

سلامة الاضلاع



دانشکده‌ی شیمی

پایان‌نامه دوره‌ی کارشناسی ارشد در رشته‌ی شیمی معدنی

موضوع:

سنتز و شناسایی کمپلکسهای فلزی با لیگاندهای کیلیت باز شیف نامتقارن

حاوی گروههای ایمین-اکسیم

استاد راهنما:

دکتر حمید گلچوبیان

استاد مشاور:

دکتر محمود تاجبخش

اساتید داور:

خانم دکتر نظری

خانم دکتر منادی

نام دانشجو:

حمید قربانپور

خرداد ۱۳۹۰

«پاس و ستایش خاص پروردگاری است که جهان را با کوه علم و دانش آراست و به انسانیت مفهوم بخشید. خدایا تو را سپاس می گویم که جرعه ای از شراب ناب علم را به من نوشاندی. پروردگارا تمامی جویندگان علم را در کلیه مراحل زندگی را هما و راهبر باش تا با اتکاب ذات اقدس تو گام بردارند و توفیق خدا کثر خدمت در راه علم نصیب آنان شود، به این امید که در راه تو خدمت گذاری صادق باشند.»

باسپاس فراوان از:

استاد ارجمند جناب آقای دکتر گلچویان که تمام آموخته های خود در این پروژه را مدیون ایشان، سهم و بار اهنایی های بی دریغ و دلسوزانه خود مراد انجام این مهم یاری کردند.

جناب آقای دکتر تاجبخش که استاد مشاور من در این پروژه بودند و از راهبانی های ایشان بهره بردم.

خانم دکتر نظری و خانم دکتر منادی که زحمات مطالعه و داوری این پایان نامه به عهده ی ایشان بود.

و با تشکر از:

از دوستان خوبم در آزمایشگاه تحقیقاتی معدنی، که در طول این مدت، به کاری خوب و صمیمانه ای با هم داشتیم.

تقدیم به

پدرم، که گرمای وجودش را همواره کنار خود احساس می‌کنم، اگرچه در فراق سرد خود آرمیده است

و

مادرم، که بزرگترین حامی من بعد از خداست.

برادر و خواهر مهربانم، برای همه‌ی زحمات و راهنمایی‌هایشان

همسرم، برای محبت و کمک‌های بی‌دینش

چکیده

در این پروژه کمپلکس های دو هسته ای مس (II) با فرمول کلی $[Cu_2(dox-enR_2)_2]X_2$ (که $dox-enR_2$ لیگندی است که از واکنش تراکمی بین دی استیل مونواکسیم و N,N -دی آلکیل اتیلن دی آمین بدست می آید. R نشان دهنده ی گروه های آلکیلی: متیل، اتیل و ایزوپروپیل می باشد و X نشان دهنده ی یون های مخالف پرکلرات و تترا فیل بورات است) تهیه گردید. این کمپلکس ها با استفاده از روش های تجزیه ی عنصری، هدایت مولی، طیف سنجی های $UV-Vis$ و IR شناسایی شدند. تأثیر قطبیت حلال و یون های مخالف بر مقادیر λ_{max} انتقالات $d-d$ کمپلکس ها با استفاده از طیف سنجی مرئی مورد بررسی قرار گرفت. تمام کمپلکس ها سولواتوکرومیسم مثبت را نشان دادند. معادلاتی شامل چند مولفه ی تجربی متفاوت برای توجیه مهمترین مولفه ی قطبیت حلال که بر انتقالات $d-d$ کمپلکس ها تأثیر دارد با استفاده از نرم افزار کامپیوتری $SPSS$ ارائه گردید. استفاده از روش رگرسیون خطی چندگانه مرحله ای نشان دهنده ی این موضوع می باشد که قدرت دهندگی حلال (که با مولفه ی تجربی DN معرفی می شود) مهمترین نقش را در بروز پدیده ی سولواتوکرومیسم در کمپلکس های سنتزی ایفا می کند.

