

## دانشگاه آزاد اسلامی

واحد شاهرود

دانشکده علوم پایه، گروه شیمی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد «M.Sc.»

گرایش: شیمی فیزیک

عنوان:

اثرات حلال بر پروتونه شدن و وابستگی ثابت های تشکیل به قدرت یونی، کمپلکس های پالادیم (II) با لیگاندهای دهنده در محیط های آبی، مخلوط حلال های آلی و میسل غیر یونی همراه با پیش بینی های نظری ارتباط کمی ساختار-ویژگی برخی از ترکیبات شیمیایی، گیاهی و دارویی

استاد راهنما:

دکتر مجید محمدحسینی

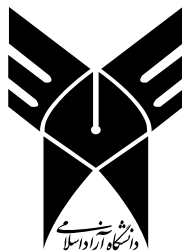
استاد مشاور:

دکتر بهزاد چهکندی

نگارش:

تقی یعقوبی

زمستان ۱۳۸۹



**ISLAMIC AZAD UNIVERSITY**

**Shahrood Branch**

**Faculty of Science-Department of Chemistry**

**Thesis «M.Sc.»**

**On Physical Chemistry**

**Title:**

Solvent and background effects on protonation and ionic strength dependence of formation constants of Palladium(II)-donating ligands in aqueous, alcoholic and non-ionic surfactants media together with theoretical predictions on the quantitative structure property relationship (QSPR) some chemical, pharmaceutical and plant compounds

**Thesis Advisor:**

**Majid Mohammadhosseini Ph.D.**

**Consulting Advisor:**

**Behzad Chahkandi Ph.D.**

**By:**

**Taghi Yaghoubi**

**Winter 2011**

سپاسگزارم؛

اکنون که به لطف پروردگار بزرگ موفق به اتمام این مقطع از تحصیل گشته‌ام، لازم است از کسانی که در این مسیر مرا راهنمایی نموده‌اند تشکر نمایم.

ابتدا از راهنماییها و کمک‌های ارزشمند استاد راهنمایم، آقای دکتر مجید محمدحسینی و استاد مشاورم آقای دکتر بهزاد چهکندی کمال تشکر و قدردانی را دارم.

همین طور از استاد محترم آقای دکتر زاهدی به دلیل مطالعه‌ی دقیق پایان نامه و شرکت در جلسه‌ی دفاع و همچنین به خاطر راهنماییهای ارزشمندشان صمیمانه تشکر می‌نمایم.

از آقای دکتر سعید زکوی استادیار شیمی معدنی دانشگاه علوم پایه دامغان که در طول دوران تحصیل از راهنماییها و کمکهای ارزشمندشان بهره‌مند شدم، کمال تشکر را دارم.

از سایر اساتید و کارکنان گروه شیمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد شاهرود که در طول مدت تحصیل در این دانشگاه از کمک‌ها و راهنماییهایشان بی‌نصیب نبوده‌ام تشکر می‌نمایم.

در نهایت از پدر، مادر، همسر و سایر اعضای خانواده‌ام به خاطر لطف و محبت و تشویقهایشان کمال تشکر را دارم.

تقديم به:

همسر و فرزندانم که با فداکاری و ایثار بی‌دریغ‌شان همواره پایگاهی امن و پشتیبانی  
استوار و مشوقی همیشگی برای من بوده و هستند.

## فهرست مطالب

عنوان	صفحه
چکیده	۱

### فصل اول: پالادیم و کاربردهای آن در زندگی و صنعت

۱-۱. پالادیم	۳
۱-۱-۱. تاریخچه	۵
۲-۱-۱. ویژگی‌های قابل توجه	۵
۳-۱-۱. پیدایش	۶
۴-۱-۱. ایزوتوپ‌ها	۷
۵-۱-۱. شیمی پالادیم	۸
۶-۱-۱. فلزات گروه پلاتین	۸
۷-۱-۱. اثرات پالادیم بر روی سلامتی	۱۰
۸-۱-۱. پالادیم کلرید	۱۰
۲-۱. کاربردها	۱۱
۱-۲-۱. کاتالیز	۱۲
۲-۲-۱. الکترونیک	۱۲
۳-۲-۱. صنعت	۱۲
۴-۲-۱. جواهرات	۱۳
۵-۲-۱. چاپ	۱۳
۶-۲-۱. مفاهیم	۱۴

### فصل دوم: شیمی کوئوردیناسیون فلز پالادیم، تعادل‌های تشکیل کمپلکس و عوامل فعال سطحی

۱-۲. پالادیم و جدول تناوبی	۱۸
۲-۲. خواص عمومی عناصر واسطه	۱۸
۱-۲-۲. دومین و سومین ردیف عناصر واسطه	۱۹
۳-۲. مقدمه‌ای بر تشکیل کمپلکس‌ها	۱۹
۴-۲. اهمیت ترکیبات کوئوردیناسی	۲۰
۱-۴-۲. کمپلکس‌های پالادیم <sup>d</sup>	۲۰
۵-۲. اربیتال‌های مولکولی در کمپلکس‌های مسطح مربع	۲۱
۶-۲. قاعده پیرسون	۲۲
۷-۲. تعادلات تشکیل کمپلکس	۲۲
۸-۲. نظریه لویس	۲۳

۲۴	۹-۲. اثر قدرت یونی
۲۴	۱۰-۲. ثوابت پایداری کمپلکس‌ها
۲۶	۱۱-۲. اندازه‌گیری ثابت تشکیل کمپلکس‌ها
۲۸	۱۲-۲. وابستگی دمائی ثوابت پایداری
۳۰	۱۳-۲. مواد فعال سطح
۳۱	۱-۱۳-۲. میسل‌ها
۳۲	۲-۱۳-۲. تریتون ۱۰۰-X
۳۴	۱۴-۲. طیف نورسنجی مولکول‌ها
۳۴	۱-۱۴-۲. روش تغییرات پیوسته
۳۵	۲-۱۴-۲. روش نسبت مولی
۳۶	۳-۱۴-۲. روش نسبت شیبی
۳۷	۱۵-۲. اسپکتروفتومتری فرابنفش-مرئی
۳۷	۱-۱۵-۲. کاربردهای اسپکتروفتومتری فرابنفش-مرئی
۳۸	۲-۱۵-۲. قانون بیر لامبرت

