

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده علوم

رساله جهت اخذ درجه‌ی دکتری تخصصی رشته شیمی (معدنی)

سنتز ترکیبات جدید فسفر آمید و تیوفسفر آمید و مطالعه رفتار
کوئوردیناسیونی آنها: تجزیه و تحلیل ساختاری و آماری داده‌های
بلورنگاری از جمله گروه‌های فضایی و بی‌نظمی‌های ساختاری

نگارنده:

مجتبی کیخا

استاد راهنما:

دکتر مهرداد پورایوبی

استاد مشاور:

دکتر علیرضا سلیمی

اردیبهشت ۱۳۹۶

تعهدنامه

اینجانب **مجتبی کیخا** دانشجوی دوره دکتری رشته شیمی معدنی دانشکده علوم دانشگاه فردوسی مشهد نویسنده پایان نامه با عنوان: **سنتز ترکیبات جدید فسفر آمید و تیوفسفر آمید و مطالعه رفتار کوئوردیناسیونی آنها: تجزیه و تحلیل ساختاری و آماری داده های بلورنگاری از جمله گروه های فضایی و بی نظمی های ساختاری تحت راهنمایی جناب آقای دکتر پورایوبی متعهد می شوم:**

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهش های محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است.
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه فردوسی مشهد است و مقالات مستخرج بانام «**دانشگاه فردوسی مشهد**» و یا «**Ferdowsi University of Mashhad**» به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از رساله رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که از موجود زنده (یا بافتهای آنها) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است، اصل رازداری، ضوابط و اصول اخلاقی انسانی رعایت شده است.

تاریخ: ۱۳۹۶/۰۲/۲۴

امضای دانشجو:

مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه های رایانه ای، نرم افزارها و تجهیزات ساخته شده) متعلق به دانشگاه فردوسی مشهد است. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
 - استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نیست.
- متن این صفحه نیز باید در ابتدای نسخه های تکثیر شده موجود باشد.



ارزشیابی رساله دکتری

کاربرگ شماره ۹

شماره:

تاریخ:

نام و نام خانوادگی دانشجو: مجتبی کیخا شماره دانشجویی: ۹۱۱۶۳۱۷۰۴۶ گروه آموزشی: شیمی رشته: شیمی گرایش: شیمی معدنی تاریخ دفاع: ۱۳۹۶/۲/۲۴

عنوان رساله: سنتز ترکیبات جدید فسفر آمید و تیوفسفر آمید و مطالعه رفتار کوئوردیناسیونی آنها: تجزیه و تحلیل ساختاری و آماری داده های بلورنگاری از جمله گروه های فضایی و بی نظمی های ساختاری.

Synthesis of new phosphoramidate and thiophosphoramidate compounds and study on their coordination behavior: structural and statistical analysis of crystallographic data such as space groups and structural disorders.

معیارهای ارزشیابی			حداکثر نمره	نمره کسب شده	ملاحظات
کیفیت نگارش	انسجام در تنظیم و تدوین مطالب، حسن نگارش و رعایت دستورالعمل		۲	۲	
	کیفیت تصویرها، شکل ها و منحنی های استفاده شده				
کیفیت علمی	پیشینه پژوهش		۱۱	۱۱	
	ابتکار و نوآوری				
	ارزش علمی و یا کاربردی				
	جمع بندی نتایج و ارائه پیشنهادات برای ادامه پژوهش				
کیفیت ارائه	استفاده از منابع و مآخذ به لحاظ کمی و کیفی (به روز بودن)		۳	۳	
	تسلط به موضوع و توانایی در پاسخگویی به سوالات در جلسه دفاع				
گزارش ها	نحوه ارائه (رعایت زمان، تنظیم موضوع، کیفیت فایل ارائه و ...)		۱	۱	
	تحویل به موقع گزارش ها				
نمره رساله (بدون در نظر گرفتن نمره دستاوردها)			۱۷	۱۷	
نمره دستاوردها			۵-۰	۳	دومقاله همیسه مایا ۲۰۱۸
نمره نهایی			۲۰	۲۰	

بر اساس تبصره ۳ ماده ۷ دستورالعمل اجرایی ضوابط و مقررات پژوهشی دوره دکتری (Ph.D)، چنانچه دانشجو پذیرش مقاله (ها)ی خود را تا تاریخ / / ارائه نماید. نمره مقاله (ها) با تایید داوران به نمره نهایی رساله افزوده خواهد شد.

رساله بر اساس رای اعضای جلسه دفاع:

☒ بدون اصلاحات پذیرفته است.

☐ با اصلاحات پذیرفته شد (دانشجو موظف است تا تاریخ / / اصلاحات رساله خود را که به تایید ----- رسیده است به گروه آموزشی تحویل دهد).

☐ مردود شناخته شد.

توضیحات:

۱- عنوان نهایی رساله (در صورت تغییر):

۲-

سمت	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی	دانشگاه/ دانشکده	امضا
استاد(ان) راهنما و مشاور	دکتر مهرداد پورایوبی	دانشیار	فردوسی مشهد- علوم	
	دکتر علیرضا سلیمی	استادیار	فردوسی مشهد- علوم	
هیات داوران	دکتر محمد حکیمی	دانشیار	پیام نور- مشهد	
	دکتر حسین اشتیاق حسینی	استاد	فردوسی مشهد- علوم	
	دکتر مسعود میرزائی شهبازی	دانشیار	فردوسی مشهد- علوم	
	دکتر امیر شکوه سلجوقی	استادیار	فردوسی مشهد- علوم	

گزارش نماینده تحصیلات تکمیلی:

مدیر گروه تحصیلات تکمیلی
امضا و تاریخ

نماینده تحصیلات تکمیلی: امیر شکوه سلجوقی
امضا و تاریخ

اکنون که موفق به اتمام پایان نامه تحصیلی ام شده ام سپاس می گویم خداوند مهربان را برای تمام نعمت هایی که به ما ارزانی داشت، برای تمام روزهای آفتابی و برای تمام روزهای غمگین ابری و بارانی، برای غروب های آرام و شب های تاریک و طولانی، برای تمام چیزهایی که داد و باز پس گرفت، برای تمام لبخند های محبت بار و دست های یاری رسان برای همه ی آن عشق و محبت و چیزهای سنگین انگیزی که دریافت کردیم؛ برای تمام گل ها و ستارگان برای تداوم حیات، برای برآورده کردن تمام نیازهایمان برای سلامتی و بیماری، برای غم ها و شادی ها برای تمام تنهایی ها، مسائل و مشکلات، تردید ها و اشک ها، چرا که همه ی این ها برای نزدیک تر شدن به او یاری مان کرد.

