردیناسیون
۵	۴-۱	انواع صورتبندی سالن‌ها
۶	۵-۱	ساختار پنج کوئوردینه کریستالی
۶	۶-۱	نمونه‌ی کمپلکس شش کوئوردینه با لیگاند چهاردندانه سالوفن با دولیگاند کلر محوری

۷	۷-۱	ساختارهای توتومری انتقال پروتون دی شیف بازها
۹	۸-۱	ساختار کمپلکس‌های Ni(II) و Cu(II)
۱۱	۹-۱	ساختاری کمپلکس‌های Pd(II)
۱۳	۱۰-۱	اوربیتال‌های HOMO و LUMO کمپلکس [Pd(C ₂₀ H ₂₂ N ₂ O ₂)]
۱۵	۱۱-۱	توتومری لیگاندها
۱۷	۱۲-۱	سنتز لیگاند H ₂ L
۱۹	۱۳-۱	ساختار کمپلکس کبالت سالوفن و ساختار کریستالی آن
۲۰	۱۴-۱	توزیع اوربیتال‌های HOMO و LOMO محاسبه شده برای کمپلکس CH ₂ Cl ₂ .
		[CoL ₁ (4-picoline) ₂] ⁺
۲۱	۱۵-۱	ساختار لیگاند LH
۲۱	۱۶-۱	ساختار پیشنهادی کمپلکس‌های چهار وجهی از لیگاند
۲۴	۱۷-۱	ساختار ژئومتری اپتیمایز B ₃ LYP لیگاند با بر حسب اتم‌ها
۲۵	۱۸-۱	ساختار ژئومتری اپتیمایز B ₃ LYP کمپلکس با بر حسب اتم‌ها
۵۳	۱-۳	ساختار اپتیمایز شده لیگاند ۲ و ۴ دی هیدروکسی سالوفن
۵۳	۲-۳	ساختار اپتیمایز شده کمپلکس پلاتین (II)
۵۴	۳-۳	طیف IR تئوری لیگاند ۲ و ۴ دی هیدروکسی سالوفن
۵۴	۴-۳	طیف IR تئوری کمپلکس پلاتین (II)

۵۵	طیف IR لیگاند ۲ و ۴ دی هیدروکسی سالوفن	۵-۳
۵۶	طیف IR کمپلکس پلاتین (II)	۶-۳
۵۸	تبادل توتومری پیشنهادی برای لیگاند شیف باز 2,4DHS	۷-۳
۶۴	طیف الکترونی لیگاند ۲ و ۴ دی هیدروکسی سالوفن	۸-۳
۶۵	طیف الکترونی کمپلکس پلاتین	۹-۳
۶۶	طیف الکترونی تئوری کمپلکس [Pt (OH) ₂ Salophen] با استفاده از روش PW91/DZ	۱۰-۳
۶۸	اوربیتال HOMO کمپلکس [Pt (OH) ₂ Salophen].	۱۱-۳
۶۸	اوربیتال LUMO کمپلکس [Pt (OH) ₂ Salophen].	۱۲-۳
۶۹	دیاگرام اوربیتال مولکولی کمپلکس [Pt (OH) ₂ Salophen] با استفاده از روش PW91/DZ	۱۳-۳
	PW91/DZ	
۷۴	ساختار اپتیمایز شده کمپلکس پالادیم (II)	۱۴-۳
۷۵	طیف IR کمپلکس پالادیم (II)	۱۵-۳
۷۵	طیف IR تئوری کمپلکس پالادیم (II)	۱۶-۳
۸۱	طیف الکترونی کمپلکس پالادیم	۱۷-۳
۸۲	طیف الکترونی کمپلکس [Pd (OH) ₂ Salophen] با استفاده از روش PW91/DZ	۱۸-۳
۸۳	اوربیتال HOMO کمپلکس [Pd (OH) ₂ Salophen].	۱۹-۳
۸۴	اوربیتال LUMO کمپلکس [Pd(OH) ₂ Salophen]	۲۰-۳