#### فصل سوم: بخش تجربی و نتایج

۴۲	۱-۳. مواد شیمیایی
۴۲	۲-۳. دستگاه‌های مورد استفاده
۴۳	۳-۳. لیگاند ۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول
۴۴	۱-۳-۳. تهیه‌ی محلول‌های
۴۵	۲-۳-۳. طیف جذبی لیگاند و کمپلکس تشکیل‌شده
۴۶	۳-۳-۳. بهینه‌سازی پارامترها، جهت تعیین ثابت‌های تشکیل کمپلکس مربوطه
۵۰	۴-۳-۳. شرایط بهینه
۵۱	۵-۳-۳. تعیین ترکیب کمپلکس پالادیم(II)-۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول در شرایط بهینه
۵۵	۶-۳-۳. تعیین ضرایب جذب مولی کمپلکس در قدرت‌های یونی مختلف
۶۰	۷-۳-۳. نتایج محاسبات ثابت‌های تشکیل کمپلکس پالادیم(II)-۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول در قدرت‌های یونی مختلف
۶۱	۸-۳-۳. تعیین ضرایب جذب مولی، ثابت تشکیل و لگاریتم ثابت تشکیل تصحیح شده در مورد کمپلکس کمپلکس پالادیم(II)-۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول
۶۲	۴-۳. لیگاند ۵- دی فنیل کاربازون
۶۳	۱-۴-۳. تهیه‌ی محلول‌ها
۶۴	۲-۴-۳. طیف جذبی ۵- دی فنیل کاربازون و کمپلکس پالادیم (II)-۵- دی فنیل کاربازون
۶۵	۳-۴-۳. بهینه‌سازی پارامترهای مؤثر
۷۰	۴-۴-۳. شرایط بهینه
۷۱	۵-۴-۳. تعیین ترکیب کمپلکس پالادیم (II)-۵- دی فنیل کاربازون در شرایط بهینه
۷۳	۶-۴-۳. تعیین ضرایب جذب مولی کمپلکس در قدرت‌های یونی مختلف

۷-۴-۳. نتایج محاسبات ثابت‌های تشکیل کمپلکس پالادیم (II)-۱ و ۵- دی فنیل کاربازون در قدرت-های یونی مختلف	۷۸
۸-۴-۳. وابستگی ثابت‌های تشکیل کمپلکس به قدرت یونی	۷۹
۹-۴-۳. تعیین ضرایب جذب مولی، ثابت تشکیل و لگاریتم ثابت تشکیل تصحیح شده در مورد کمپلکس پالادیم (II)-۱ و ۵- دی فنیل کاربازون	۸۰
۵-۳. لیگاند سدیم دی‌اتیل دی‌تیوکاربامات سه آبه (Na.DTC)	۸۱
۱-۵-۳. تهیه‌ی محلول‌ها	۸۲
۲-۵-۳. طیف جذبی سدیم دی‌اتیل دی‌تیوکاربامات و کمپلکس پالادیم (II)-۱ و ۵- سدیم دی‌اتیل دی‌تیوکاربامات	۸۳
۳-۵-۳. بهینه‌سازی پارامترها در تعیین ثابت‌های تشکیل کمپلکس	۸۵
۴-۵-۳. شرایط بهینه	۹۰
۵-۵-۳. تعیین ترکیب کمپلکس پالادیم (II)- سدیم دی‌اتیل دی‌تیوکاربامات در شرایط بهینه	۹۰
۶-۵-۳. تعیین ضرایب جذب مولی کمپلکس در قدرت‌های یونی مختلف	۹۴
۷-۵-۳. نتایج محاسبات ثابت‌های تشکیل کمپلکس پالادیم (II)- سدیم دی‌اتیل دی‌تیوکاربامات در قدرت‌های یونی مختلف	۹۸
۸-۵-۳. وابستگی ثابت‌های تشکیل کمپلکس به قدرت یونی	۹۹
۹-۵-۳. تعیین ضرایب جذب مولی، ثابت تشکیل و لگاریتم ثابت تشکیل تصحیح شده در مورد کمپلکس پالادیم (II)- سدیم دی‌اتیل دی‌تیوکاربامات	۱۰۰

#### فصل چهارم: پیش‌بینی‌های نظری ارتباط کمی ساختار-ویژگی (QSPR) برخی ترکیبات شیمیایی، گیاهی و دارویی

۱-۴. مقدمه	۱۰۲
۲-۴. کمومتریکس	۱۰۲
۳-۴. ارتباط کمی ساختار-ویژگی (QSPR)	۱۰۳
۴-۴. توصیف‌کننده‌های مولکولی	۱۰۵
۵-۴. مطالعات (QSPR)	۱۰۶
۶-۴. اعتبار سنجی مدل	۱۰۷
۱-۶-۴. اعتبارسنجی تقاطعی	۱۰۷
۲-۶-۴. تقسیم کردن مجموعه، به سری‌های آموزش و آزمون	۱۰۷
۷-۴. رگرسیون خطی چندگانه (MLR)	۱۰۷
۸-۴. انتخاب سری داده‌ها	۱۰۹
۹-۴. توصیف‌کننده‌ها	۱۱۰
۱-۹-۴. انواع توصیف‌کننده‌های مولکولی کلاسیک	۱۱۱
۲-۹-۴. توصیف‌کننده‌های صفر بعدی	۱۱۲
۳-۹-۴. توصیف‌کننده‌های یک بعدی	۱۱۲
۴-۹-۴. توصیف‌کننده‌های دو بعدی	۱۱۲



- ۱۱۲..... ۵-۹-۴. توصیف‌کننده‌های سه بعدی
- ۱۱۳..... ۶-۹-۴. تجزیه و تحلیل آماری توصیف‌کننده‌ها
- ۱۱۳..... ۱۰-۴. انتخاب مدل
- ۱۱۴..... ۱۱-۴. نرم‌افزارهای مورد نیاز

فصل پنجم: مراحل، محاسبات و نتایج حاصل از مطالعات (QSPR)

