



دانشگاه ارومیه

دانشکده علوم

گروه شیمی

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد در رشته شیمی معدنی

عنوان :

سنتز، شناسایی و بررسی ساختار بلوری کمپلکس های فلزات واسطه  $Mn$ ،  $Zn$  با لیگاند های بنزن- ۱، ۲، ۴، ۵- تترا کربوکسیلیک اسید با آمین های آلیفاتیک و بررسی پروتون ترانسفر در این کمپلکس ها

استاد راهنما :

دکتر مجید اسم حسینی

پژوهشگر:

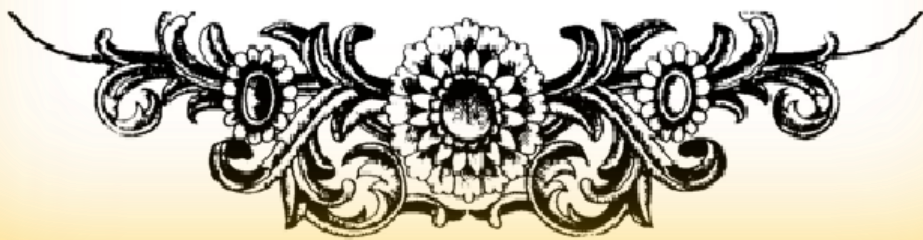
محمد وطنی

بهمن ۱۳۹۱

حق چاپ و تکثیر مطالب این پایان نامه برای دانشگاه ارومیه محفوظ است



بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



## تقدیم به :

محضر ارزشمند پدر و مادر عزیزم به خاطر همه ی تلاش های محبت آمیزی که در دوران مختلف زندگی ام انجام داده اند و بامهربانی چگونه زیستن را به من آموخته اند.

محضر ارجمند پدر و مادر عزیز و مهربان همسر که مرا همچون فرزند خود دوست داشته و همواره مرا مورد حمایت خود قرار دادند و اغراق نیست اگر بگویم مانند پدر و مادر خودیش دوستشان دارم.

به پاس قدر دانی از قلبی آکنده از عشق و محبت که محیطی سرشار از سلامت و صمیمیت و آرامش و آسایش برای من فراهم آورده است...

همدلی که با واژه ی صبر و فداکاری آشنایی دارد و با امید بخشی، عطر رویایی آرامش و اطمینان را با تمام وجود به من هدیه کرد و مرا در راه رسیدن به اهداف عالی یاری رساند...

همو که در لحظه لحظه های سخت زندگی هرگز تنهائیم نگذاشت و محبت بی دریغ خود را عاشقانه نثارم کرد...

شور زندگی، پناه خستگی و امید بودنم...

این پایان نامه تقدیم به همسر مهربانم می گردد.

## سپاس :

سپاس بی کران پروردگار یکتا را که هستی مان بخشید و به طریق علم و دانش رهنمونمان شد و به همنشینی رهروان علم و دانش مفتخرمان نمود و خوشه چینی از علم و معرفت را روزیمان ساخت.

در اینجا بر خود لازم می دانم که از زحمات استاد راهنمای گرانقدرم، جناب آقای دکتر مجید اسم حسینی، که همواره مرا مورد لطف و محبت و راهنمایی های ارزشمند خود قرار دادند، نهایت تقدیر و تشکر را بیان دارم.

از اساتید ارجمندم جناب آقای دکتر ولی گلصنملو و جناب آقای دکتر علیرضا دادرس که بر اینجانب منت نهادند و داوری این پایان نامه را قبول زحمت فرمودند بی نهایت سپاسگذارم و از درگاه خداوند متعال توفیق روز افزون این عزیزان را مسئلت می نمایم.

همچنین از محضر جناب آقای دکتر جلیل خارا مدیریت محترم تحصیلات تکمیلی دانشکده علوم که دفاع این پایان نامه بدون کمک و همراهی ایشان میسر نبود تشکر و قدردانی می نمایم.

از همسر مهربانم که با صبر و فداکاری، در سخت ترین لحظات، آرامش دهنده وجودم بود و با دلگرمی ها و عشق بی حد و حصر خویش انجام این پایان نامه را برایم ممکن ساخت تشکر وافر دارم.

همچنین از مساعدت های اساتید محترم و دانشجویان صمیمی و مهربان دانشگاه ارومیه و از زحمات دوستان و همکلاسی های عزیزم، کمال تشکر و سپاسگزاری را دارم و برای همه پویندگان راه علم و دانش، بهترین ها را آرزومندم...

محمد وطنی

بهمن ۹۱

## فهرست

صفحه	عنوان
I	فهرست مطالب
X	فهرست جدول‌ها
XIII	فهرست شکل‌ها
XX	چکیده فارسی

## فهرست مطالب

### فصل اول : مقدمه و پیشینه

صفحه	عنوان
۱	مقدمه
۱	ترکیب‌های کوئوردیناسیون یا ترکیب‌های کمپلکس
۴	۱-۱. کمپلکس‌های کلاسیک
۴	۲-۱. ترکیب‌های پیچیده دیگر
۴	۱-۲-۱. ترکیب‌های قفسی
۵	۲-۲-۱. کلاترات‌ها (ترکیب‌های اندرون‌گیر) و هیدرات‌ها
۶	۳-۲-۱. ترکیب‌های کلاستر (خوشه‌ای) فلزی
۷	۳-۱. انواع ساختار کمپلکس‌های دو هسته‌ای
۸	۱-۳-۱. دو هشت وجهی مشترک در یک یال
۸	۲-۳-۱. دو هشت وجهی مشترک در یک وجه
۸	۳-۳-۱. منشور مربعی (تتراگونالی)
۹	۴-۳-۱. ضد منشور مثلثی
۹	۴-۱. انواع لیگاند‌ها

