جامعة الموصل

كلية العلوم

دراسات حركية تكوين عدد من البايروليدينات المحضرة من الجالكونات وقاعدة شيف

راوية زغلول الخياط

اطروحة دكتوراه

في الكيمياء الفيزياوية

باشراف

الدكتور عبد المجيد محمد الدباغ   الدكتور عبد الوهاب جعفر الحمداني

استاذ   استاذ مساعد

١٤٣١هـ ——— ٢٠١٠م

الـــخلاصة

يتضمن البحث أستخدام تكاثف كليزن شميدت لتحضير سلسلة من الجالكونات (3,1 – ثنائي أريل – 2 – بروبين – 1 – اون) (85-١١٦) وتحضير سلسلة من قواعد شيف (N – أريليدين بنزايل أمينات) (117-137) والتي أستخدمت بمثابة نيوكليوفيل بعد معاملتها مع قاعدة قوية (alc.NaOH) من خلال الاضافة الحلقية الانيونية نوع (3,1) لقاعدة شيف على الاصرة المزدوجة للجالكونات بغية الحصول على المركبات الحلقية (بايروليدينات) (138-147).

وأستخدمت الطرائق الطيفية (^{1}H-NMR, IR, UV) لدعم التراكيب المحضرة من الجالكونات، قواعد شيف والبايروليدينات.

ولاجل تسهيل الدراسة الحركية للاضافة الحلقية الانيونية نوع (3,1) لقواعد شيف على الاصرة المزدوجة للجالكونات فقد تم جعل التفاعل من الرتبة الاولى الوهمية ووجد بأنه أن التفاعل هومن التفاعلات المتتالية والتي تتضمن تكوين المركب الوسطي ومن ثم تحولقه لاعطاء الناتج المتوقع (البايروليدين).

لقد وجد أن ثابت سرعة التفاعل يعتمد على عدة متغيرات منها المجاميع المعوضة ، الاعاقة الفراغية المتمثلة بالحلقة الاروماتية للمتفاعلات. كما ودرس تأثير تغيردرجة الحرارة على سرعة التفاعل، من خلال تطبيق معادلة ارهينيوس وانتروبي التنشيط.

واخيرا، تم اقتراح الميكانيكية الخاصة بهذا التفاعل (اضافة قاعدة شيف اضافة انيونية حلقية نوع (3,1) على الجالكونات) والتي دُعمت بالنتائج التي تم الحصول عليها من خلال هذه الدراسة.

University of Mosul
College of Science

Kinetic Studies of the Formation Process of some Synthesized Pyrrolidines from Chalcones and Schiff Base.

Rawya Zaghlool Al-Khayat

Ph.D. Thesis
In Physical Chemistry

Supervised by

Professor
A. M. Dabbagh, PhD

Assistant Professor
A. JafarAl-Hamdany,PhD

2010 A.D. **1431 A.H.**

SUMMARY

A series of chalcones (1,3-diaryl-2-propen-1-one)(85-116)had been prepared using Claisen-Schmidt condensation. Another series of Schiff bases(N-arylidene benzylamines)(117-137) had also been prepared as nucleophiles after treatment with strong base (alc.NaOH)through the 1,3-anionic cyclization by the addition to chalcones to afford the expected corresponding heterocycles (pyrrolidines) (138- 147).

The structures of the prepared chalcones, Schiff bases and pyrrolidines were supported by the spectral data (UV,IR,^{1}H-NMR).

To simplify the kinetic study of 1,3-anionic cycloaddition of Schiff bases to chalcones the reaction, considered as a pseudo-first order consecutive reaction which includes an intermediate formation which suffers from intramolecular cyclization to afford the expected heterocycle.

The calculated rate constants were found to depend on different variables such as substituent groups, steric hindrance introduced by the aromatic ring of reactants. Variations of rates with temperature were also studied through the application of Arrhenius equation and entropy of activation.

Finally, a mechanistic route for the reaction was suggested. Such presumed mechanism was supported by all of the above studied parameters.