واژه های کلیدی:

کمپلکس های دو هسته ای، دی استیل مونواکسیم، سولواتوکرومیسم، مس (II)، نرم افزار $SPSS$.

فهرست مطالب

شماره ی صفحه	عنوان
۱	۱- مقدمه و تئوری
۱	۱-۱- منشأ رنگ ها در ترکیبات معدنی
۳	۲-۱- نقش حلال ها و اثرات حلال
۵	۳-۱- مولفه های قطبیت حلال
۶	۱-۳-۱- مولفه ی α
۶	۲-۳-۱- مولفه ی β
۷	۳-۳-۱- مولفه ی DN
۷	۴-۳-۱- مولفه ی AN
۸	۵-۳-۱- مولفه ی $E_T(30)$
۸	۴-۱- کروموتروپیسیم
۱۱	۱-۴-۱- ویژگی های یک ترکیب سولواتو کرومیسیم
۱۱	۲-۴-۱- سولواتو کرومیسیم در کمپلکس های معدنی
۱۴	۱-۲-۴-۱- سولواتو کرومیسیم در کمپلکس های نیکل (II)
۱۵	۲-۲-۴-۱- سولواتو کرومیسیم در کمپلکس های مس (II)
۱۵	۵-۱- کمپلکس های دو هسته ای
۱۶	۱-۵-۱- کمپلکس های دو هسته ای مس (II)
۱۶	۱-۱-۵-۱- سولواتو کرومیسیم کمپلکس های دو هسته ای مس (II)
۱۷	۶-۱- کاربرد مدل های آماری در مطالعات سولواتو کرومیسیمی
۱۷	۱-۶-۱- بسته نرم افزاری SPSS
۱۸	۲-۶-۱- رگرسیون خطی چندگانه

۱۹	۱-۲-۶-۱- رگرسیون خطی چندگانه مرحله ای
۲۰	۱-۲-۶-۲- تجزیه و تحلیل آماری مدل
۲۲	۱-۲-۶-۳- روش ارزیابی تقاطعی
۲۴	۱-۷- اهداف تحقیق
۲۵	۲- بخش تجربی
۲۵	۲-۱- دستگاه ها و مواد مورد استفاده
۲۵	۲-۱-۱- دستگاه ها
۲۵	۲-۱-۱-۱- دستگاه IR
۲۶	۲-۱-۱-۲- دستگاه NMR
۲۶	۲-۱-۱-۳- دستگاه هدایت سنج
۲۶	۲-۱-۱-۴- دستگاه تجزیه عنصری
۲۶	۲-۱-۱-۵- دستگاه UV-Vis
۲۷	۲-۱-۲- مواد شیمیایی
۲۸	۲-۲- تهیه ترکیبات
۲۸	۲-۲-۱- تهیه لیگند ها
۲۸	۲-۲-۱-۱- روش تهیه لیگند ۱
۲۹	۲-۲-۱-۲- روش تهیه لیگند ۲
۳۰	۲-۲-۲- روش تهیه کمپلکس ها
۳۰	۲-۲-۱- روش تهیه کمپلکس ۱
۳۱	۲-۲-۲- روش تهیه کمپلکس ۲
۳۱	۲-۲-۳- روش تهیه کمپلکس ۳
۳۲	۲-۲-۴- روش تهیه کمپلکس ۴
۳۳	۲-۲-۵- روش تهیه کمپلکس ۵

