الصفحة الرئيسية
عمادة الكلية
وكالات الكلية
إدارة الكلية
الشؤون التعليمية
الأقسام العلمية
المعامل
مجلة كلية العلوم
الخدمات
الأنظمة الإلكترونية(ODUS)
اتصل بالكلية
دليل المنسوبين
الملفات
الأبحاث
المواد
مواقع مفضلة

عدد زيارات هذه الصفحة:17
SHARE

# تفاصيل البحث:

**عنوان البحث** : *التركيب لإلكتروني و ا لطيف لبعض مشتقات ا لثياديازول*

*ELECTRONIC STRUCTURE AND SPECTRA OF SOME THIADIAZOLE DERIVATIVES*

**الوصف** : تعتبر مركبات الثياديازول من المركبات التي لها نشاط بيولوجي كبير فهي تستخدم في علاج الالتهاب وتستخدم كمسكن للألم ومضاد للبكتريا و الفطريات و حديثاً استخدمت بعض مشتقاتها في علاج الأورام السرطانية. ونظراً لأهمية هذه المركبات و مشتقاتها قمنا بدراسة التركيب الإلكتروني و الطيف لهذه المركبات لإيجاد علاقة بين نشاط هذه المركبات و بين تركيبها الإلكتروني. تهدف الدراسة الحالية لمركبات 1، 3، 4- ثياديازول و مشتقاتها إلى: 1- إيجاد أفضل شكل هندسي لهذه المركبات و ذلك باستخدام طريقة AM1-MO من برنامج2 . MOPAC- دراسة التفاعل بين الأجزاء المختلفة للمركبات و ذلك لمعرفة أيهم له تأثير على المركب الأساسي. 3- دراسة تأثير البدائل على مجموعة إمينو فينيل وكذلك على التركيب الإلكتروني للمركب ككل. 4- قياس طيف الامتصاص للمركبات تحت الدراسة في منطقة الأشعة فوق البنفسجية باستخدام مذيبات عضوية قطبية و غير قطبية. 5- استخدام برنامج MOPAC لحساب طاقة الانتقال للمركبات و ذلك بطريقة INDO/S و مقارنتها مع النتائج العملية. -1- 6- دراسة تأثير المذيبات على الحالة المستقرة و كذلك الحالة المثارة للمركبات تحت الدراسة و من ثم إيجاد مقارنة و التحليل الكمي للانتقالات الإلكترونية و معرفة نوع الانتقال. الجزء الأول تناول التركيب الإلكتروني للمركبات تحت الدراسة و نظراً لصعوبة التركيب البنائي للمركبات و وجود أكثر من مجموعة متصلة بالحلقة الرئيسية 1، 3، 4- ثياديازول مثل مجموعة الأسيتيل في C5 في حلقة الثياديازول و كذلك مجموعة الفينيل المتصلة ب N3 في حلقة الثياديازول و مجموعة الإمينو فينيل المتصلة ب C2 في حلقة الثياديازول فقد قمنا بتقسيم المركب إلى مركبات منفصلة عددها سبعة ابتداء بالحلقة 1، 3، 4 - ثياديازول ثم وضع مجموعة منفصلة في الحلقة مثل أسيتيل ثياديازول، فينيل ثياديازول، إمينو ثياديازول و بعد ذلك وضع مجموعتين في الحلقة مثل أسيتيل فينيل ثياديازول، أسيتيل إمينو فينيل ثياديازول، فينيل إمينو فينيل ثياديازول وذلك لمعرفة القوى المؤثرة لكل مجموعة على الحلقة و من ثم على المركب و ذلك بدراسة أفضل شكل هندسي لكل مركب و إيجاد الخواص له عند الحالة المستقرة. و هذا التقسيم لا يوجد في الحقيقة و إن وجد بعضه إلا أنه يعطي إلى حد ما صورة تقريبية للتركيب الإلكتروني للمركب الأساسي. و قد أثبتت نتائج حسابات المدارات الجزيئية ما يلي: -2- 1- بالنسبة لحلقة الثياديازول 1 تم عمل الحسابات المدارية لها و مقارنتها بالقيم العملية و قد دلت النتائج على أن طريقة AM1من الطرق التي تعطي قيم نظرية قريبة من النتائج العملية إذ أنها تأخذ في الاعتبار الروابط القطبية و قد ظهر هذا واضحاً في كل من طول الرابطة و كذلك الزوايا بين الذرات. 2- عند إدخال مجموعة أسيتيل في حلقة الثياديازول في C5 لتعطي أسيتيل ثياديازول 2 لم تتغير أطوال الروابط في الحلقة و كذلك الزوايا. و قد ازدادت قيمة العزم القطبي و أصبحت ضعف قيمة حلقة الثياديازول مما يؤكد أن هذه المجموعة هي المسئولة عن القطبية في المركب و كذلك انخفضت قيمة فجوة الطاقة ليصبح المركب 2 أكثر نشاطا من مركب الثياديازول (1) . 3- عند إدخال مجموعة فينيل في الوضع رقم N3 في حلقة الثياديازول لتعطي فينيل ثياديازول 3 فإن قيمة العزم القطبي للمركب أصبحت أقل من الثياديازول مما يدل على أن المتجهة لمجموعة الفينيل تكون في الاتجاه المعاكس لحلقة الثياديازول. و بحساب قيمة رتبة الرابطة بين مجموعة الفينيل و الحلقة كانت 0.98 مما يؤكد أنها رابطة أحادية و لا يوجد أي اقتران بين مجموعة الفينيل و حلقة الثياديازول. 4- وعند إدخال مجموعة إمينو