پس از ارادت خاضعانه به نگاه پروردگاری بهمان وظیفه خودم می دانم از کسانی که از انحاء در این مهم مرایای نموده اند کمال تشکر قدرانی را بنایم هر چند زبان و قلم را قاصر می بینم؛ پس درود بر پدر و مادر بزرگوارم که علیرغم تحمل سختی ها و دشواری های فراوان مسیر پر پیچ و خم کسب دانش و معرفت را برایم هموار نموده و از دعای خیرشان بی نصیب نبوده ام پس سپاس بی کران سزاورتمان است. اینجانب بر خود وظیفه میدانم در کسوت شاگردی از زحمات و خدمات ارزشمند استاد ارجمند جناب آقای دکتر مهرداد پورایوبی که با راهنمایی های دقیق و نکته سنجش های صحیح خویش، مرا م侖ون الطاف بیکران خود قرار داد و زمینه مساعدی را برای انجام این تحقیق فراهم آوردند نهایت تشکر و قدرانی را به عل آوردم. از سرکار خانم دکتر حاجتکده السادات ترحمی که در تمامی مراحل اجراء مرا همراهی و با انتقال معلومات و تجارب ارزشمندشان موجب تشارش و تدوین بهترین اثر شدند کمال تشکر و قدرانی را دارم. از جناب آقای دکتر علیرضا سلیمی به خاطر راهنمایی ها و مساعدت ایشان در سمت اساتید مشاورم، کمال تشکر و قدرانی را دارم. همچنین، از اساتید محترم جناب آقایان پرفور حسین اشتیاق حسینی، پرفور محمد حکیمی و دکتر مسعود میرزائی به خاطر قبول مطالعه و ارزیابی پایان نامه ام و دکتر امیر شکوه سلجوقی به جهت نمانده تحصیلات تکلیفی دانشگاه، کمال تشکر و قدرانی را می نمایم.

تقدیم بہ دوستانم

دوستانی کہ وجودشان شادی، بخش و صفایشان موجب آرامش، و وجودم برایشان ہمہ محنت بود. دوستانی کہ مشکلات میر زندگی جزء در سایہ مهربانی آنها تسہیل نمی شود. از دوستان عزیز و صمیمی ام، خواهران بزرگوارم بتقدیم وحدانی، زہرا قاسمی، مینا عارفیان، مناز رمضان پور و ہمسایان اقبالی و برادر بزرگوار و عزیزم محبتی مشمول مقدمہ سپاسگزارم، از سایر دوستان و ہمراہان، از کادر اداری و آموزشی دانشکدہ و گروہ شبی کہ در طی این سال ہا ہمکاری ہای صمیمانہ ای را داشتہ اند سپاسگزاری می نمایم.

و در پایان از ہمہ استاد و دوستان طلب، بخشش و آمرزش را خواستارم. و بادعا (از دکتر مصطفی حمران) در پیشگاہ الہی بہ پایان می رسانم:

خدایا از تویی خواہم کہ طبع ما را آن قدر بلند کنی کہ در برابر ہیچ چیز جز خدا تسلیم نشویم. دنیا ما را نفیرید، خودخواہی ما را کور نکنند. سیاهی گناہ و فساد و تہمت و دروغ و غیبت، قلب ہای ما را تیرہ و تار نکنید. خدایا بہ ما آن قدر ظرفیت دہ کہ در برابر پیروزی ہا، سرست و مغرور نشویم. خدایا بہ من آن قدر توان دہ کہ کوچکی و پچاکی خویش را فراموش نکنم و در برابر عظمت تو خود را نبینم.