۳۳	۲-۲-۲-۶- روش تهیه کمپلکس ۶
۳۴	۳- بحث و نتیجه گیری
۳۴	۳-۱- سنتز و شناسایی ترکیبات
۳۴	۳-۱-۱- روش تهیه و شناسایی لیگند ها
۳۶	۳-۱-۲- روش تهیه و شناسایی کمپلکس ها
۴۰	۳-۱-۲-۱- روش دیگر تهیه کمپلکس های حاوی یون مخالف پرکلرات
۴۳	۳-۲- بررسی سولواتو کرومیسم کمپلکس ها
۴۳	۳-۲-۱- بررسی سولواتو کرومیسم کمپلکس های ۱، ۲ و ۳
۴۵	۳-۲-۲- بررسی سولواتو کرومیسم کمپلکس های ۴، ۵ و ۶
۴۸	۳-۳- تحلیل آماری نتایج
۴۸	۳-۳-۱- بررسی سولواتو کرومیسم کمپلکس های سنتزی به روش رگرسیون خطی چندگانه
	مرحله ای (SMLR)
۵۴	۳-۳-۲- بررسی رابطه ی بیشینه ی طول موج جذبی کمپلکس ها با DN حلال ها
۵۸	۳-۴- نتیجه گیری
۵۹	۳-۵- پیشنهاداتی برای کارهای آینده
۶۰	ضمیمه ۱ (طیف های IR)
۶۸	ضمیمه ۲ (طیف های NMR)
۷۲	مراجع

فهرست شکل ها

عنوان

شماره ی صفحه

۳	شکل ۱-۱: تعدادی از انتقالات نامبرده شده در کمپلکس های فلزات واسطه
۱۰	شکل ۱-۲: سولواتو کرومیسم منفی (هیپسو کرومیک)
۱۰	شکل ۱-۳: سولواتو کرومیسم مثبت (باثو کرومیک)
۱۲	شکل ۱-۴: (a) معرف بازی لوئیس (b) معرف اسیدی لوئیس
۱۲	شکل ۱-۵: مکانیسم کئوردینه شدن حلال به نیکل (II)
۱۳	شکل ۱-۶: الگوی شکافتگی اوربیتال های d نیکل (II) به دلیل اضافه شدن مولکول های حلال
۱۳	شکل ۱-۷: مکانیسم سولواتو کرومیسم نوع دوم در کمپلکس آهن (II)
۱۴	شکل ۱-۸: الگوی شکافتگی اوربیتال d کمپلکس آهن (II)
۴۱	شکل ۳-۱: طیف های IR کمپلکس های ۱، ۲ و ۳
۴۲	شکل ۳-۲: طیف های IR کمپلکس های ۴، ۵ و ۶
۴۴	شکل ۳-۳: طیف جذبی کمپلکس ۱ در حلال های مختلف
۴۴	شکل ۳-۴: طیف جذبی کمپلکس ۲ در حلال های مختلف
۴۵	شکل ۳-۵: طیف جذبی کمپلکس ۳ در حلال های مختلف
۴۶	شکل ۳-۶: طیف جذبی کمپلکس ۴ در حلال های مختلف
۴۷	شکل ۳-۷: طیف جذبی کمپلکس ۵ در حلال های مختلف
۴۷	شکل ۳-۸: طیف جذبی کمپلکس ۶ در حلال های مختلف
۵۱	شکل ۳-۹: نمودار λ_{exp} بر حسب λ_{pre} کمپلکس ۱
۵۱	شکل ۳-۱۰: نمودار λ_{exp} بر حسب λ_{pre} کمپلکس ۲
۵۲	شکل ۳-۱۱: نمودار λ_{exp} بر حسب λ_{pre} کمپلکس ۳

- شکل ۳-۱۲: نمودار λ_{exp} بر حسب λ_{pre} کمپلکس ۴
- ۵۲
- شکل ۳-۱۳: نمودار λ_{exp} بر حسب λ_{pre} کمپلکس ۵
- ۵۳
- شکل ۳-۱۴: نمودار λ_{exp} بر حسب λ_{pre} کمپلکس ۶
- ۵۳
- شکل ۳-۱۵: رابطه ی خطی بین λ_{max} کمپلکس ۱ و DN حلال های مورد استفاده
- ۵۴
- شکل ۳-۱۶: رابطه ی خطی بین λ_{max} کمپلکس ۲ و DN حلال های مورد استفاده
- ۵۵
- شکل ۳-۱۷: رابطه ی خطی بین λ_{max} کمپلکس ۳ و DN حلال های مورد استفاده
- ۵۵
- شکل ۳-۱۸: رابطه ی خطی بین λ_{max} کمپلکس ۴ و DN حلال های مورد استفاده
- ۵۶
- شکل ۳-۱۹: رابطه ی خطی بین λ_{max} کمپلکس ۵ و DN حلال های مورد استفاده
- ۵۶
- شکل ۳-۲۰: رابطه ی خطی بین λ_{max} کمپلکس ۶ و DN حلال های مورد استفاده
- ۵۷

