



دانشگاه بلوچستان
تحصیلات تکمیلی

پایان نامه کارشناسی ارشد در شیمی آلی

عنوان:

مطالعه واکنش بنزوئیل ایزوتیوسیانات ها در واکنشهای چند جزئی

استاد راهنما:

دکتر رضا حیدری

استاد مشاور:

دکتر مسعود کیخوایی

تحقیق و نگارش:

بهجت بنانزاد

(این پایان نامه از حمایت مالی معاونت پژوهشی دانشگاه سیستان و بلوچستان بهره مند شده است)

بهمن 1390

بسمه تعالی

این پایان نامه با عنوان مطالعه واکنش بنزوئیل ایزوتیوسیاناتها در واکنش های چند جزئی قسمتی از برنامه آموزشی دوره کارشناسی ارشد شیمی آلی توسط دانشجو بهجت بنانژاد با راهنمایی استاد پایان نامه آقای دکتر رضا حیدری تهیه شده است. استفاده از مطالب آن به منظور اهداف آموزشی با ذکر مرجع و اطلاع کتبی به حوزه تحصیلات تکمیلی دانشگاه سیستان و بلوچستان مجاز می باشد.

بهجت بنانژاد

این پایان نامه ...8... واحد درسی شناخته می شود و در تاریخ90/11/8..... توسط هیئت داوران بررسی و درجه به آن تعلق گرفت.

تاریخ

امضاء

نام و نام خانوادگی

دکتر رضا حیدری

استاد راهنما:

استاد راهنما:

دکتر مسعود کیخوابی

استاد مشاور:

دکتر نورالله حاضری

داور 1:

دکتر حمیده سراوانی

داور 2:

نماینده تحصیلات تکمیلی: دکتر محمد انصاری فرد



تعهدنامه اصالت اثر

اینجانب بهجت بنانژاد تعهد می کنم که مطالب مندرج در این پایان نامه حاصل کار پژوهشی اینجانب است و به دستاوردهای پژوهشی دیگران که در این نوشته از آن استفاده شده است مطابق مقررات ارجاع گردیده است. این پایان نامه پیش از این برای احراز هیچ مدرک هم سطح یا بالاتر ارائه نشده است.

کلیه حقوق مادی و معنوی این اثر متعلق به دانشگاه سیستان و بلوچستان می باشد.

نام و نام خانوادگی دانشجو: بهجت بنانژاد

امضاء

تقدیم به مهربان فرشتگانی که:

لحظات ناب باور بودن، لذت و غرور دانستن، جسارت خواستن، عظمت رسیدن و تمام

تجربه های یکتا و زیبای زندگی، مدیون حضور سبز آنهاست.

تقدیم به خانواده عزیزم

سپاسگزاری

خداوندا

سپاس بیکران رحمت و بخشایشت را که دستان گرم پدر و عشق ناب مادر را همواره چتری بر سر و قوتی در دلم نهادی و گامهای لرزانم را به قوت دستان پر مهر استاد گرانقدرم جناب آقای دکتر رضا حیدری محکم نمودی و رهنمود های دلسوزانه ایشان را قرین راه تحصیلم قرار دادی که نمی توانم معنایی بالاتر از تقدیر و تشکر بر زبانم جاری سازم و سپاس خود را در وصف ایشان آشکار نمایم، که هر چه گویم کم گفته ام.

از جناب آقای دکتر مسعود کیخوایی استاد مشاور محترم این پایان نامه و اساتید بزرگوار جناب آقای دکتر نور الله حاضری و سرکار خانم دکتر حمیده سراوانی داوران محترم و نماینده تحصیلات تکمیلی جناب آقای دکتر محمد انصاری فرد سپاسگزارم.

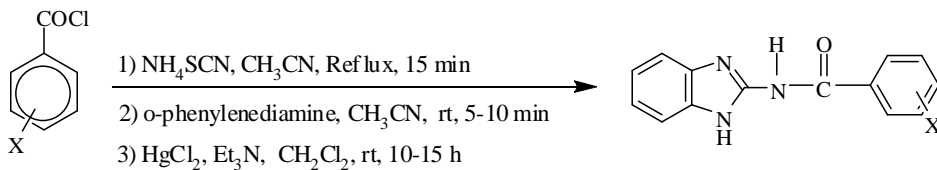
نهایت قدردانی و سپاس را دارم از تمامی کسانی که در طی این دوره همواره مرا یاری نموده اند. از دوستان گرامی آقای حسینیان، آقای لشکری، خانم شهرکی پور، خانم عزیزی و تمامی عزیزانی که در این مدت خاطراتی به یاد ماندنی در ذهنم رقم زدند تشکر و قدردانی می نمایم.

سپاس از تمامی کسانی که در طی این طریق مدیون محبتشان هستم.

برای تمامی اساتید گرامی و دوستان عزیز، سلامتی، موفقیت و طول عمری با عزت را از یگانه هستی خواستارم و از خداوند می خواهم مرا نیرویی دهد تا جبرانی بیابم بر این همه عشق و دوستی.

