جُمهورية العراق
وَزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة الموصل / كلية العلوم
قسم الكيمياء

تحضير، تشخيص ودراسة الارتباط الجزيئي لأملاح الإيميدازول المنصهرة ومعقداتها مع عدد من العناصر الانتقالية

آية علي حسين علي

رسالة ماجستير

الكيمياء / الكيمياء اللاعضوية

بإشراف

الأستاذ الدكتور عاصم عادل صباح الأستاذ الدكتور عمار عبدالستار إبراهيم

1447هـ ٢٠٢٥ م

الخلاصة

يتضمن البحث في هذهِ الرسالة تحضير عدد من الأملاح العضوية المنصهرة المشتقة من (Imidazole)، وذلك عبر التفاعل المباشر لهاليدات الألكيل متضمنةً (ethyl bromide, allyl bromide, allyl iodide) مع القاعدة النيتروجينية (Imidazole and 1-methyl imidazole) وبنسب مولية (٢:١) و(١:١). وقد تم الحصول على الأملاح العضوية المنصهرة التالية:

(A_1) [diEtIm]Br: 1,3-diethyl imidazolium bromide

(A_2) [diAIm]Br: 1,3-diallyl imidazolium bromide.

(A_3) [AMeIm]Br: 1-allyl-3-methyl imidazolium bromide.

(A_4) [EtMeIm]Br: 1-ethyl-3-methyl imidazolum bromide.

(A_5) [diAIm]I: 1,3-diallyl imodazolum iodide.

(A_6) [AMeIm]I: 1-allyl-3-methyl imidazolum iodide.

تم تشخيص الأملاح العضوية المحضرة باستخدام تقنيات طيفية وفيزيائية مختلفة شملت: مطيافية الأشعة السينية المشتتة للطاقة (EDX)، طيف الكتلة، طيف الرنين النووي المغناطيسي لكل من البروتون والكاربون (^{1}H-NMR,^{13}C-NMR)، طيف الأشعة تحت الحمراء (IR)، الأطياف الالكترونية (UV-Vis) إضافةً إلى قياسات التوصيلية الكهربائية المولارية.

كذلك تم تحضير الأملاح المعقدة عن طريق مفاعلة الأملاح العضوية المحضرة أعلاه مع كلوريدات بعض الفلزات الانتقالية لكل من المنغنيز(II)، الحديد(II)، الكوبلت(II)، النيكل(II)، والنحاس(II) وبنسب مولية (2:1) (فلز : ملح عضوي).

وقد شُخِصت هذهِ الأملاح المعقدة بواسطة طيف الأشعة تحت الحمراء (IR)، طيف الامتصاص الذري، الأطياف الالكترونية (UV-Vis)، التوصيلية الكهربائية المولارية، والقياسات المغناطيسية.

بينت نتائج قياسات التوصيلية الكهربائية المولارية أن جميع الأملاح العضوية المحضرة كانت ذات سلوك الكتروليتي موصلة وبنسبة (1:1)، بينما كانت الأملاح المعقدة موصلة بنسبة (1:2).

كما أكدت نتائج القياسات المغناطيسية فضلاً عن نتائج الأطياف الالكترونية أن جميع الأملاح المعقدة المحضرة تمتلك شكل رباعي السطوح حول ذرة الفلز المركزية.

كذلك دُرِست الفعالية البيولوجية لجميع المركبات المحضرة حيث تم تطبيقها تجاه صنفين من البكتريا وهي البكتريا السالبة لصبغة كرام (*Escherichia coli*) والبكتريا الموجبة لصبغة كرام (*Staphylococcus aureus*) وبَينت الدراسة أن جميع الأملاح العضوية المحضرة فضلاً عن البعض من أملاحها المعقدة تمتلك قدرة تثبيطية متوسطة إلى جيدة تجاه بكتريا (*E.coli*)، في حين كانت بكتريا (S.*aureus*) مقاومة تجاه أغلب المركبات المحضرة.

فضلاً عن ذلك، تم إجراء دراسة الارتباط الجزيئي (Molecular Docking) لجميع الأملاح العضوية المحضرة مع نوعين من البروتينات المستهدفة في البكتريا (*E. coli*) متضمنةً (1keb, 2ea9) فضلاً عن بكتريا (*S. aureus*) ونوع البروتين المستخدم هو (1lqw)، وأظهرت نتائج الدراسة أن هناك طاقات ارتباط جيدة بين البروتينات المستهدفة والأملاح العضوية قيد الدراسة مما يدعم فعاليتها البيولوجية المحتملة.