فهرست جدول ها

عنوان

شماره ی صفحه

- جدول ۱-۲: مواد شیمیایی استفاده شده و نام شرکت سازنده ی آنها ۲۷
- جدول ۱-۳: نتایج اندازه گیری هدایت مولی کمپلکس های ۱، ۲ و ۳ ۳۸
- جدول ۲-۳: نتایج اندازه گیری هدایت مولی کمپلکس های ۴، ۵ و ۶ ۳۹
- جدول ۳-۳: مقایسه ی λ_{\max} و ϵ_{\max} کمپلکس های ۱، ۲ و ۳ در حلال های مختلف ۴۳
- جدول ۴-۳: مقایسه ی λ_{\max} و ϵ_{\max} کمپلکس های ۴، ۵ و ۶ در حلال های مختلف ۴۶
- جدول ۵-۳: مقادیر مولفه های حلال های مورد استفاده ۴۸
- جدول ۶-۳: معادلات بدست آمده از رگرسیون خطی چندگانه مرحله ای ۴۹
- جدول ۷-۳: مقادیر بدست آمده از محاسبه ی Q^2 ، PRESS، PRESS/SSY و R_{pre} ۵۰

فهرست شماها

عنوان

شماره ی صفحه

۳۵	شما ی ۱-۳: معادله واکنش تهیه لیگندها
۳۷	شما ی ۲-۳: معادله کلی واکنش تهیه کمپلکس های ۱، ۲ و ۳
۳۸	شما ی ۳-۳: معادله کلی واکنش تهیه کمپلکس های ۴، ۵ و ۶
۴۰	شما ی ۴-۳: معادله کلی تشکیل کمپلکس های حاوی پرکلرات از لیگند مربوطه

لیست علایم و اختصارات

اصطلاحات تخصصی

AN	Acceptor Number
CT	Charge Transfer
DN	Donor Number
IL	Intra Ligand Transition
IR	Infrared
IT	Inter valence Transition
LF	Ligand Field
LMCT	Ligand to Metal Charge Transfer
MLCT	Metal to Ligand Charge Transfer
MSCT	Metal to Solvent Charge Transfer
NMR	Nuclear Magnetic Resonance
Ph	Phenyl Ring
UV	Ultra-Violet
Vis	Visible

اصطلاحات مربوط به لیگند ها

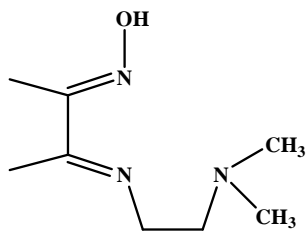
acac	Acetylacetonate
CN	Cyanide
diamine	N,N- Dialkyle N'-benzylethylenediamine
en	Ethylenediamine
Hdox	Diacetylmonoxime
Phen	1,10- phenanthroline
pmdt	N, N, N', N'', N''- Pentamethyl-diethylenetriamine
taet	Tetraketonate
tmen	Tetramethylethylenediamine

اصطلاحات مربوط به حلال ها

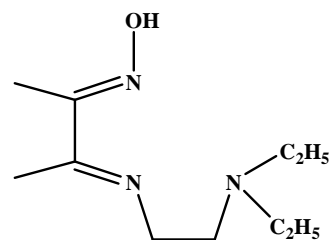
Ac	Acetone
ACN	Acetonitrile
DCM	Dichloromethane
DMF	N,N- dimethylformamide
DMSO	Dimethylsulfoxide
HMPA	Hexamethyl phosphoramidate
NB	Nitrobenzene
NM	Nitromethane
Py	Pyridine

معرفی ترکیبات

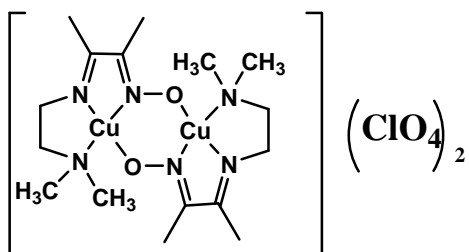
لیگند ها و کمپلکس هایی که در این پروژه معرفی می شوند دارای ساختارهای زیر می باشند و با شماره هایی که مشاهده می شود در طی پروژه بیان می گردند.