- ۱-۴-۱. لیگاندهای یک دندانه ای ..... ۹
- الف) لیگاندهای یک دندانه ای معدنی ..... ۱۰
- ب) لیگاندهای یک دندانه ای آلی ..... ۱۰
- ۱-۴-۲. لیگاندهای دوسردندانه ای ..... ۱۱
- ۱-۴-۳. لیگاندهای چند دندانه ای یا کیلیت ها ..... ۱۲
- الف) لیگاندهای دو دندانه ای ..... ۱۲
- ب) لیگاندهای سه دندانه ای ..... ۱۴
- ج) لیگاندهای چهار دندانه ای ..... ۱۴
- د) لیگاندهای پنج دندانه ای ..... ۱۵
- ه) لیگاند شش دندانه ای ..... ۱۵
- ۱-۵. جدا کردن فلزات سمی از بدن توسط کمپلکسها ..... ۱۶
- ۱-۶. کربوکسیلیک اسیدها ..... ۱۶
- ۱-۷. خواص فیزیکی کربوکسیلیک اسیدها ..... ۱۶
- ۱-۸. پایرومیتیک اسید ..... ۱۷
- ۱-۸-۱. معرفی ..... ۱۷
- ۱-۸-۲. مشخصات کلی پایرومیتیک اسیدها ..... ۱۹
- ۱-۸-۳. ویژگیهای مهم پایرومیتیک اسید ..... ۲۱
- ۱-۸-۴. خود تجمعی ابرمولکولی پایرومیتیک اسید با ترکیبات حلقوی نیتروژن دار ..... ۲۱
- ۱-۸-۵. کاربردهای پایرومیتیک اسید ..... ۲۵
- ۱-۸-۶. سیستمهای ابر مولکولی فلزهای واسطه با لیگاند پایرومیتیک اسید ..... ۲۶
- ۱-۹. واکنش های انتقال پروتون اسید و باز ..... ۳۵
- ۱-۱۰. آمینها ..... ۳۶
- ۱-۱۰-۱. مفاهیم پایه ..... ۳۶

- ۳۷ ..... ۲-۱۰-۱. آمینهای فعال از نظر فیزیولوژیکی
- ۳۷ ..... ۳-۱۰-۱. کاربرد آمینها به عنوان تفکیک کننده انانیتومرها
- ۳۷ ..... ۴-۱۰-۱. کاربرد آمینها در صنعت
- ۳۸ ..... ۱۱-۱. دی اتیلن تری آمین
- ۳۹ ..... ۱-۱۱-۱. معرفی
- ۳۹ ..... ۲-۱۱-۱. واکنش ها و کاربردها
- ۴۰ ..... ۱۲-۱. تری اتیلن تترا آمین
- ۴۰ ..... ۱-۱۲-۱. معرفی
- ۴۱ ..... ۲-۱۲-۱. روش سنتز
- ۴۱ ..... ۳-۱۲-۱. کاربردها
- ۴۱ ..... ۴-۱۲-۱. شیمی کوئوردیناسیون
- ۴۲ ..... ۱۳-۱. کلرید روی (II)
- ۴۳ ..... ۱۴-۱. کلرید منگنز (II)
- ۴۴ ..... ۱۵-۱. بلور
- ۴۴ ..... ۱۶-۱. ریشه واژه بلور
- ۴۴ ..... ۱۷-۱. تاربخچه
- ۴۵ ..... ۱۸-۱. بلورهای از لحاظ همسانگردی و ناهمسانگردی
- ۴۵ ..... ۱۹-۱. روش های تبلور و رشد بلور
- ۴۵ ..... ۲۰-۱. روش های فاز بخار
- ۴۵ ..... ۱-۲۰-۱. رسوب شیمیایی بخار (CVD)
- ۴۶ ..... ۲-۲۰-۱. رسوب فیزیکی بخار (PVD)
- ۴۶ ..... ۲۱-۱. جامدات کریستالی
- ۴۹ ..... ۲۲-۱. کریستالوگرافی

- ۲۳-۱ . شبکه کریستالی یا شبکه فضایی ..... ۵۰
- ۲۴-۱ . انواع شبکه های کریستالی ..... ۵۱
- ۲۵-۱ . انواع بلور ..... ۵۲
- ۲۵-۱-۱. انواع کریستالها بر حسب نیروهای بستگی بین اتمها و مولکولهای آنها ..... ۵۲
- الف) یونی ..... ۵۲
- ب) کووالانت ..... ۵۳
- ج) فلزی ..... ۵۳
- د) مولکولی ..... ۵۳
- ۲۵-۱-۲. انواع کریستالها بر حسب ساختار شبکه‌ای ..... ۵۴
- الف) شبکه براوه ..... ۵۴
- ب) شبکه‌های کریستالی C.P ..... ۵۴
- ۲۵-۱-۳. انواع کریستالها از نقطه نظر اپتیکی ..... ۵۴
- الف) کریستالهای ساده ..... ۵۴
- ب) کریستالهای دوشکستی ..... ۵۴
- ۲۶-۱ . کاربرد عمومی کریستال ها ..... ۵۶
- ۲۷-۱ . طبقه بندی دستگاه بلوری از لحاظ هندسی ..... ۵۶
- ۲۷-۱-۱. دستگاه بلوری دوبعدی ..... ۵۶
- ۲۷-۱-۲. دستگاه بلوری سه بعدی ..... ۵۷
- بلورشناسی و طبقه بندی کانی ها بر اساس شکل کریستال ..... ۵۹
- الف) شبکه کریستالی مکعبی (FCC, BCC, SC) ..... ۶۱
- ب) شبکه کریستالی چهاروجهی (S, BC) ..... ۶۳
- ج) شبکه کریستالی راست‌لوزی (ارتورومبیک) (S, Base-C, BC, FC) ..... ۶۵
- د) شبکه کریستالی شش گوشه (S) ..... ۶۶



