

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

بسمتعالی



دانشکده علوم پایه

تاییدیه اعضای هیات داوران حاضر در جلسه دفاع از رساله دکتری

آقای/خانم صدیقه فرشادیان رساله «واحدی خود را باعنوان: « سنتز، بررسی طیفی، ساختاری، مطالعه نظری و بیولوژیکی برخی از ترکیبات فسفر آمیدی و کمپلکسهای آنها با قلع» در تاریخ ۹۰/۶/۲۸ ارائه کردند. اعضای هیات داوران نسخه نهایی این رساله را از نظر فرم و محتوا تایید کرده است و پذیرش آنرا برای تکمیل درجه دکتری پیشنهاد می کند.

اعضای هیات داوران	نام و نام خانوادگی	رتبه علمی	امضاء
۱- استاد راهنما	آقای دکتر خداپار قلیوند	استاد	
۲- استاد ناظر داخلی	آقای دکتر علیرضا محبوب	استاد	
۳- استاد ناظر داخلی	آقای دکتر علی مرسلی	استاد	
۴- استاد ناظر خارجی	آقای دکتر داور بقاعی	استاد	
۵- استاد ناظر خارجی	آقای دکتر محمد مصطفی پور امینی	استاد	
۶- نماینده تحصیلات تکمیلی	آقای دکتر علیرضا محبوب	استاد	

آیین‌نامه حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهش‌های علمی دانشگاه تربیت مدرس

مقدمه: با عنایت به سیاست‌های پژوهشی و فناوری دانشگاه در راستای تحقق عدالت و کرامت انسانها که لازمه شکوفایی علمی و فنی است و رعایت حقوق مادی و معنوی دانشگاه و پژوهشگران، لازم است اعضای هیأت علمی، دانشجویان، دانش‌آموختگان و دیگر همکاران طرح، در مورد نتایج پژوهش‌های علمی که تحت عناوین پایان‌نامه، رساله و طرح‌های تحقیقاتی با هماهنگی دانشگاه انجام شده است، موارد زیر را رعایت نمایند:

ماده 1- حق نشر و تکثیر پایان‌نامه/ رساله و درآمدهای حاصل از آنها متعلق به دانشگاه می باشد ولی حقوق معنوی پدید آورندگان محفوظ خواهد بود.

ماده 2- انتشار مقاله یا مقالات مستخرج از پایان‌نامه/ رساله به صورت چاپ در نشریات علمی و یا ارائه در مجامع علمی باید به نام دانشگاه بوده و با تایید استاد راهنمای اصلی، یکی از اساتید راهنما، مشاور و یا دانشجو مسئول مکاتبات مقاله باشد. ولی مسئولیت علمی مقاله مستخرج از پایان‌نامه و رساله به عهده اساتید راهنما و دانشجو می باشد.

تبصره: در مقالاتی که پس از دانش‌آموختگی بصورت ترکیبی از اطلاعات جدید و نتایج حاصل از پایان‌نامه/ رساله نیز منتشر می‌شود نیز باید نام دانشگاه درج شود.

ماده 3- انتشار کتاب، نرم افزار و یا آثار ویژه (اثری هنری مانند فیلم، عکس، نقاشی و نمایشنامه) حاصل از نتایج پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرح‌های تحقیقاتی کلیه واحدهای دانشگاه اعم از دانشکده ها، مراکز تحقیقاتی، پژوهشکده ها، پارک علم و فناوری و دیگر واحدها باید با مجوز کتبی صادره از معاونت پژوهشی دانشگاه و براساس آئین‌نامه های مصوب انجام شود.

ماده 4- ثبت اختراع و تدوین دانش فنی و یا ارائه یافته ها در جشنواره‌های ملی، منطقه‌ای و بین‌المللی که حاصل نتایج مستخرج از پایان‌نامه/ رساله و تمامی طرح‌های تحقیقاتی دانشگاه باید با هماهنگی استاد راهنما یا مجری طرح از طریق معاونت پژوهشی دانشگاه انجام گیرد.

ماده 5- این آیین‌نامه در 5 ماده و یک تبصره در تاریخ 87/4/1 در شورای پژوهشی و در تاریخ 87/4/23 در هیأت رئیسه دانشگاه به تایید رسید و در جلسه مورخ 87/7/15 شورای دانشگاه به تصویب رسیده و از تاریخ تصویب در شورای دانشگاه لازم‌الاجرا است.

اینجانب..... دانشجوی رشته..... ورودی سال تحصیلی.....
مقطع..... دانشکده..... متعهد می‌شوم کلیه نکات مندرج در آئین‌نامه حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهش‌های علمی دانشگاه تربیت مدرس را در انتشار یافته‌های علمی مستخرج از پایان‌نامه / رساله تحصیلی خود رعایت نمایم. در صورت تخلف از مفاد آئین‌نامه فوق‌الاشعار به دانشگاه وکالت و نمایندگی می‌دهم که از طرف اینجانب نسبت به لغو امتیاز اختراع بنام بنده و یا هر گونه امتیاز دیگر و تغییر آن به نام دانشگاه اقدام نماید. ضمناً نسبت به جبران فوری ضرر و زیان حاصله بر اساس برآورد دانشگاه اقدام خواهم نمود و بدینوسیله حق هر گونه اعتراض را از خود سلب نمودم»

امضاء:.....
تاریخ:.....