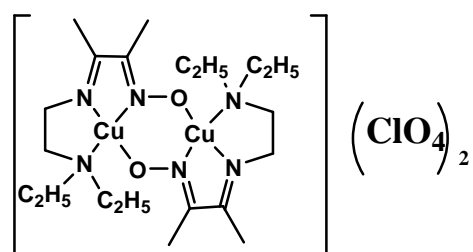
لیگند ۱



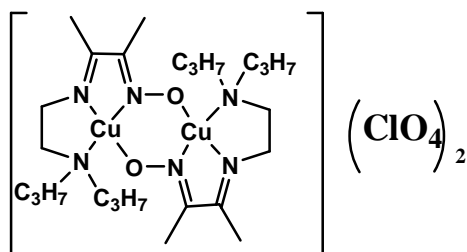
لیگند ۲



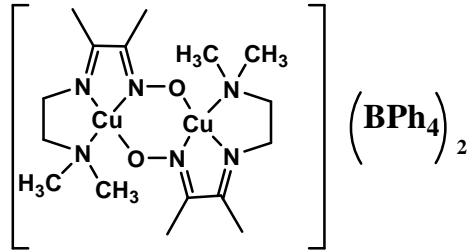
کمپلکس ۱



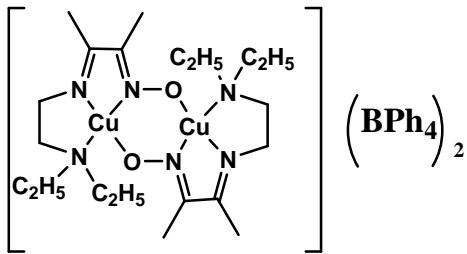
کمپلکس ۲



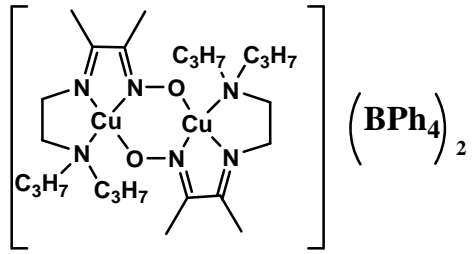
کمپلکس ۳



کمپلکس ۴



کمپلکس ۵



کمپلکس ۶

فصل اول

۱- مقدمه و تئوری

۱-۱- منشأ رنگ ها در ترکیبات معدنی

یکی از ویژگی های جالب فلزات واسطه، رنگین بودن آنها می باشد، در حالیکه ترکیبات فلزات اصلی عموماً بی رنگ هستند. به طور کلی منشأ رنگ در ترکیبات معدنی به خصوص در کمپلکس های فلزات واسطه به دلایل زیر می باشد:

۱-انتقالات میدان لیگند 1LF

۲- انتقالات بار 2CT

۳- انتقالات درون لیگند 3IL

۴- انتقال بین ظرفیتی IT^۴

جهش های $d \rightarrow d$ کمپلکس های فلزات واسطه را نوارهای میدان لیگند می نامند. به طور کلی این نوارها از شدت کمی برخوردار بوده، زیرا از نظر تقارنی این جهش از نوع $g \rightarrow g$ بوده که غیر مجاز می باشد و اگر این نوارها از لحاظ اسپینی نیز غیر مجاز باشد، با تغییر تعداد الکترون های جفت نشده همراه خواهد بود و شدت نوارها بیش از پیش پائین خواهد بود. اگر چه نوارهای میدان لیگند دارای شدت های بسیار کمی هستند اما تنوع رنگ اغلب کمپلکس های فلزات واسطه از این جهش الکترونی ناشی می شود [۱].

