

۲۳۰
اسلامی



۱۹۱۹ - ۲۰۱۹



دانشگاه اصفهان

دانشکده علوم

گروه شیمی

پایان نامه‌ی دکتری رشته‌ی شیمی گرایش آلی

سنتز و اکسایش برخی از ۲-اکسو-۱،۲،۳،۴-تترا هیدرو پیریمیدین -۵-

کربوکسامیدهای جدید تحت شرایط حرارتی، تابش امواج فراصوتی، امواج ریزموج و

امواج فرابنفش

استاد راهنما:

دکتر حمیدرضا معماریان

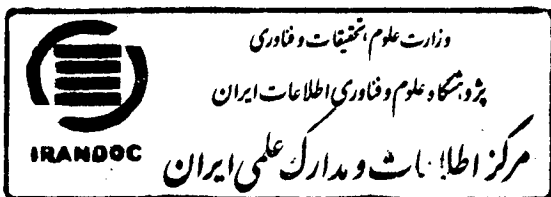
استاد مشاور:

دکتر حسن سبزیان

پژوهشگر:

موسی سلیمانی

اسفند ماه ۱۳۸۹



۱۵۹۰۱۹

۱۳۹۰/۳/۱۸

کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات، ابتکارات
و نوآوری های ناشی از تحقیق موضوع این پایان نامه
متعلق به دانشگاه اصفهان است.



دانشگاه اصفهان

دانشکده علوم

گروه شیمی

پایان نامه‌ی دکتری رشته‌ی شیمی گرایش آلی آقای موسی سلیمانی

تحت عنوان

سنتز و اکسایش برخی از ۲-اکسو-۱،۲،۳،۴-تترا هیدرو پیریمیدین -۵-
کربوکسامیدهای جدید تحت شرایط حرارتی، تابش امواج صوتی-فراصوتی، امواج
ریزموج و امواج فرابنفش

در تاریخ ۱۳۸۹/۱۲/۴ توسط هیأت داوران زیر بررسی و با درجه عالی به تصویب نهایی رسید.

۱- استاد راهنمای پایان نامه دکتر حمیدرضا معماریان با مرتبه‌ی علمی استاد امضا

۲- استاد مشاور پایان نامه دکتر حسن سبزیان با مرتبه‌ی علمی دانشیار امضا

۳- استاد داور داخل گروه دکتر احمدرضا خسروپور با مرتبه‌ی علمی دانشیار امضا

۴- استاد داور داخل گروه دکتر حسن زالی بوئینی با مرتبه‌ی علمی استادیار امضا

۵- استاد داور خارج از گروه دکتر عبدالحسین دباغ با مرتبه‌ی علمی استاد امضا

۶- استاد داور خارج از گروه دکتر عباس شکروی با مرتبه‌ی علمی استاد امضا

امضای مدیر گروه

دکتر ایرج محمدپور بلترک

سپاس و ستایش خدای را که نامهایش پاک، نعمتهایش سرشار و احسانش وافر است.

لازم می‌دانم مراتب سپاس و قدردانی خویش را تقدیم پدر و مادر عزیزم کنم که الفبای زندگی را به اینجانب آموختند و همواره با دعای خیر مرا مورد عنایت خویش قرار داده‌اند.

از همسر و دختر عزیزم که در دوران تحصیل همواره مشوق و پشتیبان اینجانب بوده‌اند و زحمات زیادی را متحمل شدند کمال تشکر را می‌نمایم.

همچنین از زحمات استاد راهنمای گرامی جناب آقای دکتر حمیدرضا معماریان که همواره با راهنمایی‌های ارزنده خود راهگشای مشکلات اینجانب بوده‌اند کمال تشکر و سپاسگزاری را دارم. از جناب آقای دکتر حسن سبزیان، استاد مشاور گرامی که همواره اینجانب را مورد لطف و عنایت خویش قرار دادند نیز تشکر می‌کنم. از سایر اساتید و دانشجویان صمیمی تحصیلات تکمیلی به ویژه جناب آقای دکتر فرهادی، خانم رنجبر، جناب آقای دکتر باقرزاده و آقای حامد احمدی و نیز کارکنان گروه شیمی سپاسگزارم.

