



دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکده شیمی

سنتز و شناسایی لیگاندهای کربوکسامیدی سه دندانه و چهار دندانه  
H<sub>2</sub>bqbza و Hbpq با ساختار نامتقارن به روش مایع یونی و کمپلکس‌های  
Ni(II) و Cu(II)

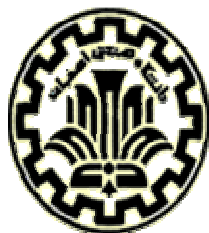
پایان‌نامه کارشناسی ارشد رشته شیمی معدنی

زهرا موسوی زاده مبارکه

استاد راهنما

دکتر مهدی امیرنصر

سرکار خانم ثریا مقدادی



دانشگاه صنعتی اصفهان

دانشکده شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد رشته شیمی معدنی خانم زهرا موسوی زاده مبارکه

تحت عنوان

**سنتز و شناسایی لیگاندهای کربوکسامیدی سه دندانه و چهار دندانه  
Hbpq و H<sub>2</sub>bqba با ساختار نامتقارن به روش مایع یونی و کمپلکس‌های  
Ni(II) و Cu(II)**

در تاریخ ۱۳۸۹/۱۲/۱۱ توسط کمیته تخصصی زیر مورد بررسی و تصویب نهایی قرار گرفت.

- |                          |                             |
|--------------------------|-----------------------------|
| دکتر مهدی امیرنصر        | ۱- استاد راهنمای پایان نامه |
| سرکار خانم ثریا مقدادی   | ۲- استاد راهنمای پایان نامه |
| دکتر شهرام تنگستانی نژاد | ۴- استاد داور               |
| دکتر کاظم کرمی           | ۵- استاد داور               |
| دکتر بیژن نجفی           | سرپرست تحصیلات تکمیلی       |

# شکر و قدردانی

دورانی دیگر در پس ایام گذشته سپری شد در این مسیر از دبستان تا حال دیدگانمان در پی نقش آفرینی قلم بندگی را تجربه می نمود، خواه خود دانستیم یا ندانستیم! شاید این بود دلیل قسم خدا به قلم و آنچه می نویسد (ن والقلم و ما یسطرون). اندیشه هایمان در همه حالات (قیاما و قعودا و علی جنوبهم) همجوار قلم شدند و پرگار اندیشه لحظه به لحظه به دور آنچه تراوش باطنی و دررونی است خط می کشید تا لیاقت حضور دانش را پیدا نماییم. ولی دانش با عنایت بود نه با لیاقت. عنایتی که از طرف پروردگار بر ما ارزانی می شود تا ما نیز در ساحل اقیانوس معرفت تجربه لمس سنگ ریزه های دانش را داشته باشیم و هر یک پیوسته بدنبال گمشده خویش که همان نور الهی است تا جمله جانان شویم. سجده شکر تنها سرمایه ماست که آنرا بر سجاده دل می نهیم تا "إن اقرب من الجبل الوریث" را با جان احساس کنیم.

آفریدگارا! بوسه بر دستان پر مهرت می ززم دستانی که تجلی اش جز دستان با شهامت پدر و با لطافت مادرم نیست، واز تو والاترین سرور و نیکویی را برای آنها خواستارم. خالقا! حمایت های مهربانه همسر در این چند ماه، آرامش جان و دل را برایم به ارمغان داشت و تکیه گاهی را در وجودم ایجاد نمود تا آینده را با تدبیر بیشتر بنگرم و با تلاش بسوی آن بشتابم. از تو می خواهم شادمانی را در زندگیش جاودانه نمایم.

معبودا! نجوای محبت تو، از طنین اساتیدم پیوسته به جانم می رسد و هدایت را در ظلمات شب برایم به ارمغان می آورد، سعادتت جاودانه به همه آنان عنایت فرما. اساتید راهنما جناب آقای دکتر مهدی امیرنصرو سرکار خانم مقدادی که،

دانیان، علم

کلاشان، روشانی

و نگار دیشان، غرور برابریم به همراه داشت.

اساتید داور جناب آقای دکتر شهرام تنگستانی نژاد و جناب آقای دکتر کاظم کرمی که با خواندن این پایان نامه، مرا با نقطه نظرات ارزنده ی خویش آشنا نمودند.

پروردگارا! سپاس گویم وجود دوستان و همراهان را که گویی هر یک دست یاری تو بودند و نور امید را در دلهای آنان فروزان نگهدار و کامیابشان گردان.

الهی ما را انسانهایی قرار ده که به رسیدن تن نمی دهند، خود را می خوانند و اجازه به پایان نمی دهند ...

کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات،  
ابتکارات و نو آوریهای ناشی از تحقیق موضوع این  
پایان نامه (رساله) متعلق به دانشگاه صنعتی اصفهان است.

تقدیم ہے:

اولین آموزگار ان زندگی

پدر و مادر

و گرانہا ترین کنجہ زندگی

ہم سمر

و منظر صفا و صمیمیت

برادر

## فهرست مطالب

<u>صفحه</u>	<u>عنوان</u>
۱	چکیده
۲	فصل اول دیباچه
۲	۱-۱- مایع های یونی
۳	۱-۱-۱- تاریخچه مایع های یونی
۴	۱-۱-۲- خواص ویژه مایع های یونی
۵	۱-۱-۳- انواع مایع های یونی
۶	۱-۱-۴- مایع های یونی در صنعت
۷	۲-۱- مقدمه ای بر شیمی کئوردیناسیون
۸	۱-۲-۱- پیوند در ترکیبات کئوردیناسیون
۸	۲-۲-۱- نظریه پیوند والانس
۹	۳-۲-۱- نظریه میدان بلور
۱۰	۴-۲-۱- نظریه اوربیتال مولکولی
۱۱	۵-۲-۱- مدل همپوشانی زاویه ای AOM
۱۲	۳-۱- طیف های الکترونی ترکیب های کئوردیناسیون:
۱۲	۱-۳-۱- انتقال های الکترونی درون لیگاند:
۱۳	۱-۳-۱- انتقال های میدان لیگاند:
۱۳	۲-۳-۱- انتقال های الکترونی انتقال بار:
۱۵	۴-۱- ساختار الکترونی کمپلکس های سنتز شده
۱۵	۱-۴-۱- ساختار الکترونی کمپلکس های نیکل (II)
۱۶	۲-۴-۱- ساختار الکترونی کمپلکس های مس (II)
۱۶	۵-۱- کربوکسامیدها
۱۶	۱-۵-۱- مقدمه
۱۸	۲-۵-۱- روش های متداول سنتز لیگاندهای کربوکسامید
۱۸	۳-۵-۱- کاربرد ها
۱۹	۴-۵-۱- شیمی کئوردیناسیون کربوکسامیدها
۲۰	۵-۵-۱- کمپلکس های نیکل کربوکسامید
۲۱	۶-۵-۱- کمپلکس های مس کربوکسامید
۲۲	۶-۱- شیمی شبه هالیدها
۲۲	۱-۶-۱- شیمی آزید
۲۲	۲-۶-۱- شیمی تیوسیانات
۲۳	۷-۱- موضوع تحقیق و ارتباط آن با کارهای قبلی:
۲۹	فصل دوم بخش تجربی
۲۹	۱-۲- مقدمه
۳۰	۲-۲- مشخصات مواد و دستگاههای مورد استفاده
۳۰	۱-۲-۲- مواد و حلالها
۳۰	۲-۲-۲- دستگاهها