- ۱-۵. مطالعات QSPR (ارتباط کمی ساختار- ویژگی) روی مقادیر  $pK_a$  ترکیبات آلی در DMSO. ۱۱۷
- ۱-۱-۵. مقدمه. ۱۱۷
- ۲-۱-۵. انتخاب داده‌ها. ۱۱۷
- ۳-۱-۵. انتخاب توصیف‌کننده‌ها. ۱۲۳
- ۴-۱-۵. مدل‌سازی با روش رگرسیون خطی چندگانه. ۱۲۳
- ۵-۱-۵. نتیجه‌گیری. ۱۲۶
- ۶-۱-۵. تکنیک‌های اعتبارسنجی. ۱۳۲
- ۲-۵. مطالعات (QSPR) روی RI (شاخص بازداری) ترکیبات تشکیل دهنده گیاه بابونه‌ی شیرازی
- ۱-۲-۵. مقدمه. ۱۳۶
- ۲-۲-۵. انتخاب داده‌ها. ۱۳۶
- ۳-۲-۵. انتخاب توصیف‌کننده‌ها و مدل‌سازی با روش رگرسیون خطی چندگانه. ۱۴۵
- ۴-۲-۵. نتیجه‌گیری. ۱۴۷
- ۵-۲-۵. تکنیک‌های اعتبارسنجی LGO و LOO. ۱۵۳
- ۳-۵. مطالعات (QSPR) روی RI (شاخص بازداری) ترکیبات تشکیل دهنده روغن گیاه PRANGOS
- ۱-۳-۵. مقدمه. ۱۵۷
- ۲-۳-۵. انتخاب داده‌ها. ۱۵۷
- ۳-۳-۵. انتخاب توصیف‌کننده‌ها و مدل‌سازی با روش رگرسیون خطی چندگانه. ۱۶۷
- ۴-۳-۵. نتیجه‌گیری. ۱۶۹
- ۵-۳-۵. تکنیک‌های اعتبارسنجی LGO و LOO. ۱۷۶
- ۴-۵. مطالعات (QSPR) روی مقادیر  $E_{1/2}$  (پتانسیل نیم‌موج) گروهی از ترکیبات آلی. ۱۸۰
- ۱-۴-۵. مقدمه. ۱۸۰
- ۲-۴-۵. انتخاب داده‌ها. ۱۸۰
- ۳-۴-۵. انتخاب توصیف‌کننده‌ها و مدل‌سازی با روش رگرسیون خطی چندگانه. ۱۸۹
- ۴-۴-۵. نتیجه‌گیری. ۱۹۰
- ۵-۴-۵. تکنیک‌های اعتبارسنجی LGO و LOO. ۱۹۷
- ۵-۵. مطالعات (QSPR) روی مقادیر  $\Delta H_f^\circ$  (آنتالپی مولی تشکیل) گروهی از ترکیبات آلی. ۲۰۱
- ۱-۵-۵. مقدمه. ۲۰۱
- ۲-۵-۵. انتخاب داده‌ها. ۲۰۲

۲۱۰	انتخاب توصیف‌کننده‌ها و مدل‌سازی با روش رگرسیون خطی چندگانه
۲۱۱	نتیجه‌گیری
۲۱۹	اعتبارسنجی LGO و LOO
۲۲۳	مطالعات (QSPR) جهت پیش‌بینی ثابت همت ( <i>Hammet Constant</i> ) گروهی از ترکیبات آلی
۲۲۳	مقدمه
۲۲۳	انتخاب داده‌ها
۲۳۲	نتیجه‌گیری
۲۲۷	اعتبارسنجی LGO و LOO

### فصل ششم: نتیجه‌گیری و پیشنهادات

۲۴۲	بهبودسازی شرایط
۲۴۳	وابستگی ضرایب جذب مولی کمپلکس به قدرت یونی
۲۴۳	نسبت‌های استوکیومتری فلز- لیگاند
۲۴۴	وابستگی ثابت‌های تشکیل به قدرت یونی
۲۴۵	بحث و نتیجه‌گیری
۲۴۶	بررسی ارتباط توصیف‌کننده‌های ساختاری وارد شده در مدل با $pK_a$ مولکول‌ها
۲۴۶	بررسی ارتباط توصیف‌کننده‌های ساختاری وارد شده در مدل با مقادیر RI ترکیبات تشکیل دهنده‌ی اسانس گیاه بابونه‌ی شیرازی
۲۴۶	بررسی ارتباط توصیف‌کننده‌های ساختاری وارد شده در مدل با مقادیر RI ترکیبات تشکیل دهنده‌ی روغن گیاه <i>PRANGOS ASPERULA</i>
۲۴۷	بررسی ارتباط توصیف‌کننده‌های ساختاری وارد شده در مدل با مقادیر $E_{1/2}$ (پتانسیل نیم-موج) ترکیبات آلی
۲۴۸	بررسی ارتباط توصیف‌کننده‌های ساختاری وارد شده در مدل با مقادیر $\Delta H_f^\circ$
۲۴۸	بررسی ارتباط توصیف‌کننده‌های ساختاری وارد شده در مدل با مقادیر ثابت هامت (HC)
۲۴۸	
۲۴۹	فهرست منابع فارسی
۲۵۱	فهرست منابع غیر فارسی
۲۵۴	فهرست سایت‌ها
۲۵۵	کلید واژه
۲۵۸	چکیده‌ی لاتین