به پاس تعبیر عظیم و انسانی‌شان از کلمه ایثار

به پاس عاطفه سرشار و گرمای امیدبخش وجودشان

به پاس قلب‌های مهربانشان که فریادرس است و سرگردانی و ترس

در پناهِشان به شجاعت می‌گراید

و به پاس محبت‌های بی‌دریغشان که هرگز فروکش نمی‌کند

این مجموعه را به پدر و مادر عزیزم، همسر مهربانم و دختر عزیزم

نازنین تقدیم می‌کنم

چکیده:

در سال ۱۸۹۳ برای اولین بار یک واکنش چندجزئی توسط پی یترو بیگینلی کشف شد که شامل سنتز دسته‌ای مهم از ترکیب‌های آلی هتروسیکل موسوم به ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدینها بود که از تراکم یک آلدهید، اوره و β -کتواستر در حضور مقادیر کاتالیتیکی از هیدروکلریک اسید و در حلال اتانول بدست آمدند. این ترکیبها و محصولهای بدست آمده از اکسایش آنها از اهمیت بیولوژیکی زیادی برخوردار هستند. در این پروژه، ابتدا برخی ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها تحت شرایط گرمایی و تابش امواج ریزموج در حضور کاتالیست زیرکونیوم (IV) کلراید و در حلال استونیتریل سنتز شد. در مرحله بعد اکسایش این ترکیبها به وسیله تترابوتیل آمونیوم پراکسی دی سولفات تحت شرایط گرمایی، تابش ریزموج، تابش امواج فراصوتی به همراه گرما و همچنین رفتار فتوشیمیائی آنها مورد بررسی قرار گرفت.

اکسایش ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها در حلال استونیتریل خشک تحت شرایط گرمایی، تابش ریزموج، تابش امواج فراصوت به همراه حرارت منجر به تشکیل محصولهای ۲-اکسو-۲،۱-دی هیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدهای مربوطه شد. مقایسه نتایج واکنشها نشان می‌دهد که تابش ریزموج و یا امواج فراصوت باعث کاهش نسبت اکسیدان به ماده اولیه و همچنین کاهش زمان واکنش گردید. در ادامه رفتار فتوشیمیایی این ترکیبات نیز مورد بررسی قرار گرفت. بر خلاف واکنش توری این ترکیبات در فاز جامد، اکسایش نوری آنها در حلال استونیتریل منجر به تشکیل محصولاتی مشابه واکنش گرمایی شد. سرعت اکسایش گرمایی و نوری بسته به طبیعت استخلافهای روی موقعیتهای ۴ و ۵ حلقه هتروسیکل می‌باشد.

رفتار الکتروشیمیایی این ترکیبها نیز مورد بررسی قرار گرفت و پتانسیل اکسایش آنها به وسیله ولتامتری چرخه‌ای اندازه‌گیری شد. نتایج بدست آمده نیز نشان داد که پتانسیل اکسایش بیشتر تحت تاثیر استخلاف موقعیت ۴ حلقه هتروسیکل قرار می‌گیرد.

ساختار بهینه ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها و نیز ۲-اکسو-۲،۱-دی هیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها، با استخلاف‌های گوناگون به وسیله روش محاسباتی $B3LYP/6-31++G^{**}$ ، مورد بررسی قرار گرفت. یافته‌های بدست آمده نشان می‌دهد که حلقه هتروسیکل در ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها به صورت شبه قایقی می‌باشد که گروه آریل در موقعیت ۴ حلقه هتروسیکل به صورت شبه محوری جهت‌گیری کرده است. همچنین، میزان انحراف اتم‌های نیتروژن موقعیت ۱ و کربن موقعیت ۴ از حلقه هتروسیکل، گشتاور دوقطبی الکتریکی، گرمای تشکیل و گرمای واکنش اکسایش محاسبه شد. در مورد بعضی از ترکیبها ساختار بهینه واسطه‌های کاتیون رادیکالی و رادیکالی که در مسیر واکنش اکسایش تولید می‌شوند، نیز بدست آمد و مشخص شد که در واکنش اکسایش انتقال الکترون از اتم نیتروژن موقعیت ۱ صورت می‌گیرد.