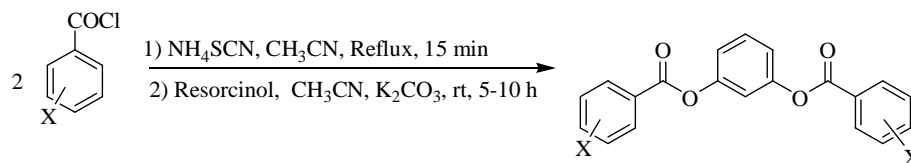
چکیده:

مطالعات گسترده دارویی و بیوشیمیایی تایید کرده است که مولکول بنزایمیدازول دارای فعالیت‌های بیولوژیکی زیادی است. مشتقات بنزایمیدازول کاربردهای زیادی در زمینه‌های دارویی دارند. در این تحقیق واکنش مشتقات تیو اوره با HgCl_2 مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که محصول واکنش مشتقات 2-بنزآمیدو بنزایمیدازول می‌باشد.



X= H, CH_3 , NO_2 , Cl

در این کار تحقیقاتی همچنین واکنش رزورسینول و مشتقات بنزوئیل ایزوسیانات‌ها نیز بررسی شده است که محصول این واکنش مشتقات رزورسینول دی بنزوات می‌باشد.



X= H, CH_3 , OCH_3 , NO_2

کلمات کلیدی: بنزوئیل ایزوتیوسیانات، ارتو-فنیلن دی آمین، HgCl_2 ، 2-بنزآمیدو بنزایمیدازول، رزورسینول،

رزورسینول دی بنزوات

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
1	فصل اول
1	مقدمه
2	1-1- مقدمه
2	2-1- برخی روشهای تهیه ایزوتیوسیاناتها
2	1-2-1- سنتز اندریش-کالوزا
3	2-2-1- روش اسلوتا-دسلر
3	3-2-1- روش هوفمن دلپین
4	4-2-1- روش ون برون
4	5-2-1- تبدیل ترکیب گوگرد دار به ایزوتیوسیاناتها با استفاده از فسفر
4	6-2-1- سنتز ایزوتیوسیاناتها با استفاده از فسفینیمینها
5	7-2-1- تهیه ایزوتیوسیاناتها با باز شدن حلقه
5	8-2-1- تهیه ایزوتیوسیاناتها بدون باز شدن حلقه
6	9-2-1- تهیه ایزوتیوسیاناتها به وسیله تجزیه تیواورهها
6	10-2-1- تهیه ایزوتیوسیاناتها با استفاده از واکنش آزا ویتیک
6	11-2-1- تهیه ایزوتیوسیاناتها با استفاده از الکلها
7	12-2-1- برخی روشهای دیگر در سنتز ایزوتیوسیاناتها
7	3-1- واکنشهای مهم ایزوتیوسیاناتها
8	1-3-1- نوآرایی ایزوتیوسیاناتها
8	2-3-1- حلقه زایی
9	1-2-3-1- حلقه زایی [2+2]
9	2-2-3-1- حلقه افزایی [3+2]
9	3-2-3-1- حلقه افزایی [4+1] و [4+2]
10	3-3-1- سنتزهای شامل باز مزدوج اسیدهای کربنی و ایلیدها
10	1-3-3-1- واکنش با بازهای کربنی
11	2-3-3-1- واکنش با ایلیدها
11	4-3-1- واکنشهای دارای گروه آمینو و آمیدو
11	1-4-3-1- واکنش با آمینو اسیدها
12	2-4-3-1- واکنش با آمینو کتونها و اکسیمها
12	3-4-3-1- واکنش با هیدرازینها و هیدرازیدها
13	4-4-3-1- واکنش با گروه آمیدی
13	5-4-3-1- واکنش با آمین دارای دو گروه نوکلئوفیلی
14	6-4-3-1- واکنش با آمینو و آمیدو هالو پیریدینها
14	5-3-1- واکنش دارای یک پیوند فعال $C=C$