۱۳۹۵/۷/۱۵

آیین نامه چاپ پایان نامه (رساله) های دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس

نظر به اینکه چاپ و انتشار پایان نامه (رساله) های تحصیلی دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس، مبین بخشی از فعالیت های علمی - پژوهشی دانشگاه است بنابراین به منظور آگاهی و رعایت حقوق دانشگاه، دانش آموختگان این دانشگاه نسبت به رعایت موارد ذیل متعهد می شوند:

ماده 1: در صورت اقدام به چاپ پایان نامه (رساله) ی خود، مراتب را قبلاً به طور کتبی به «دفتر نشر آثار علمی» دانشگاه اطلاع دهد.

ماده 2: در صفحه سوم کتاب (پس از برگ شناسنامه) عبارت ذیل را چاپ کند:

«کتاب حاضر، حاصل پایان نامه کارشناسی ارشد/ رساله دکتری نگارنده در رشته سیسمی مدرس است که در سال ۱۳۹۰ در دانشکده معلمی دانشگاه تربیت مدرس به راهنمایی سرکار خانم/جناب آقای دکتر میرزا رحمتی رنر، مشاوره سرکار خانم/جناب آقای دکتر ... و مشاوره سرکار خانم/جناب آقای دکتر ... از آن دفاع شده است.»

ماده 3: به منظور جبران بخشی از هزینه های انتشارات دانشگاه، تعداد یک درصد شمارگان کتاب (در هر نوبت چاپ) را به «دفتر نشر آثار علمی» دانشگاه اهدا کند. دانشگاه می تواند مازاد نیاز خود را به نفع مرکز نشر در معرض فروش قرار دهد.

ماده 4: در صورت عدم رعایت ماده 3، 50٪ بهای شمارگان چاپ شده را به عنوان خسارت به دانشگاه تربیت مدرس، تأدیه کند.

ماده 5: دانشجو تعهد و قبول می کند در صورت خودداری از پرداخت بهای خسارت، دانشگاه می تواند خسارت مذکور را از طریق مراجع قضایی مطالبه و وصول کند؛ به علاوه به دانشگاه حق می دهد به منظور استیفای حقوق خود، از طریق دادگاه، معادل وجه مذکور در ماده 4 را از محل توقیف کتابهای عرضه شده نگارنده برای فروش، تامین نماید.

ماده 6: اینجانب مهرداد فرساری دانشجوی رشته سیسمی مدرس مقطع دکتری تعهد فوق و ضمانت اجرایی آن را قبول کرده، به آن ملتزم می شوم.

نام و نام خانوادگی: مهرداد فرساری

تاریخ و امضا: ۱۳۹۰/۷/۱۰



دانشکده علوم پایه

رساله دوره دکتری شیمی (معدنی)

عنوان رساله:

**سنتز، بررسی طیفی، ساختاری، مطالعه نظری و بیولوژیکی
برخی از ترکیبات فسفر آمیدی و کمپلکس‌های آنها با قلع**

نگارش:

صدیقه فرشادیان

استاد راهنما:

دکتر خدایار قلی‌وند

شهریور ۱۳۹۰

به پاس تعبیر عظیم و انسانی شان از کلمه ایثار و از خودگذشتگی
به پاس عاطفه سرشار و گرمای امیدبخش وجودشان که در این
سردترین روزگاران بهترین پشتیبان است
به پاس قلب های بزرگشان که فریاد رس است و سرگردانی و ترس در
پناهمشان به شجاعت می گراید
و به پاس محبت های بی دریغشان که هرگز فروکش نمی کند
این مجموعه را به پدر و مادر عزیزم تقدیم می کنم

تشکر و قدردانی

سپاس به پیشگاه حضرت دوست که هر چه داریم از اوست.

حال که توفیق جمع آوری و تهیه این رساله را یافته ام بر خود واجب می دانم از تمامی عزیزانی که در طی انجام این پژوهش از راهنمایی و یاری شان بهره‌مند گشته‌ام تشکر و قدردانی کنم و برای ایشان از درگاه پروردگار مهربان آرزوی سعادت و پیروزی نمایم. از استاد راهنمای ارجمند دکتر خدایار قلی‌وند که با سعه صدر و صبوری مرا راهنمایی نموده و با ارائه نظرات سازنده و رهنمودهای بی دریغشان در پیشبرد این پایان نامه سعی تمام مبذول داشتند، کمال تشکر را دارم. از اساتید بزرگوار جناب آقای دکتر علیرضا محجوب، دکتر علی مرسلی، دکتر مصطفی پورامینی و دکتر داور بقاعی که زحمت بازخوانی و داوری این رساله را به عهده داشتند، صمیمانه تشکر و قدردانی می نمایم. از کارشناسان گروه شیمی و همچنین از دوستان و همکاران گرامی در آزمایشگاه تحقیقاتی دکتر قلی‌وند خصوصا خانم ها دکتر زهرا حسینی و فروغ مولایی به خاطر همکاری صمیمانه شان سپاسگزارم. از دوست و همکلاسی عزیزم خانم دکتر زهره رشیدی رنجبر به پاس محبت های بی دریغش کمال تشکر را دارم.

