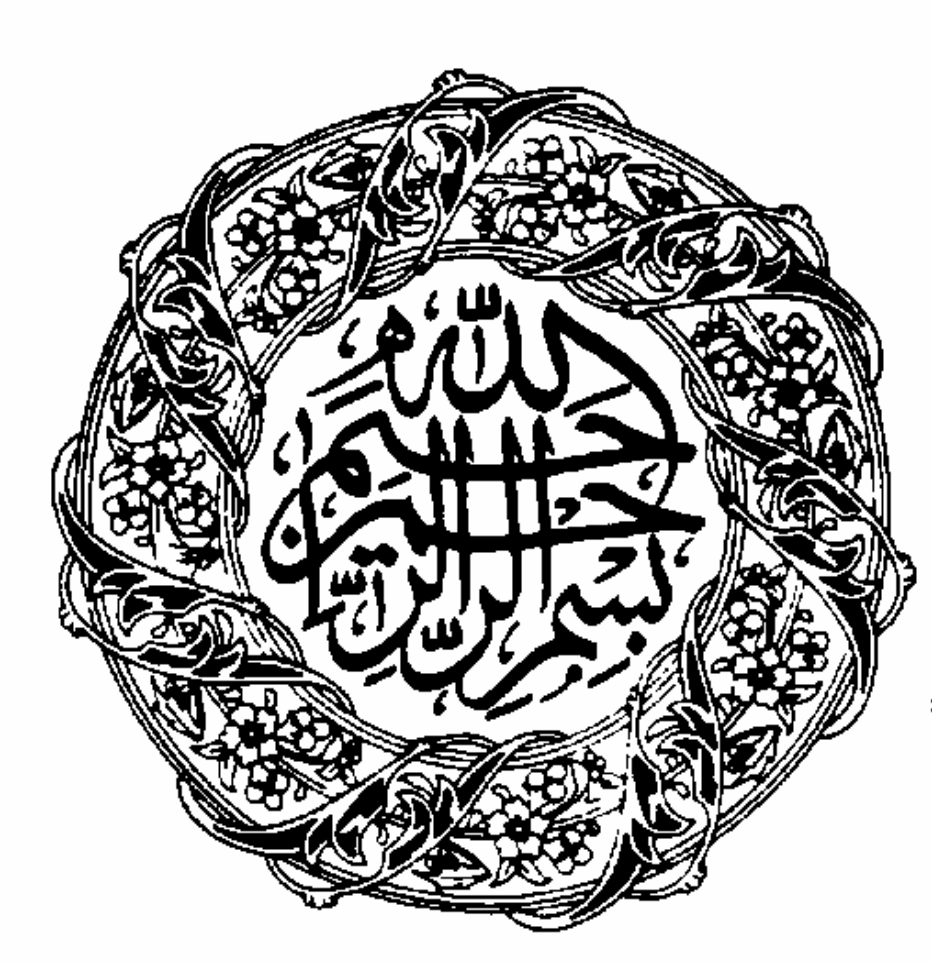

بسم الله الرحمن الرحيم

دانشکده‌ی علوم
بخش شیمی

پایان‌نامه

جهت اخذ درجه‌ی کارشناسی ارشد
در رشته شیمی معدنی

عنوان

سنتز، شناسایی و بررسی فعالیت کاتالیزوری کمپلکس‌های بیس (ماکروسیکل) مس(II) و نیکل(II)

استاد راهنما
دکتر مسعود صلواتی نیاسری

توسط
مهدی بازرگانی پور

شهریورماه ۱۳۸۵

باسمه تعالی

دانشگاه کاشان

تاریخ :
شماره:
پیوست:

نام و نام خانوادگی دانشجو : **مهدی بازرگانی‌پور** شماره دانشجویی : **۸۳۱۵۷۰۰۱**

رشته : **شیمی** دانشکده : **علوم**

عنوان پایان نامه : **سنتز، شناسایی و بررسی خواص کاتالیزوری بیس (ماکروسیکل) مس(II) و نیکل(II)**

این پایان‌نامه به مدیریت تحصیلات تکمیلی به منظور بخشی از فعالیتهای تحصیلی لازم برای اخذ درجه کارشناسی ارشد ارایه می‌گردد.دفاع از پایان نامه در تاریخ **۸۵/۶/۱۹** مورد تأیید و ارزیابی هیأت داوران قرار گرفت و با نمره به عدد: ۲۰ به حروف: بیست و درجه عالی به تصویب رسید.