محبتی کجنا

اردی بہشت ۹۶

چکیده

در این پژوهش ۲۱ ترکیب جدید فسفرآمید و ۴ ترکیب جدید تیوفسفرآمید سنتز شد. فسفر آمیدها متعلق به دسته‌های: N-کربونیل فسفریک تری‌آمیدها با اسکلت $C(O)NHP(O)[NH(C)]_2$ و $C(O)NHP(O)[N(C)(C)]_2$ ، نمک‌های آمیدو فسفات با اسکلت $C(O)NHP(O)[NH(C)]O^-$ و $C(O)NHP(O)[N(C)(C)]O^-$ ، فسفریک تری‌آمیدها با اسکلت $P(O)(N^1)(N^2)(N^3)$ و $N^1 = N^2 \neq N^3$ و $[N^1 \neq N^2 \neq N^3]$ ، نمک فسفریک دی‌آمید با اسکلت $P(O)(N^1)(N^2)O^-$ و $[N^1 = N^2]$ و آمیدو فسفریک اسید استر با اسکلت $(RO)_2P(O)[NH(C)]$ هستند. تیوفسفر آمیدهای سنتز شده از خانواده‌ی فسفروتیوئیک تری‌آمید با اسکلت $[N^1 = N^2 \neq N^3] P(S)(N^1)(N^2)(N^3)$ می‌باشند. همچنین یک کمپلکس $Hg(II)$ با لیگاند تیوفسفریک تری‌آمید دارای قطعه $Hg-S=P[NH(C)]_3$ با موفقیت سنتز و شناسایی شد. آزمایش بلورنگاری پراش پرتوی ایکس (برای ۲۴ ترکیب) و طیف‌سنجی مادون زیرقرمز (برای ۲۵ ترکیب)، طیف‌سنجی جرم و طیف‌رزونانس مغناطیس هسته (برای برخی از ترکیب‌ها) ثبت شد. تعدادی از ساختارهای مطالعه شده در این پژوهش، جزء نخستین ساختارها و یا ساختارهای به ندرت گزارش شده در میان ترکیب‌های هم‌خانواده‌ی خود هستند؛ مانند فسفریک تری‌آمید غیر حلقوی با سه گروه آمیدی متفاوت، نخستین ترکیب تیوفسفریک تری‌آمید با دو گروه آمیدی متفاوت و نخستین کمپلکس $Hg(II)$ با اسکلت $Hg-S=P[NH(C)]_3$. در این پژوهش، افزون بر تهیه‌ی ترکیب‌های جدید، بررسی‌های تجربی و آنالیزهای آماری به شرح زیر انجام شد: (۱) بررسی مسیر شکسته شدن به‌وسیله اسپکتومتری جرم؛ (۲) مطالعه ثابت‌های جفت شدن $^{31}P-^{13}C$ ، $^{31}P-H$ و $^{19}F-^{13}C$ به‌وسیله طیف‌سنجی رزونانس مغناطیس هسته؛ (۳) مقایسه فرکانس‌های کششی $P=O$ ، $P=S$ و $N-H$ در طیف مادون قرمز؛ (۴) مطالعه‌ی برهمکنش‌های بین مولکولی به‌وسیله تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد؛ (۵) تجزیه و تحلیل پیوند $M-S$ با نظریه پیوند ظرفیت در کمپلکس‌های تیوفسفرآمید با اسکلت $M-S=P[N]_3$ و مقایسه آنها با پیوندهای $M-O$ در کمپلکس‌های فسفریک تری‌آمید با اسکلت $M-O=P[N]_3$ ؛ (۶) ارزیابی برهمکنش‌های ضعیف مانند $C-H \dots \pi$ و $\pi \dots \pi$ در ساختار بلورین ترکیب‌های جدید؛ (۷) تجزیه و تحلیل ساختاری و آماری داده‌های بلورنگاری از جمله گروه‌های فضایی، بی‌نظمی ساختاری، پلی‌مورفیسم و حضور بیش از یک مولکول مستقل تقارنی در ساختار بلوری ترکیب‌های فسفرآمید با اسکلت $P(O)[N]_3$ به‌وسیله جستجو در پایگاه داده‌های ساختاری کمبریج، (۸) مطالعه رفتار کوئوردیناسیونی ترکیب‌های فسفریک تری‌آمید و تیوفسفریک تری‌آمید بر پایه تجزیه و تحلیل پایگاه داده‌های ساختاری کمبریج.

واژه‌های کلیدی: فسفریک تری‌آمید، آمیدو فسفریک اسید استر، فسفروتیوئیک تری‌آمید، بلورنگاری با پرتوی ایکس، پایگاه

داده‌های ساختاری کمبریج، تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد، تئوری پیوند ظرفیت.

فهرست مطالب

فصل نخست : مقدمه

۱-۱- مقدمه	۱
۲-۱- پیشینه‌ای بر تهیه ترکیب‌های فسفر	۲
۳-۱- ساختار بلوری ترکیب‌های فسفرآمیدی	۴
۴-۱- بررسی و تحلیل آماری ساختارهای بلوری ترکیب‌های فسفریک تری‌آمید با استفاده از پایگاه داده‌های ساختاری	۷
کمبریج	۷
۱-۴-۱- شکل بلور، شبکه بلوری و گروه فضایی	۷
۲-۴-۱- بررسی اختلال و بی‌نظمی در ساختار بلوری ترکیب‌های فسفرآمیدی	۱۰
۳-۴-۱- بررسی ساختارهای بلوری با بیش از یک مولکول مستقل تقارنی در ترکیب‌های فسفرآمیدی	۱۶
۴-۴-۱- بررسی پلی مورفیسم در ترکیب‌های بلوری فسفر آمیدی	۲۰
۵-۱- بررسی برهمکنش‌های بین‌مولکولی	۲۲
۱-۵-۱- پیوند هیدروژنی	۲۴
۲-۵-۱- برهمکنش‌های آروماتیک	۲۶
۱-۲-۵-۲- برهمکنش $\pi \dots \pi$	۲۶
۲-۲-۵-۱- برهمکنش $CH \dots \pi$	۲۹
۳-۵-۱- پیوندهای هالوژنی	۳۰
۶-۱- شرح اهداف پروژه	۳۱

فصل دوم : تهیه و شناسایی ترکیب‌ها

۱-۲- مواد استفاده‌شده	۳۳
۲-۲- دستگاه‌های مورد استفاده	۳۴
۳-۲- تهیه ترکیب‌ها	۳۶
۱-۳-۲- N-کربونیل فسفریک تری‌آمیدها با اسکلت‌های $C(O)NHP(O)[N(C)(C)]_2$ و $C(O)NHP(O)[NH(C)]_2$	۳۷
۲-۳-۲- نمک N-کربونیل فسفریک تری‌آمید با اسکلت‌های $C(O)NHP(O)[N(C)(C)]O^-$ و $C(O)NHP(O)[NH(C)]O^-$	۴۱