۳۱	..... سنتز لیگاند (Hbpq).....	۳-۲
۳۲	..... سنتز کمپلکس [Cu(bpq)NCS].....	۴-۲
۳۳	..... سنتز کمپلکس [Cu(bpq)N <sub>3</sub> ].....	۵-۲
۳۴	..... سنتز کمپلکس [Ni(bpq)SCN].....	۶-۲
۳۵	..... سنتز کمپلکس [Ni(bpq)N <sub>3</sub> ].....	۷-۲
۳۶	..... سنتز لیگاند چهار دندان (H <sub>2</sub> bqbza).....	۸-۲
۳۷	..... سنتز کمپلکس [Cu(bqbza)].....	۹-۲
۳۸	..... فصل سوم بحث و نتیجه گیری .....	
۳۸	..... ۱-۳- مقدمه .....	
۳۸	..... ۲-۳- بررسی روش مایع یونی برای سنتز لیگاند های Hbpq و H <sub>2</sub> bqbza.....	
۳۹	..... ۳-۳- آنالیز عنصری .....	
۳۹	..... ۴-۳- بررسی طیف ارتعاشی لیگاند و کمپلکسهای سنتز شده .....	
۴۱	..... ۱-۴-۳- بررسی طیف ارتعاشی لیگاند Hbpq در حالت آزاد و کئوردینه شده : .....	
۴۲	..... ۲-۴-۳- بررسی طیف ارتعاشی کمپلکس [Cu(bpq)NCS].....	
۴۳	..... ۳-۴-۳- بررسی طیف ارتعاشی کمپلکس [Cu(bpq)N <sub>3</sub> ].....	
۴۴	..... ۴-۴-۳- بررسی طیف ارتعاشی کمپلکس [Ni(bpq)SCN].....	
۴۵	..... ۵-۴-۳- بررسی طیف ارتعاشی کمپلکس [Ni(bpq)N <sub>3</sub> ].....	
۴۶	..... ۶-۴-۳- طیف ارتعاشی لیگاند H <sub>2</sub> bqbza در حالت آزاد و کئوردینه شده : .....	
۴۷	..... ۷-۴-۳- بررسی طیف ارتعاشی کمپلکس [Cu(bqbza)] .....	
۴۸	..... ۵-۳- بررسی طیف الکترونی کمپلکسها.....	
۴۹	..... ۱-۵-۳- بررسی طیف الکترونی لیگاند Hbpq.....	
۵۰	..... ۲-۵-۳- بررسی طیف الکترونی کمپلکس [Cu(bpq)NCS].....	
۵۱	..... ۳-۵-۳- بررسی طیف الکترونی کمپلکس [Cu(bpq)N <sub>3</sub> ].....	
۵۲	..... ۴-۵-۳- بررسی طیف الکترونی کمپلکس [Ni(bpq)SCN].....	
۵۳	..... ۵-۵-۳- بررسی طیف الکترونی کمپلکس [Ni(bpq)N <sub>3</sub> ].....	
۵۴	..... ۶-۵-۳- بررسی طیف الکترونی لیگاند H <sub>2</sub> bqbza.....	
۵۵	..... ۷-۵-۳- بررسی طیف الکترونی کمپلکس [Cu(bqbza)].....	
۵۶	..... ۶-۳- بررسی طیف های <sup>1</sup> H-NMR.....	
۵۶	..... ۱-۶-۳- طیف <sup>1</sup> H- NMR لیگاند Hbpq.....	
۵۹	..... ۲-۶-۳- طیف <sup>1</sup> H- NMR لیگاند H <sub>2</sub> bqbza.....	
۷۰	..... ۷-۳- بررسی ساختار بلوری ترکیبات سنتز شده .....	
۷۰	..... ۱-۷-۳- بررسی ساختار بلوری [Cu(bpq)SCN].....	
۷۳	..... ۲-۷-۳- بررسی ساختار بلوری لیگاند H <sub>2</sub> bqbza.....	
۷۵	..... ۲-۷-۳- بررسی ساختار بلوری [Cu(bqbza)].....	
۷۷	..... ۸-۳- نتیجه گیری : .....	
۷۷	..... ۹-۳- آینده نگری : .....	
۷۸	..... فصل چهارم اطلاعات تکمیلی .....	
۱۱۴	..... منابع: .....	



## فهرست جداول

صفحه	عنوان
۳۹	جدول (۱-۳). نتایج آنالیز عنصری (CHN) لیگاندها و ترکیبات سنتز شده.....
۴۰	جدول (۲-۳). شیوه‌های ارتعاشی مشخص لیگاندها H <sub>2</sub> bqbza و Hbpq.....
۴۰	جدول (۳-۳). شیوه‌های ارتعاشی مهم لیگاندها و کمپلکس‌های سنتز شده.....
۴۸	جدول (۴-۳). مشخصات طیف الکترونی ترکیب‌های سنتز شده در حلال دی‌کلرومتان.....
۵۶	جدول (۵-۳). مشخصات طیف <sup>1</sup> H NMR ترکیبات در حلال CDCl <sub>3</sub> .....
۷۲	جدول (۶-۳) طول پیوند [Å] کمپلکس [Cu(bpq)NCS].....
۷۳	جدول (۷-۳) زاویه پیوند [°] کمپلکس [Cu(bpq)NCS].....
۷۵	جدول (۸-۳) طول پیوند [Å] کمپلکس‌های مشابه با کمپلکس [Cu(bqbza)].....
۷۶	جدول (۹-۳) طول پیوند [Å] کمپلکس [Cu(bqbza)].....
۷۶	جدول (۱۰-۳) زاویه پیوند [°] کمپلکس [Cu(bqbza)].....
۱۰۰	Table 4-1. Crystal data and structure refinement for [Cu(bpq)NCS]
۱۰۱	Table 4-2. Atomic coordinates and equivalent isotropic displacement parameters (Å <sup>2</sup> ) for [Cu(bpq)NCS]
۱۰۲	Table 4-3. Bond lengths [Å] for [Cu(bpq)NCS]
۱۰۲	Table 4-4. Bond angles [°] for [Cu(bpq)NCS]
۱۰۴	Table 4-5. Crystal data and structure refinement for H <sub>2</sub> bqbza
۱۰۵	Table 4-6. Atomic coordinates and equivalent isotropic displacement parameters (Å <sup>2</sup> ) for H <sub>2</sub> bqbza
۱۰۷	Table 4-7. Bond lengths for H <sub>2</sub> bqbza
۱۰۸	Table 4-8. Bond angles [°] for H <sub>2</sub> bqbza
۱۱۰	Table 4-9. Crystal data and structure refinement for [Cu(bqbza)]
۱۱۱	Table 4-10. Atomic coordinates and equivalent isotropic displacement parameters (Å <sup>2</sup> ) for [Cu(bqbza)]
۱۱۲	Table 4-11. Bond lengths for [Cu(bqbza)]
۱۱۳	Table 4-12. Bond angles [°] for [Cu(bqbza)]