اعضاء هیأت داوران

عنوان	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی	امضاء
۱. استاد راهنما :	دکتر مسعود صلواتی	دانشیار	
۲. متخصص و صاحب نظر از داخل دانشگاه :	دکتر سیّدابوالقاسم کاهانی	استادیار	
۳. متخصص و صاحب نظر خارج از دانشگاه :	دکتر عظیم ملک‌زاده	استادیار	
٤. نماینده تحصیلات تکمیلی دانشگاه :	دکتر محمد الماسی	استادیار	

دانشگاه کاشان

تقدیم به سنگ صبور حرفهایم;

پدربزرگوارم

او که به من آموخت عقاب فاتح قله های زندگی خویش باشم

قدرشناس محبت هایش

تقدیم به چشمان منتظر ;

مادر نازنینم

که دردریای پرتلاطم و طوفانی ناملایمات زندگی کشتی امن من بود

برگ برگ این تلاش ناچیزنثار قدومش

تقدیم به یگانه خواهر مهربانم; **فاطمه**

او که وجود نازنینش شادی بخش لحظه لحظه ایام من است

آرزومند آرزوهایش

تقدیم به

تمامی دوستانم که در همه حا ل همچون کوهی استوار حامی و پشتیبان من بودند

تشکر و قدردانی

سپاس خدای را که بر انسان منت نهاد و او را اشرف مخلوقات خویش قرار داد، باشد که قدر دان این موهبت باشیم. ستایش او را که کامل‌ترین دین و بهترین نعمت خود را بر مسلمین ارزانی داشت، باشد که مسلمان واقعی باشیم. ثنا معبودی را که چهارده نور پاک و مطهر را برای هدایت مسلمین فرستاد، باشد که به شایستگی شیعه باشیم. سپاس خدا را که توفیق تحصیل علم را به ما عطا فرمود، باشد که شکرگذار باشیم.

سپاس بی پایان و خالصانه از استاد ارجمند و بزرگوار جناب آقای **دکتر مسعود صلواتی نیاسری** که تجربیات گرانبهایش را بی‌دریغ در اختیارم گذارد و در به انجام رساندن این پروژه یاورم بود.

همچنین از تشریک مساعی جناب آقای **دکتر سید ابوالقاسم کاهانی** که به عنوان متخصص و صاحب‌نظر داخل دانشگاه و جناب آقای **دکتر عظیم ملک‌زاده** به عنوان متخصص و صاحب-نظر خارج دانشگاه که زحمت بازخوانی این رساله را متقبل شده‌اند و بواسطه‌ی پیشنهادهای سازنده‌ی ایشان در تنظیم نهایی این رساله، صمیمانه سپاسگذارم. و از جناب آقای **دکتر محمد الماسی** به عنوان ناظر تحصیلات تکمیلی قدردانی می‌نمایم.

همچنین از تمامی استادان بخش شیمی که در طول دوران تحصیل از محضرشان کسب فیض نموده‌ام، سپاسگزارم.

چکیده

فرایند اکسایش یکی از مهمترین واکنش‌های متابولیسم در موجودات زنده است. آنزیم های بسیاری شناخته شده‌اند که کاتالیزورهای واکنش‌های فوق می‌باشند. به منظور شبیه سازی سیستم‌های آنزیمی تحقیقات وسیعی جهت تهیه پورفیرین‌ها و فتالوسیانین‌ها صورت گرفته است که در واقع مدل‌هایی از موقعیت‌های فعال آنزیمی می‌باشند.

در این تحقیق برای اولین بار کمپلکس‌های ۱۳- عضوی بیس (ماکروسیکل) دوهسته‌ای تری آزا دی اکسا مس(II) و نیکل(II) به روش In- situ One Pot Template Condensation Reaction (IOPTCR) تهیه شده‌اند.

کمپلکس‌های بیس (ماکروسیکل) تری آزا دی اکسا مس(II)، $[Cu_2L_{1\text{-}5}](ClO_4)_4$، به عنوان کاتالیزور در واکنش اکسایش تتراهیدروفوران(THF) با اکسیدان آب اکسیژنه استفاده شدند. محصولات واکنش شامل: تتراهیدروفوران- ۲- ان، تتراهیدروفوران- ۲- ال و ۴- هیدروکسی بوتیرآلدهید می‌باشند. در تمامی این واکنش‌ها محصول اصلی تتراهیدروفوران -۲- ان می باشد. عوامل زیادی از جمله حلال، غلظت کاتالیزور و زمان بر گزینش پذیری و بازده محصولات اثر می‌گذارند.

در ادامه کمپلکس‌های بیس (ماکروسیکل) تری آزا دی اکسا نیکل(II)، $[Ni_2L_{1\text{-}5}](ClO_4)_4$، به عنوان کاتالیزور در واکنش اکسایش سیکلوهگزن در حضور اکسیدان اکسیژن مولکولی استفاده شدند. محصولات بدست آمده عبارتند از: ۲- سیکلوهگزن- ۱- ان و ۲- سیکلوهگزن- ۱- ال، در همه واکنش‌های اکسایش سیکلوهگزن، محصول اصلی سیکلوهگزن- ۱- ال می‌باشد. در ادامه اثر دما و غلظت کاتالیزور در واکنش اکسایش بررسی شد.