- 14 1-5-3-1 واکنش با انامین ها
- 14 2-5-3-1 واکنش شامل حلقه‌های هتروسیکلی
- 15 6-3-1 تشکیل تیوکاربامات ها
- 15 7-3-1 واکنش با کربوکسیلیک اسیدها
- 15 1-7-3-1 واکنش با منو و دی کربوکسیلیک اسیدها
- 15 2-7-3-1 واکنش با N-آسیل آمینو اسیدها
- 16 8-3-1 برخی واکنش‌های مهم بنزوئیل ایزوتیوسیانات‌ها
- 16 1-8-3-1 سنتز تیواوره‌های تک استخلافی و N,N-دو استخلافی با بنزوئیل ایزوتیوسیانات‌ها
- 16 2-8-3-1 واکنش بنزوئیل ایزوتیوسیانات‌ها با هیدرازون‌ها
- 16 3-8-3-1 حلقه‌زایی بنزوئیل ایزوتیوسیانات‌ها تحت شرایط فریدل-کرافتس
- 17 4-8-3-1 واکنش دیازومتان با بنزوئیل ایزوتیوسیانات‌ها
- 17 4-1 کاربرد ایزوتیوسیانات‌ها
- 18 5-1 برخی واکنش‌های ارتو-فنیل دی آمین
- 18 1-5-1 واکنش با آلدهیدها
- 19 2-5-1 واکنش با کتون‌ها
- 19 3-5-1 واکنش با تیوکاربامات‌ها
- 20 4-5-1 واکنش با 1 و 2 دی کربونیل‌ها
- 20 5-5-1 واکنش با بنزوئیک اسیدها
- 20 6-5-1 واکنش با اگزالیک اسیدها
- 21 7-5-1 واکنش با فتالیک انیدریدها
- 21 6-2 ایمیدازول‌ها و بنزایمیدازول‌ها
- 21 1-6-1 برخی از خواص ایمیدازول‌ها و بنزایمیدازول‌ها
- 22 2-6-1 برخی از روش‌های سنتز ایمیدازول‌ها و بنزایمیدازول‌ها
- 22 1-2-6-1 تهیه ایمیدازول‌ها از امین‌ها
- 22 2-2-6-1 تهیه ایمیدازول‌ها از 1 و 2 دی کتون‌ها
- 22 3-2-6-1 تهیه 1H-ایمیدازول‌های 1 و 2 و 4-سه استخلافی
- 23 4-2-6-1 سنتز ایمیدازول‌ها با استفاده از نیتریل‌ها و سولفونیل تری آزول‌ها
- 23 5-2-6-1 تولید 2H-بنزایمیدازول‌ها
- 23 6-2-6-1 سنتز بنزایمیدازول‌ها و بنزوتیازول‌های 2-استخلافی
- 24 7-2-6-1 تهیه 1H-بنزایمیدازول‌ها 1 و 3 و 4-دی هیدرو بنزایمیدازول-2-ان‌ها
- 24 8-2-6-1 سنتز بنزایمیدازول‌های استخلاف شده از مشتقات ارتو-برمو آریل‌ها
- 24 9-2-6-1 تهیه بنزایمیدازول‌ها از ارتو-فنیل دی آمین‌ها
- 25 10-2-6-1 سنتز بنزایمیدازول‌ها با استفاده از آلکین انتهایی
- 25 11-2-6-1 تهیه 2-هترو بنزایمیدازول‌ها
- 26 12-2-6-1 سنتز بنزایمیدازول‌ها با استفاده از واکنش آریل هالیدها با گوانیدین‌ها یا آمیدین‌ها
- 26 13-2-6-1 سنتز بنزایمیدازول‌ها با استفاده از پیریدین و α -برمو کتون
- 26 14-2-6-1 تهیه بنزایمیدازول‌ها با استفاده از N-آریل‌دار کردن

27	1-6-2-15- سنتز مشتقات 2-مرکاپتو بنزایمیدازولها
27	1-2- برخی از واکنش‌های رزورسینول و فنول
27	1-1-2- واکنش با آلدهیدها
28	2-1-2- سنتز 2-آمینو-4H-کرومن‌ها
28	3-1-2- سنتز اکسولون‌ها
28	4-1-2- سنتز آزاکریپتاندها
29	5-1-2- سنتز تیواورتان‌ها
29	6-1-2- واکنش ارتو-آمینو فنول و ایزوتیوسیانات‌ها
30	فصل دوم
30	بخش تجربی
31	1-2- مشخصات مواد و دستگاه‌ها
31	2-2- روش کار عمومی سنتز بنزوئیل ایزوتیوسیانات‌ها
32	3-2- روش کار عمومی جهت واکنش مشتقات بنزوئیل ایزوتیوسیانات با ارتو- فنیل دی آمین
32	4-2- روش کار عمومی جهت واکنش مشتقات N-بنزآمیدو تیو کربونیل فنیل دی آمین با $HgCl_2$
33	1-4-2- ترکیب 2-بنزآمیدو بنزایمیدازول (جدول 2-1، ردیف 1)
34	2-4-2- ترکیب 2-(2-متیل) بنزآمیدو بنزایمیدازول (جدول 2-1، ردیف 2)
35	3-4-2- ترکیب 2-(4-متیل) بنزآمیدو بنزایمیدازول (جدول 2-1، ردیف 3)
35	4-4-2- ترکیب 2-(4-کلرو) بنزآمیدو بنزایمیدازول (جدول 2-1، ردیف 4)
36	5-4-2- ترکیب 2-(3-نیترو) بنزآمیدو بنزایمیدازول (جدول 2-1، ردیف 5)
36	5-2- روش کار عمومی واکنش مشتقات بنزوئیل ایزوتیوسیانات و رزورسینول
37	1-5-2- رزورسینول دی بنزوات (جدول 2-2، ردیف 1)
38	2-5-2- رزورسینول دی(2-متیل) بنزوات (جدول 2-2، ردیف 2)
39	3-5-2- رزورسینول دی(4-متیل) بنزوات (جدول 2-2، ردیف 3)
39	4-5-2- رزورسینول دی(4-متوکسی) بنزوات (جدول 2-2، ردیف 4)
40	5-5-2- رزورسینول دی(3-نیترو) بنزوات (جدول 2-2، ردیف 5)
40	6-2- روش کار عمومی واکنش بنزوئیل ایزوتیوسیانات با فنول و پارا-کروزل
41	1-6-2- فنیل بنزوات
41	2-6-2- پارا کروزل بنزوات
42	فصل سوم
42	بحث و نتیجه گیری
43	1-3- نتیجه گیری
43	2-3- بررسی واکنش‌های انجام شده در این کار پژوهشی
43	1-2-3- واکنش مشتقات N-(بنزآمیدو تیو کربونیل) فنیل دی آمین و $HgCl_2$
45	2-2-3- واکنش مشتقات بنزوئیل ایزوسیانات‌ها با رزورسینول و فنول
46	3-3- پیشنهاد برای آینده
47	ضمیمه ها
112	مراجع