## فهرست اشکال

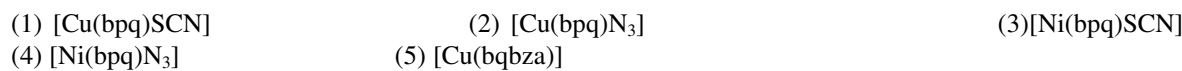
<u>صفحه</u>	<u>عنوان</u>
۳	شمای (۱-۱) نمونه‌هایی از آنیونهای معمول مورد استفاده در مایعهای یونی.....
۴	شمای (۲-۱) نمونه‌هایی از کاتیونهای معمول مورد استفاده در مایعهای یونی.....
۶	شمای (۳-۱) نمونه‌هایی از کاتیون آمونیوم.....
۱۰	شکل (۱-۱). شکافتگی پنج اوربیتال d اتم مرکزی در کمپلکس‌ها با ساختارهای متفاوت.....
۱۱	شکل (۲-۱). ترازهای انرژی اوربیتال‌های مولکولی در کمپلکس هشت وجهی با لیگاند دهنده σ.....
۱۲	شکل (۳-۱). شکافتگی اوربیتال‌های d برای چند تقارن متداول بر اساس مدل همپوشانی زاویه‌ای.....
۱۴	شمای (۴-۱) لیگاند‌های پیریدین و فنانترولین.....
۱۵	شکل (۴-۱). ترازهای انرژی اوربیتال مولکولی در کمپلکس هشت وجهی برای انتقال بار LMCT و MLCT.....
۱۷	شمای (۵-۱). ساختار کلی بیس پیریدیل آمیدها.....
۱۷	شمای (۶-۱) ساختار تعدادی از لیگاند‌های کربوکسامید.....
۲۱	شکل (۵-۱) کمپلکس هشت وجهی Ni(II).....
۲۱	شکل (۶-۱) کمپلکس مس (II).....
۲۲	شمای (۹-۱) روش‌های پل زدن لیگاند آزید (a) متقارن، (b) نامتقارن، (c) کئوردینه شدن از یک سر.....
۲۴	شمای (۱۰-۱). تعدادی از لیگاند‌های بیس پیریدیل آمیدی مورد مطالعه در آزمایشگاه پژوهشی معدنی A دانشگاه صنعتی اصفهان.....
۲۴	شمای (۱۱-۱). الف) شمای کمپلکس‌های X[trans-[Co(bpb)(amine) <sub>2</sub> ]] (ب) دیاگرام ORTEP این کمپلکس با لیگاند محوری پیرویلیدین.....
۲۵	شکل (۷-۱). دیاگرام ORTEP کمپلکس کمپلکس کبالت (III) با لیگاند [Co(Mebpb)(Prldn) <sub>2</sub> ]ClO <sub>4</sub> L <sup>10</sup> H <sub>2</sub> .....
۲۶	شکل (۸-۱). دیاگرام ORTEP کاتیون کمپلکس [Co(cbpb)(3-Mepy) <sub>2</sub> ].....
۲۶	شکل (۹-۱). دیاگرام ORTEP کمپلکس نیکل.....
۲۶	شکل (۱۰-۱). ساختار بلوری لیگاند H <sub>2</sub> Mebqb(L <sup>13</sup> H <sub>2</sub> ).....
۲۶	(II) با لیگاند L <sup>11</sup> H <sub>2</sub> [Ni(bqb)].....
۲۷	شکل (۱۱-۱). دیاگرام ORTEP کمپلکس کمپلکس کبالت (III) با لیگاند L <sup>11</sup> H <sub>2</sub> .....
۲۷	شکل (۱۲-۱) دیاگرام ORTEP کمپلکس [NiMe <sub>2</sub> bqb].....
۲۷	شکل (۱۳-۱) دیاگرام ORTEP کمپلکس trans-[Co(Me <sub>2</sub> bpb)(Prldn) <sub>2</sub> ]ClO <sub>4</sub> .....
۳۰	شمای (۱-۲) کمپلکس‌های لیگاند bpq <sup>-</sup> با یون‌های Ni <sup>II</sup> ، Cu <sup>II</sup> .....
۳۰	شمای (۲-۲) کمپلکس لیگاند bqba <sup>2-</sup> با یون Cu <sup>II</sup> .....
۳۱	شمای (۳-۲) سنتز لیگاند Hbpq به روش مایع یونی.....
۳۲	شمای (۴-۲) ساختار کمپلکس [Cu(bpq)NCS].....