کلید واژه‌ها: واکنش بیگینلی، ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها، اکسایش، اکسایش نوری، تترابوتیل آمونیوم پراکسی دی سولفات، انتقال الکترون، روش محاسباتی.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
	فصل اول: مقدمه و مبانی نظری
۱-۱-۱	مقدمه
۲-۱	سنتر ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدینها
۳-۱	سنتر ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدینهای آمیدی
۱-۳-۱	سنتر مشتقهای اسیدی ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدینها و تبدیل آنها به مشتقهای
۷	آمیدی مربوط به کمک امواج ریزموج
۲-۳-۱	سنتر ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدینهای آمیدی در حضور هیدروکلریک اسید به
۸	عنوان کاتالیست تحت تابش امواج ریزموج
۳-۳-۱	سنتر ۲-اکسو-۲،۱،۴،۳-تتراهیدروپیریمیدینهای جدید و بررسی خاصیت ضدسرطانی آنها
۴-۳-۱	استفاده از کاتالیست اتیدرونیک اسید
۵-۳-۱	سنتر ۴،۶-دی آریل-۲-اکسو(تیوکسو)-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدهای
۱۰	تثبیت شده روی پلی استیرن
۶-۳-۱	سنتر ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدینهای آمیدی جدید و بررسی خاصیت
۱۱	ضدباکتریایی آنها
۴-۱	مقایسه هیدروژنهای موقعیت ۱، ۳، ۴ و متیل موقعیت ۶ از لحاظ خصلت اسیدی
۵-۱	بررسی فرمهای توتومری در ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدینها
۶-۱	تشکیل پیوندهای هیدروژنی بین مولکولی در ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدینها
۷-۱	واکنشهای ۲-اکسو(تیوکسو)-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدینها
۱-۷-۱	واکنش اکسایش
۱-۱-۷-۱	اکسایش با پتاسیم نترات در حضور سولفوریک اسید
۲-۱-۷-۱	اکسایش با ترشیو بوتیل هیدروپراکسید TBHP در حضور مس(II) کلراید و پتاسیم کربنات
۳-۱-۷-۱	اکسایش با نیتریک اسید

- ۲۱-۷-۱-۴- هیدروژن زدایی و متیل زدایی با سرب آمونیوم نترات (CAN) ۲۱
- ۲۳-۷-۱-۵- اکسایش با پتاسیم پراکسی دی سولفات در حضور کبالت (II) نترات ۶ آبه ۲۳
- ۲۴-۷-۱-۶- اکسایش با نیتروژنیوم NO^+ ۲۴
- ۲۵-۷-۱-۷- اکسایش با پتاسیم پراکسی دی سولفات ۲۵
- ۲۷-۷-۱-۸- اکسایش نوری ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدینها ۲۷
- ۳۰-۷-۱-۹- اکسایش به کمک دی استوکسی یدوبنزن و ترسیوبوتیل هیدروپراکسید ۳۰
- ۳۱-۷-۱-۲- سایر واکنشهای ۲-اکسو(تیوکسو)-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدینها ۳۱
- ۳۱-۷-۱-۲- آلكيله كردن و آسيله كردن نيتروژن موقعيت ۳ ۳۱
- ۳۱-۷-۱-۲- گوگرد زدایی ترکیبات ۲-تیوکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدینها و قرار دادن گروه ۳۱
- ۳۳-۷-۱-۲- آریل به جای گوگرد ۳۳
- ۳۳-۷-۱-۲- هیدرولیز ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدینها ۳۳
- ۳۴-۷-۱-۲- آلكيله شدن نيتروژن موقعيت ۱ ۳۴
- ۳۵-۷-۱-۲- تبدیل ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدینها به پیریمیدینها ۳۵
- ۳۶-۷-۱-۲- تبدیل ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدینها به بی سیکلو دی هیدروپیریمیدینونها ۳۶
- ۳۷-۷-۱-۲- اکسایش گروه متیل موقعیت ۶ ۳۷
- ۳۸-۷-۱-۲- واکنش کاهش ۳۸
- ۴۰-۷-۱-۲- واکنش روی پیوند دوگانه حلقه ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدینها ۴۰
- ۴۰-۷-۱-۲- واکنش تبدیل حلقه ۴۰
- ۴۱-۷-۱-۲- واکنش بسط حلقه و انقباض حلقه ۴۱
- ۴۲-۷-۱-۲- واکنش آسילה کردن فریدل-کرافت درون مولکولی ۴۲
- ۴۳-۸-۱-۴-۱- دی هیدروپیریمیدینها ۴۳
- ۴۳-۸-۱-۱-۴- سنتز ۱،۴-دی هیدروپیریمیدینها ۴۳
- ۴۴-۸-۱-۲- اکسایش ۴،۱-دی هیدروپیریمیدینها ۴۴
- ۴۴-۸-۱-۲- اکسایش ۲-متوکسی-۴،۱-دی هیدروپیریمیدینها ۴۴