- ۶۸ ..... (و) شبکه کریستالی سه وجهی (رمبوهدرال) (لوزی وجهی) (S).....
- ۶۹ ..... (ه) سیستم کریستالی مونوکلینیک (S, Base-C).....
- ۷۱ ..... (ی) سیستم کریستالی تری کلینیک (S).....
- ۷۲ ..... ۱-۲۷-۳. دستگاه بلوری چهاربعد ..... ۱-۲۸-۱. عیوب شبکه کریستالی.....
- ۷۲ ..... ۱-۲۸-۱. عیوب شبکه کریستالی.....
- ۷۴ ..... ۱-۲۸-۱. عیوب نقطه ای (عیوب بدون بعد).....
- ۷۴ ..... الف) عیب نقطه ای جای خالی.....
- ۷۵ ..... ب) عیب نقطه ای اتم بین نشین.....
- ۷۵ ..... ج) عیب نقطه ای اتم جانشین.....
- ۷۵ ..... د) عیب نقطه ای فرنکل.....
- ۷۶ ..... و) عیب نقطه ای شوتکی.....
- ۷۷ ..... ۱-۲۸-۲. عیوب خطی (عیوب یک بعدی).....
- ۷۷ ..... الف) نابه جایی.....
- ۷۸ ..... ب) انواع نابجایی.....
- ۷۸ ..... ۱. از نظر بردار برگرز.....
- ۸۰ ..... ۲. از نظر کامل بودن.....
- ۸۰ ..... ۱-۲۸-۳. عیوب سطحی (عیوب دو بعدی).....
- ۸۰ ..... الف) مرزدانه ها.....
- ۸۱ ..... ب) عیب لایه ای.....
- ۸۲ ..... ۱-۲۸-۴. عیوب فضایی (عیوب سه بعدی).....

## فصل دوم : بخش تجربی

صفحه	عنوان
۸۳	۱-۲ . مواد مورد استفاده .....
۸۳	۱-۱-۲ . مواد جامد مصرفی .....
۸۳	۲-۱-۲ . مواد مایع مصرفی .....
۸۳	۲-۲ . حلال ها .....
۸۳	۳-۲ . تجهیزات .....
۸۴	۴-۲ . وسایل شیشه ای .....
۸۴	۵-۲ . سنتز لیگاندها .....
۸۴	۱-۵-۲ . سنتز لیگاند بیس (دی اتیلن آمین دی آمونیوم) (بنزن-۵،۴،۲،۱-تترا کربوکسیلاتو) هگزا هیدرات .....
۸۸	۲-۵-۲ . سنتز لیگاند تری اتیلن آمین دی آمونیوم (بنزن-۵،۴،۲،۱-تترا کربوکسیلاتو) تترا هیدرات .....
۹۱	۶-۲ . کمپلکسهای سنتز شده توسط لیگاند بیس (دی اتیلن آمین دی آمونیوم) (بنزن-۵،۴،۲،۱-تترا کربوکسیلاتو) هگزا هیدرات (LM) .....
۹۲	۱-۶-۲ . سنتز کمپلکس پلی {دی اتیلن آمین دی آمونیوم (بنزن-۴،۲،۱،۵-تترا کربوکسیلاتو) روی (II) دی هیدرات} حاصل از برهم کنش $ZnCl_2$ با لیگاند LM .....
۹۶	۲-۶-۲ . سنتز کمپلکس پلی {دی اتیلن آمین دی آمونیوم (بنزن-۵،۴،۲،۱-تترا کربوکسیلاتو) مس (II)} (سمی بنزن-۵،۴،۲،۱-تترا کربوکسیلات) تری هیدرات} حاصل از برهم کنش $CuCl_2 \cdot 2H_2O$ با لیگاند LM .....
۹۷	۳-۶-۲ . سنتز کمپلکس حاصل از برهم کنش $MnCl_2$ با لیگاند LM .....
۹۸	۴-۶-۲ . سنتز کمپلکس حاصل از برهم کنش $Mn(ClO_4)_2, 6H_2O$ با لیگاند LM .....
۹۹	۵-۶-۲ . سنتز کمپلکس حاصل از برهم کنش میکس فلزات $ZnCl_2$ و $MnCl_2$ با لیگاند LM .....
۱۰۰	۶-۶-۲ . سنتز کمپلکس حاصل از برهم کنش میکس فلزات $ZnCl_2$ و $Mn(ClO_4)_2, 6H_2O$ با لیگاند LM .....
۱۰۱	۷-۶-۲ . سنتز کمپلکس حاصل از برهم کنش میکس فلزات $ZnCl_2$ و $CuCl_2 \cdot 2H_2O$ با لیگاند LM .....
۱۰۲	۸-۶-۲ . سنتز کمپلکس حاصل از برهم کنش میکس فلزات $ZnCl_2$ و $Cu(NO_3)_2$ با لیگاند LM .....

- ۷-۲. کمپلکسهای سنتز شده توسط لیگاند تری اتیلن آمین دی آمونیوم (بنزن-۱،۲،۴-۵-تترا کربوکسیلاتو) تترا هیدرات (LM') ..... ۱۰۳
- ۱-۷-۲. سنتز کمپلکس حاصل از برهم کنش  $ZnCl_2$  با لیگاند LM' ..... ۱۰۴
- ۲-۷-۲. سنتز کمپلکس حاصل از برهم کنش  $MnCl_2$  با لیگاند LM' ..... ۱۰۵
- ۳-۷-۲. سنتز کمپلکس حاصل از برهم کنش  $Mn(ClO_4)_2 \cdot 6H_2O$  با لیگاند LM' ..... ۱۰۵
- ۴-۷-۲. سنتز کمپلکس حاصل از برهم کنش میکس فلزات  $ZnCl_2$  و  $MnCl_2$  با لیگاند LM' ..... ۱۰۶
- ۵-۷-۲. سنتز کمپلکس حاصل از برهم کنش میکس فلزات  $ZnCl_2$  و  $Mn(ClO_4)_2 \cdot 6H_2O$  با لیگاند LM' ..... ۱۰۷
- ۶-۷-۲. سنتز کمپلکس حاصل از برهم کنش میکس فلزات  $ZnCl_2$  و  $Cu(NO_3)_2$  با لیگاند LM' ..... ۱۰۸