نوع دیگر انتقال الکترونی، انتقال بار می باشد. انتقال بار می تواند به دو صورت از فلز به لیگند (MLCT)^۵ یا از لیگند به فلز (LMCT)^۶ صورت گیرد.

در زمانی که یون فلزی با حالت اکسایش بالا به عنوان فلز مرکزی به لیگند با تمایل بالا برای اکسید شدن متصل می گردد، انتقال بار لیگند به فلز (LMCT) با شدت بسیار بالائی مشاهده می شود. بهترین مثال از این نوع، یون های ارغوانی پررنگ پرمنگنات و زرد کرومات و نارنجی دی کرومات می باشند [۲]. انتقال بار از فلز به لیگند (MLCT) بیشتر در کمپلکس هائی که لیگند آنها دارای اوربیتال π^* با انرژی پائین، به ویژه در لیگند های غیر اشباع مشاهده می شود. خانواده ای از لیگندها که بیشتر در انتقال های بار فلز به لیگند شرکت دارند، دی ایمین ها با دو اتم دهنده نیتروژن هستند.

انتقالات درون لیگندی IL که انتقالات الکترونی از نوع $n \rightarrow \pi^*$ و $\pi \rightarrow \pi^*$ می باشند، در این دسته بندی قرار می گیرند. برای مثال می توان به لیگندهای رنگی فتالوسیانین ها^۷ و اریوم کروم بلک T^۸ اشاره نمود [۳].

انتقالات بین ظرفیتی (IT) در ترکیباتی که فلزات در آن با تنوع درجه اکسایش همراه است مشاهده می شود. شدت انتقال های بین ظرفیتی در صورت وجود لیگند پل ساز مناسب، بین دو مرکز فلز، مانند