فهرست جدول ها

صفحه	عنوان جدول
33	جدول 1-2. نتایج آزمایشگاهی واکنش N- (بنزآمیدو تیوکربونیل) فنیلن دی آمین با HgCl_2
37	جدول 2-2. نتایج آزمایشگاهی واکنش مشتقات بنزوئیل ایزوتیوسیانات با رزورسینول

فهرست شکل‌ها

عنوان شکل	صفحه
شکل 1-1. سنتز اندریش – کالوزا.....	3
شکل 2-1. سنتز اسلوتا- درس لر.....	3
شکل 3-1. سنتز هوفمن- دلپین.....	3
شکل 4-1. سنتز ون براون.....	4
شکل 5-1. تبدیل ترکیب گوگرد دار به ایزوتیوسیانات‌ها با استفاده از فسفر.....	4
شکل 6-1. سنتز ایزوتیوسیانات‌ها با استفاده از فسفینیمین‌ها.....	5
شکل 7-1. سنتز ایزوتیوسیانات‌ها با باز شدن حلقه.....	5
شکل 8-1. سنتز ایزوتیوسیانات‌ها بدون باز شدن حلقه.....	5
شکل 9-1. تهیه ایزوتیوسیانات‌ها به وسیله تجزیه تیواوره‌ها.....	6
شکل 10-1. تهیه ایزوتیوسیانات‌ها با استفاده از واکنش آزا ویتیک.....	6
شکل 11-1. واکنش ترسیو الکل‌ها با اگزالیک اسید و NaSCN در حضور ید.....	6
شکل 12-1. سنتز ایزوتیوسیانات‌ها به وسیله‌ی واکنش تیوهیدانتوین با آروئیل کلرید.....	7
شکل 13-1. سنتز ایزوتیوسیانات‌ها به وسیله‌ی واکنش بین آمین‌ها و تیوکربامات‌ها.....	7
شکل 14-1. نوآرایی ایزوتیوسیانات‌ها.....	8
شکل 15-1. نوآرایی ایزوتیوسیانات‌ها.....	8
شکل 16-1. حلقه‌زایی [2+2].....	9
شکل 17-1. حلقه‌افزایی [3+2].....	9
شکل 18-1. حلقه‌افزایی [4+2] و [4+2].....	10
شکل 19-1. واکنش آریل ایزوتیوسیانات‌ها با آنیون دی کتون.....	10
شکل 20-1. واکنش با ایلیدها.....	11
شکل 21-1. واکنش با آمینو اسیدها.....	11
شکل 22-1. واکنش با آمینو کتون‌ها.....	12
شکل 23-1. واکنش α - آمینو سیکلو هگزانول اکسیم‌ها با ایزوتیوسیانات‌ها.....	12
شکل 24-1. تراکم هیدرازین‌ها با ایزوتیوسیانات‌ها.....	12
شکل 25-1. واکنش هیدرازیدها با ایزوتیوسیانات‌ها.....	13
شکل 26-1. واکنش با گروه آمیدی.....	13
شکل 27-1. واکنش با آمین دارای دو گروه نوکلئوفیلی.....	13
شکل 28-1. واکنش با آمینو و آمیدو هالو پیریدین‌ها.....	14
شکل 29-1. واکنش با انامین‌ها.....	14
شکل 30-1. واکنش‌های شامل حلقه‌های هتروسیکلی.....	14
شکل 31-1. تشکیل تیوکربامات‌ها.....	15