۸۴	دیاگرام اوربیتال مولکولی کمپلکس [Pd (OH) ₂ Salophen] با استفاده از روش PW91/DZ	۲۱-۳
۸۸	ساختار اپتیمایز شده کمپلکس نیکل (II)	۲۲-۳
۸۹	طیف IR کمپلکس نیکل (II)	۲۳-۳
۹۲	ساختار کریستالی کمپلکس ([Ni(C ₂₀ H ₁₄ N ₂ O ₄)]·2H ₂ O)	۲۴-۳
۹۵	طیف الکترونی کمپلکس نیکل	۲۵-۳
۹۶	دیاگرام اوربیتال مولکولی کمپلکس [Ni(OH) ₂ Salophen] با استفاده از روش PW91/DZ	۲۶-۳
۹۸	اوربیتال HOMO کمپلکس [Ni(OH) ₂ Salophen].	۲۷-۳
۹۸	اوربیتال LUMO کمپلکس [Ni(OH) ₂ Salophen].	۲۸-۳
۱۰۰	ساختار اپتیمایز شده کمپلکس مس (II).	۲۹-۳
۱۰۰	طیف IR کمپلکس مس (II)	۳۰-۳
۱۰۱	طیف IR تئوری کمپلکس مس (II)	۳۱-۳
۱۰۴	ساختار کریستالی کمپلکس مس سالوفن	۳۲-۳
۱۰۷	طیف الکترونی کمپلکس مس (II)	۳۳-۳
۱۰۹	اوربیتال HOMO کمپلکس مس (II)	۳۴-۳
۱۰۹	اوربیتال LUMO کمپلکس مس (II)	۳۵-۳

فهرست جداول

- ۱-۳ مقایسه فرکانس ارتعاش پیوند $C=N_{imini}$, $Pt-N$ حاصل از سری های پایه مختلف در کمپلکس پلاتین (II). ۵۷
- ۲-۳ مقایسه فرکانس ارتعاش پیوند $Pt-O$, $C-O_{phenolic}$ حاصل از سری های پایه مختلف در کمپلکس پلاتین ۶۰
- ۳-۳ مقایسه طول پیوندهای حاصل از سری های پایه مختلف در لیگاند و کمپلکس پلاتین (II). ۶۱
- ۴-۳ مقایسه طول پیوندها و زوایای حاصل از حاصل از سری های پایه مختلف در لیگاند و کمپلکس پلاتین (II). ۶۲
- ۵-۳ انتقالات مهم $singlet-singlet (S-S)$ محاسبه شده کمپلکس پلاتین (II) ۶۷
- ۶-۳ نسبت درصد پایین ترین اوربیتال اشغال شده و بالاترین اوربیتال اشغال نشده مولکولی $LUMO$, $HOMO$ کمپلکس پلاتین (II). ۷۰
- ۷-۳ سطوح انرژی $HOMO$ و $LUMO$ کمپلکس پلاتین (II) ۷۱
- ۸-۳ مقایسه بارهای اتمی لیگاند در ADF ۷۲
- ۹-۳ مقایسه بارهای اتمی کمپلکس پلاتین (II) در ADF ۷۳
- ۱۰-۳ مقایسه فرکانس ارتعاش پیوند $C=N_{imini}$, $Pd-N$ حاصل از سری های پایه مختلف در کمپلکس پالادیم (II) ۷۶