چکیده:

در این پژوهش، ۱۱ ترکیب جدید فسفرآمیدیتی با فرمول کلی $RP(O)(NH(CH_2CH_2)_2)_2$ که R شامل گروه‌های فنیل (۱)، آریلوکسی (۲)، ۲-کلرو آریلوکسی (۳)، آنیلین (۴)، ترکیبات بنزوئیلی با استخلاف پارای متفاوت (H (۵)، OCH_3 (۶)، CH_3 (۷)، Cl (۸))، مونو (۹)، دی (۱۰) و تری (۱۱) کلرو استیل است و دو فسفرآمیدیت با فرمول $RP(O)(NH(CH_2CH_2)_3)_2$ ، R = فنیل (۱۲) و پارامتوکسی بنزوئیل (۱۳)، سنتز شد. پایداری مولکول‌های ۱۱-۱ حاصل از برهم‌کنش‌های فوق مزدوج منفی و نامستقر شدن بار، با استفاده از آنالیز NBO تعیین شد. ترکیبات ۱-۱۳ با $SnCl_2Me_2$ و $Sn(Ph)_3Cl$ واکنش داده شد و کمپلکس‌های قلع (ترکیبات ۱۴-۲۹) آنها تهیه گردید. لیگاندها و ترکیبات آلی قلع آنها با روش‌های طیف‌سنجی IR، ^{13}C ، 1H ، ^{13}P NMR، ^{119}Sn و آنالیز عنصری شناسایی شده، داده‌های طیفی آنها با هم مقایسه شد. ساختار لیگاندهای ۵، ۶، ۱۳ و دوازده کمپلکس قلع، توسط بلورنگاری پرتو ایکس تعیین شد و پارامترهای هندسی آنها از قبیل طول و زوایای پیوندی، پیوندهای هیدروژنی و همچنین انباشتگی بلور آنها در سلول واحد با یکدیگر مقایسه شد. اثر استخلاف‌ها روی اتم‌های فسفر و نیتروژن، نسبت استوکیومتری لیگاند به قلع و نوع حلال واکنش یا حلال نوبلورسازی بر روی نحوه کوئوردینه شدن لیگاندها به اتم قلع بررسی شد. دو فسفامیک اسید، $4-RC_6H_4C(O)NHP(O)(OH)_2$ ، OCH_3 (۳۰)، Cl (۳۱)، یک آمیدو فسفات، $4-Na[C_6H_4C(O)NHP(O)(OCH_3)_2]$ (۳۲) و نمک‌های آمیدو فسفات، $Na[4-$ $RC_6H_4C(O)NP(O)(OCH_3)_2]$ ، H = R، OCH_3 (۳۴)، Cl (۳۵)، یک کمپلکس قلع از لیگاند آمیدو فسفات (۳۶) و همچنین ترکیبات جدید فسفرآمیدیتی شامل گروه تیا زولیل و مشتقات آن، $RP(O)(NCSCH_2CH_2NH)_2$ ، R = فنیل (۳۷)، آریلوکسی (۳۸)، ۲-کلرو آریلوکسی (۳۹)، $C_6H_5OP(O)(4-CH_3NCSCH_2CH_2NH)Cl$ (۴۰)، $C_6H_5OP(O)(NCSCH_2CH_2NH)Cl$ (۴۱)، $CH=CH$ = R، $(C_6H_5O)_2P(O)(NCSRNH)$ (۴۲)، $CH_3C_6H_4OP(O)(NCSCH_2CH_2NH)Cl$ (۴۳)، CH_2CH_2 (۴۴)، $C_6H_4SNHCNP(O)R_2$ ، $NHCH(CH_3)_2$ = R، $NHC(CH_3)_3$ (۴۵)، NC_4H_8O (۴۷) و $Na[C_6H_5P(O)(NCSCH_2CH_2NH)(NCSCH_2CH_2N)]$ (۴۸) نیز تهیه شدند و با روش‌های طیف‌سنجی شناسایی شدند. ساختار سه ترکیب ۳۷، ۴۴ و ۴۷ با بلورنگاری پرتو ایکس تعیین و همچنین محاسبات نظری بر روی ترکیبات ۳۷، ۴۴-۴۷ انجام شد تا توتومر ترجیحی (آمینی یا ایمینی) در حالت جامد و فاز گازی به دست آید. محاسبات NBO بر روی ترکیبات ۳۲، ۳۷ و آنیون‌های آنها (۳۵ و ۴۸) نیز انجام شد و مقدار بار محاسبه شده بر روی اتم‌های فسفر با هم مقایسه گردید. فعالیت ضدباکتری برخی از لیگاندها و کمپلکس‌های قلع آنها و همچنین برخی از فسفرآمیدیت‌های شامل گروه تیا زولیل و مشتقات آن بر روی باکتری‌های گرم مثبت و منفی انجام شد.