- شکل 1-32. واکنش با کربوکسیلیک اسیدها 15
- شکل 1-33. واکنش با N-آسیل آمینواسیدها 15
- شکل 1-34. سنتز تیواوره‌های تک استخلافی از بنزوئیل ایزوتیوسیانات‌ها 16
- شکل 1-35. واکنش بنزوئیل ایزوتیوسیانات‌ها با هیدرازون‌ها 16
- شکل 1-36. واکنش حلقه‌زایی بنزوئیل ایزوتیوسیانات‌ها تحت شرایط فریدل - کرافتس 17
- شکل 1-37. واکنش دیازومتان با بنزوئیل ایزوتیوسیانات‌ها 17
- شکل 1-38. واکنش با آلدهید در حضور کاتالیست (PBBS) و (TBBDA) 18
- شکل 1-39. واکنش با آلدهید در حضور تری کلرو ایزو سیانوریک اسید 19
- شکل 1-40. واکنش با کتون‌ها 19
- شکل 1-41. واکنش با تیوکاربامات‌ها 19
- شکل 1-42. واکنش با 1,2 دی کربونیل‌ها 20
- شکل 1-43. واکنش ارتو-فنیل دی آمین با بنزوئیک اسید 20
- شکل 1-44. واکنش ارتو-فنیل دی آمین با اگزالیک اسیدها 20
- شکل 1-45. واکنش با فتالیک انیدریدها 21
- شکل 1-46. سنتز ایمیدازول‌ها از ایمینها 22
- شکل 1-47. واکنش 1,2-دی کتون‌ها با اوروتروپین 22
- شکل 1-48. تهیه ایمیدازول‌های 1,2,4-سه استخلافی 22
- شکل 1-49. واکنش 1- سولفونیل تری آزول با نیتریل‌ها 23
- شکل 1-50. واکنش نیتروآمین‌های آروماتیک و هتروآروماتیک در حضور فرمیک اسید، پودر آهن و کلرید آمونیوم 23
- شکل 1-51. تولید 2- بنزیمیدازول‌ها و تiazول‌ها 23
- شکل 1-52. واکنش 2-آیدواستانیلیدها 24
- شکل 1-53. واکنش مشتقات ارتو-برمو آریل 24
- شکل 1-54. واکنش ارتو-فنیل دی آمین و آلدهیدها 25
- شکل 1-55. واکنش اورتو-آمینو آنیلین با آلکین‌های انتهایی و پارا- تولیل سولفونیل آزید 25
- شکل 1-56. واکنش ارتو-هالو آریل کربو دی ایمید با ارتو - نوکلئوفیل 25
- شکل 1-57. واکنش مشتقات آریل هالید با گوانیدین‌ها 26
- شکل 1-58. واکنش پیریدین و α -برمو کتون 26
- شکل 1-59. واکنش N-آریل‌دار شدن بین مولکولی 27
- شکل 1-60. واکنش مشتقات تیواوره در حضور CuI به عنوان کاتالیزور 27
- شکل 1-61. واکنش رزورسینول با آلدهیدها 27
- شکل 1-62. سنتز 2-آمینو-4H-کرومن‌ها 28
- شکل 1-63. سنتز تیواکسولون‌ها 28
- شکل 1-64. سنتز آزاکریپتاند‌ها 29
- شکل 1-65. سنتز تیواورتان‌ها 29
- شکل 1-66. واکنش ارتو-آمینو فنول و ایزوتیوسیانات‌ها 29
- شکل 1-2. واکنش مشتقات بنزوئیل کلرید و آمونیوم تیوسیانات در حلال استونیتریل 32

- شکل 2-2. واکنش مشتقات بنزوئیل ایزوتیوسیانات با ارتو-فنیلن دی آمین 32
- شکل 2-3. واکنش مشتقات N-بنزآمیدو تیوکربونیل فنیلن دی آمین با $HgCl_2$ 33
- شکل 2-4. بنزآمیدو بنزایمیدازول 34
- شکل 2-5. (2-متیل بنزآمیدو) بنزایمیدازول 34
- شکل 2-6. (4-متیل بنزآمیدو) بنزایمیدازول 35
- شکل 2-7. (4-کلرو بنزآمیدو) بنزایمیدازول 35
- شکل 2-8. (3-نیترو بنزآمیدو) بنزایمیدازول 36
- شکل 2-9. واکنش مشتقات بنزوئیل ایزوتیوسیانات با رزورسینول 37
- شکل 2-10. رزورسینول دی بنزوات 38
- شکل 2-11. رزورسینول دی (2-متیل) بنزوات 38
- شکل 2-12. رزورسینول دی (4-متیل) بنزوات 39
- شکل 2-13. رزورسینول دی (4-متوکسی) بنزوات 39
- شکل 2-14. رزورسینول دی (3-نیترو) بنزوات 40
- شکل 2-15. واکنش بنزوئیل ایزوتیوسیانات با فنول و پارا-کرزول 41
- شکل 2-16. فنیل بنزوات 41
- شکل 2-17. پارا-کرزول بنزوات 41
- شکل 3-1. فرم های رزونانسی آنیون تیوسیانات 43
- شکل 3-2. واکنش مشتقات بنزوئیل کلرید و آمونیوم تیوسیانات در حلال استونیتریل 43
- شکل 3-3. مکانیسم واکنش مشتقات N- (بنزآمیدو تیوکربونیل) فنیلن دی آمین و $HgCl_2$ 44
- شکل 3-4. مکانیسم واکنش مشتقات بنزوئیل ایزوسیانات ها با رزورسینول 45

بخش اول

مقدمه

1-1- مقدمه

ایزوتیوسیانات‌ها حدواسط‌های مهمی هستند که به خانواده هتروکیومولن‌ها¹ تعلق دارند. این ترکیبات بر گروه R (R - N = C = S) به دو دسته‌ی آلیفاتیک و آروماتیک تقسیم می‌شوند.

آنها بیشتر مواقع بی رنگ یا زرد کم‌رنگ هستند و به صورت مایع یا سیال می‌باشند و به ندرت به صورت ماده‌ی کریستالی با دمای ذوب پایین هستند.

ایزوتیوسیانات‌ها در خلأ با اندکی تجزیه تقطیر می‌شوند. این ترکیبات در معرض هوا زرد و سپس به رنگ نارنجی در می‌آیند. این مواد در مدت زمان طولانی پلیمریزه شده و بصورت جامد تیره در می‌آیند.