### فصل سوم : بحث و نتیجه گیری

صفحه	عنوان
۱۱۰	۱-۳. طیف IR ..... ۱۱۰
۱۱۰	۱-۱-۳. طیف IR کربوکسیلیک اسیدها ..... ۱۱۰
۱۱۱	۲-۱-۳. طیف IR آمین ها ..... ۱۱۱
۱۱۲	۲-۳. بررسی لیگاند بیس (دی اتیلن آمین دی آمونیوم) (بنزن-۱،۲،۴-۵-تترا کربوکسیلاتو) هگزا هیدرات ..... ۱۱۲
۱۱۲	۱-۲-۳. بررسی دادهای طیف IR لیگاند بیس (دی اتیلن آمین دی آمونیوم) (بنزن-۱،۲،۴-۵-تترا کربوکسیلاتو) هگزا هیدرات ..... ۱۱۲
۱۱۴	۲-۲-۳. تفسیر داده های کریستالوگرافی لیگاند بیس (دی اتیلن آمین دی آمونیوم) (بنزن-۱،۲،۴-۵-تترا کربوکسیلاتو) هگزا هیدرات ..... ۱۱۴
۱۱۵	۳-۳. بررسی لیگاند تری اتیلن آمین دی آمونیوم (بنزن-۱،۲،۴-۵-تترا کربوکسیلاتو) تترا هیدرات ..... ۱۱۵
۱۱۵	۱-۳-۳. بررسی دادهای طیف IR لیگاند تری اتیلن آمین دی آمونیوم (بنزن-۱،۲،۴-۵-تترا کربوکسیلاتو) تترا هیدرات ... ۱۱۵
۱۱۶	۲-۳-۳. تفسیر داده های کریستالوگرافی لیگاند تری اتیلن آمین دی آمونیوم ( بنزن-۱،۲،۴-۵-تترا کربوکسیلاتو ) تترا هیدرات ..... ۱۱۶
۱۱۸	۴-۳. بررسی کمپلکس پلی {دی اتیلن آمین دی آمونیوم (بنزن-۱،۲،۴-۵-تترا کربوکسیلاتو) روی (II) دی هیدرات} ..... ۱۱۸

۱-۴-۳ . بررسی داده‌های طیف IR کمپلکس پلی‌دی اتیلن آمین دی آمونیوم (بنزن-۵،۴،۲،۱-تترا کربوکسیلاتو) روی (II) دی هیدرات {	۱۱۸
۲-۴-۳ . تفسیر داده های کریستالوگرافی کمپلکس پلی‌دی اتیلن آمین دی آمونیوم (بنزن-۵،۴،۲،۱-تترا کربوکسیلاتو) روی (II) دی هیدرات {	۱۱۹
۵-۳ . بررسی کمپلکس پلی‌دی اتیلن آمین دی آمونیوم (بنزن-۵،۴،۲،۱-تترا کربوکسیلاتو) مس (II) (سمی بنزن-۱،۵،۴،۲-تترا کربوکسیلات) تری هیدرات {	۱۲۲
۱-۵-۳ . بررسی داده‌های طیف IR کمپلکس پلی‌دی اتیلن آمین دی آمونیوم (بنزن-۵،۴،۲،۱-تترا کربوکسیلاتو) مس (II) (سمی بنزن-۵،۴،۲،۱-تترا کربوکسیلات) تری هیدرات {	۱۲۲
۲-۵-۳ . تفسیر داده های کریستالوگرافی کمپلکس پلی‌دی اتیلن آمین دی آمونیوم (بنزن-۵،۴،۲،۱-تترا کربوکسیلاتو) مس (II) (سمی بنزن-۵،۴،۲،۱-تترا کربوکسیلات) تری هیدرات {	۱۲۳
۶-۳ . بررسی کمپلکس حاصل از برهم کنش $ZnCl_2$ با لیگاند $LM'$	۱۲۴
۷-۳ . بررسی طیف IR ترکیب دی اتیلن تری آمین	۱۲۵
۸-۳ . بررسی طیف IR ترکیب تری اتیلن تترا آمین	۱۲۶
۸-۳ . سایر ترکیبات میکس فلزات با لیگاندهای LM و $LM'$	۱۲۷
۱-۸-۳ . کمپلکس حاصل از برهم کنش میکس فلزات $ZnCl_2$ و $MnCl_2$ با لیگاند LM	۱۲۷
۲-۸-۳ . کمپلکس حاصل از برهم کنش میکس فلزات $ZnCl_2$ و $MnCl_2$ با لیگاند $LM'$	۱۲۸
۳-۸-۳ . کمپلکس حاصل از برهم کنش میکس فلزات $ZnCl_2$ و $Cu(NO_3)_2$ با لیگاند LM	۱۲۹
۴-۸-۳ . کمپلکس حاصل از برهم کنش میکس فلزات $ZnCl_2$ و $Mn(ClO_4)_2 \cdot 6H_2O$ با لیگاند LM	۱۳۰
۵-۸-۳ . کمپلکس حاصل از برهم کنش میکس فلزات $ZnCl_2$ و $Mn(ClO_4)_2 \cdot 6H_2O$ با لیگاند $LM'$	۱۳۱
۶-۸-۳ . کمپلکس حاصل از برهم کنش میکس فلزات $ZnCl_2$ و $CuCl_2 \cdot 2H_2O$ با لیگاند LM	۱۳۲
توضیحات	۱۳۳
نتیجه گیری	۱۳۴
پیشنهادات	۱۳۶

## فصل چهارم : پیوست ها

صفحه	عنوان
۱۳۷	۴-۱. داده های کریستالوگرافی لیگاند بیس (دی اتیلن آمین دی آمونیوم) (بنزن-۵،۴،۲،۱- تترا کربوکسیلاتو) هگزا هیدرات ...
۱۴۸	۴-۲ . داده های کریستالوگرافی لیگاند تری اتیلن آمین دی آمونیوم (بنزن-۵،۴،۲،۱- تترا کربوکسیلاتو) تترا هیدرات .....
۱۵۳	۴-۳ . داده های کریستالوگرافی کمپلکس پلی {دی اتیلن آمین دی آمونیوم (بنزن-۵،۴،۲،۱- تترا کربوکسیلاتو) روی (II) دی هیدرات } .....
۱۶۲	۴-۴ . داده های کریستالوگرافی کمپلکس پلی {دی اتیلن آمین دی آمونیوم (بنزن-۵،۴،۲،۱- تترا کربوکسیلاتو) مس (II)} (سمی بنزن-۵،۴،۲،۱- تترا کربوکسیلات) تری هیدرات } .....
۱۷۲	انتشارات و مقالات خارجی و داخلی .....
۱۷۵	منابع .....
۱۷۹	چکیده (به زبان انگلیسی) .....