عنوان	فهرست مطالب	صفحه

فصل اول – مقدمه

۱-۱- اثر تمپلت ۲

۱-۲- انواع اثر تمپلت ۲

۱-۲-۱- اثر سینتیکی تمپلت ۲

۱-۲-۲- اثر ترمودینامیکی تمپلت ۴

۱-۳- اثر تمپلت منفی ۵

۱-۴- فاکتورهای موثر بر یک واکنش تمپلت ۶

۱-۴-۱- کئوردیناسیون لیگاندها ۶

۱-۴-۲- اثر کیلیت ۶

۱-۴-۳- اثر ماکروسیکل ۷

۱-۵- واکنش‌های شامل سنتز لیگاندهای ماکروسیکل ۹

۱-۵-۱- واکنش‌های آلکیلاسیون ۹

۱-۵-۱-۱- آلکیلاسیون اتم نیتروژن ۹

۱-۵-۱-۲- آلکیلاسیون اتم گوگرد ۱۰

۱-۵-۲- تراکم شیف ۱۱

۱-۵-۲-۱- ماکروسیکل‌های دی ایمین ۱۲

۱-۵-۲-۱-۱- مونوکربونیل آلیفاتیک و دی ایمین ۱۲

۱-۵-۲-۱-۲- کربونیل اکسامید و دی ایمین ۱۳

۱-۵-۲-۱-۳- دی کربونیل و دی آمین ۱۳

۱-۵-۲-۱-۴- ماکروسیکل دی ایمین دارای اکسیژن، فسفر،

عنوان	فهرست مطالب	صفحه

گوگرد به عنوان دهنده ۱۵

۱-۵-۲-۲- ماکروسیکل‌های تترا ایمین ۱۶

۱-۵-۲-۲-۱- عامل کربونیل،آلیفاتیک باشد ۱۶

۱-۵-۲-۲-۲- عامل کربونیل، غیر اشباع و آروماتیک باشد ۱۷

۱-۵-۲-۳- ماکروسیکل دارای زنجیر جانبی ۱۸

۱-۵-۳- تراکم مانیخ ۱۸

۱-۵-۳-۱- تراکم مانیخ برای تهیه لیگاندهای ماکروسیکل ۱۹

۱-۵-۳-۱-۱- ماکروسیکل تترا آزا ۲۰

۱-۵-۳-۱-۲- ماکروسیکل پنتا آزا ۲۱

۱-۵-۳-۱-۳- ماکروسیکل هگزا آزا ۲۲

۱-۵-۳-۱-۴- ماکروسیکل اکتا آزا ۲۲

۱-۵-۳-۱-۵- ماکروسیکل آزا اتر ۲۳

۱-۵-۳-۱-۶- ماکروسیکل آزا تیو اتر ۲۳

۱-۵-۳-۱-۷- ماکروسیکل‌های تقویتی ۲۴

۱-۵-۴- خودتراکمی نیتریل‌ها ۲۵

۱-۶- کمپلکس‌های دو هسته‌ای ماکروسیکل ۲۶

۱-۶-۱- سنتز ماکروسیکل‌های دو هسته‌ای با استفاده از تراکم شیف ۲۶

۱-۶-۱-۱- پیش ماده، دهنده N_2O ۲۶

۱-۶-۱-۲- پیش ماده، دهنده N_2S ۲۸

۱-۶-۲- سنتز ماکروسیکل‌های دو هسته‌ای با استفاده از تراکم مانیخ ۲۸

۱-۷- بیس (ماکروسیکل‌ها) ۲۹

۱-۷-۱- بیس (ماکروسیکل) با پل N-R-N ۳۰

۱-۷-۲- سنتز بیس (ماکروسیکل) با پل C-R-C ۳۲

۱-۷-۳- بیس (ماکروسیکل) اسپیرو ۳۳

۱-۸- اهمیت و کاربرد ماکروسیکل‌ها ۳۳

۱-۸-۱- لیگاند ماکروسیکل برای استخراج یون‌های فلزی و ساخت الکترودهای یون گزین ۳۳

۱-۸-۲- لیگاند ماکروسیکل برای حفاظت از خوردگی فلزات ۳۵

۱-۸-۳- کاربرد لیگاند ماکروسیکل به عنوان دارو و مصارف پزشکی ۳۶

۱-۸-۴- ماکروسیکل‌ها برای پایدار کردن حالت اکسایش بالای فلزات ۳۷

۱-۸-۵- لیگاند ماکروسیکل به عنوان کاتالیزور ۳۷

۱-۹- فعال سازی پیوند C-H ۳۸

فصل دوم- بخش تجربی

۲-۱- دستگاه‌های مورد استفاده ۴۱

۲-۲- مواد شیمیایی مصرفی ۴۱

۲-۳- تهیه کمپلکس‌های بیس (ماکروسیکل) د وهسته‌ای مس(II) ۴۳

۲-۳-۱- تهیه کمپلکس دوهسته ای ۶- [۴- (۱، ۱۱- دی اکسا- ۴، ۶، ۸- تری آزا سیکلو تری دکا نیل) فنیل]-۱، ۱۱- دی اکسا-۴، ۶، ۸- تری آزا سیکلو تری دکان مس (II) پرکلرات $[Cu_2L_1](ClO_4)_4$ ۴۳