## فهرست جدول‌ها

صفحه	عنوان
۶	۱-۱. جدول: لایه‌های الکترونی عناصر گروه پلاتین
۷	۲-۱. جدول: ایزوتوپ‌های پالادیم
۹	۳-۱. جدول: فلزات گروه پلاتین
۱۴	۴-۱. جدول: خواص عمومی پالادیم
۱۴	۵-۱. جدول: تغییرات فشار بخار پالادیم با دما
۱۵	۶-۱. جدول: خواص فیزیکی پالادیم
۱۵	۷-۱. جدول: خواص اتمی پالادیم
۱۶	۸-۱. جدول: سایر خواص پالادیم
۱۶	۹-۱. جدول: مشخصات لیگاندهای مورد استفاده در این تحقیق
۲۱	۱-۲. جدول: مشخصات کمپلکس‌های مربع مسطح
۲۲	۲-۲. جدول: تعدادی از بازها و اسیدهای نرم
۳۳	۳-۲. جدول: خواص فیزیکی و شیمیایی تریتون ۱۰۰-X
۴۴	۱-۳. جدول: مواد مورد استفاده
۴۷	۲-۳. جدول: اثر pH بر جذب کمپلکس پالادیم (II)-۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول
۴۸	۳-۳. جدول: اثر مقدار تریتون ۱۰۰-X بر جذب کمپلکس پالادیم (II)-۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول در طول موج ۶۰۱ نانومتر
۴۹	۴-۳. جدول: اثر زمان بر جذب کمپلکس پالادیم (II)-۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول در طول موج ۶۰۱ نانومتر
۵۰	۵-۳. جدول: اثر سرعت روبش طول موج بر جذب کمپلکس پالادیم (II)-۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول
۵۲	۶-۳. جدول: ترکیب بال‌های روش جاب کمپلکس پالادیم (II)-۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول
۵۳	۷-۳. جدول: داده‌های جذبی روش جاب در مورد کمپلکس پالادیم (II)-۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول در طول موج ۶۰۱ نانومتر و در قدرت‌های یونی مختلف
۵۴	۸-۳. جدول: داده‌های جذبی روش نسبت مولی در مورد کمپلکس پالادیم (II)-۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول در قدرت یونی ۰/۱ مول بر لیتر از پتاسیم کلرید
۵۵	۹-۳. جدول: ضرایب جذب مولی کمپلکس پالادیم (II)-۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول در طول موج ۶۰۱ نانومتر و در قدرت‌های یونی مختلف
۶۰	۱۰-۳. جدول: مقادیر ثابت‌های تشکیل کمپلکس پالادیم (II)-۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول در طول موج ۶۰۱ نانومتر و در قدرت‌های یونی مختلف
۶۱	۱۱-۳. جدول: ثوابت تشکیل تصحیح شده در قدرت‌های یونی مختلف برای کمپلکس پالادیم (II)-۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول
۶۳	۱۲-۳. جدول: مواد مورد استفاده
۶۶	۱۳-۳. جدول: اثر pH بر جذب کمپلکس پالادیم (II)-۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول

۱۴-۳ . جدول: اثر مقدار تریتون ۱۰۰ - X بر جذب کمپلکس پالادیم (II)-۵و۱- دی فنیل کاربازون در طول موج ۶۱۵ نانومتر .....	۶۷
۱۵-۳ . جدول: اثر مقدار اتانول بر جذب کمپلکس پالادیم (II)-۵و۱- دی فنیل کاربازون .....	۶۸
۱۶-۳ . جدول: اثر زمان بر جذب کمپلکس پالادیم (II)-۵و۱- دی فنیل کاربازون .....	۶۹
۱۷-۳ . جدول: اثر سرعت روبش طول موج بر جذب کمپلکس پالادیم (II)-۵و۱- دی فنیل کاربازون .....	۷۰
۱۸-۳ . جدول: ترکیب بالن‌های روش جاب کمپلکس پالادیم (II)-۵و۱- دی فنیل کاربازون .....	۷۱
۱۹-۳ . جدول: داده‌های جذبی روش جاب در مورد کمپلکس پالادیم (II)-۵و۱- دی فنیل کاربازون در طول موج ۶۱۵ نانومتر و در قدرت‌های یونی مختلف .....	۷۲
۲۰-۳ . جدول: داده‌های جذبی روش نسبت مولی در مورد کمپلکس پالادیم (II)-۵و۱- دی فنیل کاربازون در قدرت یونی ۰/۱ مول بر لیتر از پتاسیم کلرید .....	۷۳
۲۱-۳ . جدول: ضرایب جذب مولی کمپلکس پالادیم (II)-۵و۱- دی فنیل کاربازون در طول موج ۶۱۵ نانومتر و در قدرت‌های یونی مختلف .....	۷۴
۲۲-۳ . جدول: مقادیر ثابت‌های تشکیل کمپلکس پالادیم (II)-۵و۱- دی فنیل کاربازون در طول موج ۶۱۵ نانومتر و در قدرت‌های یونی مختلف .....	۷۹
۲۳-۳ . جدول: مقادیر لگاریتم ثابت‌های تشکیل کمپلکس پالادیم (II)-۵و۱- دی فنیل کاربازون در طول موج ۶۱۵ نانومتر و در قدرت‌های یونی مختلف .....	۷۹
۲۴-۳ . جدول: ثوابت تشکیل تصحیح شده در قدرت‌های یونی مختلف برای کمپلکس پالادیم (II)-۵و۱- دی فنیل کاربازون .....	۸۰
۲۵-۳ . جدول: مواد مورد استفاده .....	۸۲
۲۶-۳ . جدول: اثر pH بر جذب کمپلکس پالادیم (II)-سدیم دی‌اتیل دی‌تیو کاربامات .....	۸۵
۲۷-۳ . جدول: اثر مقدار تریتون ۱۰۰ - X بر جذب کمپلکس پالادیم (II)-سدیم دی‌اتیل دی‌تیو کاربامات در طول موج ۳۱۰ نانومتر .....	۸۶
۲۸-۳ . جدول: اثر مقدار اتانول بر جذب کمپلکس پالادیم (II)-سدیم دی‌اتیل دی‌تیو کاربامات .....	۸۸
۲۹-۳ . جدول: اثر زمان بر جذب کمپلکس پالادیم (II)-سدیم دی‌اتیل دی‌تیو کاربامات .....	۸۹
۳۰-۳ . جدول: اثر سرعت روبش طول موج بر جذب کمپلکس پالادیم (II)-سدیم دی‌اتیل دی‌تیو کاربامات .....	۹۰
۳۱-۳ . جدول: ترکیب بالن‌های روش جاب کمپلکس پالادیم (II)-سدیم دی‌اتیل دی‌تیو کاربامات .....	۹۱
۳۲-۳ . جدول: داده‌های جذبی روش جاب در مورد کمپلکس پالادیم (II)-۵و۱- دی فنیل کاربازون در طول موج ۶۱۵ نانومتر و در قدرت‌های یونی مختلف .....	۹۲
۳۳-۳ . جدول: داده‌های جذبی روش نسبت مولی در مورد کمپلکس پالادیم (II)-سدیم دی‌اتیل دی‌تیو کاربامات در قدرت یونی ۰/۱ مول بر لیتر از پتاسیم کلرید .....	۹۳
۳۴-۳ . جدول: ضرایب جذب مولی کمپلکس پالادیم (II)-سدیم دی‌اتیل دی‌تیو کاربامات در طول موج ۳۱۰ نانومتر و در قدرت‌های یونی مختلف .....	۹۴
۳۵-۳ . جدول: مقادیر ثابت‌های تشکیل کمپلکس پالادیم (II)-سدیم دی‌اتیل دی‌تیو کاربامات در طول موج ۳۱۰ نانومتر و در قدرت‌های یونی مختلف .....	۹۹