## فهرست جدول‌ها

### فصل اول : مقدمه و پیشینه

صفحه	عنوان
۳	جدول ۱-۱: رنگ ها و نام کلاسیک چند ترکیب کوئوردیناسیون کبالت (III).....
۱۹	جدول ۱-۲: مشخصات پایرومیلیتیک اسیدها.....
۳۸	جدول ۱-۳: مشخصات دی اتیلن تری آمین.....
۴۰	جدول ۱-۴: مشخصات تری اتیلن تترا آمین.....
۴۲	جدول ۱-۵: مشخصات کلرید روی (II).....
۴۳	جدول ۱-۶: مشخصات کلرید منگنز (II).....
۵۷	جدول ۱-۷: دستگاه بلوری سه بعدی.....
۵۹	جدول ۱-۸: جدول طبقه بندی کانی ها بر اساس شکل کریستال.....
۶۲	جدول ۱-۹: شبکه کریستالی مکعبی و انواع کانی ها و کریستال هایی که در این شبکه متبلور می شوند.....
۶۳	جدول ۱-۱۰: شبکه کریستالی چهاروجهی و انواع کانی ها و کریستال هایی که در این شبکه متبلور می شوند.....
۶۵	جدول ۱-۱۱: شبکه کریستالی راست لوزی و انواع کانی ها و کریستال هایی که در این شبکه متبلور می شوند.....
۶۶	جدول ۱-۱۲: شبکه کریستالی شش گوشه و انواع کانی ها و کریستال هایی که در این شبکه متبلور می شوند.....
۶۸	جدول ۱-۱۳: شبکه کریستالی رمبوهدرال و انواع کانی ها و کریستال هایی که در این شبکه متبلور می شوند.....
۷۰	جدول ۱-۱۴: شبکه کریستالی مونوکلینیک و انواع کانی ها و کریستال هایی که در این شبکه متبلور می شوند.....
۷۱	جدول ۱-۱۵: شبکه کریستالی تری کلینیک و انواع کانی ها و کریستال هایی که در این شبکه متبلور می شوند.....

### فصل سوم : بحث و نتیجه گیری

صفحه	عنوان
۱۱۱	جدول ۱-۳: خلاصه شده فرکانس های گروهی برای گروه های آلی.....
۱۱۴	جدول ۲-۳: داده های کریستالوگرافی لیگاند بیس (دی اتیلن آمین دی آمونیوم) (بنزن-۵،۴،۲،۱-تتراکربوکسیلاتو) هگزا هیدرات.....

- جدول ۳-۳: داده های کریستالوگرافی لیگاند تری اتیلن آمین دی آمونیوم (بنزن-۱،۲،۴،۵-تترا کربوکسیلاتو) تترایدرات ..... ۱۱۷
- جدول ۳-۴: داده های کریستالوگرافی کمپلکس  $[Zn(C_4H_{15}N_3)(C_{10}H_2O_8) \cdot 2H_2O]_n$  ..... ۱۲۰
- جدول ۳-۵: داده های کریستالوگرافی کمپلکس  $[Cu(C_4H_{15}N_3)(C_{10}H_2O_8)(C_{10}H_6O_8)_{0.5} \cdot 3H_2O]_n$  ..... ۱۲۳