۲-۳-۲- تهیه کمپلکس دوهسته‌ای ۶- {۴- [۴- (۱، ۱۱- دی اکسا-۴، ۶، ۸-

تری آزا سیکلو تری دکانیل) بنزیل] فنیل}-۱، ۱۱- دی اکسا-۴، ۶، ۸- تری آزا سیکلو تری دکان مس(II) پرکلرات $[Cu_2L_2](ClO_4)_4$ ۴۴

۲-۳-۳- تهیه کمپلکس دوهسته‌ای۶- {۴- [۴- (۱، ۱۱- دی اکسا- ۴، ۶، ۸-تری آزا سیکلو تری دکا نیل) بنزیل] فنیل}- ۱، ۱۱- دی اکسا- ۴، ۶، ۸- تری آزا سیکلو تری دکان مس(II) پرکلرات $[Cu_2L_3](ClO_4)_4$ ۴۴

۲-۳-۴- تهیه کمپلکس دوهسته‌ای ۶- {۴- [۴- (۱، ۱۱- دی اکسا—۴، ۶، ۸- تری آزا سیکلو تری دکا نیل) فنوکسی] فنیل} -۱، ۱۱- دی اکسا- ۴، ۶، ۸- تری آزا سیکلو تری دکان مس(II) پرکلرات $[Cu_2L_4](ClO_4)_4$ ۴۵

۲-۳-۵- تهیه کمپلکس دوهسته‌ای۶- (۴- {[۴- (۱، ۱۱- دی اکسا-۴، ۶، ۸- تری آزا سیکلو تری دکا نیل) فنیل] سولفونیل}فنیل) -۱، ۱۱- دی اکسا-۴، ۶، ۸- تری آزا سیکلو تری دکان مس(II) پرکلرات $[Cu_2L_5](ClO_4)_4$ ۴۵

۲-۴- تهیه کمپلکس‌های بیس (ماکروسیکل) دوهسته‌ای نیکل(II) ۴۶

۲-۴-۱- تهیه کمپلکس دوهسته‌ای ۶- [۴- (۱، ۱۱- دی اکسا- ۴، ۶، ۸- تری آزا سیکلو تری دکا نیل) فنیل]- ۱، ۱۱- دی اکسا-۴، ۶، ۸- تری آزا سیکلو تری دکان نیکل(II) پرکلرات $[Ni_2L_1](ClO_4)_4$ ۴۶

۲-۴-۲- تهیه کمپلکس دوهسته‌ای ۶- {-۴ -[۴ -(۱، ۱۱- دی اکسا-۴، ۶، ۸- تری آزا سیکلو تری دکا نیل) بنزیل] فنیل} -۱، ۱۱- دی اکسا-۴، ۶، ۸- تری آزا سیکلو تری دکان نیکل(II) پرکلرات $[Ni_2L_2](ClO_4)_4$ ۴۶

عنوان	فهرست مطالب	صفحه

۲-۴-۳- تهیه کمپلکس دوهسته‌ای ۶- {۴- [۴- (۱، ۱۱- دی اکسا-۴، ۶، ۸- تری آزا سیکلو تری دکا نیل) بنزیل] فنیل}- ۱، ۱۱- دی اکسا- ۴، ۶، ۸- تری آزا سیکلو تری دکان نیکل(II) پرکلرات $[Ni_2L_3](ClO_4)_4$ ۴۷

۲-۴-۴- تهیه کمپلکس دوهسته‌ای ۶- {۴- [۴- (۱، ۱۱- دی اکسا— ۴، ۶، ۸- تری آزا سیکلو تری دکا نیل) فنوکسی] فنیل}- ۱، ۱۱- دی اکسا- ۴، ۶، ۸- تری آزا سیکلو تری دکان نیکل(II) پرکلرات $[Ni_2L_4](ClO_4)_4$ ۴۸

۲-۴-۵- تهیه کمپلکس دوهسته‌ای ۶- (۴- {[۴- (۱، ۱۱- دی اکسا-۴، ۶، ۸- تری آزا سیکلو تری دکا نیل) فنیل] سولفونیل} فنیل) -۱، ۱۱- دی اکسا- ۴، ۶، ۸- تری آزا سیکلو تری دکان نیکل(II) پرکلرات $[Ni_2L_5](ClO_4)_4$ ۴۸

۲-۵- اکسایش تترا هیدرو فوران (THF) با استفاده از آب اکسیژنه (H_2O_2) در حضور کمپلکس‌های دوهسته‌ای بیس (ماکروسیکل) مس(II) پرکلرات $[Cu_2L_{1-5}](ClO_4)_4$ ۴۹