- ۳-۳-۲ فسفریک تری آمیدها با اسکلت $P(O)(N^1)(N^2)(N^3)$ و فسفریک تری آمیدها غیر حلقوی نامتقارن با اسکلت $[N^1 \neq N^2 \neq N^3] P(O)(N^1)(N^2)(N^3)$ ۴۳
- ۴-۳-۲ نمک فسفریک تری آمیدها با اسکلت $[N^1 = N^2] P(O)(N^1)(N^2)O^-$ ۴۵
- ۵-۳-۲ فسفریک تیوآمیدها با اسکلت $[N^1 = N^2 \neq N^3] P(S)(N^1)(N^2)(N^3)$ ۴۷
- ۶-۳-۲ کمپلکس فلزی $HgCl_2$ با لیگاند فسفریک تیوآمیدها دارای اسکلت $[N^1 = N^2 \neq N^3] Hg-S=P(N^1)(N^2)(N^3)$ ۴۸
- ۱-۱-۳-۲ تهیه N-کربونیل فسفریک تری آمیدها با اسکلت $C(O)NHP(O)[NH(C)]_2$ ۴۹
- ۱-۲-۳-۲ نمک N-کربونیل فسفریک تری آمید با اسکلت $C(O)NHP(O)[N(C)(C)]O^-$ ۶۳
- ۱-۳-۳-۲ فسفریک تری آمیدها با اسکلت $[N^1 \neq N^2 \neq N^3]$ و $N^1 = N^2 \neq N^3] P(O)(N^1)(N^2)(N^3)$ ۶۵
- ۲-۳-۳-۲ فسفریک تری آمیدهای غیر حلقوی با اسکلت $[N^1 \neq N^2 \neq N^3] P(O)(N^1)(N^2)(N^3)$ ۶۶
- ۴-۳-۲ نمک فسفریک تری آمیدها با اسکلت $[N^1 = N^2] P(O)(N^1)(N^2)O^-$ ۶۸
- ۵-۳-۲ فسفریک آمیدو استرها با قطعه $(RO)_2P(O)[NH(C)]$ و فرمول $(RO)_2P(O)[(NH)-1-C_6H_4-3-(NH)](O)P(OR)$ ۶۸
- ۱-۵-۳-۲ فسفریک آمیدو استرها با قطعه $(RO)_2P(O)[NH(C)]$ ۶۹
- ۲-۵-۳-۲ فسفریک آمیدو استرها با فرمول $(RO)_2P(O)[(NH)-1-C_6H_4-3-(NH)](O)P(OR)_2$ ۶۹
- ۶-۳-۲ تیوفسفریک تری آمیدها با اسکلت $[N^1 = N^2 \neq N^3] P(S)(N^1)(N^2)(N^3)$ ۷۰
- ۷-۳-۲ کمپلکس های فلزی $HgCl_2$ با لیگاند های تیوفسفریک تری آمیدها ۷۲

فصل سوم : بررسی ساختاری ترکیبها

- ۱-۳- بررسی ساختاری N-کربونیل فسفریک تری آمیدها با اسکلت های $C(O)NHP(O)[N(H)(C)]_2$ و $C(O)NHP(O)[N(C)(C)]_2$ ۷۵
- ۱-۱-۳- بررسی ساختاری ترکیب ۱A تا ۵A با قطعه $3-Cl,4-F-C_6H_3C(O)NHP(O)[N(H)(C)]_2$ و $3-Cl,4-F-C_6H_3NHC(O)P(O)[N(C)(C)]_2$ ۷۶
- ۱-۱-۱-۳- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۱A با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۷۷
- ۲-۱-۱-۳- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۱A با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد ۷۸
- ۳-۱-۱-۳- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۲A با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۸۶
- ۴-۱-۱-۳- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۲A با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد ۸۷
- ۵-۱-۱-۳- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۳A با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۹۱

- ۳-۱-۱-۶- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۳A با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد ۹۲
- ۳-۱-۱-۷- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۴A با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۹۷
- ۳-۱-۱-۸- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۴A با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد ۹۸
- ۳-۱-۱-۹- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۵A با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۱۰۳
- ۳-۱-۱-۱۰- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۵A با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد ۱۰۴
- ۳-۱-۲- بررسی ساختاری ترکیب ۱B تا ۷B با اسکلت $2\text{-Cl,5-F-C}_6\text{H}_3\text{C(O)NHP(O)[NH(C)]}_2$ و $2\text{-Cl,5-F-C}_6\text{H}_3\text{C(O)NHP(O)[N(C)(C)]}_2$ ۱۱۰
- ۳-۱-۲-۱- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۱B با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۱۱۱
- ۳-۱-۲-۲- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۱B با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد ۱۱۲
- ۳-۱-۲-۳- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۲B با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۱۱۹
- ۳-۱-۲-۴- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۲B با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد ۱۱۹
- ۳-۱-۲-۵- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۳B با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۱۱۹
- ۳-۱-۲-۶- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۳B با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد ۱۲۰
- ۳-۱-۲-۷- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۴B با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۱۳۲
- ۳-۱-۲-۸- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۴B با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد ۱۳۳
- ۳-۱-۲-۹- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۵B با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۱۳۹
- ۳-۱-۲-۱۰- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۵B با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد ۱۳۹
- ۳-۱-۲-۱۱- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۶B با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۱۴۵
- ۳-۱-۲-۱۲- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۶B با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد ۱۴۵
- ۳-۱-۲-۱۳- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۷B با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۱۵۱
- ۳-۱-۲-۱۴- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۷B با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد ۱۵۱
- ۳-۱-۳- بررسی ساختاری ترکیب ۱C و ۱D با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۱۵۶
- ۳-۱-۳-۱- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۱C با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۱۵۷
- ۳-۱-۳-۲- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۱C با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد ۱۵۷
- ۳-۱-۳-۳- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۱C با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۱۶۲

- ۱۶۳-۱-۳-۴- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۱D با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد ۱۶۳
- ۱۶۹-۲-۳- نمک N-کربونیل فسفریک تری آمید با اسکلت های $C(O)NHP(O)[NH(C)]O^-$ و $C(O)NHP(O)[N(C)(C)]O^-$ ۱۶۹
- ۱۶۹-۱-۲-۳- بررسی ساختاری ترکیب ۱F و ۲F با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۱۶۹
- ۱۷۰-۱-۲-۳- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۱F با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۱۷۰
- ۱۷۰-۲-۱-۲-۳- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۱F با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد ۱۷۰
- ۱۷۶-۳-۱-۲-۳- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۲F با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۱۷۶
- ۱۷۶-۴-۱-۲-۳- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۲F با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد ۱۷۶
- ۱۸۶-۳-۳- بررسی ساختاری ترکیب های فسفریک تری آمیدها با اسکلت $P(O)(N^1)(N^2)(N^3)$ و $[N^1 = N^2 \neq N^3]$ ۱۸۶
- ۱۸۶-۱-۳-۳- بررسی ساختاری ترکیب ۱G و ۲G با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۱۸۶
- ۱۸۷-۱-۳-۳- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۱G با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۱۸۷
- ۱۸۷-۲-۱-۳-۳- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۱G با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد ۱۸۷
- ۱۹۲-۴-۱-۳-۳- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۲G با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۱۹۲
- ۱۹۲-۵-۱-۳-۳- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۲G با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد ۱۹۲
- ۲۰۰-۴-۳- بررسی ساختاری ترکیب های فسفریک تری آمیدهای غیر حلقوی با اسکلت $P(O)(N^1)(N^2)(N^3)$ و $[N^1 \neq N^2 \neq N^3]$... ۲۰۰
- ۲۰۰-۱-۴-۳- بررسی ساختاری ترکیب ۱H با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۲۰۰
- ۲۰۱-۱-۴-۳- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۱H با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۲۰۱
- ۲۰۱-۲-۱-۴-۳- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۱H با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد ۲۰۱
- ۲۰۹-۵-۳- نمک فسفریک تری آمیدها با اسکلت $[N^1=N^2] P(O)(N^1)(N^2)O^-$ ۲۰۹
- ۲۰۹-۱-۵-۳- بررسی ساختاری ترکیب ۱I با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۲۰۹
- ۲۰۹-۱-۱-۵-۳- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۱I با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۲۰۹
- ۲۱۰-۲-۱-۵-۳- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۱I با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد ۲۱۰
- ۲۱۶-۶-۳- بررسی ساختاری ترکیب فسفریک آمیدو استر با اسکلت $(RO)_2P(O)[NH(C)]$ ۲۱۶
- ۲۱۷-۱-۶-۳- بررسی ساختاری ترکیب ۱J با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۲۱۷
- ۲۱۷-۲-۱-۶-۳- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۱J با استفاده از پراش پرتوی ایکس ۲۱۷
- ۲۱۷-۳-۱-۶-۳- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۱J با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد ۲۱۷