- ۳۶-۳. جدول: مقادیر لگاریتم ثابت‌های تشکیل کمپلکس پالادیم (II)-سدیم دی‌اتیل دی‌تیو کاربامات در طول موج ۳۱۰ نانومتر و در قدرت‌های یونی مختلف ..... ۱۰۰
- ۳۷-۳. جدول: ثوابت تشکیل تصحیح شده در قدرت‌های یونی مختلف برای کمپلکس پالادیم (II)-سدیم دی‌اتیل دی‌تیو کاربامات ..... ۱۰۰
- ۱-۴. جدول: تعدادی از پارامترهای آماری ..... ۱۰۹
- ۱-۵. جدول: ساختار، نام و مقادیر  $pK_a$  ترکیبات، سری داده‌ها ..... ۱۱۸
- ۲-۵. جدول: مشخصات مدل منتخب توسط روش رگرسیون خطی چندگانه ..... ۱۲۵
- ۳-۵. جدول: ماتریس همبستگی توصیف‌کننده‌های وارد شده در مدل منتخب ..... ۱۲۶
- ۴-۵. جدول: مقادیر تجربی  $pK_a$  و مقادیر پیش‌بینی شده آن توسط تکنیک رگرسیون خطی چندگانه ..... ۱۲۸
- ۵-۵. جدول: مقادیر توصیف‌کننده‌های وارد شده در مدل ..... ۱۳۰
- ۶-۵. جدول: مقایسه مقادیر  $pK_a$  تجربی و مقادیر حاصل از اعمال تکنیک LGO و LOO ..... ۱۳۲
- ۷-۵. جدول: مقادیر عددی پارامترهای آماری ..... ۱۳۵
- ۸-۵. جدول: ساختار، نام و مقادیر RI ترکیبات، سری داده‌ها ..... ۱۳۶
- ۹-۵. جدول: نام، علامت، ضرائب رگرسیون و اثرات متوسط نسبی هر توصیف‌کننده در مدل ارائه شده برای اسانس گیاه بابونه شیرازی ..... ۱۴۵
- ۱۰-۵. جدول: ماتریس همبستگی توصیف‌کننده‌های وارد شده در مدل منتخب ..... ۱۴۶
- ۱۱-۵. جدول: مقادیر تجربی RI و مقادیر پیش‌بینی شده آن توسط تکنیک رگرسیون خطی چندگانه ..... ۱۴۹
- ۱۲-۵. جدول: مقادیر توصیف‌کننده‌های وارد شده در مدل ..... ۱۵۱
- ۱۳-۵. جدول: مقایسه مقادیر RI تجربی و مقادیر حاصل از اعمال تکنیک LGO و LOO ..... ۱۵۴
- ۱۴-۵. جدول: مقادیر عددی پارامترهای آماری ..... ۱۵۶
- ۱۵-۵. جدول: ساختار، نام و مقادیر RI ترکیبات، سری داده‌ها ..... ۱۵۷
- ۱۶-۵. جدول: مشخصات مدل منتخب توسط روش رگرسیون خطی چندگانه ..... ۱۶۸
- ۱۷-۵. جدول: ماتریس همبستگی توصیف‌کننده‌های وارد شده در مدل منتخب ..... ۱۶۹
- ۱۸-۵. جدول: مقادیر تجربی RI و مقادیر پیش‌بینی شده آن توسط تکنیک رگرسیون خطی چندگانه ..... ۱۷۱
- ۱۹-۵. جدول: مقادیر توصیف‌کننده‌های وارد شده در مدل ..... ۱۷۳
- ۲۰-۵. جدول: مقایسه مقادیر RI تجربی و مقادیر حاصل از اعمال تکنیک LGO و LOO ..... ۱۷۶
- ۲۱-۵. جدول: مقادیر عددی پارامترهای آماری ..... ۱۷۹
- ۲۲-۵. جدول: ساختار، نام و مقادیر  $E_{1/2}$  ترکیبات، سری داده‌ها ..... ۱۸۱
- ۲۳-۵. جدول: مشخصات مدل منتخب توسط روش رگرسیون خطی چندگانه ..... ۱۸۹
- ۲۴-۵. جدول: ماتریس همبستگی توصیف‌کننده‌های وارد شده در مدل منتخب ..... ۱۹۰
- ۲۵-۵. جدول: مقادیر تجربی  $E_{1/2}$  و مقادیر پیش‌بینی شده آن توسط تکنیک رگرسیون خطی چندگانه ..... ۱۹۲
- ۲۶-۵. جدول: مقادیر توصیف‌کننده‌های وارد شده در مدل ..... ۱۹۶
- ۲۷-۵. جدول: مقایسه مقادیر  $E_{1/2}$  تجربی و مقادیر حاصل از اعمال تکنیک LGO و LOO ..... ۱۹۸
- ۲۸-۵. جدول: مقادیر عددی پارامترهای آماری ..... ۲۰۰
- ۲۹-۵. جدول: ساختار، نام و مقادیر  $\Delta H_f^\circ$  ترکیبات، سری داده‌ها ..... ۲۰۱