۲-۶- بررسی اثر غلظت کاتالیزور در اکسایش تتراهیدروفوران (THF) ۴۹

۲-۷- بررسی اثر زمان در اکسایش تتراهیدروفوران (THF) ۵۰

۲-۸- بررسی اثر حلال در اکسایش تتراهیدروفوران (THF) ۵۰

۲-۹- اکسایش سیکلوهگزن با استفاده از O_2 در حضور کمپلکس‌های دوهسته‌ای بیس (ماکروسیکل) نیکل(II) پرکلرات $[Ni_2L_{1-5}](ClO_4)_4$ ۵۰

۲-۱۰- بررسی اثر دما در اکسایش سیکلوهگزن ۵۱

۲-۱۱- بررسی اثر غلظت کاتالیزور در اکسایش سیکلوهگزن ۵۱

فصل سوم- بحث و نتیجه گیری

عنوان	فهرست مطالب	صفحه

۳-۱- تهیه بیس (ماکروسیکل‌های) دوهسته‌ای مس(II) پرکلرات $[Cu_2L_{1-5}](ClO_4)_4$ ۵۳

۳-۲- اکسایش تترا هیدروفوران با استفاده از H_2O_2 در حضور کمپلکس‌های ۱۳- عضوی بیس(ماکروسیکل) مس(II) پرکلرات $[Cu_2L_{1-5}](ClO_4)_4$ ۶۰

۳-۳- بررسی اثر غلظت کاتالیزور در اکسایش THF توسط H_2O_2 ۶۳

۳-۴- بررسی اثر زمان در اکسایش THF توسط H_2O_2 در حضور کمپلکس $[Cu_2L_5](ClO_4)_4$ ۶۵

۳-۵- بررسی اثر حلال در اکسایش THF توسط H_2O_2 در حضور کمپلکس $[Cu_2L_5](ClO_4)_4$ ۶۷

۳-۶- مکانیسم فعالسازی پیوند C-H در تتراهیدروفوران ۷۰

۳-۷- تهیه بیس(ماکروسیکل‌های) دوهسته‌ای نیکل(II) پرکلرات $[Ni_2L_{1-5}](ClO_4)_4$ ۷۳

۳-۸- اکسایش سیکلوهگزن با استفاده از O_2 در حضور کمپلکس‌های $[Ni_2L_{1-5}](ClO_4)_4$ ۷۸

۳-۹- بررسی اثر غلظت کاتالیزور در اکسایش سیکلوهگزن ۸۱

۳-۱۰- بررسی اثر دما بر اکسایش سیکلوهگزن در حضور اکسیدان O_2 با استفاده از کاتالیزور $[Ni_2L_5](ClO_4)_4$ ۸۳

۳-۱۱- مکانیسم فعال سازی پیوند C-H در سیکلوهگزن ۸۵

منابع و مآخذ ۹۰

عنوان	فهرست جداول	صفحه

جدول ۱-۱- مقایسه انواع اکسیدان‌های معمول در فرایند اکسایش کاتالیزوری ۳۹

جدول ۳-۱- بررسی اثر کمپلکس‌های بیس (ماکروسیکل) باز شیف $[Cu_2L_{1\text{-}5}](ClO_4)_4$ در واکنش اکسایش تتراهیدروفوران ۵۴

جدول ۳-۲- داده‌های آنالیز عنصری و طیف سنجی مادون قرمز برای کمپلکس‌های بیس(ماکروسیکل) مس(II) پرکلرات $[Cu_2L_{1\text{-}5}](ClO_4)_4$ ۵۷

جدول۳-۳- داده‌های طیف سنجی الکترونی، ممان مغناطیسی و هدایت مولی برای کمپلکس‌های بیس(ماکروسیکل) مس(II) پرکلرات $[Cu_2L_{1\text{-}5}](ClO_4)_4$ ۵۹

جدول ۳-۴- بررسی اثر کمپلکس‌های بیس(ماکروسیکل) مس(II) در اکسایش THF در حضور H_2O_2 ۶۱

جدول ۳-۵- بررسی اثر غلظت کاتالیزور $[Cu_2L_5](ClO_4)_4$ در اکسایش THF با استفاده از H_2O_2 ۶۳

جدول۳-۶- بررسی اثر زمان در گزینش پذیری محصولات حاصل از اکسایش توسط کاتالیزور $[Cu_2L_5](ClO_4)_4$ ۶۵

جدول۳-۷- بررسی اثر حلال در محصولات حاصل از اکسایش THF توسطH_2O_2 در حضور کاتالیزور $[Cu_2L_5](ClO_4)_4$ ۶۸

جدول ۳-۸- درصد تبدیل مولی و گزینش پذیری محصولات حاصل از اکسایش THF با H_2O_2 در حضور کمپلکسهای ماکروسیکل ۱۴-عضوی مس(II) پرکلرات ۷۱

جدول ۳-۹- درصد تبدیل مولی و گزینش پذیری محصولات حاصل از اکسایش THF با H_2O_2 در حضور کمپلکسهای ماکروسیکل ۱۴-عضوی مس(II) پرکلرات محبوس شده در زئولیت ۷۲