- ۲۲۳ ۷-۳- فسفریک آمیدو استرها با فرمول $(RO)_2P(O)[(NH)-1-C_6H_4-3-(NH)](O)P(OR)_2$
- ۲۲۳ ۱-۷-۳- بررسی ساختاری ترکیب ۱K با استفاده از پراش پرتوی ایکس
- ۲۲۴ ۱-۱-۷-۳- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۱K با استفاده از پراش پرتوی ایکس
- ۲۲۵ ۲-۱-۷-۳- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۱K با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرفلد
- ۲۳۵ ۸-۳- تیوفسفریک تری آمیدها با اسکلت $[N^1 = N^2 \neq N^3] P(S)(N^1)(N^2)(N^3)$
- ۲۳۵ ۱-۸-۳- بررسی ساختاری ترکیب ۲L با استفاده از پراش پرتوی ایکس
- ۲۳۶ ۱-۱-۸-۳- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۲L با استفاده از پراش پرتوی ایکس
- ۲۳۶ ۲-۱-۸-۳- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۲L با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرفلد
- ۲۴۳ ۹-۳- کمپلکس های فلزی $HgCl_2$ با لیگاندهای تیوفسفریک تری آمیدها
- ۲۴۳ ۱-۹-۳- بررسی ساختاری ترکیب ۱M با استفاده از پراش پرتوی ایکس
- ۲۴۴ ۱-۱-۹-۳- بررسی الگوی پیوند هیدروژنی ترکیب ۱M با استفاده از پراش پرتوی ایکس
- ۲۴۵ ۲-۱-۹-۳- بررسی برهمکنش بین مولکولی ترکیب ۱M با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرفلد

فصل چهارم: تحلیل و بررسی داده ها

- ۲۵۳ ۱-۴- روش تهیه، خالص سازی و بلورگیری از ترکیبها
- ۲۵۳ ۱-۱-۴- روش تهیه و خالص سازی
- ۲۵۴ ۲-۱-۴- بلورگیری
- ۲۵۶ ۲-۴- بررسی طیفی ترکیبها تهیه شده
- ۲۵۶ ۱-۲-۴- طیف زیر قرمز (IR)
- ۲۵۸ ۲-۲-۴- طیف رزونانس مغناطیس هسته (NMR)
- ۲۵۸ ۱-۱-۲-۴- بررسی طیف رزونانس مغناطیس هسته در ترکیبهای گروه A (۱A تا ۵A)
- ۲۵۹ ۲-۱-۲-۴- بررسی طیف رزونانس مغناطیس هسته در ترکیبهای گروه B (۱B تا ۷B)
- ۲۶۰ ۳-۱-۲-۴- بررسی طیف رزونانس مغناطیس هسته در ترکیب گروه ۱D
- ۲۶۳ ۴-۱-۲-۴- بررسی طیف رزونانس مغناطیس هسته در ترکیبهای گروه ۱K

۲۶۴	۵-۱-۲-۴- بررسی طیف رزونانس مغناطیس هسته در ترکیب ۱M
۲۶۴	۱-۲-۴- طیف جرمی (Mass)
۲۶۸	۳-۴- بررسی پیوندهای هیدروژنی
۲۶۸	۱-۳-۴- پیوند هیدروژنی N-H...O
۲۷۱	۲-۳-۴- پیوند هیدروژنی N-H...S
۲۷۱	۳-۳-۴- برهمکنش C-H... π
۲۷۲	۴-۳-۴- برهمکنش π ... π
۲۷۳	۴-۴- بررسی و مطالعه برهمکنش‌های بین مولکولی با استفاده از تجزیه و تحلیل سطح هرشفلد
۲۷۴	۱-۴-۴- ترکیب‌های فسفرآمیدی
۲۷۶	۲-۴-۴- ترکیب تیوفسفریک تری‌آمید
۲۷۷	۳-۴-۴- کمپلکس فلزی HgCl_2 با لیگاندهای تیوفسفریک تری‌آمید
۲۷۷	۵-۴- مقایسه شیمی کئوردیناسیونی در کمپلکس‌های تیوفسفریک تری‌آمیدی و کمپلکس‌های فسفریک تری‌آمیدی
۲۷۹	۱-۵-۴- نقش لیگاند در شیمی کئوردیناسیون
۲۷۹	۱-۱-۵-۴- تغییر ماهیت لیگاند
۲۸۰	۲-۱-۵-۴- تغییر قطبش پذیری لیگاند
۲۸۰	۳-۱-۵-۴- چگالی با بر روی اتم کئوردینه شونده در لیگاند
۲۸۱	۲-۵-۴- نقش فلز در شیمی کئوردیناسیون
۲۸۲	۳-۵-۴- اثرات مربوط به حضور و یا عدم حضور یون مخالف
۲۸۳	۴-۵-۴- اثرات مربوط به قطبیت حلال و حلال‌پوشی
	۶-۴- تجزیه و تحلیل ظرفیت پیوند در پیوندهای M-S=P در کمپلکسهای تیوفسفریک تری‌آمید و مقایسه آنها با پیوند M-O=P
۲۸۳	O=P در کمپلکس‌های فسفریک تری‌آمیدی
۲۸۹	۷-۴- نتیجه‌گیری

