

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



**Molecular docking study and synthesis of some heterocyclic
compounds derived from N-aminophthalimide using the
ultrasonic technique**

Mohammed basher Khalil Ahmed

M.Sc. Thesis in
Chemistry / Organic Chemistry

Supervised by
Professor Dr. Adnan O. Omer

1447 A.H.

2025 A.D.

SUMMARY

This study involved the environmentally friendly (ultrasonic technology) synthesis of some Schiff bases and various new heterocyclic compounds derived from N-amino phthalimide and as follows:-

- 1- The first series involves the preparation of Schiff bases by reaction of starting material N-amino phthalimide with Different substitutes of benzaldehydes using ultrasonic technology with the addition of zirconium ion as catalyst to produce eight new Schiff base compounds ($M_1 - M_8$).
- 2- The second series involves the preparation of four-member ring compounds through the reaction of new Schiff base compounds ($M_1-M_4-M_5-M_6-M_8$) in The first series with Chloroacetyl chloride to give ($A_1-A_4-A_5-A_6-A_8$).
- 3- The third series involves the preparation of five-member ring compounds through the reaction of new Schiff base compounds ($M_1 - M_8$) in The first series with ethyl thioglycolate to give ($S_1 - S_8$).
- 4- The Fourth series involves the preparation of N-(1,3-dioxoisindolin-2-yl)-3-oxobutanamide by the reaction of N-amino phthalimide with Ethyl acetoacetate then react the N-(1,3-dioxoisindolin-2-yl)-3-oxobutanamide with Chloroacetyl chloride and ammonia derivatives such as hydrazine, phenylhydrazine, semicarbazide, thiosemicarbazide, , urea, thio urea,, allyl thio urea to produce heterocyclic compounds ($B_1 - B_8$) .
- 5- series involves the reaction of N-amino phthalimide with acetyl chloride, acetonitrile, urea, thio urea and guanidine to produce aza heterocyclic compounds ($K_1- K_5$).
- 6- Study molecular docking theoretically for all produce compounds.
- 7- The structures of the prepared were identified according to their physical properties and spectral data (FT-IR, ^1H -NMR, and ^{13}C -NMR).

8- Finally, study the effect of some of the prepared compounds (M1,M2,M4,M5,A1,A4,A5,A6,B1,B5,B6,B8,S1,S5,S8,S7,K1,K2,K3) on four types of bacteria Gram-positive *Staphylococcus aureus* and *bacillus* and Gram-negative *bacteria*: *E. coli* and *klebsiella* in different concentration (0.01, 0.02, 0.03).

الخلاصة

تضمنت هذه الدراسة التخليق الصديق للبيئة (باستخدام تقنية الموجات فوق الصوتية) لبعض قواعد وعلى النحو N-aminophthalimide شيف ومركبات حلقية غير متجانسة جديدة مختلفة مشتقة من التالي :-

1- تتضمن السلسلة الأولى تحضير قاعدة شيف من خلال تفاعل المادة الأولية N-amino phthalimide مع معوضات مختلفة من البنزالديهايدات باستخدام تقنية الموجات فوق الصوتية مع إضافة أيون الزركونيوم كمحفز لإنتاج ثمانية مركبات قاعدة شيف جديدة (M1 – M8).

2- تتضمن السلسلة الثانية تحضير مركبات حلقية رباعية الأعضاء من خلال تفاعل مركبات قواعد شيف الجديدة (M1,M4,M5,M6,M8) في السلسلة الأولى مع كلوريد كلورو أسيتايل لنحصل على مركبات (A1,A4,A5,A6,A8).

3- السلسلة الثالثة تتضمن تحضير مركبات حلقية خماسية الأعضاء من خلال تفاعل مركبات قواعد شيف الجديدة (M1 – M8) في السلسلة الأولى مع ثيوجليكولات الإيثيل (S1 – S8).

4- تتضمن السلسلة الرابعة تحضير N-(1,3-دايوكسوزوإندولين-2-يل)-3-أوكسو بوتان اميد عن طريق تفاعل N-أمينو فثاليميد مع إيثيل أسيتو أسيتات، ثم تفاعل مع مشتقات الأمونيا مثل الهيدرازين، فينيل هيدرازين، سيمي كاربازيد، ثيوسيمي كاربازيد، كلورو أسيتيل كلوريد، يوريا، ثيو يوريا، غوانيديين، وأليل ثيو يوريا (B1 – B8) لإنتاج مركبات حلقية غير متجانسة.

5- تتضمن السلسلة تفاعل N-aminophthalimide مع كلوريد الأسيتيل، وأسيتونتريل، واليوريا، وثنو يوريا، والغوانيديين لإنتاج مركبات حلقية غير متجانسة من الأزا.

6- دراسة الالتحام الجزيئي نظريا لجميع المركبات الناتجة.

7- تم تشخيص على المركبات المحضرة حسب خواصها الفيزيائية وبياناتها الطيفية (FT-IR، $^1\text{H-NMR}$ ، و $^{13}\text{C-NMR}$).

8- وأخيرا تضمنت هذه الرسالة دراسة تأثير بعض المركبات المحضرة (M1،M2،M4،M5،A1،A4،A5،A6،B1،B5،B6،B8،S1،S5،S7،S8،K1،K2،K3) على أربعة أنواع من المكورات العنقودية الذهبية موجبة الجرام والعصيات والبكتيريا سالبة الجرام: الإشريكية القولونية والكلبسيلا بتركيزات مختلفة.



جمهورية العراق

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

جامعة الموصل / كلية العلوم

قسم الكيمياء

دراسة الالتحام الجزيئي وتشبيد بعض المركبات الحلقية غير المتجانسة
المشتقة من N-امينوفثاليميد بطريقة الأمواج فوق الصوتية

محمد بشير خليل احمد

رسالة ماجستير

الكيمياء / الكيمياء العضوية

بإشراف

الأستاذ الدكتور عدنان عثمان عمر