4- Inter valence transition

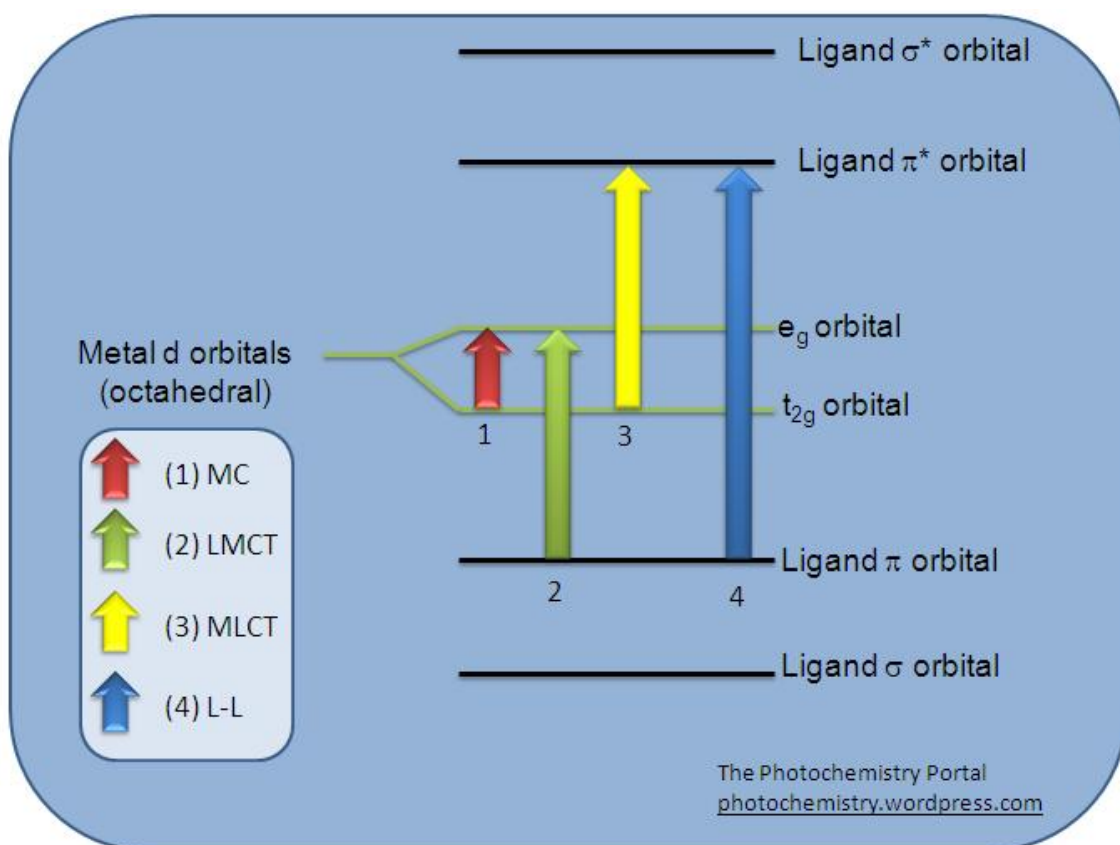
5-Metal to ligand charge transfer

6-Ligand to metal charge transfer

7-Phthalocyanine

8- Eriochrom black T

رنگدانه های آبی آهن و یون کرومیز-تاوبی $[(\text{NH}_3)_5\text{Ru}(\text{Pyz})\text{Ru}(\text{NH}_3)_5]^{+59}$ بسیار بالاست. در بعضی موارد اگر لیگند پل ساز مناسب بین دو فلز وجود نداشته باشد ممکن است شدت نوار IT به اندازه ای کم باشد که این انتقال مشاهده نشود [4]. تعدادی از این انتقالات در شکل (۱-۱) نشان داده شده اند.



شکل ۱-۱: تعدادی از انتقالات نامبرده شده در کمپلکس های فلزات واسطه

۱-۲- نقش حلال و اثرات حلال

تغییرات شیمیایی می توانند در حالت جامد، مایع و یا گاز رخ دهند. اما به جرأت می توان گفت که اکثر واکنش های شیمیایی در محلول رخ می دهند. محلول، مخلوط همگنی است که از چند ماده با نسبت های مختلف تشکیل می شود که یکی از این مواد تشکیل دهنده، حلال نامیده می شود که بخش اعظم یک محلول را به خود اختصاص می دهد.

⁹ - Creutz-Taube

با توجه به این که حلال باید توانایی حل کردن واکنش‌گرها را داشته باشد و نیز به گونه‌ای انتخاب گردد که جداسازی محصولات واکنش از محیط واکنش ساده و امکان‌پذیر باشد، انتخاب حلال می‌تواند تأثیر بسزایی بر روی واکنش‌های تحت مطالعه داشته باشد. بنابراین هر زمان که شیمی‌دانی خواستار انجام واکنش شیمیایی خاصی است، نه تنها باید به اجزای واکنش و غلظت آن‌ها، ظرف انجام واکنش، دمای مناسب برای پیشبرد واکنش و در صورت نیاز حضور یک کاتالیزگر مناسب توجه کند، بلکه باید در صورت امکان پذیر بودن واکنش طراحی شده، در مورد انتخاب حلال یا مخلوطی از حلال‌ها نیز تحقیق کند.

در سال ۱۸۶۲، برتلوت^{۱۰} و سنت-ژیلز^{۱۱}، پس از مطالعه دقیق استری شدن اسید استیک با اتانول، برای اولین بار به تأثیر حلال در سرعت واکنش شیمیایی پی بردند [۵]. در سال ۱۸۹۰، منشوتکین^{۱۲} اعلام کرد که یک واکنش نمی‌تواند از محیطی که در آن اتفاق افتاده جدا شود [۶]. او تأکید داشت تأثیر حلال‌ها عموماً مربوط به ساختارهای شیمیایی آن‌ها می‌باشد تا خواص فیزیکی آن‌ها و ارتباطی برای سرعت واکنش‌ها و ساختار حلال ارائه داد. اثر حلال بر روی موقعیت تعادل شیمیایی در سال ۱۸۹۶ توسط کلایزن^{۱۳} [۷] در آخن^{۱۴}، نور^{۱۵} [۸] در ژنا^{۱۶}، ویسلیسنوس^{۱۷} [۹] و هانتزش^{۱۸} [۱۰] در وورتزبورگ^{۱۹} کشف گردید.