- ۳۰-۵. جدول: مشخصات مدل منتخب توسط روش رگرسیون خطی چندگانه ..... ۲۱۱
- ۳۱-۵. جدول: ماتریس همبستگی توصیف‌کننده‌های وارد شده در مدل منتخب ..... ۲۱۱
- ۳۲-۵. جدول: مقادیر تجربی  $\Delta H_f^\circ$  و مقادیر پیش‌بینی‌شده آن توسط تکنیک رگرسیون خطی چندگانه ..... ۲۱۳
- ۳۳-۵. جدول: مقادیر توصیف‌کننده‌های وارد شده در مدل ..... ۲۱۶
- ۳۴-۵. جدول: مقایسه مقادیر  $\Delta H_f^\circ$  تجربی و مقادیر حاصل از اعمال تکنیک LGO و LOO ..... ۲۱۹
- ۳۵-۵. جدول: مقادیر عددی پارامترهای آماری ..... ۲۲۲
- ۳۶-۵. جدول: ساختار، نام و مقادیر ثابت هامت ترکیبات، سری داده‌ها ..... ۲۲۴
- ۳۷-۵. جدول: مشخصات مدل منتخب توسط روش رگرسیون خطی چندگانه ..... ۲۳۱
- ۳۸-۵. جدول: ماتریس همبستگی توصیف‌کننده‌های وارد شده در مدل منتخب ..... ۲۳۲
- ۳۹-۵. جدول: مقادیر تجربی ثابت هامت و مقادیر پیش‌بینی‌شده آن توسط تکنیک رگرسیون خطی چندگانه ..... ۲۳۴
- ۴۰-۵. جدول: مقادیر توصیف‌کننده‌های وارد شده در مدل ..... ۲۳۶
- ۴۱-۵. جدول: مقایسه مقادیر ثابت هامت تجربی و مقادیر حاصل از اعمال تکنیک LGO و LOO ..... ۲۳۸
- ۴۲-۵. جدول: مقادیر عددی پارامترهای آماری ..... ۲۴۰
- ۱-۶. جدول: ویژگی‌های مولکولی مؤثر روی مقدار  $pK_a$  مولکول ..... ۲۴۶
- ۲-۶. جدول: ویژگی‌های مولکولی مؤثر روی مقدار RI مولکول ..... ۲۴۶
- ۳-۶. جدول: ویژگی‌های مولکولی مؤثر روی مقدار RI مولکول ..... ۲۴۷
- ۴-۶. جدول: ویژگی‌های مولکولی مؤثر روی مقدار  $E_{1/2}$  مولکول ..... ۲۴۷
- ۵-۶. جدول: ویژگی‌های مولکولی مؤثر روی مقدار  $\Delta H_f^\circ$  مولکول ..... ۲۴۸
- ۶-۶. جدول: ویژگی‌های مولکولی مؤثر روی مقدار ثابت هامت مولکول ..... ۲۴۸

## فهرست نمودارها

عنوان	صفحه
۱-۳. نمودار: طیف‌های جذبی لیگاند ۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول، و کمپلکس پالادیم (II)-۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول در نسبت‌های حجمی مختلف لیگاند	۴۵.....
۲-۳. نمودار: طیف جذبی: (a) ۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول، (b) کمپلکس پالادیم (II)-۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول	۴۶.....
۳-۳. نمودار: اثر pH بر جذب کمپلکس پالادیم (II)-۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول در طول موج ۶۰۱ نانومتر	۴۷.....
۳-۴. نمودار: اثر مقدار تریتون-۱۰۰ - X بر جذب کمپلکس پالادیم (II)-۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول در طول موج ۶۰۱ نانومتر	۴۸.....
۳-۵. نمودار: اثر زمان بر جذب کمپلکس پالادیم (II)-۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول در طول موج ۶۰۱ نانومتر	۵۰.....
۳-۶. نمودار: منحنی‌های روش جاب در مورد کمپلکس پالادیم (II)-۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول در طول موج ۶۰۱ نانومتر و در قنرت‌های یونی (۰/۱ و ۰/۵) پتاسیم کلرید	۵۳.....
۳-۷. نمودار: منحنی روش نسبت مولی در مورد کمپلکس پالادیم (II)-۴- (۲- پیریدیل آزو)- رزورسینول در طول موج ۶۰۱ نانومتر	۵۴.....
۳-۸. نمودار: طیف‌های جذبی لیگاند ۵ا و ۵ب- دی‌فنیل کاربازون و پالادیم (II)- ۵ا و ۵ب- دی‌فنیل کاربازون در نسبت‌های حجمی مختلف لیگاند	۶۴.....
۳-۹. نمودار: (a) ۵ا و ۵ب- دی‌فنیل کاربازون، (b) کمپلکس پالادیم (II)- ۵ا و ۵ب- دی‌فنیل کاربازون	۶۵.....
۳-۱۰. نمودار: اثر pH بر جذب کمپلکس پالادیم (II)- ۵ا و ۵ب- دی‌فنیل کاربازون در طول موج ۶۱۵ نانومتر	۶۶.....
۳-۱۱. نمودار: اثر مقدار تریتون-۱۰۰ - X بر جذب کمپلکس پالادیم (II)- ۵ا و ۵ب- دی‌فنیل کاربازون در طول موج ۶۱۵ نانومتر	۶۷.....
۳-۱۲. نمودار: اثر مقدار اتانول بر جذب کمپلکس پالادیم (II)- ۵ا و ۵ب- دی‌فنیل کاربازون در طول موج ۶۱۵ نانومتر	۶۸.....
۳-۱۳. نمودار: اثر زمان بر جذب کمپلکس پالادیم (II)- ۵ا و ۵ب- دی‌فنیل کاربازون در طول موج ۶۱۵ نانومتر	۷۰.....
۳-۱۴. نمودار: منحنی‌های روش جاب در مورد کمپلکس پالادیم (II)- ۵ا و ۵ب- دی‌فنیل کاربازون در طول موج ۶۱۵ نانومتر و در قدرت‌های یونی (۰/۱ و ۰/۵) پتاسیم کلرید	۷۲.....
۳-۱۵. نمودار: منحنی روش نسبت مولی در مورد کمپلکس پالادیم (II)- ۵ا و ۵ب- دی‌فنیل کاربازون در طول موج ۶۱۵ نانومتر	۷۳.....
۳-۱۶. نمودار: طیف‌های جذبی لیگاند سدیم دی‌اتیل دی‌تیو کاربامات و کمپلکس پالادیم(II)- سدیم دی-اتیل دی‌تیو کاربامات در نسبت‌های حجمی مختلف لیگاند	۸۴.....