عنوان

صفحه

۴۵	۱-۸-۲-۲-اکسایش ۲-متیل تیو-۴،۱-دی هیدروپیریمیدینها
۴۶	۱-۸-۲-۳-اکسایش الکتروشیمیایی ۱،۴-دی هیدروپیریمیدینها
۹-۱	استفاده از روشهای محاسبات کوانتومی برای بررسی ساختارهای
۴۷	۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدینها

فصل دوم: روشهای تجربی

۴۸	۱-۲-اطلاعات عمومی
۵۱	۲-۲- سنتز ۲-اکسو (تیوکسو)-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها
۵۱	۲-۲-۱- سنتز بتا-کتوآمیدها
۵۲	۲-۲-۲- بهینه سازی شرایط
۵۲	۲-۲-۱- انتخاب کاتالیز مناسب
۵۳	۲-۲-۲- انتخاب حلال مناسب
۵۴	۲-۲-۳- بهینه سازی مقدار کاتالیز
	۳-۲-۲- روش کلی سنتز ۲-اکسو (تیوکسو)-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها
۵۴	تحت شرایط گرمایی
	۴-۲-۲- روش کلی سنتز ۲-اکسو (تیوکسو)-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها
۵۵	تحت تابش امواج ریزموج
۵۷	۵-۲-۲- داده های فیزیکی و طیفی ترکیبهای سنتزی
	۳-۲-۱- اکسایش ۲-اکسو (تیوکسو)-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها تحت
۷۵	شرایط گرمایی
۷۵	۱-۳-۲- سنتز اکسیدان تترابوتیل آمونیوم پراکسی دی سولفات (TBAPS) (۱۰۹)
۷۵	۲-۳-۲- بهینه سازی شرایط
	۳-۳-۲- روش کلی اکسایش ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها

