



جامعة الموصل  
كلية التربية للعلوم الصرفة

دراسة عملية ونظرية لثوابت استقرارية تكوين عشرة من صبغات

الآزو - جالكون الاروماتية

أسماء محمد يونس امين محمود شيخلر

رسالة ماجستير

كيمياء

بإشراف

الأستاذ المساعد

الدكتور محمد محمود حسين يونس النعيمي

## الخلاصة:

اشتملت الدراسة على تحضير عشرة جالكونات مشتقة من الالديهيدات و الكيتونات ومعوذاتها في مواقع مختلفة ( أورثو ، وميثا ، وبارا ) ، وتم التأكد من تكوّن الهيئات التركيبية للجالكونات المحضرة وتشخيصها كافة باستعمال طرائق عدة، منها قياس درجات الانصهار، وأطياف الأشعة تحت الحمراء (IR)، والأطياف الالكترونية UV. تم تعيين ثوابت الاستقرار لصبغات الأزو-جالكون الأروماتية المتكوّنة، باستعمال الطريقة الطيفية الفوتومترية، وحسب الخطوات الآتية :

- 1- إيجاد الظروف المثلى لصبغات الأزو-جالكون، وهي: (أفضل طول موجي بدائي، وأفضل حجم للكاشف، وأفضل حجم للملح القاعدي للحصول على الدالات الحامضية المطلوبة، وأفضل تسلسل إضافة، وأفضل طول موجي عند الظروف المثلى لكل صبغة).
- 2- تقدير نسب مكوّنات الأصباغ العشرة المدروسة باستخدام طريقة النسبة المولية التي كانت (1:2) لجمعها.

3- حساب قيم ثوابت الاستقرار لتكوين الأصباغ العشرة المحضّرة، التي حسبت من معادلات قياسية، فتبيّن أنها كانت تعتمد على المتغيرات العملية التالية:

أ) درجات الحرارة التي كانت ضمن المدى ( $0-50^{\circ}\text{C}$ )، ممّا سهّل علينا ذلك حساب معدلات المتغيرات الترموديناميكية ( $\Delta H, \Delta G^{\circ}, \Delta S^{\circ}$ )، إذ تبيّن انها تفاعلات تلقائية وباعثة للحرارة من خلال إشارتي ( $\Delta H, \Delta G^{\circ}$ ) السالبتين معاً، كما بيّنت الدراسة ذاتها أن الإشارة السالبة لـ ( $\Delta S^{\circ}$ ) منسجمة مع تكوين الصبغات العشرة مع وجود بعض الاستثناءات.

ب) الهيئات التركيبية: أثبتت الدراسة أن تغيّر الهيئات التركيبية للجالكونات وموقع ونوع المعوض فيها له تأثير واضح على قيم ثوابت استقرار صبغات الأزو- جالكون المتكوّنة منها.

كما تمت دراسة الفعالية البيولوجية للجالكونات العشرة المحضّرة ومدى تأثيرها في نمو اجناس من البكتريا المرضية، وتم ذلك باستعمال اربع أنواع من البكتريا منها الموجبة لصبغة الكرام وأخرى سالبة لصبغة الكرام وذلك باستعمال طريقة الحفر بالأكار، وتبين ان لهذه الجالكونات فعالية متفاوتة القوة في نمو البكتريا.

وأخيراً دُرست المركّبات العشرة قيد البحث نظرياً باستعمال طريقة من طرائق ميكانيك الكم و استعملت الحسابات الأساسية abinitio وهي طريقة HF ، وتم حساب بعض الثوابت الفيزيائية مثل شحنة مليكان وقيم طاقة الأوربيتالين : HOMO و LUMO ومن قيمتهما تم حساب قيم بعض الدوال التي لها علاقة باستقرارية وفعالية الجزيئات مثل الصلادة، والجهد الكيميائي، ودليل الالكتروفيلية العام.

## Abstract

The study involved the synthesis of ten chalcones derived from various aldehydes, ketones, and their substituted derivatives at different positions (ortho, meta, and para). Subsequently, a recrystallization process was carried out to enhance the purity of the synthesized compounds. The composition of the prepared chalcones was confirmed and characterized using various techniques, including melting point determination, infrared (IR) spectroscopy, and UV-visible spectroscopy. The stability constants of the resulting aromatic azo-chalcone dyes were determined using a spectrophotometric method, following these steps:

- 1- Optimization of the conditions for the formation of azo-chalcone dyes, including determining the optimal initial wavelength, reagent concentration, basic salt concentration for achieving the desired acidic conditions, addition sequence, and optimal wavelength under the optimized conditions for each dye.
- 2- The proportions of the components of the ten dyes studied were estimated using the molar ratio method, which was found to be 2:1 for all of them.
- 3- The values of the stability constants for the composition of the ten prepared dyes were calculated using standard equations. It was observed that these values were dependent on certain practical variables, such as:
  - a) Temperature. The temperature range used in the study was 0-50°C, which allowed for the calculation of thermodynamic variables ( $\Delta H$ ,  $\Delta G^\circ$ ,  $\Delta S^\circ$ ). It was found that the reactions were spontaneous and produced heat, as indicated by the negative signs of ( $\Delta H$ ,  $\Delta G^\circ$ ). The study also revealed that the negative sign of ( $\Delta S^\circ$ ) was consistent with the formation of the ten pigments, with some exceptions.

b) Structural structures: The study showed that modifying the structural structures of chalcones and the position and type of substitution in them significantly impacts the stability constants of the azo-chalcone dyes formed by them.

Additionally, the biological efficacy of the ten chalcones prepared and their impact on the growth of pathogenic bacteria were investigated. This was accomplished through the agar diffusion method, using four types of bacteria, including both gram-positive and gram-negative strains. The results revealed that these chalcones exhibit varying degrees of effectiveness against bacterial growth.

Finally, the ten compounds under study were theoretically analyzed using the HF method, a quantum mechanics approach. Various physical constants were calculated, including the millican charge and the orbital energy values of HOMO and LUMO. Based on these values, several functions related to the stability and effectiveness of molecules were determined, such as hardness, chemical potential, and general electrophilicity index.

**University Of Mosul  
College of Education  
for Pure Sciences**



**Practical and Theoretical study of stability  
constants for formation of Ten of Aromatic  
Azo – chalcone**

**Asmaa Mohamed Younis Amin Mahmoud Shikhler**

M.Sc. Thesis

Chemistry

Supervised by

**Assist. Prof.**

**Dr. Mohamed Mahmoud Hussein Yonis Al-Nuaimi**

**2024 A.D**

**1446 A.H**