- شمای (۵-۲) ساختار پیشنهادی کمپلکس [Cu(bpq)N<sub>3</sub>]..... ۳۳
- شمای (۶-۲) ساختار پیشنهادی کمپلکس [Ni(bpq)SCN]..... ۳۴
- شمای (۷-۲) ساختار پیشنهادی کمپلکس [Ni(bpq)N<sub>3</sub>]..... ۳۵
- شمای (۱-۳). لیگاند دیروتونه و سیستم غیر مستقر  $\pi$ ..... ۴۱
- شکل (۱-۳). طیف جذبی زیر قرمز لیگاند Hbpq به صورت قرص KBr..... ۴۲
- شکل (۲-۳). طیف FT-IR کمپلکس [Cu(bpq)NCS] به صورت قرص KBr..... ۴۳
- شکل (۳-۳). طیف FT-IR کمپلکس [Cu(bpq)N<sub>3</sub>] به صورت قرص KBr..... ۴۴
- شکل (۴-۳). طیف FT-IR کمپلکس [Ni(bpq)SCN] به صورت قرص KBr..... ۴۵
- شکل (۵-۳). طیف FT-IR کمپلکس [Ni(bpq)N<sub>3</sub>] به صورت قرص KBr..... ۴۵
- شکل (۶-۳). طیف جذبی زیر قرمز لیگاند H<sub>2</sub>bqbza به صورت قرص KBr..... ۴۷
- شکل (۷-۳). طیف جذبی زیر قرمز کمپلکس [Cu(bqbza)] به صورت قرص KBr..... ۴۷
- شکل (۸-۳). طیف الکترونی لیگاند Hbpq ( $10^{-6} \times 9/2$  مول بر لیتر در حلال دی کلرومتان، در دمای ۲۵ °C)..... ۴۹
- شکل (۹-۳). طیف جذب الکترونی [Cu(bpq)NCS] ( $10^{-6} \times 9/7$  مول بر لیتر در حلال دی کلرومتان، در دمای ۲۵ °C)..... ۵۰
- شکل (۱۰-۳). طیف جذب الکترونی [Cu(bpq)N<sub>3</sub>] ( $10^{-6} \times 9/89$  مول بر لیتر در حلال دی کلرومتان، در دمای ۲۵ °C)..... ۵۱
- شکل (۱۱-۳). طیف جذب الکترونی [Ni(bpq)SCN] ( $10^{-6} \times 9/86$  مول بر لیتر در حلال دی کلرومتان، در دمای ۲۵ °C)..... ۵۲
- شکل (۱۲-۳). طیف جذب الکترونی [Ni(bpq)N<sub>3</sub>] ( $10^{-5} \times 1/0$  مول بر لیتر در حلال دی کلرومتان، در دمای ۲۵ °C)..... ۵۳
- شکل (۱۳-۳). طیف الکترونی لیگاند H<sub>2</sub>bqbza ( $10^{-6} * 2/7$  مول بر لیتر در حلال دیکلرومتان، در دمای ۲۵ °C)..... ۵۴
- شکل (۱۴-۳). طیف جذب الکترونی [Cu(bqbza)] ( $10^{-5} \times 1/03$  مول بر لیتر در حلال دی کلرومتان، در دمای ۲۵ °C)..... ۵۵
- شمای (۲-۳) لیگاند آزاد Hbpq..... ۵۶
- شکل (۱۵-۳). طیف 1H-NMR لیگاند Hbpq در حلال CDCl<sub>3</sub> در دمای 25° C..... ۵۷
- شکل (۱۶-۳). طیف گسترده 1H-NMR لیگاند Hbpq در حلال CDCl<sub>3</sub> در دمای 25° C..... ۵۷
- شکل (۱۷-۳). طیف گسترده 1H-NMR لیگاند Hbpq در حلال CDCl<sub>3</sub> در دمای 25° C..... ۵۸
- شکل (۱۸-۳). طیف گسترده 1H-NMR لیگاند Hbpq در حلال CDCl<sub>3</sub> در دمای 25° C..... ۵۸
- شمای (۳-۳) لیگاند آزاد H<sub>2</sub>bqbza..... ۵۹
- شکل (۱۹-۳). طیف 1H-NMR لیگاند H<sub>2</sub>bqbza در حلال CDCl<sub>3</sub> در دمای 25° C..... ۶۹
- شکل (۲۰-۳). طیف 1H-NMR لیگاند H<sub>2</sub>bqbza در حلال CDCl<sub>3</sub> در دمای 25° C..... ۶۹
- شکل (۲۱-۳) آرایش ایجاد شده با عدد کوئوردیناسیون پنج..... ۷۱
- شکل (۲۲-۳) دیاگرام ORTEP کمپلکس [Cu(bpq)NCS]..... ۷۲
- شکل (۲۳-۳) دیاگرام ORTEP لیگاند H<sub>2</sub>bqbza..... ۷۴
- شکل (۲۴-۳). ساختار بلوری لیگاند های [103] H<sub>2</sub>Me<sub>2</sub>bqb (a) و [93] H<sub>2</sub>Mebqb (b)..... ۷۴
- شکل (۲۵-۳) دیاگرام ORTEP کمپلکس Cu(bqbza)..... ۷۶
- شکل (۲۶-۳) دیاگرام ORTEP کمپلکس Cu(Me<sub>2</sub>bpb)..... ۷۶

- شکل (۱-۴). طیف جذبی زیر قرمز لیگاند Hbpq به صورت قرص KBr ..... ۷۹
- شکل (۲-۴). طیف الکترونی لیگاند Hbpq ( $10^{-6} \times 9/2$  مول بر لیتر در حلال دی کلرومتان، در دمای  $25^\circ\text{C}$ ) ..... ۸۰
- شکل (۳-۴). طیف گسترده  $^1\text{H-NMR}$  لیگاند Hbpq در حلال  $\text{CDCl}_3$  ..... ۸۱
- شکل (۴-۴). طیف گسترده  $^1\text{H-NMR}$  لیگاند Hbpq در حلال  $\text{CDCl}_3$  ..... ۸۲
- شکل (۶-۴). طیف گسترده  $^1\text{H-NMR}$  لیگاند Hbpq در حلال  $\text{CDCl}_3$  ..... ۸۴
- شکل (۷-۴). طیف FT-IR کمپلکس  $[\text{Cu}(\text{bpq})\text{NCS}]$  به صورت قرص KBr ..... ۸۵
- شکل (۸-۴). طیف جذب الکترونی  $[\text{Cu}(\text{bpq})\text{NCS}]$  ( $10^{-6} \times 9/7$  مول بر لیتر در حلال دی کلرومتان، در دمای  $25^\circ\text{C}$ ) ..... ۸۶
- شکل (۹-۴). طیف FT-IR کمپلکس  $[\text{Cu}(\text{bpq})\text{N}_3]$  به صورت قرص KBr ..... ۸۷
- شکل (۱۰-۴). طیف جذب الکترونی  $[\text{Cu}(\text{bpq})\text{N}_3]$  ( $10^{-6} \times 9/89$  مول بر لیتر در حلال دی کلرومتان، در دمای  $25^\circ\text{C}$ ) ..... ۸۸
- شکل (۱۱-۴). طیف FT-IR کمپلکس  $[\text{Ni}(\text{bpq})\text{SCN}]$  به صورت قرص KBr ..... ۸۹
- شکل (۱۲-۴). طیف جذب الکترونی  $[\text{Ni}(\text{bpq})\text{SCN}]$  ( $10^{-6} \times 9/86$  مول بر لیتر در حلال دی کلرومتان، در دمای  $25^\circ\text{C}$ ) ..... ۹۰
- شکل (۱۳-۴). طیف FT-IR کمپلکس  $[\text{Ni}(\text{bpq})\text{N}_3]$  به صورت قرص KBr ..... ۹۱
- شکل (۱۴-۴). طیف جذب الکترونی  $[\text{Ni}(\text{bpq})\text{N}_3]$  ( $10^{-5} \times 1/0$  مول بر لیتر در حلال دی کلرومتان، در دمای  $25^\circ\text{C}$ ) ..... ۹۲
- شکل (۱۵-۴). طیف جذبی زیر قرمز لیگاند  $\text{H}_2\text{bqbza}$  به صورت قرص KBr ..... ۹۳
- شکل (۱۶-۴). طیف الکترونی لیگاند  $\text{H}_2\text{bqbza}$  ( $10^{-6} \times 2/7$  مول بر لیتر در حلال دیکلرومتان، در دمای  $25^\circ\text{C}$ ) ..... ۹۴
- شکل (۱۷-۴). طیف  $^1\text{H-NMR}$  لیگاند  $\text{H}_2\text{bqbza}$  در حلال  $\text{CDCl}_3$  ..... ۹۵
- شکل (۱۸-۴). طیف  $^1\text{H-NMR}$  لیگاند  $\text{H}_2\text{bqbza}$  در حلال  $\text{CDCl}_3$  ..... ۹۶
- شکل (۱۹-۴). طیف جذبی زیر قرمز کمپلکس  $[\text{Cu}(\text{bqbza})]$  به صورت قرص KBr ..... ۹۷
- شکل (۲۰-۴). طیف جذب الکترونی  $[\text{Cu}(\text{bqbza})]$  ( $10^{-5} \times 1/03$  مول بر لیتر در حلال دی کلرومتان، در دمای  $25^\circ\text{C}$ ) ..... ۹۸
- شکل ۲۱-۴ ORTEP کمپلکس  $[\text{Cu}(\text{bpq})\text{NCS}]$  ..... ۹۹
- شکل (۲۲-۴) دیاگرام ORTEP لیگاند ..... ۱۰۳
- شکل ۲۲-۴ ORTEP کمپلکس  $[\text{Cu}(\text{bqbza})]$  ..... ۱۰۹