- تحت شرایط گرمایی ۷۷
- ۱-۳-۳-۲-اکسایش ۶-متیل-۲-اکسو-۴-فنیل-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-فنیل ۷۹
- کربوکسامید (۸۳) ۷۹
- ۲-۳-۳-۲-اکسایش ۶-متیل-۲-اکسو-۴-فنیل-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-بنزیل ۷۹
- کربوکسامید (۸۴) ۷۹
- ۳-۳-۳-۲-اکسایش ۶-متیل-۲-اکسو-۴-فنیل-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-(۴-فلوئوروفنیل) ۸۰
- کربوکسامید (۸۶) ۸۰
- ۴-۳-۳-۲-اکسایش ۶-متیل-۲-اکسو-۴-فنیل-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-(۲-کلروفنیل) ۸۱
- کربوکسامید (۸۷) ۸۱
- ۵-۳-۳-۲-اکسایش ۶-متیل-۲-اکسو-۴-فنیل-۱،۴،۳،۲-تتراهیدروپیریمیدین-۵-(۴-کلروفنیل) ۸۱
- کربوکسامید (۸۸) ۸۱
- ۶-۳-۳-۲-اکسایش ۶-متیل-۲-اکسو-۴-فنیل-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-(۴-برموفنیل) ۸۲
- کربوکسامید (۸۹) ۸۲
- ۷-۳-۳-۲-اکسایش ۴-(۲-کلروفنیل)-۶-متیل-۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین ۸۳
- ۵-(۲-کلروفنیل) کربوکسامید (۹۱) ۸۳
- ۸-۳-۳-۲-اکسایش ۴-(۳-کلروفنیل)-۶-متیل-۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین ۸۴
- ۵-(۲-کلروفنیل) کربوکسامید (۹۲) ۸۴
- ۹-۳-۳-۲-اکسایش ۴-(۴-کلروفنیل)-۶-متیل-۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین ۸۴
- ۵-(۲-کلروفنیل) کربوکسامید (۹۳) ۸۴
- ۱۰-۳-۳-۲-اکسایش ۴-(۲-برموفنیل)-۶-متیل-۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین ۸۵
- ۵-(۲-کلروفنیل) کربوکسامید (۹۴) ۸۵
- ۱۱-۳-۳-۲-اکسایش ۴-(۴-برموفنیل)-۶-متیل-۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین ۸۶
- ۵-(۲-کلروفنیل) کربوکسامید (۹۶) ۸۶

- ۱۲-۳-۳-۲-اکسایش ۶-متیل-۴-(۳'-نیتروفنیل)-۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین
- ۸۷..... ۵- (۲-کلروفنیل) کربوکسامید (۹۷)
- ۱۳-۳-۳-۲-اکسایش ۶-متیل-۴-(۴'-نیتروفنیل)-۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین
- ۸۷..... ۵- (۲-کلروفنیل) کربوکسامید (۹۸)
- ۱۴-۳-۳-۲-اکسایش ۴-(۳'-متوکسی فنیل)-۶-متیل-۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین
- ۸۸..... ۵- (۲-کلروفنیل) کربوکسامید (۹۹)
- ۱۵-۳-۳-۲-اکسایش ۴-(۴'-متوکسی فنیل)-۶-متیل-۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین
- ۸۹..... ۵- (۲-کلروفنیل) کربوکسامید (۱۰۰)
- ۱۶-۳-۳-۲-اکسایش ۶-متیل-۴-(۴'-متیل فنیل)-۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین
- ۹۰..... ۵- (۲-کلروفنیل) کربوکسامید (۱۰۱)
- ۱۷-۳-۳-۲-اکسایش ۶-متیل-۲-اکسو-۴-(۱-فنیل اتیل)-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین
- ۹۰..... ۵- (۲-کلروفنیل) کربوکسامید (۱۰۲)
- ۱۸-۳-۳-۲-اکسایش ۴-(۲'-کلروفنیل)-۶-متیل-۲-تیوکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین
- ۹۱..... ۵- (۲-کلروفنیل) کربوکسامید (۱۰۷)
- ۴-۲-اکسایش ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها تحت تابش امواج ریزموج
- ۹۱..... ۱-۴-۲-بهبهینه سازی شرایط
- ۲-۴-۲-روش کلی اکسایش ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها تحت تابش امواج ریزموج
- ۹۲..... ۵-۲-اکسایش ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها تحت تابش امواج فراصوتی همراه با گرما
- ۹۳..... ۱-۵-۲-بهبهینه سازی شرایط
- ۲-۵-۲-روش کلی اکسایش ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها تحت تابش امواج ریزموج