برخی از آسیل ایزوتیوسیانات‌ها بوی تند ناخوشایند دارند و در بسیاری از حلال‌های آلی محلول هستند و به راحتی متحمل واکنش‌های افزایش هسته دوستی و حلقه‌افزایی می‌شوند [1].

مشتقات تیواوره ایزوتیوسیانات‌ها در حضور فلزات واسطه مناسبی که قابلیت کاهش دارند، به عنوان یک ترکیب اکسید شونده و یک لیگاند عمل می‌نمایند.

از کاربردهای مشتقات بنزیلی تیواوره‌ها، خواص ضد تومور، ضد ویروس، ضد قارچ، ضد باکتری و حذف یون‌های فلزات سنگین و آلاینده‌های محیط را می‌توان نام برد.

طیف جذبی مادون قرمز آسیل ایزوتیوسیانات‌ها به طور جزئی بررسی شده است. ارتعاشات کششی NCS به صورت زیر می‌باشند: [1]

$$v_{(as)} = 2080 \pm 50 \text{ cm}^{-1} \text{ و } v_{(as)} = 1080 \pm 30 \text{ cm}^{-1}$$

2-1- برخی روشهای تهیه ایزوتیوسیانات‌ها

ایزوتیوسیانات‌ها به روش‌های مختلف سنتز می‌شوند و انتخاب روش به مولکول هدف بستگی دارد.

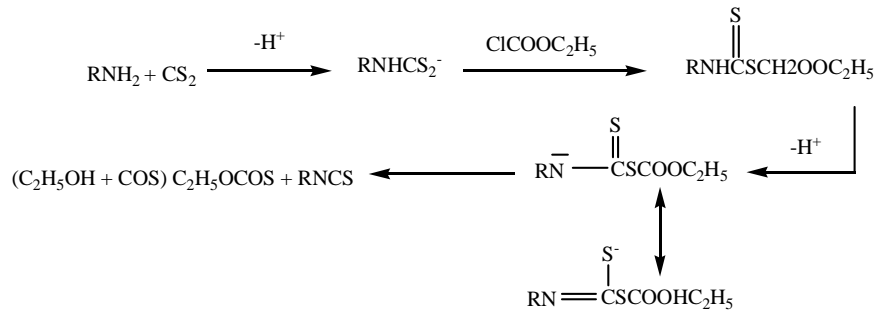
1-2-1- سنتز اندریش – کالوزا²

در این روش از واکنش آمین با کربن دی سولفید در حضور باز، دی تیوکربامات متناظر حاصل می‌گردد که با اتیل کلرو کربنات برای تهیه کربو اتوکسی دی تیوکربامات وارد واکنش می‌شود.

1-Heterocumulenes

2- Andreasch-kaluza

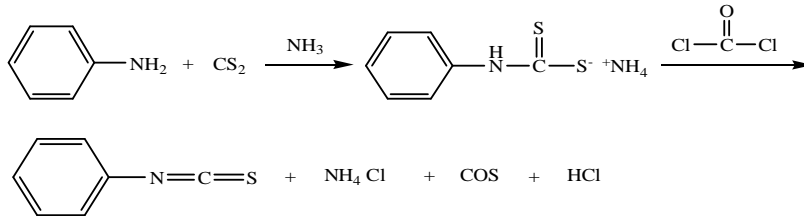
کربو اتوکسی دی تیوکربامات به عنوان حدواسط بر اثر انشقاق به اتانول، کربن اکسی سولفید و R-NCS تبدیل می‌گردد (شکل 1-1) [2-3].



شکل 1-1. سنتز اندریش - کالوزا

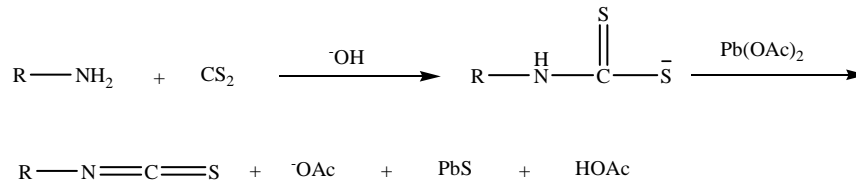
2-2-1- روش اسلوتا- درسالر³

این روش فقط برای آمین‌های آروماتیک بکار رفته است (شکل 2-1) [2-3].



شکل 2-1. سنتز اسلوتا- درسالر

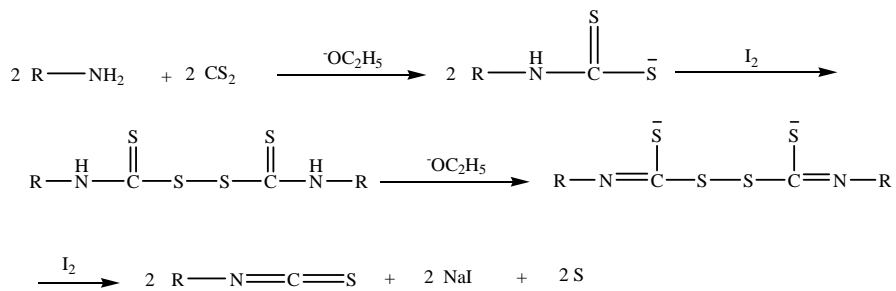
3-2-1- روش هوفمن - دلپین⁴ [2-3]