کلمات کلیدی: فسفرآمید، ترکیبات آلی قلع، بلورنگاری پرتو ایکس، پیوند هیدروژنی، ۲-آمینوتیازول، فعالیت ضدباکتری

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فهرست جدول‌ها.....	ح
فهرست شکل‌ها.....	م
فصل ۱- مقدمه	۱
۱-۱- ترکیبات آلی قلع.....	۲
۱-۱-۱- کمپلکسهای قلع با لیگاندهای فسفریل دار.....	۳
۲-۱- آمینوتیازولها و مشتقات فسفردار آنها.....	۷
۳-۱- توتومری در آمینوتیازولها.....	۹
۴-۱- مکانیسم عمل داروهای ضدباکتری.....	۱۱
۵-۱- ضرورت و اهداف تحقیق.....	۱۵
فصل ۲- نتایج تجربی	۱۸
۱-۲- مواد و حلال‌های مصرفی.....	۱۸
۲-۲- دستگاه‌های مورد استفاده.....	۲۰
۳-۲- روش انجام آزمایشات.....	۲۱
۱-۳-۲- سنتز حدواسطهای مورد استفاده.....	۲۱
۲-۳-۲- روش تهیه لیگاندهای فسفرآمیدی از ایزوپروپیل آمین و ترشیو بوتیل آمین.....	۲۱
۲-۳-۲-۱- بیس (ایزوپروپیل) فنیل فسفونیک دی آمید (۱).....	۲۲
۲-۳-۲-۲- فنیل N^1, N - بیس (ایزوپروپیل) آمیدو فسفات (۲).....	۲۲
۲-۳-۲-۳-۲- کلرو فنیل N^1, N - بیس (ایزوپروپیل) آمیدو فسفات (۳).....	۲۳

- ۲۴..... $N-4-2-3-2$ - فنیل - N', N - بیس ایزوپروپیل فسفریک تری آمید (۴)
- ۲۴..... $N-5-2-3-2$ - بنزوئیل - N', N - بیس ایزوپروپیل فسفریک تری آمید (۵)
- ۲۵..... $N-6-2-3-2$ - متوکسی بنزوئیل - N', N - بیس ایزوپروپیل فسفریک تری آمید (۶)
- ۲۵..... $N-7-2-3-2$ - متیل بنزوئیل - N', N - بیس ایزوپروپیل فسفریک تری آمید (۷)
- ۲۶..... $N-8-2-3-2$ - کلرو بنزوئیل - N', N - بیس ایزوپروپیل فسفریک تری آمید (۸)
- ۲۶..... $N-9-2-3-2$ - منو کلرو استیل - N', N - بیس ایزوپروپیل فسفریک تری آمید (۹)
- ۲۷..... $N-10-2-3-2$ - دی کلرو استیل - N', N - بیس ایزوپروپیل فسفریک تری آمید (۱۰)
- ۲۷..... $N-11-2-3-2$ - تری کلرو استیل - N', N - بیس ایزوپروپیل فسفریک تری آمید (۱۱)
- ۲۸..... $N-12-2-3-2$ - بیس (ترشیو بوتیل) فنیل فسفونیک دی آمید (۱۲)
- ۲۸..... $N-13-2-3-2$ - متوکسی بنزوئیل - N', N - بیس ترشیو بوتیل فسفریک تری آمید (۱۳)
- ۲۹..... $3-3-2$ - تهیه کمپلکس های آلی قلع با لیگاندهای ۱-۱۳
- ۲۹..... $1-3-3-2$ - بیس (N', N) ایزوپروپیل (فنیل فسفونیک دی آمید) دی متیل قلع دی کلرید (۱۴)
- ۲۹..... $2-3-3-2$ - بیس (فنیل N', N - بیس (ایزوپروپیل) آمیدو فسفات) دی متیل قلع دی کلرید (۱۵)
- ۳۰..... $3-3-3-2$ - بیس (۲-کلرو فنیل N', N - بیس (ایزوپروپیل) آمیدو فسفات) دی متیل قلع دی کلرید (۱۶)
- ۳۱..... $4-3-3-2$ - بیس (N - فنیل - N', N - بیس ایزوپروپیل فسفریک تری آمید) دی متیل قلع دی کلرید (۱۷)
- ۳۲.....

- ۲-۳-۳-۵- بیس (N - بنزوئیل - N^m, N^n - بیس ایزوپروپیل فسفریک تری آمید) دی متیل قلع
 ۳۲ دی کلرید (۱۸).....
- ۲-۳-۳-۶- بیس (N - متوکسی بنزوئیل - N^m, N^n - بیس ایزوپروپیل فسفریک تری آمید) دی
 ۳۴ متیل قلع دی کلرید (۱۹).....
- ۲-۳-۳-۷- بیس (N - متیل بنزوئیل - N^m, N^n - بیس ایزوپروپیل فسفریک تری آمید) دی متیل
 ۳۵ قلع دی کلرید (۲۰).....
- ۲-۳-۳-۸- بیس (N - کلرو بنزوئیل - N^m, N^n - بیس ایزوپروپیل فسفریک تری آمید) دی متیل
 ۳۶ قلع دی کلرید (۲۱).....
- ۲-۳-۳-۹- کمپلکس دی متیل قلع دی کلرید با N - منو کلرو استیل - N^m, N^n - بیس
 ۳۷ ایزوپروپیل فسفریک تری آمید (۲۲).....
- ۲-۳-۳-۱۰- بیس (N - دی کلرو استیل - N^m, N^n - بیس ایزوپروپیل فسفریک تری آمید) دی
 ۳۸ متیل قلع دی کلرید (۲۳).....
- ۲-۳-۳-۱۱- کمپلکس دی متیل قلع دی کلرید با N - تری کلرو استیل - N^m, N^n - بیس
 ۳۹ ایزوپروپیل فسفریک تری آمید (۲۴).....
- ۲-۳-۳-۱۲- N^m, N^n - بیس (ترشیو بوتیل) فنیل فسفونیک دی آمید دی متیل قلع دی کلرید
 ۴۰ (۲۵).....
- ۲-۳-۳-۱۳- N^m, N^n - بیس (ایزوپروپیل) فنیل فسفونیک دی آمید) تری فنیل قلع کلرید
 ۴۱ (۲۶).....
- ۲-۳-۳-۱۴- (فنیل N^m, N^n - بیس (ایزوپروپیل) آمیدو فسفات) تری فنیل قلع کلرید (۲۷).....
 ۴۲ (۲۸).....
- ۲-۳-۳-۱۵- (۲- کلرو فنیل N^m, N^n - بیس (ایزوپروپیل) آمیدو فسفات) تری فنیل قلع کلرید
 ۴۲ (۲۸).....