پیوست

۲۹۰	منابع مربوط به جدول ۳-۱.....
۲۹۴	منابع مربوط به جدول ۴-۱.....
۲۹۶	شکل طیفهای IR، NMR و Mass
۳۴۷	منابع:

فهرست جداول

۹	جدول ۱-۱. نوع و فراوانی سیستم بلوری در ترکیبهای دارای اسکلت $P(O)[N]_3$
۱۳	جدول ۲-۱. قطعه‌های آمیدی متصل به اتم فسفر در ترکیبهای با اسکلت $P(O)[O][N]_2$ ، $P(O)[N]_3$ و $P(O)[O]_2[N]$
۱۸	جدول ۳-۱. ترکیبهای فسفرآمیدی با بیش از یک مولکول مستقل تقارنی.....
۲۱	جدول ۴-۱. ترکیبهای پلی‌مورف گزارش‌شده در پایگاه ساختاری کمبریج دارای اسکلت $P(O)[N]_3$ ، $P(O)_2[N]_2$ و $P(O)_3[N]$
۲۳	جدول ۶-۱. متداول‌ترین برهمکنش‌های بین‌مولکولی.....
۲۵	جدول ۷-۱. حالت‌های حدی پیوند هیدروژنی بر اساس پارامترهای هندسی.....
۳۳	جدول ۱-۲. لیست مواد استفاده‌شده در این پژوهش.....
۴۰	جدول ۱-۳. فهرست N-کربونیل فسفریک تری‌آمیدهای تهیه‌شده بر مبنای نوع آمین به‌کاررفته‌شده.....
۸۱	جدول ۲-۳. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۱A.....
۸۲	جدول ۳-۳. گزیده‌ای از طول و زوایای پیوندی ترکیب ۱A.....
۸۲	جدول ۴-۳. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۱A.....
۸۹	جدول ۵-۳. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۲A.....
۹۰	جدول ۶-۳. گزیده‌ای از طول و زوایای پیوندی ترکیب ۲A.....
۹۰	جدول ۷-۳. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۲A.....
۹۵	جدول ۸-۳. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۳A.....
۹۵	جدول ۹-۳. گزیده‌ای از طول و زوایای پیوندی ترکیب ۳A.....

جدول ۳-۱۰. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۳A	۹۶
جدول ۳-۱۱. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۴A	۱۰۰
جدول ۳-۱۲. گزیده‌ای از طول و زوایای پیوندی در ترکیب ۴A	۱۰۱
جدول ۳-۱۳. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۴A	۱۰۱
جدول ۳-۱۴. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۵A	۱۰۶
جدول ۳-۱۵. گزیده‌ای از طول و زوایای پیوندی ترکیب ۵A	۱۰۷
جدول ۳-۱۶. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۵A	۱۰۸
جدول ۳-۱۷. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۱B	۱۱۶
جدول ۳-۱۸. گزیده‌ای از طول و زوایای پیوندی ترکیب ۱B	۱۱۷
جدول ۳-۱۹. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۱B	۱۱۷
جدول ۳-۲۰. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۲B	۱۲۳
جدول ۳-۲۱. گزیده‌ای از طول و زوایای پیوندی ترکیب ۲B	۱۲۴
جدول ۳-۲۲. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۲B	۱۲۴
جدول ۳-۲۳. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۳B	۱۳۰
جدول ۳-۲۴. گزیده‌ای از طول و زوایای پیوندی ترکیب ۳B	۱۳۱
جدول ۳-۲۵. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۳B	۱۳۱
جدول ۳-۲۶. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۴B	۱۳۶
جدول ۳-۲۷. گزیده‌ای از طول و زوایای پیوندی ترکیب ۴B	۱۳۷
جدول ۳-۲۸. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۴B	۱۳۷
جدول ۳-۲۹. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۵B	۱۴۲
جدول ۳-۳۰. گزیده‌ای از طول و زوایای پیوندی ترکیب ۵B	۱۴۳
جدول ۳-۳۱. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۵B	۱۴۳
جدول ۳-۳۲. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۶B	۱۴۸
جدول ۳-۳۳. گزیده‌ای از طول و زوایای پیوندی ترکیب ۶B	۱۴۹
جدول ۳-۳۴. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۶B	۱۴۹

جدول ۳-۳۵. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۷B	۱۵۳
جدول ۳-۳۶. گزیده‌ای از طول و زوایای پیوندی ترکیب ۷B	۱۵۳
جدول ۳-۳۷. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۷B	۱۵۴
جدول ۳-۳۸. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۱C	۱۶۰
جدول ۳-۳۹. گزیده‌ای از طول و زوایای پیوندی ترکیب ۱C	۱۶۱
جدول ۳-۴۰. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۱C	۱۶۱
جدول ۳-۴۱. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۱D	۱۶۶
جدول ۳-۴۲. گزیده‌ای از طول و زوایای پیوندی ترکیب ۱D	۱۶۷
جدول ۳-۴۳. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۱D	۱۶۷
جدول ۳-۴۴. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۱F	۱۷۳
جدول ۳-۴۵. گزیده‌ای از طول و زوایای پیوندی ترکیب ۱F	۱۷۴
جدول ۳-۴۶. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۱F	۱۷۴
جدول ۳-۴۷. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۲F	۱۸۰
جدول ۳-۴۸. گزیده‌ای از طول و زوایای پیوندی ترکیب ۲F	۱۸۱
جدول ۳-۴۹. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۲F	۱۸۲
جدول ۳-۵۰. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۱G	۱۸۹
جدول ۳-۵۱. گزیده‌ای از طول و زوایای پیوندی ترکیب ۱G	۱۹۰
جدول ۳-۵۲. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۱G	۱۹۰
جدول ۳-۵۳. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۲G	۱۹۶
جدول ۳-۵۴. گزیده‌ای از طول و زوایای پیوندی ترکیب ۲G	۱۹۷
جدول ۳-۵۵. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۲G	۱۹۷
جدول ۳-۵۶. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۱H	۲۰۴
جدول ۳-۵۷. گزیده‌ای از طول و زاویه‌های پیوندی ترکیب ۱H	۲۰۵
جدول ۳-۵۸. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۱H	۲۰۵
جدول ۳-۵۹. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۱I	۲۱۳