## چکیده

مایع های یونی نقش بسیار مهمی در شیمی سبز ایفا می کنند و کاربردهای آزمایشگاهی و صنعتی زیادی دارند. این ترکیب ها استفاده از حلالهای آلی سمی و آلاینده را بواسطه ویژگی های منحصر به فردشان در واکنشهای گوناگون کاهش داده اند. با انتخاب مایع یونی مناسب می توان با افزایش بازده محصول، تولید محصولات جانبی را کاهش داد. اغلب مایع های یونی قابل بازیافت اند که این امر کاهش هزینه فرآیندهای مورد استفاده را به دنبال دارد. یکی از کاربردهای مایع های یونی سنتز ترکیبات آلی مانند کربوکسامیدها می باشد. لیگاندهای کربوکسامیدی یکی از شاخه های توسعه یافته در شیمی کئوردیناسیون کمپلکس های فلزی می باشند. کمپلکس های فلزی با لیگاند های پیریدیل آمید به عنوان مدل های ساختاری برای تعدادی از متالو پروتیین ها مورد مطالعه قرار گرفته اند. برهمکنش یون فلز با لیگاند های پیریدیل آمید ذهنیت روشنی از ساختار پروتیین ها و متالو آنزیم ها با مراکز فلزی به دست می دهد. در روش کلاسیک، مشتقات کربوکسامید از واکنش آمین یا دی آمین با کربوکسیلیک اسید مناسب در حضور کوپل کننده مانند تری فیل فسفیت در حلال پیریدین سنتز شده اند. به دلیل سمیت حلال پیریدین، بازده کم و ناکامی روش کلاسیک در سنتز برخی ساختار ها، از مایع های یونی به عنوان جایگزینی مناسب و بی زیان استفاده شده است. در این پژوهش با استفاده از TBAB بعنوان محیط واکنش ملایم به سنتز لیگاندهای کربوکسامیدی پرداخته ایم. لیگاندهای کربوکسامیدی نامتقارن  $H_2bpqbza$  و  $Hbpq$  تحت شرایط بهینه با بازده بالا و زمان کوتاه واکنش نسبت به روش های کلاسیک سنتز آماده شده اند. در ادامه چهار کمپلکس جدید از لیگاند سه دندانه  $N=Hbpq$  (۸-کینولین) پیریدین -۲- کربوکسامید با فرمول کلی  $[M(bpq)X]$  ( $M = Cu(II), X = SCN (1), N_3 (2)$ ;  $M = Ni(II), X = SCN (3), N_3 (4)$ ) سنتز شده اند. هم چنین کمپلکس مس با لیگاند دو آنیونی  $bqba^{2-}$  سنتز شد. فرمول کمپلکس های سنتز شده در زیر آورده شده است.



لیگاندهای سنتز شده و کمپلکس های آنها به کمک تکنیک های طیف سنجی UV-Vis, FT-IR,  $^1H$ NMR و آنالیز عنصری مورد شناسایی قرار گرفته اند. لیگاند  $H_2bpqbza$  و کمپلکس های (۱) و (۵) توسط پرتو X تعیین ساختار شده اند. نتایج حاصل از تکنیک های طیف سنجی و داده های ساختاری از بلور نگاری توسط پرتو X علاوه بر تایید یکدیگر اطلاعاتی در رابطه با ساختار سه کمپلکس (۲)، (۳) و (۴) به دست می دهند. در ساختار بلوری لیگاند  $H_2bpqbza$  حلقه بنزنی تقریباً هم صفحه با یکی از سیستم های حلقه کینولینی می باشد. هم چنین به علت ممانعت فضایی، دو حلقه کینولینی می پیچند. در کمپلکس (۱) با ساختار هرم مربع القاعده انحراف یافته، از برهمکنش بین بون مس و اتم اکسیژن کربونیل مولکول مجاور ساختار پلیمری ایجاد شده است. هم چنین لیگاند  $SCN^-$  از سر نیتروژن به مرکز فلزی متصل شده است. کمپلکس (۵) در شبکه اورتورومبیک متبلور شده است و چهار اتم نیتروژن، مس (II) را احاطه کرده اند. طول پیوند Cu-N آمید کوتاهاتر از دیگر پیوندهای Cu-N می باشد. این امر بیانگر قوی تر بودن سیگما دهندگی نیتروژن های آمیدی دپروتونه نسبت به سایر نیتروژن ها می باشد.