۲-۳-۱۶- N', N - بیس (ترشیوبوتیل) فنیل فسفونیک دی آمید) تری فنیل قلع کلرید

۴۳.....(۲۹)

۲-۳-۴- روش تهیه فسفامیک اسیدها، آمیدو فسفات و تمکهای آمیدو فسفاتها..... ۴۴

۲-۳-۴-۱- N - متوکسی بنزوئیل فسفامیک اسید (۳۰)..... ۴۵

۲-۳-۴-۲- N - کلرو بنزوئیل فسفامیک اسید (۳۱)..... ۴۵

۲-۳-۴-۳- دی متیل N - کلرو بنزوئیل آمیدو فسفات (۳۲)..... ۴۶

۲-۳-۴-۴- سدیم دی متیل N - بنزوئیل آمیدو فسفات (۳۳)..... ۴۶

۲-۳-۴-۵- سدیم دی متیل N - متوکسی بنزوئیل آمیدو فسفات (۳۴)..... ۴۷

۲-۳-۴-۶- سدیم دی متیل N - کلرو بنزوئیل آمیدو فسفات (۳۵)..... ۴۷

۲-۳-۵- تهیه کمپلکسهای قلع..... ۴۸

۲-۳-۵-۱- (دی متیل N - کلرو بنزوئیل آمیدو فسفات) دی متیل قلع دی کلرید (۳۶)..... ۴۸

۲-۳-۶- روش تهیه لیگاندهای فسفر آمیدی با استفاده از مشتقات آمینوتیازول..... ۴۸

۲-۳-۶-۱- سنتز لیگاند N', N - بیس (۲-تیازولیل) فنیل فسفونیک دی آمید (۳۷)..... ۴۸

۲-۳-۶-۲- فنیل N', N - بیس (۲-تیازولیل) آمیدو فسفات (۳۸)..... ۴۹

۲-۳-۶-۳- کلرو فنیل N', N - بیس (۲-تیازولیل) آمیدو فسفات (۳۹)..... ۵۰

۲-۳-۶-۴- فنیل N - (۲-تیازولیل) کلرو آمیدو فسفات (۴۰)..... ۵۱

۲-۳-۶-۵- فنیل N - (۴-متیل ۲-تیازولیل) کلرو آمیدو فسفات (۴۱)..... ۵۱

۲-۳-۶-۶-۴- متیل فنیل N - (۲-تیازولیل) کلرو آمیدو فسفات (۴۲)..... ۵۲

۲-۳-۶-۷- دی فنیل N - (۲-تیازولیل) آمیدو فسفات (۴۳)..... ۵۳

۲-۳-۶-۸- دی فنیل N - (۲-تیازولینیل) آمیدو فسفات (۴۴)..... ۵۳

- ۵۴..... N'' , N' - بنزوتیازولیل بیس ایزوپروپیل فسفریک تری آمید (۴۵).....
- ۵۵..... N'' , N' - بنزوتیازولیل بیس ترشیوبوتیل فسفریک تری آمید (۴۶).....
- ۵۶..... N'' , N' - بنزوتیازولیل بیس مورفولینو فسفریک تری آمید (۴۷).....
- ۵۷..... N'' , N' - سدیم (۲-تیازولیل) فنیل فسفونیک دی آمید (۴۸).....
- ۵۸..... N'' , N' - محاسبات شیمی کوانتوم.....
- ۵۸..... N'' , N' - ارزیابی اثرات مهارکنندگی بر روی باکتریهای گرم مثبت و منفی.....
- ۵۸..... N'' , N' - مواد و وسایل لازم.....
- ۵۸..... N'' , N' - اندازه گیری اثر مهارکنندگی باکتریها.....
- ۶۰.....**فصل ۳ - بحث و نتیجه گیری**.....
- ۶۰..... N'' , N' - لیگاندهای سفرآمیدی حاوی ایزوپروپیل و ترشیوبوتیل آمین.....
- ۶۰..... N'' , N' - روش عمومی سنتز.....
- ۶۲..... N'' , N' - بررسی طیفی.....
- ۶۶..... N'' , N' - بررسی ساختار بلوری.....
- ۶۷..... N'' , N' - بنزوئیل - N - ساختارهای N - بنزوئیل - N'' , N' - بیس ایزوپروپیل فسفریک تری آمید (۵) و N - ۴.....
- ۶۷..... N'' , N' - متوکسی بنزوئیل - N'' , N' - بیس ایزوپروپیل فسفریک تری آمید (۶).....
- ۷۳..... N'' , N' - ساختار N - ۴ - متوکسی بنزوئیل - N'' , N' - بیس ترشیوبوتیل فسفریک تری آمید (۱۳).....
- ۷۶..... N'' , N' - بررسی محاسباتی لیگاندهای ۱-۱۱.....
- ۷۸..... N'' , N' - برهمکنشهای دهنده - پذیرنده (پیوندی - ضد پیوندی).....
- ۸۶..... N'' , N' - کمپلکسهای قلع با لیگاندهای ۱-۱۲.....