از دید ماکروسکوپی، حلال جزئی می‌باشد که توسط ثابت‌های فیزیکی ماکروسکوپی مانند دمای جوش، فشار بخار، ضریب شکست، ظرفیت گرمایی، کشش سطحی و غیره شناسایی می‌گردد. حلال محیط ایده‌آلی برای انتقال حرارت در واکنش‌های گرمازا و گرماگیر نیز می‌باشد.

از دیدگاه مولکولی-میکروسکوپی حلال جزئی گسسته می‌باشد که از مولکول‌های حلال واکنش دهنده تشکیل یافته و بر اساس خواص مولکولی مانند ممان دوقطبی، قطبش پذیری الکترونیکی، توانایی

¹⁰-Berthelot

¹¹-Saint-Giles

¹²-Menschutkin

¹³Claisen

¹⁴- Aachen

¹⁵- Knorr

¹⁶- Jena

¹⁷- Wislicenus

¹⁸- Hantzsch

¹⁹- Wurzburg

دهندگی و گیرندگی پیوند هیدروژنی، توانائی دهندگی یا پذیرندگی جفت الکترون و غیره شناسائی می گردد [۱۱-۱۵].

در حلالیت مواد حل شونده، حلال شبکه بلورین حل شونده های جامد را می شکند و حل شونده های جامد یا گازی را حل می کند و تأثیر قابل ملاحظه ای بر سرعت واکنش و موقعیت تعادل شیمیائی و همچنین موقعیت و شدت طیف های جذبی حل شونده های شامل کروموفر دارند [۱۶، ۱۷].

جنبه های ماکروسکوپی و میکروسکوپی حلال با یکدیگر برای تعیین بر همکنش های حلال- حل شونده باید در نظر گرفته شوند. این جوانب شامل: ۱- خواص فیزیکی ماکروسکوپی، مانند ضریب شکست، نفوذ پذیری الکتریکی نسبی، خواص ترمودینامیکی و ... ۲- نیروهای بین مولکولی میکروسکوپی شامل یون دوقطبی، دوقطبی- دوقطبی القا شده، پیوند هیدروژنی، برهمکنش های جفت الکترون دهنده- پذیرنده و برهمکنش های حلال دوستی ۳- حلالیت در سیستم های چند جزئی شامل حلالیت انتخابی و حلالیت مایسلی و ۴- حلالیت شیمیائی مربوط به مراحل یونیزاسیون و تفکیک می باشد. موارد ۱ تا ۴ در کل به عنوان تأثیرات حلال معرفی می گردند و قطبیت^{۲۰} حلال نامیده می شوند.

۱-۳- مؤلفه های قطبیت حلال

برهم کنش میان حلال و حل شونده ناشی از پیوندهای ویژه از قبیل کئوردیناسیون، پیوند هیدروژنی و پیوندهای غیر ویژه ناشی از اثرات الکتروستاتیک می باشد. بنابراین امکان یافتن یک مؤلفه فیزیکی برای بیان مشخصات حلال مقدور نیست. بر این اساس نیاز به معرفی مؤلفه های تجربی جهت مشخص کردن اثر حلال ضرورت می یابد. از نظر تاریخی، پیشگامان مؤلفه های تجربی گرانولد و وینستین^{۲۱} بودند که در سال ۱۹۴۸ مقدار γ (مقدار کمی قدرت یونی) را توسط مطالعات ثابت سرعت محاسبه کردند [۱۸]. بعضی از پر کاربردترین مؤلفه های تجربی به همراه توضیح مختصری در مورد آنها در ادامه بیان شده است.

²⁰-Polarity
²¹- Weinstein