- تابش امواج فراصوتی همراه با گرما ۹۵
- ۶-۲- مطالعات هدایت‌سنجی روی واکنش اکسایش ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین ۹۷
- ۵- کربوکسامیدها با تترا بوتیل آمونیوم پراکسی دی سولفات ۹۷
- ۷-۲- مقایسه واکنش‌پذیری ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدینهای استری و آمیدی با ۹۷
- اکسیدانهای پتاسیم پراکسی دی سولفات و تترا بوتیل آمونیوم پراکسی دی سولفات PPS ۹۷
- ۸-۲- بررسی واکنش اکسایش نوری مشتق‌های ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین ۹۹
- ۵- کربوکسامیدها ۹۹
- ۱-۸-۲- بهینه‌سازی شرایط ۹۹
- ۲-۸-۲- روش کلی واکنش اکسایش نوری مشتقات ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین ۱۰۰
- ۵- کربوکسامیدها ۱۰۰
- ۳-۸-۲- مقایسه واکنش اکسایش نوری ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدینهای آمیدی، ۱۰۲
- کتونی و استری در حلال استونیتریل ۱۰۲
- ۹-۲- بررسی ولتامتری چرخه‌ای ترکیب‌های ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین ۱۰۲
- ۵- کربوکسامیدها ۱۰۲
- ۱-۹-۲- تهیه تترا بوتیل آمونیوم پرکلرات به عنوان الکترولیت حامی ۱۰۲
- ۲-۹-۲- روش انجام ولتامتری چرخه‌ای ترکیبات ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین ۱۰۳
- ۵- کربوکسامیدها ۱۰۳
- ۱۰-۲- مطالعات محاسباتی ۱۰۴
- ۱-۱۰-۲- بهینه‌سازی ساختار ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها ۱۰۴
- و ۲-اکسو-۲،۱-دی‌هیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها ۱۰۴
- ۲-۱۰-۲- محاسبه میزان انحراف از سطح اتم‌های ۱-N و ۴-C ۱۱۵
- ۳-۱۰-۲- محاسبات ترمودینامیکی ۱۱۷
- ۴-۱۰-۲- مقایسه داده‌های محاسباتی با داده‌های عملی ۱۱۸

فصل سوم: بحث و نتیجه گیری

۱-۳-۱- سنتر ۲-اکسو(تیوکسو)-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها	۱۲۸
۱-۱-۳- سنتر بناکتوآمیدها	۱۲۸
۲-۱-۳- اثر کاتالیست بر بازده تشکیل محصول	۱۲۸
۳-۱-۳- اثر حلال بر بازده تشکیل محصول	۱۳۱
۴-۱-۳- بهینه سازی مقدار کاتالیست	۱۳۱
۲-۳- مطالعه سازوکار واکنش سنتر ۲-اکسو(تیوکسو)-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها	۱۳۲
۳-۳- بررسی طیفهای ۲-اکسو(تیوکسو)-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها	۱۴۱
۱-۳-۳- بررسی طیف فرابنفش UV	۱۴۱
۲-۳-۳- بررسی طیف مادون قرمز IR	۱۴۱
۳-۳-۳- بررسی طیفهای رزونانس مغناطیسی پروتون $^1\text{H-NMR}$	۱۴۴
۴-۳-۳- بررسی طیفهای جرمی	۱۴۷
۴-۳-۴- اکسایش ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها تحت شرایط گرمایی	۱۴۸
۱-۴-۳- بهینه سازی مقدار، اکسیدان و حلال واکنش	۱۴۹
۲-۴-۳- اکسایش تتراهیدروپیریمیدینونهای آمیدی تحت شرایط گرمایی	۱۵۰
۵-۳-۵- اکسایش ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها تحت تابش امواج ریزموج	۱۵۰
۶-۳-۶- اکسایش ۲-اکسو-۳،۲،۱،۴-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها تحت تابش امواج فراصوتی
همراه با گرما	۱۵۲
۷-۳-۷- بررسی طیفهای ۲-اکسو-۲،۱-دی‌هیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها و مقایسه با طیفهای
مواد اولیه	۱۵۳
۱-۷-۳- بررسی طیفهای فرابنفش UV	۱۵۳
۲-۷-۳- بررسی طیفهای مادون قرمز IR	۱۵۵
۳-۷-۳- بررسی طیفهای رزونانس مغناطیسی پروتون $^1\text{H-NMR}$	۱۵۸
۴-۷-۳- بررسی طیفهای جرمی	۱۶۱