## فصل چهارم : پیوست ها

عنوان	صفحه
جدول ۴-۱: داده های کریستالی لیگاند $[C_4H_{15}N_3]_2[C_{10}H_2O_8] \cdot 6H_2O$ ..... ۱۳۷	۱۳۷
جدول ۴-۲: سایر داده های کریستالی لیگاند $[C_4H_{15}N_3]_2[C_{10}H_2O_8] \cdot 6H_2O$ ..... ۱۳۷	۱۳۷
جدول ۴-۳: ویرایش اطلاعات کریستال لیگاند $[C_4H_{15}N_3]_2[C_{10}H_2O_8] \cdot 6H_2O$ ..... ۱۳۸	۱۳۸
جدول ۴-۴: مختصات اتمی و نسبت پارامتر جابه جایی ایزوتروپی ( $U_{iso}$ ) به پارامتر جابه جایی ایزوتروپی هم ارز ( $U_{eq}$ ) لیگاند $[C_4H_{15}N_3]_2[C_{10}H_2O_8] \cdot 6H_2O$ ..... ۱۳۸	۱۳۸
جدول ۴-۵: پارامترهای جابه جایی اتمی لیگاند $[C_4H_{15}N_3]_2[C_{10}H_2O_8] \cdot 6H_2O$ ..... ۱۴۱	۱۴۱
جدول ۴-۶: پارامترهای هندسی (طول پیوندها و زوایای پیوندی) لیگاند $[C_4H_{15}N_3]_2[C_{10}H_2O_8] \cdot 6H_2O$ ..... ۱۴۳	۱۴۳
جدول ۴-۷: مختصات پیوند های هیدروژنی در لیگاند $[C_4H_{15}N_3]_2[C_{10}H_2O_8] \cdot 6H_2O$ ..... ۱۴۷	۱۴۷
جدول ۴-۸: داده های کریستالی لیگاند $[C_6H_{22}N_4][C_{10}H_2O_8] \cdot 4H_2O$ ..... ۱۴۸	۱۴۸
جدول ۴-۹: سایر داده های کریستالی لیگاند $[C_6H_{22}N_4][C_{10}H_2O_8] \cdot 4H_2O$ ..... ۱۴۸	۱۴۸
جدول ۴-۱۰: ویرایش اطلاعات کریستال لیگاند $[C_6H_{22}N_4][C_{10}H_2O_8] \cdot 4H_2O$ ..... ۱۴۹	۱۴۹
جدول ۴-۱۱: مختصات اتمی و نسبت پارامتر جابه جایی ایزوتروپی ( $U_{iso}$ ) به پارامتر جابه جایی ایزوتروپی هم ارز ( $U_{eq}$ ) لیگاند $[C_6H_{22}N_4][C_{10}H_2O_8] \cdot 4H_2O$ ..... ۱۴۹	۱۴۹
جدول ۴-۱۲: پارامترهای جابه جایی اتمی لیگاند $[C_6H_{22}N_4][C_{10}H_2O_8] \cdot 4H_2O$ ..... ۱۵۰	۱۵۰
جدول ۴-۱۳: پارامترهای هندسی (طول پیوندها و زوایای پیوندی) لیگاند $[C_6H_{22}N_4][C_{10}H_2O_8] \cdot 4H_2O$ ..... ۱۵۱	۱۵۱
جدول ۴-۱۴: داده های کریستالی کمپلکس $[Zn(C_4H_{15}N_3)(C_{10}H_2O_8) \cdot 2H_2O]_n$ ..... ۱۵۳	۱۵۳
جدول ۴-۱۵: سایر داده های کریستالی کمپلکس $[Zn(C_4H_{15}N_3)(C_{10}H_2O_8) \cdot 2H_2O]_n$ ..... ۱۵۳	۱۵۳
جدول ۴-۱۶: ویرایش اطلاعات کریستال کمپلکس $[Zn(C_4H_{15}N_3)(C_{10}H_2O_8) \cdot 2H_2O]_n$ ..... ۱۵۴	۱۵۴

جدول ۴-۱۷: مختصات اتمی و نسبت پارامتر جابه جایی ایزوتروپی ( $U_{iso}$ ) به پارامتر جابه جایی ایزوتروپی هم ارز ( $U_{eq}$ ) کمپلکس

۱۵۴ ..... [Zn (C<sub>4</sub>H<sub>15</sub>N<sub>3</sub>)(C<sub>10</sub>H<sub>2</sub>O<sub>8</sub> ).2H<sub>2</sub>O]<sub>n</sub>

جدول ۴-۱۸: پارامترهای جابه جایی اتمی کمپلکس [Zn (C<sub>4</sub>H<sub>15</sub>N<sub>3</sub>)(C<sub>10</sub>H<sub>2</sub>O<sub>8</sub> ).2H<sub>2</sub>O]<sub>n</sub> ..... ۱۵۶

جدول ۴-۱۹: پارامترهای هندسی (طول پیوندها و زوایای پیوندی) کمپلکس [Zn (C<sub>4</sub>H<sub>15</sub>N<sub>3</sub>)(C<sub>10</sub>H<sub>2</sub>O<sub>8</sub> ).2H<sub>2</sub>O]<sub>n</sub> ..... ۱۵۸

جدول ۴-۲۰: داده های کریستالی کمپلکس [Cu (C<sub>4</sub>H<sub>15</sub>N<sub>3</sub>)(C<sub>10</sub>H<sub>2</sub>O<sub>8</sub> )( C<sub>10</sub>H<sub>6</sub>O<sub>8</sub>)<sub>0/5</sub> .3H<sub>2</sub>O]<sub>n</sub> ..... ۱۶۲

جدول ۴-۲۱: سایر داده های کریستالی کمپلکس [Cu (C<sub>4</sub>H<sub>15</sub>N<sub>3</sub>)(C<sub>10</sub>H<sub>2</sub>O<sub>8</sub> )( C<sub>10</sub>H<sub>6</sub>O<sub>8</sub>)<sub>0/5</sub> .3H<sub>2</sub>O]<sub>n</sub> ..... ۱۶۲

جدول ۴-۲۲: ویرایش اطلاعات کریستال کمپلکس [Cu (C<sub>4</sub>H<sub>15</sub>N<sub>3</sub>)(C<sub>10</sub>H<sub>2</sub>O<sub>8</sub> )( C<sub>10</sub>H<sub>6</sub>O<sub>8</sub>)<sub>0/5</sub> .3H<sub>2</sub>O]<sub>n</sub> ..... ۱۶۳

جدول ۴-۲۳: مختصات اتمی و نسبت پارامتر جابه جایی ایزوتروپی ( $U_{iso}$ ) به پارامتر جابه جایی ایزوتروپی هم ارز ( $U_{eq}$ ) کمپلکس

۱۶۳ ..... [Cu (C<sub>4</sub>H<sub>15</sub>N<sub>3</sub>)(C<sub>10</sub>H<sub>2</sub>O<sub>8</sub> )( C<sub>10</sub>H<sub>6</sub>O<sub>8</sub>)<sub>0/5</sub> .3H<sub>2</sub>O]<sub>n</sub>

جدول ۴-۲۴: پارامترهای جابه جایی اتمی کمپلکس [Cu (C<sub>4</sub>H<sub>15</sub>N<sub>3</sub>)(C<sub>10</sub>H<sub>2</sub>O<sub>8</sub> )( C<sub>10</sub>H<sub>6</sub>O<sub>8</sub>)<sub>0/5</sub> .3H<sub>2</sub>O]<sub>n</sub> .... ۱۶۵

