نوع الوثيقة : رسالة جامعية

عنوان الوثيقة : *تركيب الإلكتروني والطيف لبعض مشتقات ٢ -مركبتوكوانزولين*

تركيب الإلكتروني والطيف لبعض مشتقات ٢ -مركبتوكوانزولين

لغة الوثيقة : العربية

المستخلص : تم دراسة التركيب الإلكتروني والطيف لكل من ٢- ميركبتوكوانزلون وكذلك مشتقات الألكيل والآريل عند ذرتي الكبريت والنتروجين في الحلقة. والهدف الرئيسي لهذا العمل هو التركيز على العوامل التركيبية المؤثرة على النشاط البيولوجي لهذه المركبات . وقد تم تعيين التركيب الإلكتروني في الحالة الأرضية لمركب ٢- ميركبتو كوانزلين باستخدام ٦-٣١١G** وقد أستخدم في هذا العمل بدائل مختلفة القوة من حيث الأخذ أو العطاء ومدى تأثير هذه البدائل على التركيب الإلكتروني للمركب الأب . والبدائل المستخدمة في هذا العمل هي مجموعات المثيل ، الإيثيل ، الآليل ، البنزيل ، ثنائي إيثيل الملونات ، استيل الأستون وبارا ميثوكسي أسيتون فينون . تم اكتشاف الإتزان التوتوميري للميركبتوكوانزلون . كل لأشكال التوتوميرية قد أخذت في الإعتبار . وقد أثبتت نتائج الحسابات أن ٢- ميركبتوكوانزلون لا يتواجد في في شكل الكيتو- ثيون ولكن هناك على الأقل شكل آخر هو كيتو ثياول وهما يتواجدان معاً في المحلول . وقد تم حساب طاقة اكتساب أو نزع بروتون من بعض المراكز النشطة في الحلقة مثل SH أو . NH وقد أثبتت نتائج الحسابات أن كلاً من بروتون SH ، وكذلك بروتون N٨ لهم أقل طاقة وعلى هذا كان المركب يسلك سلوك الأحماض لميله لفقد البروتونات . تم إعطاء دراسة مقارنة بين المشاهدات التجريبية والحسابات النظرية للطيف بالإضافة إلى توضيح وتعيين كمي لكل الانتقالات باستخدام طريقتي INDO و MINDO/3 . وقد تم دراسة تأثير المذيبات على كل من الحالة الدنيا والحالة المثارة .

المشرف : أ.د. سعد الله بن قاري عزيز ، أ.د. حسين محمد مصطفى

سنة النشر : ٢٠٠٦