عنوان

صفحه

- ۸-۳- بررسی سازوکار اکسایش ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها ۱۶۱
- ۹-۳- بررسی نتایج هدایت‌سنجی واکنش اکسایش گرمایی ۱۶۶
- ۱۰-۳- مقایسه اکسایش ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین‌های آمیدی و استری ۱۷۱
- ۱۱-۳- اکسایش ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها تحت تابش امواج فرابنفش ۱۷۲
- ۱-۱۱-۳- بهینه‌سازی شرایط و بررسی نتایج ۱۷۲
- ۲-۱۱-۳- مقایسه واکنش‌پذیری تتراهیدروپیریمیدین‌های آمیدی، استری و کتونی ۱۸۱
- ۳-۱۱-۳- اکسایش نوری تتراهیدروپیریمیدین‌های آمیدی در حالت جامد ۱۸۴
- ۴-۱۱-۳- بررسی سازوکار اکسایش نوری تتراهیدروپیریمیدین‌های آمیدی ۱۸۴
- ۱۲-۳- بررسی ولتامتری چرخه‌ای ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها ۱۸۸
- ۱۳-۳- مطالعات محاسباتی ۱۹۵
- ۱-۱۳-۳- تعیین ساختار ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها و ۱۹۵
- ۲-۱۳-۳- بررسی میزان انحراف اتم‌های نیتروژن موقعیت ۱ و کربن موقعیت ۴ از سطح عبوری ۲۰۸
- ۳-۱۳-۳- محاسبه گرمای تشکیل (ΔH°_f) و گرمای واکنش اکسایش (ΔH°_{ox}) ۲۰۸
- ۲-۱۳-۳- ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها و ۲-اکسو-۲،۱-دی‌هیدروپیریمیدین ۲۰۹
- ۵-کربوکسامیدها ۲۰۹
- ۴-۱۳-۳- بررسی سازوکار اکسایش ۲-اکسو-۴،۳،۲،۱-تتراهیدروپیریمیدین-۵-کربوکسامیدها ۲۱۱
- ۵-۱۳-۳- مقایسه نتایج مطالعات محاسباتی و یافته‌های بلورشناسی با اشعه X ۲۲۳
- منابع و مأخذ ۲۲۹

فهرست شکل‌ها

صفحه	عنوان
۲.....	(شکل ۱-۱)
۲.....	(شکل ۲-۱)
۳.....	(شکل ۳-۱)
۳.....	(شکل ۴-۱)
۳.....	(شکل ۵-۱)
۴.....	(شکل ۶-۱)
۴.....	(شکل ۷-۱)
۵.....	(شکل ۸-۱)
۶.....	(شکل ۹-۱)
۶.....	(شکل ۱۰-۱)
۸.....	(شکل ۱۱-۱)
۹.....	(شکل ۱۲-۱)
۹.....	(شکل ۱۳-۱)
۱۰.....	(شکل ۱۴-۱)
۱۱.....	(شکل ۱۵-۱)
۱۲.....	(شکل ۱۶-۱)
۱۲.....	(شکل ۱۷-۱)
۱۳.....	(شکل ۱۸-۱)
۱۴.....	(شکل ۱۹-۱)
۱۵.....	(شکل ۲۰-۱)
۱۶.....	(شکل ۲۱-۱)
۱۶.....	(شکل ۲۲-۱)

صفحه	عنوان
١٧.....	(شكل ٢٣-١)
١٨.....	(شكل ٢٤-١)
١٩.....	(شكل ٢٥-١)
٢٠.....	(شكل ٢٦-١)
٢٠.....	(شكل ٢٧-١)
٢١.....	(شكل ٢٨-١)
٢١.....	(شكل ٢٩-١)
٢٢.....	(شكل ٣٠-١)
٢٣.....	(شكل ٣١-١)
٢٣.....	(شكل ٣٢-١)
٢٤.....	(شكل ٣٣-١)
٢٥.....	(شكل ٣٤-١)
٢٦.....	(شكل ٣٥-١)
٢٧.....	(شكل ٣٦-١)
٢٨.....	(شكل ٣٧-١)
٢٩.....	(شكل ٣٨-١)
٣٠.....	(شكل ٣٩-١)
٣٠.....	(شكل ٤٠-١)
٣١.....	(شكل ٤١-١)
٣٢.....	(شكل ٤٢-١)
٣٢.....	(شكل ٤٣-١)
٣٣.....	(شكل ٤٤-١)
٣٤.....	(شكل ٤٥-١)
٣٤.....	(شكل ٤٦-١)