- ۳-۲-۱- ترکیبات دی متیل قلع دی کلرید با لیگاندهای ۴-۱ و ۱۴ ۸۶
- ۳-۲-۱-۱- نتایج حاصل از روشهای سنتز ۸۶
- ۳-۲-۱-۲- مطالعات طیفی ۸۸
- ۳-۲-۱-۳- مطالعات ساختاری ۹۴
- ۳-۲-۲- ترکیبات دی متیل قلع دی کلرید با لیگاندهای R-۴-N بنزوئیل -N',N''- بیس
- ۱-۲-۲-۱- نتایج حاصل از روشهای سنتز (۸-۵) ۱۰۱
- ۱-۲-۲-۲- نتایج حاصل از روشهای سنتز ۱۰۱
- ۲-۲-۲-۲- مطالعات طیفی ۱۰۳
- ۳-۲-۲-۳- مطالعات ساختاری ۱۰۵
- ۳-۲-۳- ترکیبات دی متیل قلع دی کلرید با لیگاندهای N-مونو، دی و تری کلرو استیل
- N',N''- بیس (ایزوپروپیل) فسفریک تری آمید ۱۲۲
- ۱-۳-۲-۳- نتایج حاصل از روشهای سنتز ۱۲۲
- ۲-۳-۲-۳- بررسی طیفی ۱۲۲
- ۳-۳-۲-۳- بررسی ساختاری ۱۲۵
- ۴-۲-۳- ترکیبات تری فنیل قلع کلرید با لیگاندهای ۳-۱ و ۱۴ ۱۴۱
- ۱-۴-۲-۳- نتایج حاصل از روشهای سنتز ۱۴۱
- ۲-۴-۲-۳- بررسی طیفی ۱۴۲
- ۳-۴-۲-۳- بررسی ساختاری کمپلکسهای ۲۶ و ۲۹ ۱۴۴
- ۳-۳- فسفامیک اسید، آمیدو فسفات، و نمکهای آمیدو فسفات ۱۴۸
- ۱-۳-۳- روشهای سنتز ۱۴۸
- ۲-۳-۳- مطالعات طیفی ۱۵۰

۱۵۳تهیه کمپلکس قلع با لیگاند ۳۲	۳-۳-۳
۱۵۴ترکیبات فسفرآمیدی حاوی مشتقات آمینوتیازول	۴-۳
۱۵۴روشهای سنتز	۱-۴-۳
۱۵۹بررسی طیفی	۲-۴-۳
۱۶۴مطالعات ساختاری	۳-۴-۳
۱۶۵بررسی ساختار بلوری ترکیب ۳۷	۱-۳-۴-۳
۱۶۸بررسی ساختار بلوری ۴۴	۲-۳-۴-۳
۱۷۱بررسی N -بنزوتیازولیل N' , N'' -بیس مورفولینو فسفریک تری آمید (۴۷)	۳-۳-۴-۳
۱۷۴محاسبات مکانیک کوانتومی	۴-۴-۳
۱۷۴تعیین پایدارترین توتومر برای ترکیب ۳۷	۱-۴-۴-۳
۱۷۶محاسبه پایدارترین توتومرها برای ترکیبات ۴۵-۴۷	۲-۴-۴-۳
۱۷۹بررسی محاسبات NBO ترکیبات ۳۲، ۳۵ و آنیونهای ۳۷ و ۴۸	۳-۴-۴-۳
۱۸۵بررسی فعالیت ضدباکتری	۵-۳
۱۸۹نتایج کلی	۶-۳
۱۹۷فهرست مراجع	

