جامعة الموصل
كلية التربية للعلوم الصرفة

دراسة ثرموداينميكية طيفية لتفاعل بعض المركبات الدوائية مع كاشفين مؤزوتين

عمار ياسر هاشم محمد المشهداني

رسالة ماجستير
الكيمياء

بإشراف
الأستاذ المساعد
الدكتور محمد محمود حسين يونس النعيمي

1445هـ 2023م

الخلاصة :

لقد تضمنت الدراسة الحالية تحضير صبغات الآزو الدوائية ، من اقتران اربعة من المُركّبات الدوائية مع الكاشفين المؤزوتين: الميتا أمينو فينول و البارا أمينو حامض البنزويك عن طريق تكوين أملاح الدايازونيوم. لمعرفة تأثير نوع المعوض بالإضافة إلى نوع الكاشف على ثوابت استقرارية الصبغات المحضرة قيد الدراسة.

إن موضوع الدراسة الرئيس، هو تعيين ثوابت استقرار صبغات الآزو الدوائية الناتجة ، باستعمال الطريقة الطيفية الفوتومترية. إذ تطلبت هذه الدراسة الخطوات التالية:

1- إيجاد الظروف المثلى لكلّ صبغة آزو وهي:
   أ- أفضل حجم للكاشف.
   ب- أفضل حجم للملح القاعدي للحصول على الدالات الحامضية المطلوبة.
   ج- أفضل تسلسل إضافة.
   د- زمن الظهور.
   هـ- زمن الاستقرار.
   و- أفضل طول موجي عند الظروف المثلى.
2- تقدير نسب مكونات صبغات الآزو الدوائية باستخدام طريقة النسبة المولية التي كانت (1 دواء :1 كاشف مؤزوت) لكافة الصبغات قيد الدراسة.
3- حساب قيم ثوابت الاستقرار لصبغات الآزو الناتجة ، والتي حسبت من معادلات قياسية ، فتبين أنها كانت تعتمد على المتغيرات العملية التالية:

أ- **درجة الحرارة:** كانت درجة الحرارة بالمدى (10-50)°م ، مما سهل ذلك في حساب معدلات المتغيرات الثرموديناميكية ΔS^o،ΔH،ΔG^o إذ تبين ان التفاعلات كانت تلقائية وباعثة للحرارة من خلال الإشارة السالبة لقيم ΔG^o ، ΔH ، كما بينت الدراسة ذاتها أن الاشارة السالبة لـ ΔS^o منسجمة مع تكوين الصبغات مع وجود بعض الاستثناءات.

ب- **الدالة الحامضية:** درست ثوابت الاستقرار لكل صبغة آزو عند الدالات الحامضية الثلاث : الحامضية بقيمة (5)، المتعادلة بقيمة (7) والقاعدية بقيمة (9) ، عند خمس درجات حرارية مختلفة (10،20،30،40،50)°م.

ج- **الهيئات التركيبية:** أثبتت الدراسة أنَّ تغير الهيئات التركيبية للمركبات الدوائية وموقع ونوع المعوض فيها له تأثير واضح على قيم ثوابت استقرار صبغات الآزو المُتكونة منها, كما أثبتت ايضاً أن تغيير الكاشف له تأثير كبير وواضح على قيم ثوابت الاستقرار لصبغات الآزو المتكونة منها.

واخيراً تضمن البحث دراسة نظرية مبسطة في محاولة لتحديد موقع التآصر بين المركب الدوائي والكاشف, وذلك من خلال حساب بعض المتغيرات الالكترونية والطاقية, فضلاً عن الابعاد الهندسية للصبغة بهيئتها المثلى, وقد حاولنا إيجاد العلاقة بين هذه المتغيرات مع قيم ثوابت الاستقرارية من خلال محاولة الربط بينها.

Abstract

The present study included preparation of some drug azo dyes by coupling four drug compounds with two diazotized reagents: meta-aminophenol reagent and para-amino benzoic acid by forming diazonium salts. to see the effect of the compensator type in addition to the reagent type on Stability constants for dyes prepared under study

The main subject of the study is determination of the stability constants for pharmaceutical azo dyes formed using the spectrophotometric analysis method. As this study required following steps:

1- Finding the optimal conditions for each colored produced azo dye, which are :
   A- Optimum volume of the reagent.
   B- Optimum volume of basic salt to obtain the required pH.
   C- Optimum order of addition.
   D- Time of appearance.
   E- Stability time.
   F- The optimum wavelength at the final optimal conditions for each prepared azo dye.
2- Determining the components ratios of each resulting dye using the mole-ratio method, which was (1 drug :1 reagent) for all the dyes under study .

3- Calculating the values of stability constants for formed azo dyes, which were calculated from standard equations, and found that they depend on the following practical parameters :

A. Temperature: temperature in the range (10-50)°C, making it easy to calculate averages thermodynamic parameters ΔG^o, ΔH, ΔS^o , where it was found that they are spontaneous and exothermic reactions through the negative values ΔG^o and ΔH, the same study also showed the negative values of ΔS^o parameter, is agrees with theoretical study, with some exclusions

B. pH :The stability constants of each azo dye were studied at the three pH : acidic with a value (5), neutral with a value (7) and basic with a value (9), at five different temperatures (10,20,30,40 and 50) °C.

C. Structures formula : the study proved that the changing the structures of the drug compounds, location and type substitutes which has a clear effect on the stability constants of the resulting azo dyes, It also proved that change the reagent has a significant on the values Stability constants for the azo dyes formed from them.

Finally, research included simplified theoretical study in an attempt to determine bonding site between drugs with the reagents through calculating of some electronic parameters and energy. as well as the geometric dimensions of dye at optimal formula . We have tried to find the relationship between these parameters with stability constants by trying to link them values.

University of Mosul

College of Education

for Pure Science

Spectral Thermodynamic Study for The Reaction of Some pharmaceutical Compounds With two Reagents Diazotized

Ammar Yaser Hashim Mohammad AL-Mashhadani

M.Sc. Thesis

Chemistry

Supervised By

Assistant Prof.

Dr. Mohammad Mahmoud Hussein Younes Al-Niemi

2023 A.D. 1445 A.H.