شکل 3-1. سنتز هوفمن - دلپین

3-Slotta-Dressler
4-Slotta-Dressler

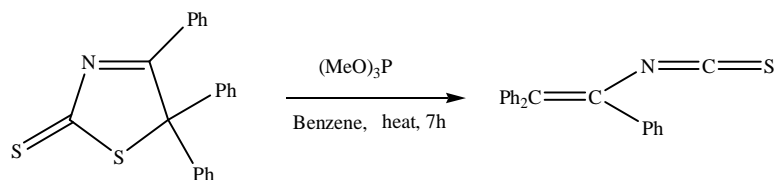
4-2-1- روش ون براون⁵ [2-3]



شکل 4-1. سنتز ون براون

5-2-1- تبدیل ترکیب گوگرد دار به ایزوتیوسیاناتها با استفاده از فسفر

فتولیز 3-تيازولين-2-تيون با تری متوکسی فسفین، ایزوتیوسیانات را با بازده بالا تولید می‌کند (شکل 5-1) [2].

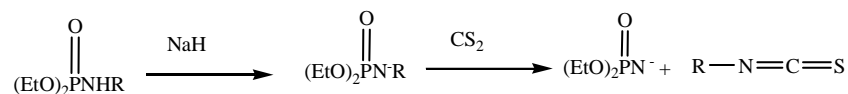
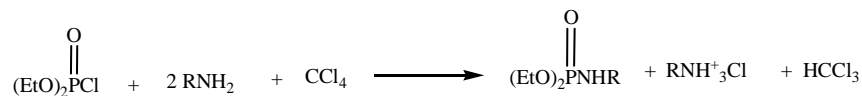
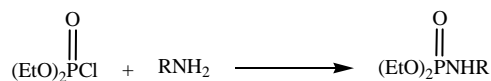


شکل 5-1. تبدیل ترکیب گوگرد دار به ایزوتیوسیاناتها با استفاده از فسفر

6-2-1- سنتز ایزوتیوسیاناتها با استفاده از فسفینیمینها⁶

فسفینیمینها حدواسطهای مهمی در تهیه ترکیبات اشباع نشده نیتروژنی می‌باشند (شکل 6-1) [4].

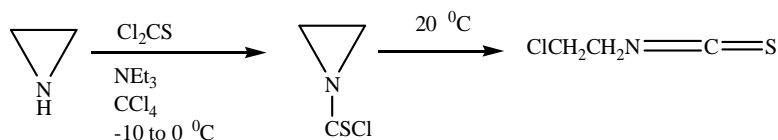
5-Von braun
6- Phosphinimines



شکل 1-6. سنتز ایزوتیوسیانات‌ها با استفاده از فسفینیمین‌ها

7-2-1- تهیه ایزوتیوسیانات‌ها با باز شدن حلقه

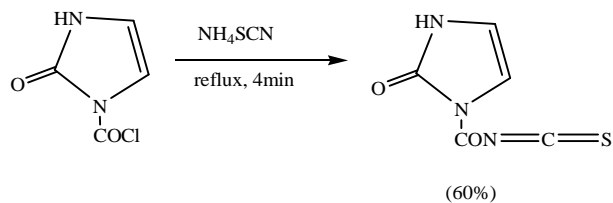
به طور کلی نیتروژن و اکسیژن و هتروسیکل‌های نیتروژن به راحتی در واکنش با تیوفسژن حلقه را باز می‌کنند و در نتیجه محصول 2- کلرو اتیل ایزوتیوسیانات را با بازده 40-50 درصد تولید می‌کنند (شکل 1-7) [5].



شکل 1-7. سنتز ایزوتیوسیانات‌ها با باز شدن حلقه

8-2-1- تهیه ایزوتیوسیانات‌ها بدون باز شدن حلقه

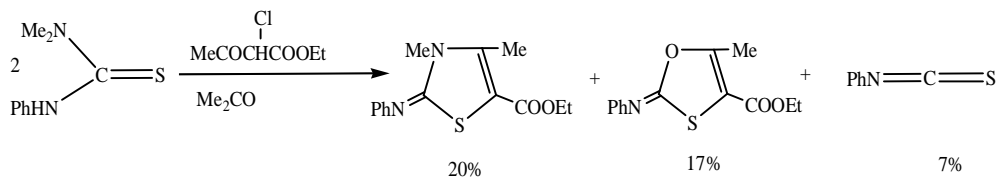
2-اکسو-4-ایمیدازولین-1-کربونیل کلرید با آمونیوم تیوسیانات در استون در حال جوش واکنش می‌دهد و (2-اکسو-ایمیدازولینیل) کربونیل ایزوتیوسیانات را تولید می‌کند (شکل 1-8) [5].