صفحه	عنوان
٣٥.....	(شكل ١-٤٧)
٣٦.....	(شكل ١-٤٨)
٣٧.....	(شكل ١-٤٩)
٣٨.....	(شكل ١-٥٠)
٣٩.....	(شكل ١-٥١)
٤٠.....	(شكل ١-٥٢)
٤٠.....	(شكل ١-٥٣)
٤١.....	(شكل ١-٥٤)
٤٢.....	(شكل ١-٥٥)
٤٢.....	(شكل ١-٥٦)
٤٣.....	(شكل ١-٥٧)
٤٣.....	(شكل ١-٥٨)
٤٤.....	(شكل ١-٥٩)
٤٤.....	(شكل ١-٦٠)
٤٥.....	(شكل ١-٦١)
٤٥.....	(شكل ١-٦٢)
٤٦.....	(شكل ١-٦٣)
٤٦.....	(شكل ١-٦٤)
٥١.....	(شكل ٢-١)
٥١.....	(شكل ٢-٢)
٥٥.....	(شكل ٢-٣)
٧٧.....	(شكل ٢-٤)
١٠٠.....	(شكل ٢-٥)
١٠٢.....	(شكل ٢-٦)

صفحه	عنوان
۱۰۵.....	(شکل ۲-۷)
۱۱۸.....	(شکل ۲-۸)
۱۲۹.....	(شکل ۳-۱)
۱۲۹.....	(شکل ۳-۲)
۱۳۰.....	(شکل ۳-۳)
۱۳۰.....	(شکل ۳-۴)
۱۳۳.....	(شکل ۳-۵)
۱۳۵.....	(شکل ۳-۶)
۱۳۸.....	(شکل ۳-۷)
۱۳۹.....	(شکل ۳-۸)
۱۳۹.....	(شکل ۳-۹)
۱۵۱.....	(شکل ۳-۱۰)
۱۵۵.....	(شکل ۳-۱۱)
۱۵۷.....	(شکل ۳-۱۲)
۱۶۰.....	(شکل ۳-۱۳)
۱۶۲.....	(شکل ۳-۱۴)
۱۶۳.....	(شکل ۳-۱۵)
۱۶۵.....	(شکل ۳-۱۶)
۱۶۶.....	(شکل ۳-۱۷)
۱۶۷.....	(شکل ۳-۱۸)
۱۶۸.....	(شکل ۳-۱۹)
۱۷۰.....	(شکل ۳-۲۰)
۱۷۵.....	(شکل ۳-۲۱)
۱۷۸.....	(شکل ۳-۲۲)

صفحه	عنوان
۱۸۴.....	(شکل ۳-۲۳).....
۱۸۵.....	(شکل ۳-۲۴).....
۱۸۸.....	(شکل ۳-۲۵).....
۱۹۱.....	(شکل ۳-۲۶).....
۱۹۲.....	(شکل ۳-۲۷).....
۱۹۴.....	(شکل ۳-۲۸).....
۱۹۷.....	(شکل ۳-۲۹).....
۱۹۸.....	(شکل ۳-۳۰).....
۲۰۶.....	(شکل ۳-۳۱).....
۲۰۷.....	(شکل ۳-۳۲).....
۲۱۰.....	(شکل ۳-۳۳).....
۲۱۲.....	(شکل ۳-۳۴).....
۲۱۷.....	(شکل ۳-۳۵).....
۲۱۹.....	(شکل ۳-۳۶).....
۲۱۹.....	(شکل ۳-۳۷).....
۲۲۲.....	(شکل ۳-۳۸).....
۲۲۳.....	(شکل ۳-۳۹).....
۲۲۵.....	(شکل ۳-۴۰).....
۲۲۷.....	(شکل ۳-۴۱).....