وفي النهاية، تم إجراء دراسة التحليل الحراري وحساب المتغيرات الثرموداينمكية للأملاح العضوية(A_5) و (A_6) وبعض أملاحها المعقدة باستخدام نموذج (ASTM 1641) ونموذج (Coats and Redfern). وأظهرت النتائج أن المركبات المدروسة تمتاز بثبات حراري جيد ضمن مدى مناسب، كذلك تبين أن تفاعلات التحلل كانت ماصة للحرارة (Endothermic) وغير تلقائية (Non-Spontaneous) ، كما لوحظ اختلاف قيم المتغيرات الثرموداينمكية بين النموذجين، وعلى الرغم من هذا التباين، فإن القيم المستحصلة تقع ضمن نطاق جيد نظراً لاختلاف المدخلات وطرائق الحساب.

Abstract

The research in this thesis involves the preparation of a number of molten organic salts derived from imidazole, through the direct reaction of alkyl halides including (ethyl bromide, allyl bromide, allyl iodide) with nitrogen base (imidazole and 1-methylimidazole) in molar ratios of (2:1) and (1:1). The following molten organic salts were obtained:

(A_1) [diEtIm]Br: 1,3-diethyl imidazolium bromide.

(A_2) [diAIm]Br: 1,3-diallyl imidazolium bromide

(A_3) [AMeIm]Br: 1-allyl-3-methyl imidazolium bromide.

(A_4) [EtMeIm]Br: 1-ethyl-3-methyl imidazolium bromide.

(A_5) [diAIm]I:1,3-diallyl imidazolium iodide.

(A_6) [AMeIm]I: 1-allyl-3-methyl imidazolium iodide.

The prepared organic salts were characterized using various spectroscopic and physical techniques, including: Energy Dispersive X-ray Spectroscopy (EDX), mass spectrometry, nuclear magnetic resonance spectroscopy for both proton and carbon (^{1}H-NMR, ^{13}C-NMR), infrared spectroscopy (IR), electronic spectra (UV-Vis), in addition to molar electrical conductivity measurements.

Also, complex salts were prepared by reacting the above-prepared organic salts with chlorides of some transition metals including manganese(II), iron(II), cobalt(II), nickel(II), and copper(II) in molar ratios of (1:2) (metal: organic salt).

These complex salts were characterized using infrared spectroscopy (IR), atomic absorption spectroscopy, electronic spectra (UV-Vis), molar electrical conductivity, and magnetic measurements.

The results of molar electrical conductivity measurements showed that all the prepared organic salts exhibited conductive electrolytic behavior in a (1:1) ratio, while the complex salts were conductive in a (1:2) ratio.

Magnetic measurements results, as well as electronic spectra, confirmed that all the prepared complex salts have a tetrahedral geometry around the central metal ion.

The biological activity of all the prepared compounds was also studied, as they were tested against two types of bacteria: Gram-negative bacteria *Escherichia coli* and Gram-positive bacteria *Staphylococcus aureus*. The study showed that all the prepared organic salts, in addition to some of their complex salts, have moderate to good inhibitory ability against *E. coli*, while *S. aureus* was resistant to most of the prepared compounds.

In addition, a molecular docking study was conducted for all the prepared organic salts with two types of target proteins in(*E. coli*), including (1keb, 2ea9), as well as for(*S. aureus*), with the used protein type being (1lqw). The results of the study showed that there is good binding energy between the target proteins and the studied organic salts, supporting their potential biological activity.

Finally, a thermal analysis study and the calculation of thermodynamic parameters were carried out for the organic Salts (A_5) and (A_6) and some of their complex salts using the (ASTM 1641) model and the (Coats and Redfern) model. The results showed that the studied compounds have good thermal stability within an appropriate range. The decomposition reactions were found to be endothermic and non-spontaneous. A variation in thermodynamic parameters values between the two models was observed, and despite this variation, The obtained values fell within a good range due to differences in input data and calculation methods.

The Republic of Iraq
Ministry of Higher Education
and Scientific Research
University of Mosul / College of Science
Department of Chemistry

Preparation, Characterization and Docking Study of Molten Imidazole Salts and Their Complexes with a Number of Transition Elements

Aya Ali Hussein Ali

M.Sc. Thesis

Chemistry / Inorganic Chemistry

Supervised by

Prof. Dr. Assim A. Sabah **Prof. Dr. Ammar A. Ibrahim**

1447 A.H. **202٥ A.D.**