جدول ۳-۱۰- داده‌های آنالیز عنصری و طیف سنجی مادون قرمز برای کمپلکس‌های

عنوان	فهرست جداول	صفحه

بیس(ماکروسیکل) نیکل(II) پرکلرات $[Ni_2L_{1-5}](ClO_4)_4$ ۷۵

جدول ۳-۱۱- داده‌های طیف سنجی الکترونی، ممان مغناطیسی و هدایت مولی برای کمپلکس‌های بیس(ماکروسیکل) نیکل(II) پرکلرات $[Ni_2L_{1-5}](ClO_4)_4$ ۷۷

جدول ۳-۱۲- بررسی اثر کاتالیزوری کمپلکس های بیس(ماکروسیکل) نیکل(II) $[Ni_2L_{1-5}](ClO_4)_4$ در اکسایش سیکلوهگزن در حضور اکسیدان O_2 ۷۹

جدول ۳-۱۳- اثر غلظت کاتالیزور $[Ni_2L_5](ClO_4)_4$ بر فرایند اکسایش سیکلو هگزن ۸۱

جدول ۳-۱۴- بررسی اثر دما بر گزینش پذیری محصولات حاصل از اکسایش سیکلو هگزن در حضور کاتالیزور $[Ni_2L_5](ClO_4)_4$ ۸۳

فصل اول

مباحث نظری

مقدمه

۱–۱– اثر تمپلت[1]

در سال ۱۸۴۰ اتلینگ[2] یک محصول کریستالی سبز سیاه از واکنش مس(II) استات، سالیسیل آلدهید و محلول آمونیاک جدا کرد [۱]. چند سال بعد شیف[3] نشان داد که از واکنش نمک فلزی، سالیسیل آلدهید و آمونیاک کمپلکسی آلدیمین نتیجه می‌شود [۲]. اما اولین سنتز با شناخت اثر تمپلت، توسط بوش[4] در سال ۱۹۶۴ انجام گرفت [۳].

۱–۲– انواع اثر تمپلت:

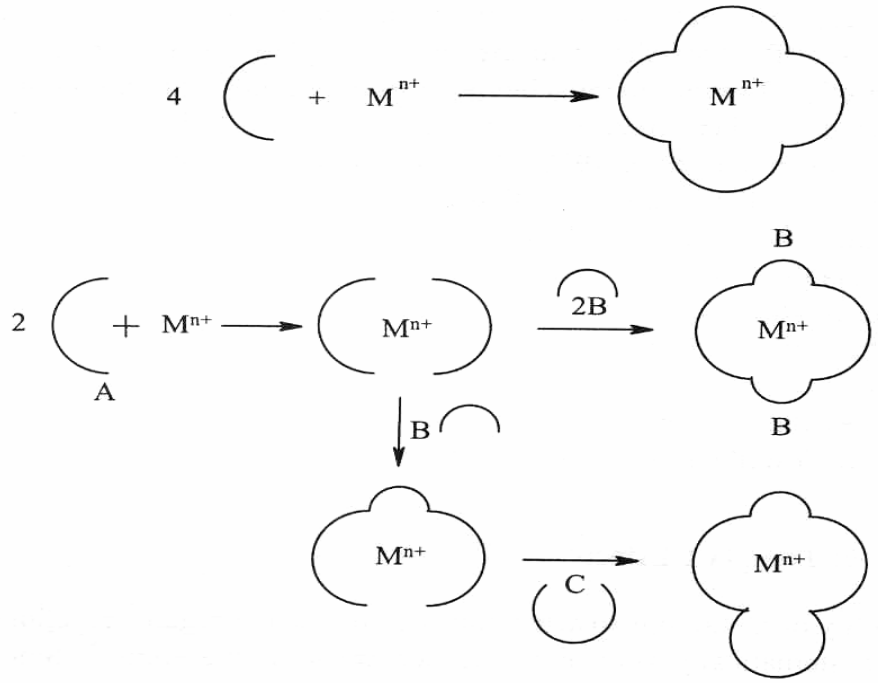
اثر سینتیکی تمپلت

اثر ترمودینامیکی تمپلت

۱–۲–۱– اثر سینتیکی تمپلت

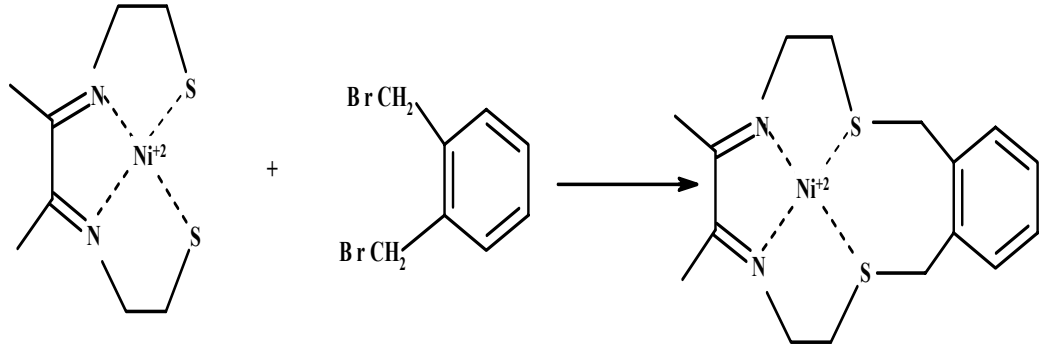
1) The template effect
2) Ettling
3) Schiff
4) Busch