جدول ۳-۶۰. گزیده‌ای از طول و زوایای پیوندی ترکیب ۱I.....	۲۱۳
جدول ۳-۶۱. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۱I.....	۲۱۴
جدول ۳-۶۲. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۱J.....	۲۲۰
جدول ۳-۶۳. گزیده‌ای از طول و زوایای پیوندی ترکیب ۱J.....	۲۲۱
جدول ۳-۶۴. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۱J.....	۲۲۱
جدول ۳-۶۵. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۱K.....	۲۲۹
جدول ۳-۶۶. گزیده‌ای از طول و زوایای پیوندی ترکیب ۱K.....	۲۳۰
جدول ۳-۶۷. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۱K.....	۲۳۱
جدول ۳-۶۸. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۲L.....	۲۴۰
جدول ۳-۶۹. طول و زاویه‌های پیوندی انتخاب‌شده ترکیب ۲L.....	۲۴۱
جدول ۳-۷۰. پیوندهای هیدروژنی ترکیب ۲L.....	۲۴۱
جدول ۳-۷۱. داده‌های شبکه بلوری ترکیب ۱M.....	۲۴۹
جدول ۳-۷۲. گزیده‌ای از طول و زوایای پیوندی ترکیب ۱M.....	۲۵۰
جدول ۴-۱. حلالیت برخی از نمک‌های آمونیم در حلال‌های کلروفرم، استونیتریل و تتراکلرید کربن.....	۲۵۴
جدول ۴-۲. ثابت ممان دوقطبی، ثابت دی الکتریک، قطبیت و پرتون دهندگی برخی از حلال‌های متداول.....	۲۵۶
جدول ۴-۳. طیف زیر قرمز برخی از گروه‌های عاملی شاخص.....	۲۵۶
جدول ۴-۴. ظرفیت پیوند محاسبه شده برای پیوندهای M-S(P).....	۲۸۶
جدول ۴-۵. هم ظرفیتی کووالانسی پیوند محاسبه شده برای پیوندهای M-S(P).....	۲۸۶

فهرست شکل‌ها

شکل ۱-۱. پراکندگی گروه فضایی در ۲۳۲ ترکیب گزارش شده با اسکلت $P(O)[N]_3$ در پایگاه داده‌های ساختاری کمبریج ۹	
شکل ۱-۲. اختلال موقعیتی پویا و اختلال استخلافی.....	۱۱
شکل ۱-۳. هندسه‌های رایج پیوند هیدروژنی.....	۲۵
شکل ۱-۴. نمایش شماتیک از پارامترهای هندسی برای برهمکنش‌های $\pi \dots \pi$ در حالت سرخورده.....	۲۸

- شکل ۱-۵. حالت‌های مختلف انباشتگی حلقه‌های آروماتیک ۲۹
- شکل ۲-۱. شمای واکنش تهیه پیش ماده فسفر-کلردار با فرمول $RC(O)NHP(O)Cl_2$ ۳۸
- شکل ۲-۲. روش عمومی برای تهیه N-کربونیل فسفریک تری آمیدها ۳۹
- شکل ۲-۳. روش عمومی برای تهیه نمک N-کربونیل فسفریک تری آمیدها ۴۳
- شکل ۲-۴. شمای تهیه پیش ماده‌های G, H ۴۴
- شکل ۲-۵. روش عمومی برای تهیه نمک فسفریک تری آمیدها ۴۶
- شکل ۲-۶. واکنش $P(S)Cl_3$ با آمین سیکلوهگزیل ۴۷
- شکل ۲-۷. شمای واکنش تهیه کمپلکس فلزی جیوه از واکنش $HgCl_2$ با لیگاند فسفریک تیو آمیدها ۴۹
- شکل ۲-۸. فرمول گسترده ترکیب ۱A ۵۰
- شکل ۲-۹. فرمول گسترده ترکیب ۲A ۵۱
- شکل ۲-۱۰. فرمول گسترده ترکیب ۳A ۵۲
- شکل ۲-۱۱. فرمول گسترده ترکیب ۴A ۵۳
- شکل ۲-۱۲. فرمول گسترده ترکیب ۵A ۵۴
- شکل ۲-۱۳. فرمول گسترده ترکیب ۱B ۵۶
- شکل ۲-۱۴. فرمول گسترده ترکیب ۲B ۵۷
- شکل ۲-۱۵. فرمول گسترده ترکیب ۳B ۵۸
- شکل ۲-۱۶. فرمول گسترده ترکیب ۴B ۵۹
- شکل ۲-۱۷. فرمول گسترده ترکیب ۵B ۶۰
- شکل ۲-۱۸. فرمول گسترده ترکیب ۶B ۶۱
- شکل ۲-۱۹. فرمول گسترده ترکیب ۷B ۶۲
- شکل ۲-۲۰. فرمول گسترده ترکیب ۱C ۶۳
- شکل ۲-۲۱. فرمول گسترده ترکیب ۱D ۶۳
- شکل ۲-۲۳. فرمول گسترده ترکیب ۱F ۶۴
- شکل ۲-۲۴. فرمول گسترده ترکیب ۲F ۶۵
- شکل ۲-۲۵. فرمول گسترده ترکیب ۱G ۶۶