فهرست جدول‌ها

عنوان	صفحه
جدول ۱-۲: حلال‌های مورد استفاده.....	۱۸
جدول ۲-۲: مواد مورد استفاده.....	۱۹
جدول ۱-۳: داده‌های طیف‌های NMR و IR لیگاندهای ۱-۱۳.....	۶۶
جدول ۲-۳: داده‌های بلورنگاری ساختارهای ۵، ۶ و ۱۳.....	۶۷
جدول ۳-۳: برخی از طول و زوایای پیوند ترکیب ۵.....	۶۹
جدول ۴-۳: برخی از طول و زوایای پیوند ترکیب ۶.....	۷۰
جدول ۵-۳: داده‌های پیوند هیدروژنی ترکیبات ۵ و ۶ [Å، °].....	۷۱
جدول ۶-۳: برخی از طول و زوایای پیوند ترکیب ۱۳.....	۷۴
جدول ۷-۳: داده‌های پیوند هیدروژنی ترکیب ۱۳ [Å، °].....	۷۵
جدول ۸-۳: آنالیز NBO پیوند P-R در ترکیبات ۱ و ۱۱-۴ که هیبریداسیون هر اتم در پیوند و چگالی الکترونی در هر پیوند را در بر می‌گیرد.....	۸۰
جدول ۹-۳: طول پیوندهای محاسباتی برای ترکیبات ۱-۱۱.....	۸۰
جدول ۱۰-۳: انرژی پایداری NBO برای ترکیبات ۱ و ۲.....	۸۱
جدول ۱۱-۳: انرژی پایداری NBO برای ترکیبات ۳ و ۴.....	۸۲
جدول ۱۲-۳: انرژی پایداری NBO برای ترکیبات ۸-۵.....	۸۳
جدول ۱۳-۳: انرژی پایداری NBO برای ترکیبات ۱۱-۹.....	۸۴

- جدول ۳-۱۴: میزان خصلت p و چگالی الکترونی برخی از اوربیتال‌های جفت الکترون‌های تنهای اتم-
های اکسیژن کربونیل و فسفریل ترکیبات ۵ و ۱۱.....۸۵
- جدول ۳-۱۵: انرژی پایداری NBO برای برهم‌کنش‌های LP(O) فسفریل و کربونیل با اوربیتال‌های
ضدپیوندی ترکیبات ۵ و ۱۱.....۸۵
- جدول ۳-۱۶: داده‌های طیف NMR ترکیبات ۱، ۱۲، ۱۴ و ۲۵.....۸۹
- جدول ۳-۱۷: برخی از داده‌های طیفی ترکیبات ۲-۴ و ۱۵-۱۷.....۸۹
- جدول ۳-۱۸: داده‌های بلورنگاری ساختارهای ۱۴ و ۲۵.....۹۵
- جدول ۳-۱۹: برخی از طول و زوایای پیوند در ساختار ترکیب ۱۴.....۹۶
- جدول ۳-۲۰: داده‌های پیوند هیدروژنی ترکیبات ۱۴ و ۲۵.....۹۷
- جدول ۳-۲۱: برخی از طول و زوایای پیوند در ترکیب ۲۵.....۹۹
- جدول ۳-۲۲: برخی از طول پیوندها و زاویه‌های پیوندی ترکیب ۱۲.....۱۰۱
- جدول ۳-۲۳: برخی از داده‌های طیفی ترکیبات ۵-۸ و ۱۸-۲۱.....۱۰۴
- جدول ۳-۲۴: داده‌های بلورنگاری ساختارهای ۱۸، ۱۸.CH₃CN و ۱۹.CH₃CN.....۱۰۶
- جدول ۳-۲۵: برخی از طول و زوایای پیوند ترکیب ۱۸.....۱۰۸
- جدول ۳-۲۶: برخی از طول و زوایای پیوندی ترکیب ۱۸.CH₃CN.....۱۰۹
- جدول ۳-۲۷: داده‌های پیوندهای هیدروژنی ترکیبات ۱۸، ۱۸.CH₃CN، ۱۹.CH₃CN و ۲۰ و ۲۱ [Å،
.....[°] ۱۱۰
- جدول ۳-۲۸: برخی از طول و زوایای پیوند ترکیب ۱۹.CH₃CN.....۱۱۴
- جدول ۳-۲۹: داده‌های بلورنگاری ساختارهای ۲۰ و ۲۱.....۱۱۷
- جدول ۳-۳۰: برخی از طول و زوایای پیوند ترکیبات ۲۰ و ۲۱.....۱۱۹