شیمی فضایی که یون فلزی به واکنش دهنده‌ها القاء می‌کند. در حقیقت این اثر مسیرهایی را برای رسیدن به محصول فراهم می‌کند که در غیاب یون فلزی امکان تشکیل آنها وجود ندارد. اثر سینتیکی تمپلت مسیر مکانیسمی واکنش را تحت تاثیر قرار می‌دهد [۴]. طرح زیر اثرسینتیکی تمپلت را بیان می‌کند.



طرح ۱-۱

بوش اثر سینتیکی تمپلت را اولین بار در سنتز کمپلکس مسطح مربع دیا مغناطیسی ۲ و ۳ – بوتان – بیس (مرکاپتو اتیل ایمینو) – نیکل(II) نشان داد (طرح ۱-۲) [۵].

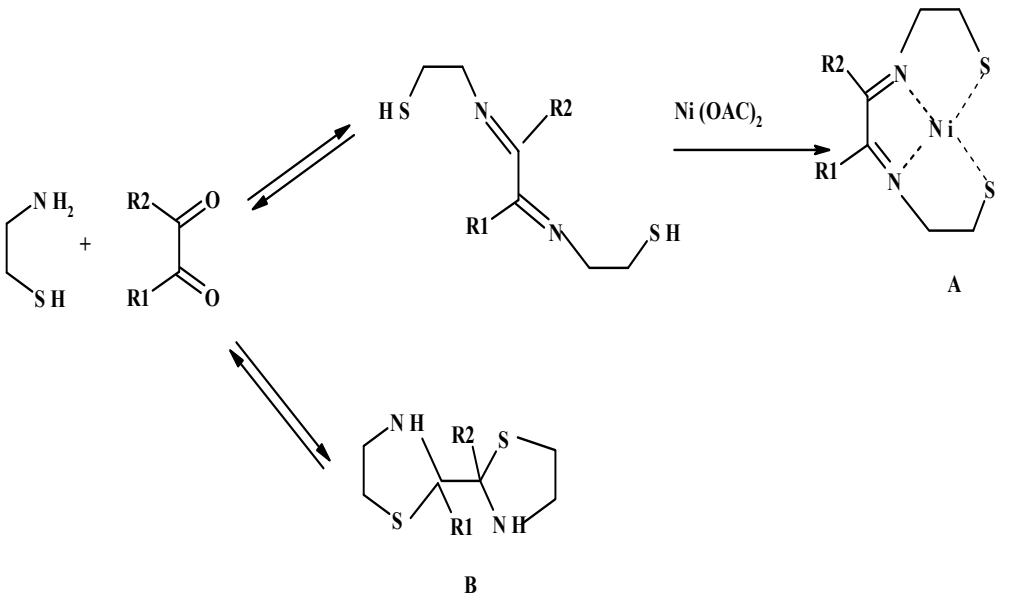


طرح ۱-۲

او کمپلکس مذکور را که دارای اتم‌های گوگرد انتهایی در موقعیت سیس است با معرف-های آلکیله کننده[1] واکنش داد و محصول موردنظر را گرفت. اهمیت این واکنش در آنجا است که اتم فلزی، اتم‌های گوگرد را درموقعیت سیس قرار داده و باعث می‌شود یک لیگاند پایدار ماکروسیکل[2] تشکیل شود. این واکنش در غیاب یون فلزی انجام نمی‌شود.

۱-۲-۲- اثر ترمودینامیکی تمپلت

اثر ترمودینامیکی تمپلت به واکنش‌هایی که در غیاب یون فلزی انجام می‌شود بر می-گردد. در این مورد، یون فلزی تشکیل محصول مطلوب را با حذف محصولات دیگر از تعادل ارتقاء می‌دهد [۶]. به عبارت دیگر یون فلزی بین مخلوط تعادل از ساختارها یک ساختار را انتخاب می‌کند (طرح ۱-۳).