کلمات کلیدی:

مایع یونی، لیگاندهای پیریدیل آمید، کمپلکس مس، کمپلکس نیکل

## فصل اول

### دیباچه

#### ۱-۱- مایع های یونی

مایع های یونی نمک هایی با دمای ذوب پایین هستند که در حالت مذاب تنها از یون های سازنده خود تشکیل شده اند، و بیشتر آن ها نقطه ذوب کمتر از  $100^{\circ}\text{C}$  دارند. با این تعریف صد ها و هزاران ترکیب را بعنوان مایع یونی می توان در نظر گرفت ولی حقیقت این است که تعداد واقعی آن ها محدود می باشد [۶-۱]. مایع های یونی بصورت شبکه سه بعدی از کاتیون ها و آنیون ها هستند که با نیروهایی مانند پیوند هیدروژنی، نیرو های واندروالس و الکتروستاتیک بهم متصل اند که با قوی تر شدن نیروهای واندروالس و اسکوزیته آن ها افزایش می یابد. ویژگی بارز آن ها داشتن کاتیون با تقارن کم و تمرکز ضعیف بار مثبت است که مانع تشکیل شبکه کریستالی منظم و همچنین کاهش نقطه ذوب نمک حاصله می شود که باعث فراهم شدن محیط غیر آبی در دمای پائین (نه صرفاً دمای محیط) و در نتیجه امکان انجام واکنش های متعدد در آن محیط می گردد [۷].

با تغییر ساختار آنیون و کاتیون می توان مایع های یونی را اصلاح کرد. در بررسی هایی با تغییر استخلاف آلکیل در کاتیون خواص آن ها مورد مطالعه قرار گرفته است. برای اصلاح خواص مایع های یونی علاوه بر کاتیون، می توان آنیون را اصلاح کرد تغییر آنیون اثر زیادی بر رفتار شیمیایی و پایداری مایع یونی دارد و تغییر کاتیون خواص فیزیکی آن را تحت تأثیر قرار می دهد. از این مبحث می توان دریافت که

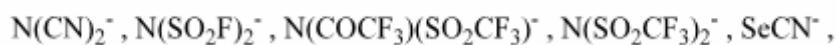
آنیون ها برای کنترل رفتار شیمیایی و کاتیون ها برای کنترل خواص فیزیکی انتخاب می شوند [۸-۱۱].

#### ۱-۱-۱- تاریخچه مایع های یونی

مدت زیادی از شناسایی مایع های یونی می گذرد اما استفاده وسیع از آن ها بعنوان حلال در فرآیند های شیمیایی ، سنتز و کاتالیست اخیراً بسیار کاربردی شده است .

نخستین مایع یونی اتیل آمونیوم نیترات با نقطه ذوب °C ۱۲ است که در سال ۱۹۱۴ توسط والدن<sup>۱</sup> سنتز شد . این مایع یونی از واکنش بین اتیل آمین با نیتریک اسید غلیظ ساخته شده است . علی رغم این کشف تا سال ۱۹۴۸ کاربرد این مایع ها رسمیت نیافته بود در اواسط این سال اولین مایع یونی در دمای اتاق بر پایه آنیون تتراکلرو آلومینات و کاتیون N- اتیل پیریدینیوم توسط هورلی<sup>۲</sup> و ویر<sup>۳</sup> سنتز شد. در سال ۱۹۶۷ کاربرد های تتراهگزیل آمونیوم بنزوات بعنوان حلالی برای مطالعه واکنش های سینتیکی و الکتروشیمیایی منتشر گردید. در سال ۱۹۷۵ اوستریانگ<sup>۴</sup> بررسی هایی بر روی کاتیون N- بوتیل پیریدینیوم انجام داد و اولین نمک یونی مایع را سنتز کرد. بعد از آن هوسی<sup>۵</sup> و همکارانش دریافتند که کاتیون ۱- اتیل ۳- میتل ایمیدازولیوم با آنیون تتراکلرو آلومینات (III) خواص بهتری بر روی سیستم مورد مطالعه آن ها دارد . این بررسی ها سبب پیشرفت مطالعات بر روی مایع یونی شد. پیشرفت بیشتر زمانی رخ داد که ویلکس<sup>۶</sup> و زاورتکو<sup>۷</sup> مایع های یونی زیادی را با کاتیون ایمیدازولیوم و تغییر در آنیون آنها ( مانند تری فلوروبورات یا استات ) سنتز کردند. در سال ۱۹۶۸ از مایع های یونی بعنوان حلال در واکنش فریدل کرافتس استفاده شد. ویلکس و زاورتکو در سال ۱۹۹۲ مایع های یونی سنتز کردند که در رطوبت و هوا پایدار بودند. پس از آن از کاتیون ها و آنیون های دیگری در مایع های یونی استفاده شد [۱۲-۲۰].

بعضی کاتیون ها و آنیون های معمول به کار برده شده در مایع های یونی در شمای (۱-۱) و (۲-۱) نشان داده شده است. امروزه استفاده از این مایع های یونی گسترش یافته و در زمینه های بسیاری کاربرد دارند. آنیون های ممکن:



شمای (۱-۱) نمونه هایی از آنیون های معمول مورد استفاده در مایع های یونی

<sup>1</sup> Walden

<sup>2</sup> Hurlly

<sup>3</sup> Wire

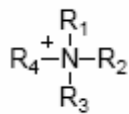
<sup>4</sup> Osteryang

<sup>5</sup> Hussey

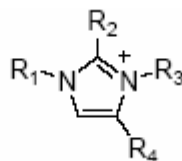
<sup>6</sup> Wilkes

<sup>7</sup> Zaworotko

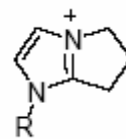
کاتیون‌های معمول :



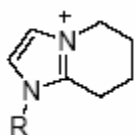
تتراآلکیل آمونیوم



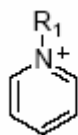
دی، تری و تتراآلکیل ایمیدازولیوم



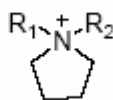
[R-3C-im]



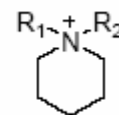
[R-4C-im]



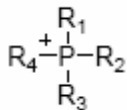
آلکیل پیریدینیوم



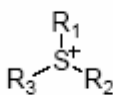
دی آلکیل پیرولیدینیوم



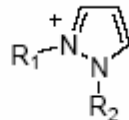
دی آلکیل پی پیریدینیوم



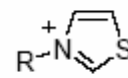
تترا آلکیل فسفونیوم



تری آلکیل سولفونیوم



دی آلکیل پیرازولیوم



N-آلکیل تiazولیوم

[R-3C-im] = 1-alkyl-2, 3-trimethyleneimidazolium

[R-4C-im] = 1-alkyl-2, 3-tetramethyleneimidazolium

شما (۱-۲) نمونه‌هایی از کاتیون‌های معمول مورد استفاده در مایع‌های یونی

#### ۲-۱-۱ - خواص ویژه مایع‌های یونی

به دلیل دارا بودن ویژگی‌های منحصر به فرد، مایع‌های یونی در زمینه‌های بسیاری از جمله شیمی آلی، الکتروشیمی، کاتالیست و شیمی فیزیک کاربرد‌های فراوانی دارند از جمله مهمترین این ویژگی‌ها عبارتند از: ۱- مایع‌های یونی مواد غیر سمی هستند به همین دلیل بعنوان حلال سبز در شیمی، بیوشیمی استفاده می‌شوند.