- جدول ۳-۳۱: داده‌های طیف IR و NMR ترکیبات ۱۱-۹ و ۲۴-۲۲..... ۱۲۴
- جدول ۳-۳۲: داده‌های بلورنگاری ساختارهای ۲۲، ۲۳ و ۲۴..... ۱۲۵
- جدول ۳-۳۳: برخی از طول و زوایای پیوند ترکیب ۲۲..... ۱۲۸
- جدول ۳-۳۴: داده‌های پیوند هیدروژنی ترکیبات ۲۲، ۲۳ و ۲۴..... ۱۳۱
- جدول ۳-۳۵: برخی از طول و زوایای پیوند ترکیب ۲۳..... ۱۳۴
- جدول ۳-۳۶: برخی از طول و زوایای پیوند ترکیب ۲۴..... ۱۳۷
- جدول ۳-۳۷: برخی از داده‌های طیفی ترکیبات ۲۸-۲۶..... ۱۴۳
- جدول ۳-۳۸: داده‌های بلورنگاری ساختارهای ۲۶ و ۲۹..... ۱۴۵
- جدول ۳-۳۹: برخی از طول و زوایای پیوند ترکیبات ۲۶ و ۲۹..... ۱۴۶
- جدول ۳-۴۰: داده‌های پیوند هیدروژنی ترکیبات ۲۶ و ۲۹..... ۱۴۷
- جدول ۳-۴۱: داده‌های طیف‌های NMR (در حلال DMSO-d₆) و IR لیگاندهای ۳۵-۳۰..... ۱۵۲
- جدول ۳-۴۲: داده‌های طیف‌های NMR در حلال CDCl₃ لیگاند ۳۲ و کمپلکس ۳۶..... ۱۵۴
- جدول ۳-۴۳: برخی از داده‌های طیف‌های NMR و IR ترکیبات ۴۶-۳۵..... ۱۶۰
- جدول ۳-۴۴: داده‌های ¹³C NMR ترکیب ۳۷ در حلال DMSO-d₆..... ۱۶۲
- جدول ۳-۴۵: داده‌های بلورنگاری ساختارهای ۳۷، ۴۴ و ۴۷..... ۱۶۴
- جدول ۳-۴۶: برخی از طول و زوایای پیوند ترکیب ۳۷..... ۱۶۶
- جدول ۳-۴۷: داده‌های پیوند هیدروژنی ترکیب ۳۷..... ۱۶۷
- جدول ۳-۴۸: برخی از طول و زوایای پیوند ترکیب ۴۴..... ۱۶۹
- جدول ۳-۴۹: داده‌های پیوند هیدروژنی ترکیب ۴۴..... ۱۷۱
- جدول ۳-۵۰: برخی از طول و زوایای پیوند ترکیب ۴۷..... ۱۷۲

- جدول ۳-۵۱: داده‌های پیوند هیدروژنی ترکیب ۴۷..... ۱۷۴
- جدول ۳-۵۲: انرژی‌های نسبی محاسبه شده با روش‌های B3LYP و MP2 برای توتومرهای احتمالی ترکیب ۳۷ در صورت‌بندی‌های مختلف (برحسب کیلو کالری بر مول)..... ۱۷۵
- جدول ۳-۵۳: طول پیوند [Å] و زوایای پیوند [°] محاسباتی [B3LYP/6-311++G(3df,2p)] و تجربی برای ترکیب ۳۷..... ۱۷۶
- جدول ۳-۵۴: انرژی‌های نسبی محاسبه شده با روش‌های B3LYP و MP2 برای توتومرهای آمینی و ایمینی ترکیبات ۴۵-۴۷ (برحسب کیلو کالری بر مول)..... ۱۷۷
- جدول ۳-۵۵: ممان دوقطبی محاسبه شده برحسب دمای برای توتومرهای ایمینی و آمینی ترکیبات ۴۵-۴۷..... ۱۷۸
- جدول ۳-۵۶: طول پیوند [Å] و زوایای پیوند [°] محاسباتی [B3LYP/6-311++G(3df,2p)] و تجربی برای ترکیب ۴۷..... ۱۷۸
- جدول ۳-۵۷: توزیع دانسیته الکترونی بر روی اوربیتال‌های اتم فسفر و بار روی اتم فسفر در ترکیبات ۳۲، ۳۵، ۳۷ و ۴۸..... ۱۸۰
- جدول ۳-۵۸: بار محاسبه شده بر روی برخی از اتم‌های ترکیبات ۳۲ و ۳۵..... ۱۸۱
- جدول ۳-۵۹: طول پیوندهای محاسباتی ترکیبات ۳۲ و ۳۵ [Å]..... ۱۸۱
- جدول ۳-۶۰: طول پیوندهای محاسباتی ترکیبات ۳۷ و ۴۸ [Å]..... ۱۸۲
- جدول ۳-۶۱: انرژی پایداری NBO برای ترکیبات ۳۲ و ۳۵..... ۱۸۴
- جدول ۳-۶۲: انرژی پایداری NBO برای ترکیبات ۳۷ و ۴۷..... ۱۸۴
- جدول ۳-۶۳: بار محاسبه شده بر روی اتم‌های گوگرد، اکسیژن و نیتروژن ترکیبات ۳۷ و ۴۸..... ۱۸۵

جدول ۳-۶۴: فعالیت ضد باکتری کمپلکس‌های ۱۴ و ۲۵ و لیگاندهای آنها (قطر هاله مهار رشد بعد از

۲۴h برحسب میلی متر).....۱۸۶

جدول ۳-۶۵: فعالیت ضد باکتری کمپلکس‌های ۱۸، ۲۱ و ۲۴ (قطر هاله مهار رشد بعد از ۲۴h

برحسب میلی متر).....۱۸۷

جدول ۳-۶۶: فعالیت ضد باکتری کمپلکس‌های ۱۹، ۲۲، ۲۳، ۲۶، ۲۷ و ۲۹ (قطر هاله مهار رشد بعد

از ۲۴h برحسب میلی متر).....۱۸۸

جدول ۳-۶۷: فعالیت ضد باکتری ترکیبات ۴۴-۳۷ و ۴۶ (قطر هاله مهار رشد بعد از ۲۴h برحسب

میلی متر).....۱۸۸

جدول ۳-۶۸: بار محاسباتی برای اتم‌های اکسیژن فسفریل و کربونیل لیگاندهای ۱۱-۱ و طول

پیوندهای Sn-O کمپلکس‌های آنها در حالت جامد.....۱۹۱