- ۳-۱۷. نمودار: (a) سدیم دی‌اتیل دی‌تیو کاربامات ، (b) کمپلکس پالادیم(II) - سدیم دی‌اتیل دی‌تیو کاربامات ..... ۸۴
- ۳-۱۸. نمودار: اثر pH بر جذب کمپلکس پالادیم(II) - سدیم دی‌اتیل دی‌تیو کاربامات در طول موج ۳۱۰ نانومتر ..... ۸۶
- ۳-۱۹. نمودار: اثر مقدار تریتون ۱۰۰ - X بر جذب کمپلکس پالادیم(II) - سدیم دی‌اتیل دی‌تیو کاربامات در طول موج ۳۱۰ نانومتر ..... ۸۷
- ۳-۲۰. نمودار: اثر مقدار اتانول بر جذب کمپلکس پالادیم(II) - سدیم دی‌اتیل دی‌تیو کاربامات در طول موج ۳۱۰ نانومتر ..... ۸۸
- ۳-۲۱. نمودار: اثر زمان بر جذب کمپلکس پالادیم(II) - سدیم دی‌اتیل دی‌تیو کاربامات در طول موج ۳۱۰ نانومتر ..... ۸۹
- ۳-۲۲. نمودار: منحنی‌های روش جاب در مورد کمپلکس پالادیم(II) - سدیم دی‌اتیل دی‌تیو کاربامات در طول موج ۳۱۰ نانومتر و در قدرت‌های یونی (۰/۱ و ۰/۵) پتاسیم کلرید ..... ۹۳
- ۳-۲۳. نمودار: منحنی روش نسبت مولی در مورد کمپلکس پالادیم(II) - سدیم دی‌اتیل دی‌تیو کاربامات در طول موج ۳۱۰ نانومتر ..... ۹۴
- ۵-۱. نمودار: منحنی مقادیر ضریب اندازه‌گیری به‌عنوان تابعی از تعداد توصیف‌کننده‌های محاسبه شده توسط روش MLR ..... ۱۲۵
- ۵-۲. نمودار: منحنی مقادیر  $pK_a$  محاسبه شده توسط روش MLR در مقابل مقادیر تجربی ..... ۱۲۷
- ۵-۳. نمودار: منحنی مقادیر باقی‌مانده محاسبه شده توسط روش MLR در مقابل  $pK_a$  تجربی ..... ۱۲۷
- ۵-۴. نمودار: نمایش میزان تأثیر توصیف‌کننده‌های منتخب در مدل ..... ۱۲۸
- ۵-۵. نمودار: منحنی مقادیر  $pK_a$  محاسبه شده توسط تکنیک LGO در مقابل مقادیر تجربی ..... ۱۳۴
- ۵-۶. نمودار: منحنی مقادیر  $pK_a$  محاسبه شده توسط تکنیک LOO در مقابل مقادیر تجربی ..... ۱۳۴
- ۵-۷. نمودار: منحنی مقادیر ضریب اندازه‌گیری به‌عنوان تابعی از تعداد توصیف‌کننده‌های محاسبه شده توسط روش MLR ..... ۱۴۵
- ۵-۸. نمودار: منحنی مقادیر RI محاسبه شده توسط روش MLR در مقابل مقادیر تجربی ..... ۱۴۷
- ۵-۹. نمودار: منحنی مقادیر باقی‌مانده محاسبه شده توسط روش MLR در مقابل RI تجربی ..... ۱۴۸
- ۵-۱۰. نمودار: نمایش میزان تأثیر توصیف‌کننده‌های منتخب در مدل ..... ۱۴۸
- ۵-۱۱. نمودار: منحنی مقادیر RI محاسبه شده توسط تکنیک LGO در مقابل مقادیر تجربی ..... ۱۵۶
- ۵-۱۲. نمودار: منحنی مقادیر RI محاسبه شده توسط تکنیک LOO در مقابل مقادیر تجربی ..... ۱۵۶
- ۵-۱۳. نمودار: منحنی مقادیر ضریب اندازه‌گیری به‌عنوان تابعی از تعداد توصیف‌کننده‌های محاسبه شده توسط روش MLR ..... ۱۶۷
- ۵-۱۴. نمودار: منحنی مقادیر RI محاسبه شده توسط روش MLR در مقابل مقادیر تجربی ..... ۱۶۹
- ۵-۱۵. نمودار: منحنی مقادیر باقی‌مانده محاسبه شده توسط روش MLR در مقابل RI تجربی ..... ۱۷۰
- ۵-۱۶. نمودار: نمایش میزان تأثیر توصیف‌کننده‌های منتخب در مدل ..... ۱۷۰
- ۵-۱۷. نمودار: منحنی مقادیر RI محاسبه شده توسط تکنیک LGO در مقابل مقادیر تجربی ..... ۱۷۸
- ۵-۱۸. نمودار: منحنی مقادیر RI محاسبه شده توسط تکنیک LOO در مقابل مقادیر تجربی ..... ۱۷۸



- ۱۹-۵. نمودار: منحنی مقادیر ضریب اندازه‌گیری به‌عنوان تابعی از تعداد توصیف‌کننده‌های محاسبه شده توسط روش MLR ..... ۱۸۹
- ۲۰-۵. نمودار: منحنی مقادیر  $E_{1/2}$  محاسبه شده توسط روش MLR در مقابل مقادیر تجربی ..... ۱۹۱
- ۲۱-۵. نمودار: منحنی مقادیر باقی‌مانده محاسبه شده توسط روش MLR در مقابل  $E_{1/2}$  تجربی ..... ۱۹۱
- ۲۲-۵. نمودار: نمایش میزان تأثیر توصیف‌کننده‌های منتخب در مدل ..... ۱۹۲
- ۲۳-۵. نمودار: منحنی مقادیر  $E_{1/2}$  محاسبه شده توسط تکنیک LGO در مقابل مقادیر تجربی ..... ۲۰۰
- ۲۴-۵. نمودار: منحنی مقادیر  $E_{1/2}$  محاسبه شده توسط تکنیک LOO در مقابل مقادیر تجربی ..... ۲۰۰
- ۲۵-۵. نمودار: منحنی مقادیر ضریب اندازه‌گیری به‌عنوان تابعی از تعداد توصیف‌کننده‌های محاسبه شده توسط روش MLR ..... ۲۱۰
- ۲۶-۵. نمودار: منحنی مقادیر  $\Delta H_f^\circ$  محاسبه شده توسط روش MLR در مقابل مقادیر تجربی ..... ۲۱۲
- ۲۷-۵. نمودار: منحنی مقادیر باقی‌مانده محاسبه شده توسط روش MLR در مقابل  $\Delta H_f^\circ$  تجربی ..... ۲۱۲
- ۲۸-۵. نمودار: نمایش میزان تأثیر توصیف‌کننده‌های منتخب در مدل ..... ۲۱۳
- ۲۹-۵. نمودار: منحنی مقادیر  $\Delta H_f^\circ$  محاسبه شده توسط تکنیک LGO در مقابل مقادیر تجربی ..... ۲۲۱
- ۳۰-۵. نمودار: منحنی مقادیر  $\Delta H_f^\circ$  محاسبه شده توسط تکنیک LOO در مقابل مقادیر تجربی ..... ۲۲۲
- ۳۱-۵. نمودار: منحنی مقادیر HC محاسبه شده توسط روش MLR در مقابل ثابت‌های هامت ..... ۲۳۲
- ۳۲-۵. نمودار: منحنی مقادیر باقی‌مانده محاسبه شده توسط روش MLR در مقابل ثابت‌های هامت ..... ۲۳۳
- ۳۳-۵. نمودار: نمایش میزان تأثیر توصیف‌کننده‌های منتخب در مدل ..... ۲۳۳
- ۳۴-۵. نمودار: منحنی مقادیر HC محاسبه شده توسط تکنیک LGO در مقابل مقادیر تجربی ..... ۲۳۹
- ۳۵-۵. نمودار: منحنی مقادیر HC محاسبه شده توسط تکنیک LOO در مقابل مقادیر تجربی ..... ۲۳۹
- ۱-۶. نمودار: لگاریتم ثابت‌های تشکیل کمپلکس پالادیم(II) - ۴ - (۲-پیریدیل آزو) - رزورسینول بر حسب ریشه‌ی دوم قدرت یونی در طول موج ۶۰۱ نانومتر ..... ۲۴۴
- ۲-۶. نمودار: لگاریتم ثابت‌های تشکیل کمپلکس پالادیم(II) - ۱ و ۵ - دی‌فنیل کاربازون بر حسب ریشه‌ی دوم قدرت یونی در طول موج ۶۱۵ نانومتر ..... ۲۴۵
- ۳-۶. نمودار: لگاریتم ثابت‌های تشکیل کمپلکس پالادیم(II) - سدیم دی‌اتیل دی‌تیوکاربامات بر حسب ریشه‌ی دوم قدرت یونی در طول موج ۳۱۰ نانومتر ..... ۲۴۵