شکل ۲-۲۶. فرمول گسترده ترکیب ۲G.....	۶۷
شکل ۲-۲۷. فرمول گسترده ترکیب ۱H.....	۶۸
شکل ۲-۲۸. فرمول گسترده ترکیب ۱I.....	۶۹
شکل ۲-۲۹. فرمول گسترده ترکیب ۱J.....	۷۰
شکل ۲-۳۰. فرمول گسترده ترکیب ۱K.....	۷۱
شکل ۲-۳۱. فرمول گسترده ترکیب ۱L.....	۷۲
شکل ۲-۳۲. فرمول گسترده ترکیب ۲L.....	۷۳
شکل ۲-۳۳. فرمول گسترده ترکیب ۱M.....	۷۴
شکل ۲-۳۴. فرمول گسترده ترکیب ۲M.....	۷۵
شکل ۳-۱. واحد بی تقارن ترکیب ۱A شامل دو مولکول مستقل تقارنی به صورت بیضوی های گرمایی..	۸۰
شکل ۳-۲. انباشتگی بلوری ایجاد شده به کمک پیوندهای هیدروژنی $N_{CP}-H...O=P$ و $N_P-H...O=P$ در ترکیب ۱A.....	۸۰
شکل ۳-۳. انباشتگی بلوری ایجاد شده به کمک برهمکنش های $\pi... \pi$ در ترکیب ۱A.....	۸۱
شکل ۳-۴. سطح هرشفلد ایجاد شده در فاصله d_{norm} برای مولکول ۱A(a).....	۸۳
شکل ۳-۵. سطح هرشفلد ایجاد شده در فاصله d_{norm} برای مولکول ۱A(b).....	۸۳
شکل ۳-۶. سطح هرشفلد ایجاد شده در مدل "shape index" برای مولکول ۱A(a).....	۸۴
شکل ۳-۷. سطح هرشفلد ایجاد شده در مدل "shape index" برای مولکول ۱A(b).....	۸۴
شکل ۳-۸. نمودارهای اثرانگشت برای مولکول ۱A(a).....	۸۴
شکل ۳-۹. نمودارهای اثرانگشت برای مولکول ۱A(b).....	۸۶
شکل ۳-۱۰. ساختار ترکیب ۲A به صورت بیضوی های گرمایی.....	۸۸
شکل ۳-۱۱. انباشتگی بلوری ایجاد شده در ترکیب ۲A.....	۸۸
شکل ۳-۱۲. سطح هرشفلد ایجاد شده در فاصله d_{norm} برای ترکیب ۲A.....	۹۰
شکل ۳-۱۳. نمودارهای اثرانگشت برای ترکیب ۲A.....	۹۱
شکل ۳-۱۴. ساختار مولکولی ترکیب ۳A.....	۹۳
شکل ۳-۱۵. انباشتگی بلوری ایجاد شده در ترکیب ۳A.....	۹۴
شکل ۳-۱۶. برهمکنش $C_{16}-H_{161}... \pi$ بین مرکز حلقه فنیل قطعه $[C_6H_5CH_2N(C_2H_5)]$ در ترکیب ۳A.....	۹۴

شکل ۳-۱۷	سطح هرشفلد ایجادشده در فاصله d_{norm} برای ترکیب ۳A	۹۶
شکل ۳-۱۸	سطح هرشفلد ایجادشده در مدل "shape index" ترکیب ۳A	۹۶
شکل ۳-۱۹	نمودارهای اثرانگشت برای ترکیب ۳A	۹۷
شکل ۳-۲۰	ساختار مولکولی ترکیب ۴A به صورت بیضوی های گرمایی	۹۹
شکل ۳-۲۱	انباشتگی بلوری ایجادشده در ترکیب ۴A	۹۹
شکل ۳-۲۲	برهمکنش $\pi \dots \pi$ بین مراکز حلقه های آروماتیک قطعه $[3\text{-Cl}, 4\text{-F}, \text{C}_6\text{H}_3]$ در ترکیب ۴A	۱۰۰
شکل ۳-۲۳	سطح هرشفلد ایجادشده در فاصله d_{norm} برای ترکیب ۴A	۱۰۲
شکل ۳-۲۴	سطح هرشفلد ایجادشده در مدل "shape index" ترکیب ۴A	۱۰۳
شکل ۳-۲۵	نمودارهای اثرانگشت برای ترکیب ۴A	۱۰۳
شکل ۳-۲۶	واحد بی تقارن ترکیب ۵A	۱۰۵
شکل ۳-۲۷	انباشتگی بلوری ایجادشده در ترکیب ۵A	۱۰۶
شکل ۳-۲۸	سطح هرشفلد ایجادشده در فاصله d_{norm} برای مولکول ۵A(a)	۱۰۸
شکل ۳-۲۹	سطح هرشفلد ایجادشده در فاصله d_{norm} برای مولکول ۵A(b)	۱۰۸
شکل ۳-۳۰	نمودارهای اثرانگشت برای مولکول ۵A(a)	۱۰۹
شکل ۳-۳۱	نمودارهای اثرانگشت برای مولکول ۵A(b)	۱۱۰
شکل ۳-۳۲	ساختار مولکولی ترکیب ۱B به صورت بیضوی های گرمایی	۱۱۴
شکل ۳-۳۳	انباشتگی بلوری ایجادشده به کمک پیوندهای هیدروژنی $\text{P}=\text{O} \dots \text{H}-\text{N}$ در ترکیب ۵A	۱۱۵
شکل ۳-۳۴	انباشتگی ایجادشده در صفحه bc از طریق اتصال زنجیره های خطی به وسیله برهمکنش های ضعیف $\text{C}21-\text{H}211 \dots \text{O}18$ و $\text{C}24-\text{H}241 \dots \text{O}12$ در ترکیب ۵A	۱۱۵
شکل ۳-۳۵	برهمکنش $\text{CH} \dots \pi$ بین مرکز حلقه آروماتیک قطعه $[2\text{-Cl}, 5\text{-F}, \text{C}_6\text{H}_3]$ در ترکیب ۵A	۱۱۵
شکل ۳-۳۶	سطح هرشفلد ایجادشده در فاصله d_{norm} برای ترکیب ۱B	۱۱۷
شکل ۳-۳۷	سطح هرشفلد در مدل "shape index" ترکیب ۱B	۱۱۸
شکل ۳-۳۸	نمودار اثرانگشت برای ترکیب ۱B	۱۱۸
شکل ۳-۳۹	ساختار مولکولی ترکیب ۲B	۱۲۱
شکل ۳-۴۰	انباشتگی بلوری ایجادشده در ترکیب ۲B	۱۲۱