توانایی حل کردن بسیاری از ترکیبات آلی، معدنی و آلی فلزی را دارند [۲۱].

۲- دارای پایداری گرمایی بالا هستند و در گستره دمایی وسیع تخریب نمی‌شوند در نتیجه محیط واکنش بسیار مناسبی برای واکنش‌های نیازمند دمای بالا فراهم می‌کنند. پایداری گرمایی این ترکیب‌ها به قدرت پیوند کربن-هترواتم و پیوند هیدروژنی هترواتم بستگی دارد و پایداری مایع‌های یونی به دست آمده بوسیله آلکیلاسیون آمین یا فسفین در برابر گرما به طبیعت آنیون بستگی دارد برای مثال پایداری گرمایی



$(EMIM)BF_4$  300°C<sup>۱</sup> می باشد [۲۲ و ۲۳].

۳- مایع های یونی فشار بخار بسیار کمی دارند .

۴- مایع های یونی بعنوان حلال و همچنین کاتالیست فعال در واکنش ها شرکت می کنند.

۵- نقطه ذوب آن ها به تقارن کاتیون و آنیون بستگی دارد . مقایسه نقاط ذوب در بیشتر موارد نشان می دهد که برای یک کاتیون معین افزایش اندازه آنیون ها دارای بار یکسان باعث کاهش در نقطه ذوب می شود [۱۷].

۶- در واکنش های سنتز کمپلکس قادر به کوئوردینه شدن به کمپلکس فلزی نیستند .

۷- بیشتر آن ها مقاوم در برابر رطوبت هستند و قابلیت حلالیت در آب و مایع های آلی قطبی و غیر قطبی را دارند [۲۴].

۸- علاوه بر این مایع های یونی دارای خصوصیتی چون اشتعال ناپذیری ، هدایت الکتریکی زیاد ، پایداری شیمیایی و تحرک یونی نیز می باشد و خواصی از قبیل چگالی ، گرانشی ، خصلت اسید و باز و قدرت کوئوردینه شدن بوسیله انتخاب مناسب جزء کاتیون و یا آنیون برای این ترکیب ها قابل تنظیم هستند .

#### ۱-۱-۳- انواع مایع های یونی

انواع مایع های یونی شامل :

۱- مایع یونی بر پایه کاتیون آمونیوم

۲- مایع یونی بر پایه کاتیون ایمیدازولیوم

۳- مایع یونی بر پایه کاتیون پیریدینیوم

۴- مایع یونی بر پایه کاتیون تری آزولیوم

۵- مایع یونی بر پایه کاتیون مورفولینیوم

۶- مایع یونی کایرال

۷- مایع یونی مغناطیسی

می باشند. به دلیل استفاده از مایع یونی بر پایه کاتیون آمونیوم در این پروژه به معرفی این دسته از مایع

های یونی می پردازیم .

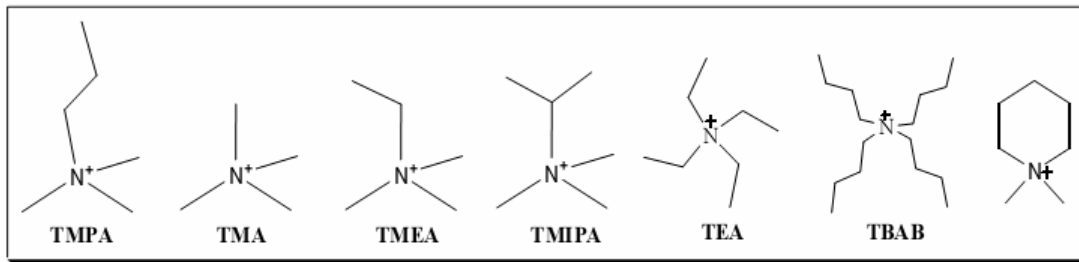
مایع یونی بر پایه کاتیون آمونیوم:

اکثر نمک های حاصل از کاتیون آمونیوم در دمای اتاق مایع اند. در واکنش های زیادی از این نمک

<sup>1</sup> 1-Ethyl-3-methyl imidazolium

ها بعنوان کاتالیست انتقال فاز استفاده شده است. از جمله مزیت های این نمک ها سادگی عمل ، انتخاب پذیری بالا و ایجاد یک محیط ملایم برای واکنش ها می باشد [۲۵].  
وجود استخلاف حجم در کاتیون این نمک ها ، آن ها را برای واکنش های جانشینی نوکلئوفیلی مناسب می سازد.

نمونه هایی از کاتیون های آمونیوم در زیر آورده شده است :



شماي (۱-۳) نمونه هایی از کاتیون آمونیوم

نمک تترابوتیل آمونیوم برماید <sup>1</sup>TBAB بعنوان یکی از نمک های آمونیومی اشباع به دلیل کاربرد آسان ، قیمت مناسب و توزیع گسترده توجه شیمیدانان را به خود جلب نموده است. این نمک در بسیاری از واکنش های شیمی محیطی ملایم و سبز را ایجاد می کند. وجود نقطه ذوب  $100-103^{\circ}\text{C}$  شرایط را برای ایجاد محیطی همگن در واکنش های نیازمند به دمای بالاتر از  $100^{\circ}\text{C}$  فراهم می کند. حضور الزامی این نمک در این واکنش ها اثبات شده و همچنین کاتالیستی مناسب برای بسیاری از واکنش های سنتزی می باشد [۲۷].

#### ۱-۴-۱- مایع های یونی در صنعت

از بهترین جنبه های کاربردی مایع های یونی می توان به توانایی آن ها در فرایند جذب ، به ویژه جذب گاز های اسیدی اشاره کرد.

- کاربرد مایع های یونی در فرایند های شیمیایی و پتروشیمیایی:
- حلال سبز در واکنش های نیازمند به محیط قطبی
- جذب گاز های اسیدی
- کاتالیست در فرایند های پتروشیمی نظیر هیدروژناسیون اولفین ها
- محیط مناسب فرایندهای جداسازی مایع-مایع آروماتیک و ترکیبات اورگانوسولفور از هیدروکربن ها

<sup>1</sup> Tetrabutylammonium bromide

توجه به انتخاب جایگزین های مناسب برای آمین ها در فرایندهای تصفیه گاز به صورت جدی از بیش از یک دهه ی پیش آغاز و تلاش برای کاربردی کردن فرایند همچنان ادامه دارد. دست یابی به این فناوری در جهت جایگزین کردن مواد شیمیایی پر مصرف در صنعت به منظور کاهش آلاینده ها ، حذف مسائل خوردگی ناشی از آمین ها و همین طور کاهش مصرف انرژی مورد توجه خاصی قرار دارد.

