

## رتبه دوم پژوهش‌های بنیادی



● پژوهشگر: مهدی بیات

● عنوان طرح: مطالعات نظری بر واکنش‌های تراکمی بین تعدادی از پلی آمین‌ها و دی کتون‌ها یا دی آلدئیدها و پروتون خواهی کمپلکس‌های مربوط و همچنین بررسی خصلت پیوند در تعدادی از کمپلکس‌ها

● استاد راهنما: دکتر صادق صالح‌زاده

● استاد مشاور: دکتر حسن کی‌پور

● مؤسسه‌های همکار: دانشگاه بوعلی سینا همدان - دانشگاه ماربورگ آلمان

### چکیده طرح:

امروزه تکنیک‌های شیمی محاسباتی می‌تواند به توصیف خصلت تشکیل پیوندهای شیمیایی و همچنین ساختار ترکیبات شیمیایی به نحو بسیار خوب و با صحت خوبی بپردازد. در این طرح گزارش مطالعات مختلف نظری بر روی چندین ترکیب و یا فرایندهای شیمیایی ارائه می‌گردد. در ابتدا مطالعه ساختار و پایداری تعدادی از کمپلکس‌های حاوی لیگاندهای چند بازی پرداخته و رابطه بین ثابت پایداری این ترکیبات در فاز گاز با ثابت پایداری آن‌ها پروتونه شدن آن‌ها در فاز محلول به دست می‌آید. سپس واکنش تراکمی « $1+1$ » و « $2+2$ » بین تعدادی از دی آمین‌های مختلف با ۲،۶ دی استیل پیریدین در حضور یون‌های منیزیم (II) و سرب (II) مطالعه می‌شود. در ادامه مطالعه ساختار و پروتون خواهی تعدادی از کمپلکس‌های بزرگ حلقه نوع CR که دارای بازوی آمینو آلکیلی می‌باشند ارائه می‌شود همچنین به مطالعه اهمیت مونو شیف باز به عنوان یک حد واسط در واکنش تمپلیت تشکیل کمپلکس‌های اخیر پرداخته می‌شود. همچنین به مطالعه خصلت پیوند در سه سری از کمپلکس‌های فلزی که حاوی پیوندهای ایمین- فلز و فلز اکسیم هستند پرداخته شده و سهم اربیتال‌های سیگما  $\sigma$  و پای  $\pi$  را در پیوندهای فلز- ایمین برای بیشتر کمپلکس‌های اخیر محاسبه می‌شود.

