المستخلص

معقدات حديثة من معدن البلاديوم يحتوي على متصلات مانحة مختلطة (دايثيولات, وفوسفور) تم تحضيرها و أيضا (دايثيولات,نيتروجين) تم تحضيرها. هذه المعقدات تم توصيفها بواسطة الاشعة أحادية الكريستال لتحديد الشكل الهيكلي. الى جانب ذلك، درسنا الدراسة الطيفية لهذه المعقدات بواسطة الاشعة الفوق بنفسجية فخ لرؤية أكثر الانتقالات في كل معقد ومقارنتها مع نتائج حسابات الدراسات الكثافة الوظيفية. بالضافة الى ذلك، المعقدات تم تطويرها في بتفاعلات اقتران سوزوكي تحت ظروف كثيرة ولأول مرة و أظهرت فعالية جيدة الى ممتازة في الاقتران.

تسهل روابط الفسفور أيضا تكوين معقدات ضخمة غنية بالإلكترونات. وتتمتع ذرات الفوسفور المانحة بالقدرة على تحسين النشاط التحفيزي عند استخدامها لتشكيل معقدات معدنية انتقالية. ومع ذلك، وبمرور الوقت، أصبحت حساسيته الشديدة للهواء والرطوبة مصدر قلق للكيميائي.

تعتبر متصلات النيتروجين المانحة واعدة ويمكن أن تكون بديلاً جيدًا للذرات المانحة للفوسفور. يستمر تخليق مركب بيريدين الحلقية غير المتجانسة في جذب الكثير من الاهتمام بسبب قابليته للتطبيق في مختلف المجالات بما في ذلك التحضير الصيدلاني والعضوي. في الصناعات الدوائية، تم استخدام المعادن الانتقالية مثل مجمعات البلاديوم والنحاس بنجاح لتحضير أدوية ارتفاع ضغط الدم النشطة للغاية ويتم إجراء الأبحاث باستمرار لاستكشاف المزيد من المجالات التي يمكن فيها استخدام هذه المواد (محفزات البلاديوم).

تتميز متصلات السلفر بخصائص فريدة، حيث تتميز مجمعات دايثيولات بخصائص الأكسدة والاختزال غير العادية. نظرًا لأن مجمعات ماليونيتريليثيولات المعدنية (mnt) لها امتصاص مولاري كبير ولوحظ في أطياف الاشعة الفوق بنفسجية حساسة جدًا لمدى الترابط الخلفي الموجود من المعدن.

الكلمات المفتاحية: محفزات البلاديوم، تفاعلات سوزوكي، الاقتران، معقدات البلاديوم، حسابات نظرية الكثافة الالكترونية، دايثيولات.

ABSTRACT

New complexes of palladium metal containing mixing donor ligands (PR_3), maleonitriledithiolate (MNT) have been synthesized and also 4,4'-(^{t}but)-2,2'-bipyridine with MNT have been synthesized. These complexes were characterized by X-ray single crystals to determent the structure geometry. Besides that, we studied the spectroscopic of these complexes by UV-Vis to see the most transitions in each complex and compare them with the DFT calculation result. In addition, the complexes were employed in Suzuki cross coupling reactions under mild condition for the first time and shows good to excellent activity for the coupling.

Phosphorus ligands also facilitate the formation of bulky electron-rich complexes. Phosphorus donor atoms have the ability to improve the catalytic activity when used to form transition metal complexes. However, over time, its extreme sensitivity to air and moisture has been a thing of concern to chemist.

Nitrogen donor ligands are seeing to be promising and could serve as a good alternative to the phosphorus donor atoms. Pyridine heterocyclic compound synthesis continues to attract much attention due to their verse applicability on various fields including Pharmaceutical and organic synthesis. In the pharmaceutical industries, transition metals such as palladium and copper complexes have been used successfully for the preparation of very active hypertensive drugs and researches are continually being carried out to explore more areas where these materials (Palladium catalysts) can be applied.

MNT ligand has unique properties, the dithiolate complexes have unusual redox properties. As Metal maleonitriledithiolate (MNT) complexes have large molar absorptivities and observed in the UV-Vis spectra are very sensitive to the extent of back bonding present from the metal.

Keywords: Organometallic, catalysis Suzuki, cross-coupling, Palladium Complex, DFT Calculation, X-ray single crystal, maleonitriledithiolate.