1) Alkylating

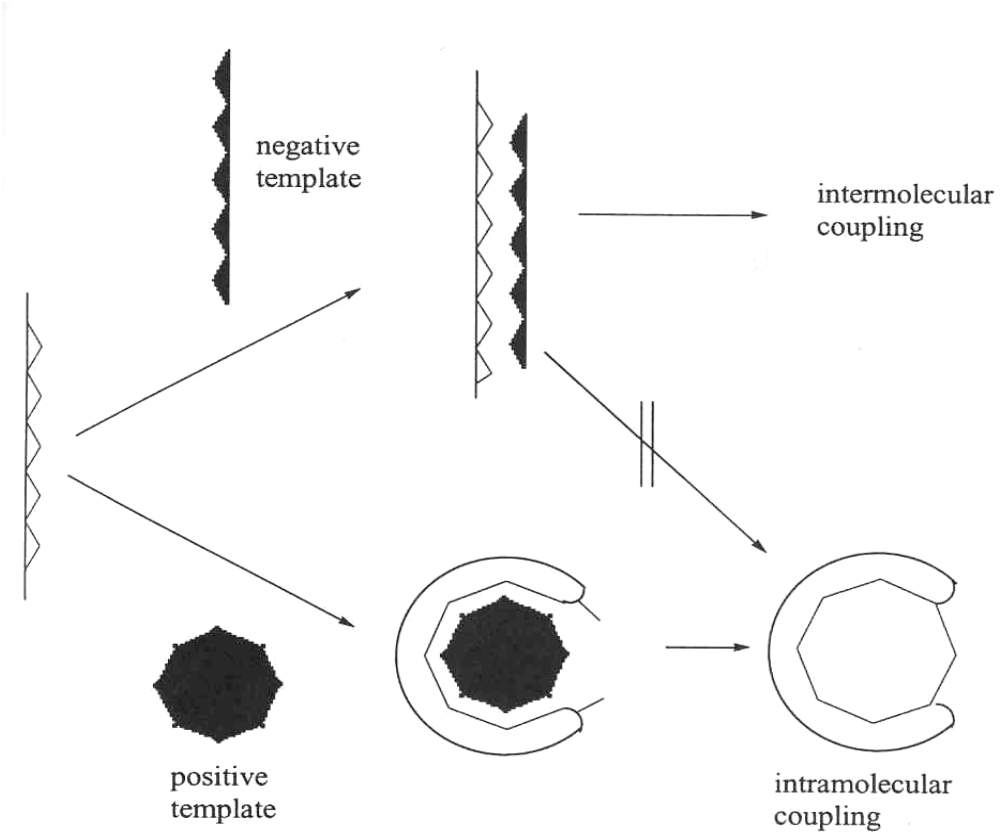
2) Macrocyclic

طرح ۱-۳

در غیاب یون فلزی واکنش هم مسیر A و هم مسیر B را می‌رود، اما در حضور فلز، مسیر A غالب است و حدود ۷۰٪ محصول را تشکیل می‌دهد. اثر تمپلت در حقیقت یک اثر سازمان دهنده مولکولی است و یون فلزی باعث می‌شود لیگاند از بین آرایش‌های مختلف یک آرایش خاص را انتخاب کند.

۱-۳- اثر تمپلت منفی

اثر تمپلت مثبت دو قسمت واکنش پذیر یک مولکول را کنار هم می‌آورد، در حالی که اثر تمپلت منفی گروه‌های واکنش پذیر را جدا از هم نگه می‌دارد. در حقیقت تمپلت مثبت یک واکنش درون مولکولی است در صورتی‌که تمپلت منفی یک واکنش بین مولکولی است [۷].



طرح ۱-۴

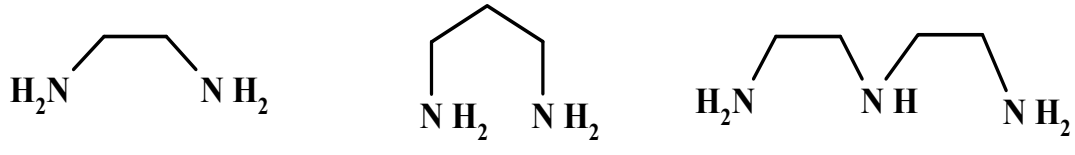
۱-۴- عوامل موثر بر یک واکنش تمپلت:

۱-۴-۱- اثر کئوردیناسیون لیگاندها

این اثر به اصل اسید و باز سخت و نرم[1] برمی‌گردد و برطبق آن فلزات قلیایی و قلیایی خاکی فعالیت تمپلت بهتری به لیگاندهای دهنده اکسیژن مانند اترهای تاجی شکل[1] نشان می-دهند و فلزات واسطه فعالیت تمپلت بهتری نسبت به لیگاندهای دهنده نیتروژن از خود نشان می‌دهند.

۱-۴-۲- اثر کیلیت[3]

مشاهدات تجربی و مطالعات کمی نشان می‌دهد کمپلکس کیلیت فلزی از کمپلکس لیگاند تک دندانه متناظر پایدارتر است، این بعنوان اثر کیلیت شناخته می‌شود و بهترین اثر کیلیت برای حلقه‌های ۵ عضوی و ۶ عضوی مشاهده می‌شود و هرچه حلقه تشکیل شده مسطح تر باشد اثر کیلیت پایداری بیشتری به کمپلکس می دهد [۸]. برای مثال دی آمین‌های زیر نسبت به آمونیاک کمپلکس‌های پایدارتری با فلز تشکیل داده و فلز اثر تمپلت خود را بهتر نشان می‌دهد.



1) Hard Soft Acid Base
2) Crown
3) The chelate effect