جدول ۴-۲۵: پارامترهای هندسی (طول پیوندها و زوایای پیوندی) کمپلکس

۱۶۷ ..... [Cu (C<sub>4</sub>H<sub>15</sub>N<sub>3</sub>)(C<sub>10</sub>H<sub>2</sub>O<sub>8</sub> )( C<sub>10</sub>H<sub>6</sub>O<sub>8</sub>)<sub>0/5</sub> .3H<sub>2</sub>O]<sub>n</sub>



## فهرست شکل ها

### فصل اول : مقدمه و پیشینه

صفحه	عنوان
۵	شکل ۱-۱ . ساختار مولکولی چند نمونه از ترکیب های قفسی .....
۶	شکل ۲-۱ . نمونه هایی از کلاترات ها .....
۷	شکل ۳-۱ . ساختار آنیون خوشه ای دو هسته ای $W_2Cl_9^{3-}$ .....
۷	شکل ۴-۱ . ساختار آنیون خوشه ای سه هسته ای $Re_3Cl_{12}^{3-}$ .....
۷	شکل ۵-۱ . ساختار کاتیون خوشه ای شش هسته ای $Mo_6Cl_8^{4+}$ .....
۸	شکل ۶-۱ . ساختارهای (الف) $Nb_2[C_2H_4(PR_2)]_2Cl_6$ ، (ب) $Zr_2(PR_3)_4Cl_6$ .....
۸	شکل ۷-۱ . ساختار $W_2Cl_9^{3-}$ .....
۹	شکل ۸-۱ . ساختار $Re_2Cl_8^{2-}$ .....
۹	شکل ۹-۱ . ساختار پیوند سه گانه Mo-Mo در کمپلکس $Mo_2L_6$ .....
۹	شکل ۱۰-۱ . ساختار $M_2L_6$ .....
۱۰	شکل ۱۱-۱ . ساختار هیپریدرزونانس لیگاند $CH_3COO^-$ .....
۱۱	شکل ۱۲-۱ . ساختار N اتصالی آنیون نیتريت ( $NO_2^-$ ) .....
۱۱	شکل ۱۳-۱ . ساختار O اتصالی آنیون نیتريت ( $NO_2^-$ ) .....
۱۲	شکل ۱۴-۱ . نمایش لیگاند یک دندان ای $Cl^-$ که در نقش یک گروه های پلساز عمل می کند .....
۱۳	شکل ۱۵-۱ . متداولترین لیگاندهای دو دندان ای معدنی .....
۱۳	شکل ۱۶-۱ . آنیون کربنات می تواند لیگاند یک دندان ای نیز باشد .....
۱۳	شکل ۱۷-۱ . ساختار لیگاند اتیلن دی آمین .....
۱۳	شکل ۱۸-۱ . ساختار لیگاند پروپیلن دی آمین .....
۱۴	شکل ۱۹-۱ . ساختار لیگاند تری متیلن دی آمین .....
۱۴	شکل ۲۰-۱ . ساختار لیگاند دی اتیل تری آمین .....

- شکل ۱-۲۱. ساختار لیگاند تری اتیلن تترا آمین ..... ۱۴
- شکل ۱-۲۲. ساختار لیگاند تری آمینو تری اتیل آمین ..... ۱۵
- شکل ۱-۲۳. ساختار لیگاند تترا اتیلن پنتا آمین ..... ۱۵
- شکل ۱-۲۴. ساختار لیگاند اتیلن دی آمین تترا استات (EDTA) ..... ۱۵
- شکل ۱-۲۵. یک جفت مولکول کربوکسیلیک اسید به وسیله دو پیوند هیدروژنی به یکدیگر متصل می شوند ..... ۱۷
- شکل ۱-۲۶. طرح ۵ ساختار خود تجمعی برای دی آنیون های پایرومیلنات ..... ۲۰
- شکل ۱-۲۷. آرایش دو بعدی  $H_4BTEC$  و فنازین با دو نوع حفره و پیوند های هیدروژنی ..... ۲۲
- شکل ۱-۲۸. تصویری از ساختارهای مولکولی در واحد نامتقارن (a) سیتوزین و ۵،۳،۱- تری کربوکسیلیک اسید (تری میسک اسید) (TMA)، (b) سیتوزین و ۵،۴،۲،۱- تترا کربوکسیلیک اسید (PMA) ..... ۲۳
- شکل ۱-۲۹. طرح لایه ای پیوند هیدروژنی سیتوزین، ۵،۳،۱- تری کربوکسیلیک اسید و مولکول های آب. (b) توده لایه های مولکولی ..... ۲۳
- شکل ۱-۳۰. (b) طرح لایه مولکولی پیوندهای هیدروژنی سیتوزین، ۵،۴،۲،۱- تترا کربوکسیلیک اسید و مولکولهای آب (a) توده لایه های مولکولی ..... ۲۴
- شکل ۱-۳۱. مدل فضاپرکن توده مولکولی در یک لایه از کمپلکس مولکولی ۵،۴،۲،۱- تترا کربوکسیلیک اسید- سیتوزین ... ۲۴
- شکل ۱-۳۲. توده مولکولی در محور ۱:۱ مولکول ۵،۴،۲،۱- تترا کربوکسیلیک اسید با ۱، ۴- دی هیدروکسی بنزن (a) در امتداد محور b (b) در امتداد محور c ..... ۲۵
- شکل ۱-۳۳. انواع حالت های مختلف کوئوردیناسیون پایرومیلنیک اسید با فلزات واسطه ..... ۲۷
- شکل ۱-۳۴. محیط کوئوردیناسیونی اتم مرکزی  $Cu^{II}$  در  $CuH_2Pm$  ..... ۲۸
- شکل ۱-۳۵. نمایی از ساختار بلوری  $Cu_2Pm$  ..... ۲۸
- شکل ۱-۳۶. نمایی از تعیین ساختار کمپلکس های  $Zn$ ،  $Na$  و  $K$  با  $H_4BTEC$  ..... ۲۹
- شکل ۱-۳۷. ساختار کمپلکس  $Ni$  با  $H_4BTEC$  (  $[Ni(BTEC)(OH_2)_4].[C_4H_{12}N_2].4H_2O]_n$  ) ..... ۳۰
- شکل ۱-۳۸. ساختار کمپلکس  $[Zn_2(C_{10}H_2O_8)(C_{16}H_{20}N_4)(H_2O)_2]_n$  ..... ۳۱
- شکل ۱-۳۹. طرح سه بعدی ساختار کمپلکس  $[Zn_2(C_{10}H_2O_8)(C_{16}H_{20}N_4)(H_2O)_2]_n$  ..... ۳۱
- شکل ۱-۴۰. تصویری از لایه های مشبک تکراری در کمپلکس  $[Zn_2(C_{10}H_2O_8)(C_{16}H_{20}N_4)(H_2O)_2]_n$  حول محور تقارن C ..... ۳۲

