جامعة الموصل

كلية التربية للعلوم الصرفة

تحضير ودراسة عملية ونظرية لمقارنة ثوابت التأين لعدد من مشتقات الاحماض الامينية

محمد عبدالرزاق مهدي صالح الحيالي

رسالة ماجستير

كيمياء

بإشراف

الأستاذ المساعد

الدكتورة نور حازم محمد سعيد

١٤٤٧هـ ٢٠٢٥م

الخلاصة:

تهدف هذه الرسالة إلى دراسة ثوابت التأين لعدد من مشتقات الأحماض الأمينية المهمة، باستعمال مسارين: أحدهما عملي والآخر نظري حسابي. يشمل الجانب العملي تحضير المشتقات المطلوبة للأحماض الأمينية وايجاد قيمة ثابت التأين (pKa) ، فضلاً عن اعتماد الجانب النظري على حسابات كيمياء الكم لتفسير سلوك هذه المركبات ومقارنة النتائج العملية مع النظرية.

تم تحضير مجموعة من الأحماض الأمينية ذات السلاسل الجانبية المختلفة،مثل الكلايسين والالنين والسيرين والثريونين والفالين والليوسين ومفاعلتها مع المركب 4,2–ثنائي نايترو فنيل بنزين لتحضير المركبات المطلوبة للدراسة تم تشخيصها بطيف الاشعة تحت الحمراء وايجاد ثابت التأين لها عملياً و نظرياً باستخدام طرائق ميكانيك الكم

وجدت قيمة pKa عمليًا للمركبات المحضرة ،أما من الجانب النظري، فقد استخدمت حسابات الطرائق الاساسية ، مثل: نظرية دالة الكثافة DFT ذي القاعدة الاساسية (6311-G)(d,p) والقاعدة الاساسية (cc-pvdz) ونظرية هارتي فوك ذي القاعدة الاساسية (6311-G)(d,p) وتم دراسة المركبات نظريا في الحالتين المتعادلة والسالبة.

بعد ذلك اجريت مقارنة بين قيم ثوابت التأين المحسوبة بالطرق النظرية في الحالتين المتعادلة والسالبة وقد بينت النتائج تطابقًا جيدًا بين القيم النظرية والعملية في أغلب المركبات، مع وجود فروق يمكن تفسيرها عبر اختلاف البيئة التجريبية ودرجة تأثرها بالوسط الكيميائي وكذلك دقة القواعد الاساسية المستخدمة مع النظريات. كما ساعدت الحسابات النظرية في تقديم تفسير أعمق لتوزيع الشحنة الإلكترونية في الجزيئات، وطبيعة المدارات الجزيئية (HOMO, LUMO)، وصلادتها، وطبيعة انتقال البروتونات وتأثير المجموعات الوظيفية على التأين. تشير الدراسة إلى أن ثوابت التأين ليست فقط خواصًا تجريبية قابلة للقياس، بل يمكن أيضًا التنبؤ بها بدقة باستخدام الحسابات الكمية المدروسة. كما أن العلاقة بين طبيعة السلسلة الجانبية وثابت التأين تؤثر بشكل كبير على االدالة الحامضية ، وخصوصًا في الحالات التي تتداخل فيها العوامل الإلكترونية والحجم الجزيئي والقدرة على تشكيل روابط هيدروجينية.

Abstract:

This thesis aims to investigate the ionization constants of several important amino acid derivatives through two complementary approaches: an experimental route and a theoretical–computational one. The experimental part involves the synthesis of the required amino acid derivatives and the determination of their ionization constant (pKa), while the theoretical aspect relies on quantum-chemical calculations to interpret the behavior of these compounds and to compare the experimental results with the theoretical findings.

A group of amino acids with different side chains—such as glycine, alanine, serine, threonine, valine, and leucine—were synthesized and reacted with 2,4-dinitrophenylbenzene to obtain the target compounds for this study. These products were characterized by infrared spectroscopy (IR), and their ionization constants were determined experimentally and theoretically using quantum-mechanical methods.

Experimentally, the pKa values of the synthesized compounds were obtained. Theoretically, calculations were performed using fundamental quantum-chemical approaches, including Density Functional Theory (DFT) with the basis sets 6-311G(d,p) and cc-pvdz, as well as the Hartree–Fock (HF) method with the 6-311G(d,p) basis set. The compounds were studied in both their neutral and anionic forms.

A comparison between the theoretical ionization constants for the two electronic states (neutral and anionic) revealed good agreement with the experimental data for most compounds, with minor discrepancies that can be attributed to differences in the experimental environment, the influence of the chemical medium, and the precision of the basis sets used with the applied theories. The theoretical calculations also provided a deeper insight into the electronic charge distribution, the nature of the molecular orbitals (HOMO and LUMO), molecular hardness, the proton-transfer mechanism, and the influence of functional groups on ionization behavior.

The study concludes that ionization constants are not merely measurable experimental properties but can also be accurately predicted through well-designed quantum-chemical computations. Moreover, the relationship between the nature of the amino acid side chain and its ionization constant significantly influences its acidic function, particularly in cases where electronic effects, molecular size, and hydrogen-bonding ability interact simultaneously.

University Of Mosul
College of Education
for Pure Sciences

Synthesis and Theoretical-Experimental Investigation of the Ionization Constants of Several Amino Acid Derivatives

Mohammed AbdulRazzaq Mahdi Saleh Al-Hayali

M.Sc. Thesis

Chemistry

Supervised by

Asst. Prof.

Dr. Noor Hazim Mohammad Saeed

2025 A.D. **1447 A.H.**