- ۱۱-۳ مقایسه فرکانس ارتعاش پیوند (C-O),(Pd-O) حاصل از سری های پایه مختلف در کمپلکس پالادیم (II) ۷۸
- ۱۲-۳ مقایسه طول پیوندهای حاصل از سری های پایه مختلف در لیگاند و کمپلکس پالادیم (II) ۷۸
- ۱۳-۳ مقایسه زوایای پیوندی حاصل از سری های پایه مختلف در کمپلکس پالادیم (II) ۷۹
- ۱۴-۳ همه انتقالات مهم singlet-singlet (S-S) محاسبه شده تئوری را برای کمپلکس ۸۲
- ۱۵-۳ نسبت درصد پایین ترین اوربیتال اشغال شده و بالاترین اوربیتال اشغال نشده مولکولی (LUMO HOMO) کمپلکس پالادیم با استفاده از روش PW91/DZ ۸۵
- ۱۶-۳ سطوح انرژی HOMO و LUMO کمپلکس پالادیم ۸۶
- ۱۷-۳ مقایسه بارهای اتمی کمپلکس پالادیم (II) در ADF ۸۷
- ۱۸-۳ مقایسه فرکانس ارتعاش پیوند C=O_{phenolic} و C=N_{iminic} حاصل از سری های پایه مختلف در کمپلکس نیکل (II) ۹۰
- ۱۹-۳ مقایسه فرکانس ارتعاش پیوند C=O_{phenolic} و Ni-O حاصل از سری های پایه مختلف در کمپلکس نیکل (II) ۹۲
- ۲۰-۳ مقایسه زوایای حاصل از سری های پایه مختلف در کمپلکس نیکل (II). ۹۳
- ۲۱-۳ مقایسه طول پیوندها حاصل از سری های پایه مختلف در کمپلکس نیکل (II) ۹۴
- ۲۲-۳ نسبت درصد پایین ترین اوربیتال اشغال شده و بالاترین اوربیتال اشغال نشده مولکولی (LUMO and HOMO) کمپلکس با استفاده از روش PW91/DZ ۹۷
- ۲۳-۳ سطوح انرژی HOMO و LUMO کمپلکس نیکل (II). ۹۹
- ۲۴-۳ مقایسه فرکانس ارتعاش پیوند C=N_{imini}, Cu-N حاصل از سری های پایه در کمپلکس مس (II) ۱۰۲

- ۲۵-۳ مقایسه فرکانس ارتعاش کششی پیوند Cu-O, (C-O) حاصل از سری‌های پایه مختلف در کمپلکس ۱۰۴
مس (II)
- ۲۶-۳ مقایسه طول‌های پیوندی حاصل از سری‌های پایه مختلف در لیگاند و کمپلکس مس (II) ۱۰۵
- ۲۷-۳ مقایسه زوایای پیوندی حاصل از سری‌های پایه مختلف در کمپلکس مس (II) ۱۰۵
- ۲۸-۳ نسبت درصد پایین‌ترین اوربیتال اشغال شده و بالاترین اوربیتال اشغال نشده مولکولی (LUMO
HOMO) کمپلکس با استفاده از روش PW91/ DZ ۱۰۸
- ۲۹-۳ سطوح انرژی HOMO و LUMO. کمپلکس مس (II) ۱۱۰
- ۳۰-۳ کمیتهای ترمودینامیکی محاسبه شده برای کمپلکس های سنتز شده ۱۱۰

حروف و علائم اختصاری

ν	Frequenz
ml	Millilitres
mmol	Millimoles
mp	Melting point
nm	Nanometer(10^{-9} m)
Å	Angstrom(10^{-10} m)
h	hours
Hz	Hertz
Cm	Centimeter(10^{-2} m)
δ	Chemical shift
μ L	Microlitres
λ	Wavelength
°C	Degrees Celsius
%	Percent
R	Alkyl group
EtOH	Ethanol
IR	Infra red
MeOH	Methanol
UV	Ultraviole
Vis	Visible
CT	Charge transfer
DMSO	Dimethylsulfoxide
DMSO-d ₆	Deuterated dimethylsulfoxide
LMCT	Ligand to metal charge transfer
VDD	Voronoi deformation density
DZ	Double Zeta basis set
DZP	Double Zeta Plus One Polarization basis set

TZP	Triple – zeta doubly polarized
HOMO	Highest Occupied Molecular Orbital
LUMO	Lowest Unoccupied Molecular Orbital
MO	Molecular Orbital
PW91	Perdew&Yang1991
DFT	Density Functional Theory
ADF	Amsterdam Density Functional