مایع های یونی کاربرد گسترده ای در صنعت دارند . آن ها در فرایندهای واکنش های شیمیایی و تفکیک، در فرایندهای فلزات و پلیمرها، بعنوان الکترولیت ها در وسایل الکترونیکی و بعنوان مایعات کاربردی و مهندسی مورد استفاده قرار می گیرند. دیویس<sup>۱</sup> یکی از اولین افرادی بود که دریافت مایع های یونی تنها بعنوان محیط انجام واکنش به کار نمی روند بلکه می توانند نقش کاتالیزوری هم داشته باشند بعنوان مثال نمک های فسفونیم را می توان نام برد که تشکیل استرها از الکل ها و اسیدها را کاتالیز می کند.

در ژاپن محققان دانشگاه ناگویا از مایع های یونی به عنوان محیطی برای ساختن آلیاژ همگن از نانو ذرات استفاده کردند. به این ترتیب که بمباران ورقه نازکی از طلا و نقره را به وسیله یون های گازی پراثری انجام می دهند . فلزات از سطح ورقه جدا شده و به درون مایع یونی وارد می شوند ، در آنجا به یکدیگر پیوسته و آلیاژ دو فلزی را تشکیل می دهند [۳۰].

#### ۱-۲- مقدمه ای بر شیمی کئوردیناسیون<sup>۲</sup>

اگر چه تاریخ تشکیل پیوند و تفسیر واکنش های ترکیبات کئوردیناسیون در حقیقت توسط آلفرد ورنر شروع شد ، اما ترکیبات کئوردیناسیون خیلی زودتر شناخته شده بودند . بسیاری از ترکیبات کئوردیناسیون بعنوان رنگ ها از زمان قدیم مورد استفاده بوده اند. مثال هایی که هنوز هم مورد استفاده هستند شامل ارولین  $K_3[Co(NO_2)_6].6H_2O$  ، آلیزارین قرمز رنگ و آبی پروس<sup>۳</sup> می باشد. شاید اولین کمپلکس ثبت شده آبی پروس ،  $KCN. Fe(CN)_2. Fe(CN)_3$  ، باشد که در ابتدای قرن هیجدهم توسط دیسباخ<sup>۴</sup> تهیه گردید. این ترکیب به عنوان رنگ در برلین برای کارهای هنری مورد استفاده قرار می گرفت . به هر حال تاریخی که معمولاً برای کشف کمپکس ها ذکر می شود تاریخ کشف هگزآمین کبالت (III) کلرید توسط تاسرت<sup>۵</sup> (۱۷۹۸) می باشد این کشف آغاز واقعی شیمی کئوردیناسیون را نشان می دهد [۳۱].

<sup>1</sup> Davis

<sup>2</sup> Coordination Chemistry

<sup>3</sup> Prussian Blue

<sup>4</sup> Diesbach

<sup>5</sup> Tassaert

## ۱-۲-۱- پیوند در ترکیبات کئوردیناسیون

مطالعه جدید ترکیبات کئوردیناسیون توسط دو نفر به نام های آلفرد ورنر<sup>۱</sup> و سوفوس مادس یورگنسن<sup>۲</sup> شروع شده است .

در یک ترکیب مانند هگزا آمین کبالت (III) کلرید،  $[Co(NH_3)_6]Cl_3$  ، نظریه های ابتدایی در تشکیل پیوند اجازه می دادند که فقط ۳ اتم به اتم کبالت متصل شوند (به دلیل ظرفیت سه آن) . در نتیجه لازم بود که نظریه های جدید توسعه یابد تا ساختار ترکیب را توضیح دهد . یک نظریه که اولین بار توسط بلومسترند<sup>۳</sup> ارائه شد و بوسیله یورگنسن گسترش یافت این بود که نیتروژن ها می توانند زنجیرهایی مانند آنچه را که کربن تشکیل می داد تشکیل دهند . آلفرد ورنر پیشنهاد کرد که همه شش آمونیاک می توانند مستقیماً به یون کبالت پیوند دهند . مباحثه بین یورگنسن و ورنر ادامه داشت تا اینکه سر انجام وقتی ورنر موفق به تهیه ایزویرهای سیس بنفش و ترانس سبز

$[Co(NH_3)_4Cl_2]^+$  شد نادرستی نظریه ی یورگنسن به اثبات رسید ، زیرا هیچکدام از ایزومرها در ارتباط با فرضیه زنجیری نبودند. در واقع ورنر نخستین شیمیدان معدنی است که به دریافت جایزه نوبل در شیمی موفق شده است [۳۱].

نظریه های متعددی در مورد پیوند ترکیبات کئوردیناسیون وجود دارد : نظریه پیوند والانس (VBT) ، نظریه میدان بلور<sup>۴</sup> (CFT) ، نظریه اوربیتال مولکولی<sup>۵</sup> MOT و جنبه کمی آن مدل همپوشانی زاویه ای<sup>۶</sup> AOM که در اینجا به اختصار به آن ها اشاره می شود.

## ۱-۲-۲- نظریه پیوند والانس

لینوس پاولینگ<sup>۷</sup> دانشمندی بود که نخستین بار نظریه تشکیل پیوند را به طور موفقیت آمیز در مورد ترکیبات کئوردیناسیون به کاربرد . از این نظریه به نام نظریه پیوند والانس یاد می شود و با موضوع هیبرید شدن و شکل هندسی ترکیبات غیر کمپلکس ارتباط نزدیک دارد . از دیدگاه پیوند والانس تشکیل یک کمپلکس ، واکنش میان یک باز لوئیس ( لیگاند ) و یک اسید لوئیس ( فلز یا یون مرکزی ) و به وجود آمدن یک پیوند کووالانس کئوردینانس ( داتیو ) بین لیگاند و فلز می باشد . هدف نظریه پیوند ارائه روشی ساده برای پیش بینی ساختار هندسی ، خواص مغناطیسی و مسئله پایداری می باشد . این نظریه به دلیل کاستی هایی

<sup>1</sup> A.Werner

<sup>2</sup> S.M.Jørgensen

<sup>3</sup> C.W.Blomstrand

<sup>4</sup> Crystal Field Theory

<sup>5</sup> Molecular Orbital Theory

<sup>6</sup> Angular Overlap Model

<sup>7</sup> Linuse Pauling