## فهرست شکل‌ها

صفحه	عنوان
۴	۱-۱ شکل: فلز پالادیم
۶	۲-۱ شکل: ساختار الکترونی پالادیم
۱۱	۳-۱ شکل: ساختار ناپایدار $PdCl_2$
۱۱	۴-۱ شکل: ساختار پایدار $PdCl_2$
۱۱	۵-۱ شکل: موارد استفاده پالادیم
۳۱	۱-۲ شکل: مسیل‌ها در آب
۳۲	۲-۲ شکل: طرز عمل میسل
۳۳	۳-۲ شکل: ساختار تریتون ۱۰۰ - X
۳۴	۴-۲ شکل: منحنی تغییرات پیوسته
۳۴	۵-۲ شکل: منحنی نسبت مولی
۴۲	۱-۳ شکل طیف حاصل از دستگاه Perkin-Elmer
۴۳	۲-۳ شکل: ساختار لیگاند ۴- (۲- پیریدیل‌آزو)- رزورسینول
۶۲	۳-۳ شکل: ساختار لیگاند ۱و۵- دی فنیل کاربازون
۸۱	۴-۳ شکل: ساختار لیگاند سدیم دی‌اتیل دی‌تیو کابامات سه آبه (Na.DTC)

## چکیده:

بخش اول این پایان‌نامه، به روند تشکیل کمپلکس بین پالادیم (II) با لیگاندهای، ۴- (۲-پیریدیل آزو)- رزورسینول (PAR)، ۱ و ۵- دی‌فنیل کاربازون (DPC) و سدیم دی‌اتیل دی‌تیو کاربامات (Na-DTC) در محیط‌های مختلف آبی، الکلی و میسل غیر یونی با استفاده از روش اسپکتروفوتومتری مرئی- فرابنفش اختصاص دارد. کمپلکس- های تشکیل شده در این تحقیق، در محیط آبی، کم‌محلول اما در حلال‌های آلی مانند اتانول محلول می‌باشند. در این تحقیق برای انحلال بیشتر کمپلکس‌های تشکیل شده، از تریتون ۱۰۰- X ( یک سورفاکتانت غیر یونی)، استفاده شده است. در ابتدا، پارامترهای مؤثر بر جذب کمپلکس‌ها بهینه، سپس روش‌های تغییرات پیوسته (جاب) و نسبت مولی در طول موج‌ها و قدرت‌های یونی مختلف اجرا گردید. با استفاده از اطلاعات بدست آمده، نسبت استوکیومتری لیگاند به فلز در کمپلکس‌های Pd:PAR، Pd:DPC و Pd:Na-DTC در حضور انواع مختلف نمک‌های زمینه در گستره‌ی قدرت‌های یونی مختلف، به ترتیب معادل ۱:۱، ۱:۲ و ۱:۳ حاصل شد. در انتها با استفاده از مقدار جذب کمپلکس‌ها در نقطه‌ی ماکزیمم منحنی‌های روش جاب، نسبت استوکیومتری فلز به لیگاند، و معلوم بودن ضرایب جذب مولی، ثوابت تشکیل کمپلکس‌های تشکیل شده محاسبه و معلوم شد که با تغییر قدرت یونی، ثابت‌های تشکیل با روند مشخص تغییر می‌کنند. در بخش دوم، مدل‌سازی و پیش-بینی ویژگی‌های برخی از ترکیبات آلی، بر مبنای مطالعات ارتباط کمی ساختار-ویژگی (QSPR) صورت گرفته است. در ابتدا مولکول‌هایی به عنوان سری داده‌ها انتخاب، و سپس به منظور اعمال تکنیک‌های اعتبارسنجی، به دو سری آموزش و آزمون تقسیم شدند. به کمک روش‌های انتخاب متغیر، توصیف‌کننده‌های مولکولی مهم‌تر، انتخاب و توسط روش رگرسیون خطی چندگانه مدل‌سازی انجام شد. نتیجه‌ی بررسی‌ها نشان از توانایی پیشگویی بالای روش رگرسیون خطی چندگانه دارد. کلمات کلیدی: ثابت تشکیل، قدرت یونی، روش جاب، روش نسبت مولی، QSPR، توصیف‌کننده‌های مولکولی، انتخاب متغیر، روش رگرسیون خطی چندگانه (MLR).

# فصل اول:

پالادیم و کاربردهای آن در زندگی و صنعت