چکیده

۲ و ۴ دی هیدروکسی سالوفن دسته‌ای از لیگاندهای شیف باز متقارن است که در این پایان نامه با علامت اختصاری (2,4 DHS) معرفی می‌شود، در این ترکیبات امکان توتومری بین دو فرم OH و NH وجود دارد. این لیگاند بعنوان لیگاند چهار دندانه N و N⁻، O⁻ و O⁻ از طریق نیتروژن آزومتین و اکسیژن فنولی به فلز کئوردینه می‌شود. در پروژه حاضر کمپلکس‌های [Pd(OH)₂Salophen]، [Ni(OH)₂Salophen]، [Pt(OH)₂Salophen] و [Cu(OH)₂Salophen] با این لیگاند سنتز شدند و با طیف سنجی‌های IR و UV-vis و آنالیز عنصری CHN، هدایت مولی و نقطه ذوب شناسایی شدند. شیمی کئوردیناسیون کمپلکس‌های مسطح مربع پلاتین (II) و پالادیم (II) با لیگاندهای دهنده اکسیژن و نیتروژن اهمیت بسیار زیادی در سنتز داروهای ضد تومور و ضد سرطان و فعالیت‌های کاتالیتیکی دارند.

همه محاسبات در این کار با استفاده از تئوری تابع چگالی ADF انجام شد. در این مطالعه نظری، ساختارهای مسطح مربع با کمی انحراف برای کمپلکس‌های حاصل با استفاده از روش PW91 و سری‌های پایه مختلف DZ/DZP /TZP بدست آمد. همچنین فرکانس‌های ارتعاشی نشان دادند که سری پایه DZ، بیشترین سازگاری را با مقادیر تجربی دارد.

انرژی‌های HOMO و LUMO در سری‌های پایه مختلف محاسبه شدند و دیاگرام اوربیتال مولکولی کمپلکس‌ها محاسبه شدند. همچنین بارهای اتمی در ADF به سه روش مولیکن، ورونی و هیرشیفلد برای کمپلکس‌ها با سری پایه DZ /DZP /TZP محاسبه شدند.

پارامترهای ساختاری بدست آمده تطابق خوبی با نتایج تجربی دارند، نتایج محاسباتی و تجربی، ساختارهای پیشنهادی برای لیگاند و کمپلکس‌ها را تأیید می‌کنند.

**۱-۱ شیف بازها**

شیف بازها [۱] دسته‌ای از ترکیبات آلی هستند که از واکنش افزایشی - حذفی یک ترکیب کربونیل دار با آمین نوع اول بوجود می‌آیند، به این ترکیبات ایمین یا آزومیتن نیز گفته می‌شود که به پاس تلاش‌های هوگوشیف^۱، شیمیدان آلمانی بعد از او (۱۹۱۵-۱۸۳۴) نامگذاری شدند.

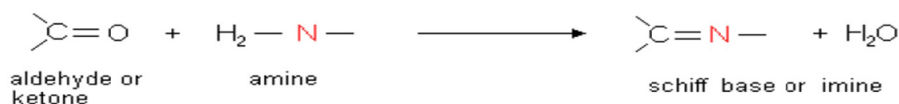
این ترکیبات دارای فرمول کلی $R_1R_2C=NR_3$ می‌باشند که R_1 یک گروه آریل است، R_2 اتم هیدروژن است و R_3 یک گروه آریل یا آلکیل است. شیف بازهای دارای استخلاف آریل پایداری بیشتری دارند و سهولت سنتز می‌شوند در حالی که استخلاف‌های دارای آلکیل نسبتاً ناپایدارند.

شیف بازهای آلدئید آلیفاتیک نسبتاً ناپایدارند در حالی آلدئیدهای آروماتیک دارای اثر مزدوج شدگی بیشتر و پایدار هستند [۲].

۱-۲ روش‌های تهیه شیف بازها

چندین مسیر واکنش برای سنتز شیف بازها وجود دارد [۳] معمول‌ترین آنها، واکنش تراکمی بین آمین و آلدئید یا کتون تحت شرایط رفلاکس است، اولین مرحله این واکنش حمله نوکلئوفیلی اتم نیتروژن آمین روی کربن کربونیل می‌باشد که منجر به تشکیل واسطه‌ای ناپایدار می‌شود و در نتیجه، آب زدایی (حذف آب) ایمین بوجود می‌آید.

مکانیسم کلی تشکیل شیف بازها مطابق با واکنش زیر است [۴]:



¹ Hogo schiff