شکل 1-8. سنتز ایزوتیوسیانات‌ها بدون باز شدن حلقه

9-2-1- تهیه ایزوتیوسیاناتها به وسیله تجزیه تیواوره‌ها

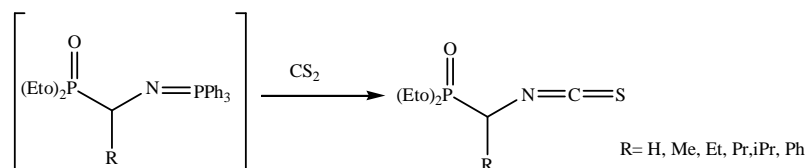
N, N-تیواوره دی استخلاف شده وقتی در حضور اسیدها گرما داده شود، به آمین‌ها و ایزوتیوسیانات‌ها تبدیل می‌شوند (شکل 9-1) [6].



شکل 9-1. سنتز ایزوتیوسیانات‌ها به وسیله تجزیه تیواوره‌ها

10-2-1- تهیه ایزوتیوسیانات‌ها با استفاده از واکنش آزا ویتینگ

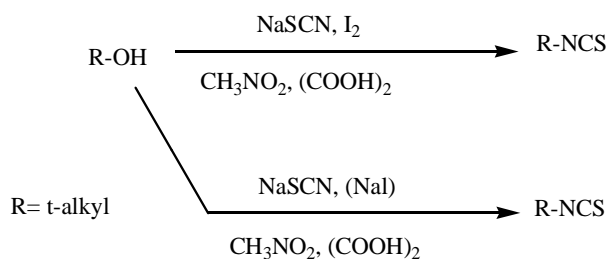
واکنش فسفاژن با کربن دی سولفید، 1-ایزوتیوسیانات آلکیل فسفونات‌ها را در محدوده استخلاف‌های آلیفاتیک و آروماتیک تولید می‌کند (شکل 10-1) [6].



شکل 10-1. تهیه ایزوتیوسیانات‌ها با استفاده از واکنش آزا ویتینگ

11-2-1- تهیه ایزوسیانات‌ها با استفاده از الکل‌ها

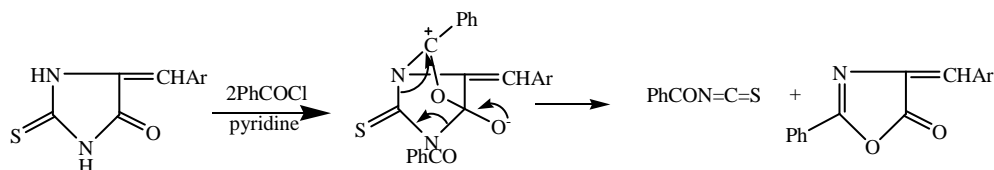
واکنش ترسیو الکل‌ها با اگزالیک اسید و NaSCN در حضور ید، ترسیو آلکیل ایزوتیوسیانات‌ها را با یک بازده خوب تولید می‌کنند، تیوسیانات‌های که در غیاب ید تولید می‌شوند بازده خیلی کمی دارند (شکل 11-1) [7].



شکل 11-1. واکنش ترسیو الکل‌ها با اگزالیک اسید و NaSCN در حضور ید

12-2-1- برخی روش‌های دیگر در سنتز ایزوتیوسیانات‌ها

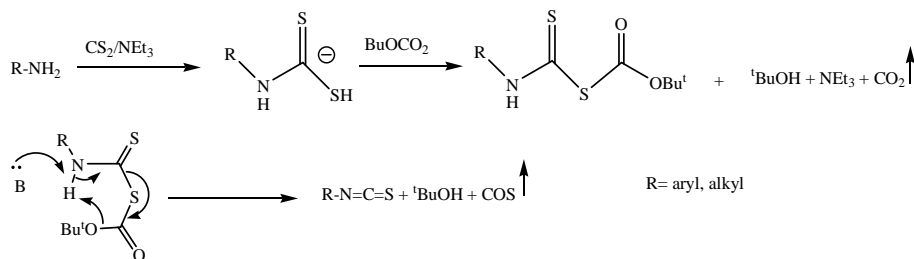
پیرولیز برخی تیواورده‌ها و تیوآمیدهای حلقوی یا واکنش آنها با واکنش‌گرهای مناسب، منجر به تولید ایزوتیوسیانات‌ها می‌شود. برای مثال، مشتق تیوهیدانتوین با مقدار اضافی از آروئیل کلرید، آروئیل ایزوتیوسیانات و آزا لاکتون تولید می‌کند (شکل 12-1) [7].



Ar = 3-O₂NC₆H₄ (97%)

شکل 12-1. سنتز ایزوتیوسیانات‌ها به وسیله‌ی واکنش تیوهیدانتوین با آروئیل کلرید

آریل و آلکیل آمین‌ها با استفاده از دی تیوکربامات‌ها در حضور کاتالیزورهای بازی، به آرامی به ایزوتیوسیانات‌های مربوطه با یک بازدهی خوب تبدیل می‌شوند. در این واکنش بیشتر محصولات جانبی آن فرار هستند و خالص سازی آن با تبخیر ساده مخلوط واکنش انجام می‌شود (شکل 13-1) [8].



شکل 13-1. سنتز ایزوتیوسیانات‌ها به وسیله‌ی واکنش بین آمین‌ها و تیوکربامات‌ها

3-1- واکنش‌های مهم ایزوتیوسیانات‌ها

- نوآرایی ایزوتیوسیانات‌ها
- حلقه‌زایی
- سنتزهای شامل کربن اسیدها