- شکل ۱-۴۱. تصویر توده ای از شبکه سه بعدی کمپلکس  $[Zn_2(C_{10}H_2O_8)(C_{16}H_{20}N_4)(H_2O)_2]_n$  حول محور تقارن a
- ۳۲ .....
- شکل ۱-۴۲. ساختار مولکولی ترکیب انتقال پروتون  $(phenH)(btcH_3) \cdot H_2O$  .....
- شکل ۱-۴۳. الگوی انباشتگی ترکیب انتقال پروتون  $(phenH)(btcH_3) \cdot H_2O$  در سلول واحد .....
- شکل ۱-۴۴. نمایشی از برهمکنش های  $\pi-\pi$  بین حلقه های N1/C11/C12/C13/C14/C22 و C14/C15/C16/C17/C21/C22 در ترکیب انتقال پروتون  $(phenH)(btcH_3) \cdot H_2O$  .....
- شکل ۱-۴۵. واکنش انتقال پروتون .....
- شکل ۱-۴۶. ماده جامد .....
- شکل ۱-۴۷. تعریفی از حالت های مختلف مواد جامد و شکلی که به خوبی آن را نشان می دهد .....
- شکل ۱-۴۸. جامد تک کریستال .....
- شکل ۱-۴۹. یک تک کریستال در داخل یک جامد آمورف .....
- شکل ۱-۵۰. جامد پلی کریستالی .....
- شکل ۱-۵۱. حالت آمورف .....
- شکل ۱-۵۲. در عمل همیشه کریستال خالص نیست و ناخالصی هایی در داخل آن است .....
- شکل ۱-۵۳. تصاویری از کریستال ها .....
- شکل ۱-۵۴. از چپ به راست: تک کریستالی (شفاف)، پلی کریستال با تخلخل کم (کمی شفاف)، پلی کریستالی با تخلخل بالا (غیر شفاف) .....
- شکل ۱-۵۵. استقرار کریستالهای مایع .....
- شکل ۱-۵۶. شکلگیری ساختار کریستالی .....
- شکل ۱-۵۷. خیلی از الگوها نیز از تکرار یک واحد اولیه بدست می آیند .....
- شکل ۱-۵۸. ساختار کریستال = شبکه کریستال • + پایه (  ) .....
- شکل ۱-۵۹. شبکه براوه و شبکه غیر براوه .....
- شکل ۱-۶۰. شبکه کریستالی NaCl .....
- شکل ۱-۶۱. شبکه کریستالی الماس .....

- شکل ۱-۶۲. نمونه ای از یک کریستال فلزی ..... ۵۳
- شکل ۱-۶۳. کریستال دوشکستی یک پرتو تابش را به دو پرتو تجزیه می کند ..... ۵۴
- شکل ۱-۶۴. عملکرد تیغه نیم موج ..... ۵۶
- شکل ۱-۶۵. پنج گونه شبکه براوه موجود در دستگاه بلوری دوبعدی ..... ۵۶
- شکل ۱-۶۶. (الف) بلور NaCl با ساختار مکعبی (ب) یاخته الماس که در دستگاه بلوری مکعبی قرار دارد ..... ۶۱
- شکل ۱-۶۷. بلور وولفریت ( $PbMoO_4$ ) با ساختار چهارگوشه ..... ۶۳
- شکل ۱-۶۸. بلور بریل ( $Be_3Al_2(SiO_3)_6$ ) با ساختار شش گوشه ..... ۶۶
- شکل ۱-۶۹. بلور دولومیت  $CaMg(CO_3)_2$  با ساختار لوزی پهلوی ..... ۶۸
- شکل ۱-۷۰. بلور ارتوکلاس  $KAlSi_3O_8$  با ساختار تک شیب ..... ۶۹
- شکل ۱-۷۱. بلور میکروکلین ( $KAlSi_3O_8$ ) که ساختار سه شیب دارد ..... ۷۱
- شکل ۱-۷۲. تراکم ساختارهای کریستالی در عناصر جدول تناوبی ..... ۷۲
- شکل ۱-۷۳. درصد سیستمهای هفتگانه در کریستالهای موجود در جهان ..... ۷۲
- شکل ۱-۷۴. عیوب شبکه کریستالی ..... ۷۴
- شکل ۱-۷۵. عیوب نقطه ای که عبارتند از: (a) عیب نقطه ای جای خالی، (b) عیب نقطه ای اتم بین نشین، (c و d) عیب نقطه ای اتم جانشین، (e) عیب نقطه ای فرنکل، (f) عیب نقطه ای شوتکی ..... ۷۶
- شکل ۱-۷۶. عیب نقطه ای برای اتم AgCl ..... ۷۷
- شکل ۱-۷۷. عیب خطی از نوع نابه جایی ..... ۷۸
- شکل ۱-۷۸. یک نابجایی لبه ای (b = بردار برگرز) ..... ۷۹
- شکل ۱-۷۹. عیب نابجایی پیچشی ..... ۷۹
- شکل ۱-۸۰. تصاویری از مرزدانه ها ..... ۸۱
- شکل ۱-۸۱. (الف) تصویر شماتیکی از دانه - مرزدانه، (ب) مرز دانه ها در ساختار میکروسکوپی نشان داده شده است ..... ۸۱