



جامعة الموصل
كلية التربية
للعلوم الصرفة

دراسة طيفية ثرمودايناميكية وحركية لتحضير عدد من أصباغ
الآزو – جالكون عملياً ونظرياً

أحمد قاسم حسن حيدر الوندائي

أطروحة دكتوراه
الكيمياء

بإشراف
الأستاذ المساعد
الدكتور محمد محمود حسين يونس النعيمي

الخلاصة :

تضمنت الدراسة تحضير عشر مركبات جالكونية مشتقة من الالديهيدات والكتونات ومعوّضاتها في موقع اورثو وميتا وبارا بمجاميع مختلفة ، تم التأكد من الهياآت التركيبية للجالكونات المحضّرة باستعمال الطرائق الفيزيائية مثل درجة الانصهار ، أطياف الاشعة تحت الحمراء (IR)، الأطياف الإلكترونية U.V.

تم تعيين ثوابت استقرار هذه أصباغ الأزو- جالكون الأروماتية المتكوّنة، باستعمال الطريقة الطيفية الفوتومترية . إذ تطلّبت هذه الدراسة الخطوات الآتية : إيجاد الظروف المثلى لكل معقدات الأزو - جالكون، وهي:(أفضل حجم للكاشف، أفضل حجم للملح القاعدي للحصول على الدالات الحامضية المطلوبة، تسلسل الإضافة). تقدير نسب تكوين أصباغ الأزو- جالكون باستخدام طريقة النسبة المولية التي كانت (1:1) لكافة المعقدات قيد الدراسة . حساب قيم ثوابت الاستقرار لأصباغ الأزو- جالكون المتكوّنة ، التي حُسبت من معادلات قياسية ، فتبين أنها كانت تعتمد على المتغيرات العملية الآتية : (درجة الحرارة: كانت درجة الحرارة بالمدى (10-50 °C)، ممّا سهّل ذلك في حساب معدلات المتغيرات الترموديناميكية ΔG ، ΔH ، ΔS ، إذ نلاحظ أنها تفاعلات تلقائية وباعثة للحرارة من خلال إشارتي ΔH ، ΔG السالبتين معاً، كما بينت الدراسة ذاتها أن الإشارة السالبة لـ ΔS منسجمة مع تكوين المعقدات.

الدالة الحامضية: كما درست ثوابت الاستقرار لكل أصباغ الأزو - جالكون عند الدالات الحامضية الثلاث : حامضية بقيمة (5)، متعادلة بقيمة (7) وقاعدية بقيمة (9) ، عند خمس درجات حرارية مختلفة. لقد تمت دراسة الحركية تكوّن أصباغ الأزو -جالكون الناتجة من تفاعل جالكونات الحاوي على معوضات مختلفة في الموقع ارثو وميتا وبارا ، مع ملح بارا - أمينوبنزوفينون المؤزوت عند دالة الحامضية pH7 . وأيضاً درست حركية تكوّن كل صبغة عند الظروف المثلى لها وعند مدى من الدرجات الحرارية المحصورة بين (10°C - 50). ومنها تم حساب ثوابت السرعة (k)، عمر النصف ($t_{1/2}$) والدوال الترموديناميكية للتنشيط (ΔS^* , ΔG^* , ΔH^* , Ea) ، تمت مناقشتها مع إعطاء التفسير المناسب لكل منها. وكما تمت دراسة الجالكونات نظرياً باستعمال طريقتين من طرائق ميكانيك الكم إحداها استعملت الحسابات الأساسية abintio وهي طريقة HF ، والطريقة الثانية استعملت الحسابات شبه التجريبية semiempirical متمثلة بطريقة AM1، منها حسب بعض الثوابت الفيزيائية مثل شحنة

Abstract:

The study included the preparation of ten chalcones derived from aldehydes and ketones and their substitutes at the ortho, meta, and para sites in different groups. The structural forms of the prepared chalcones were confirmed using physical methods such as melting point, infrared (IR) spectra, and UV electronic spectra and the stability constants for these were determined. Aromatic azo-chalcone dyes formed using the spectrophotometric method. This study required the following steps: Finding the optimal conditions for each azo-chalcone complex, which are: (the best size of the reagent, the best size of the basic salt to obtain the required acidic parameters, the sequence of addition. Estimating the formation percentages of the azo-chalcone dyes using the molar ratio method, which was (1:1) for all the complexes under study. Calculating the values of the stability constants for the formed azo-chalcone dyes, which were calculated from standard equations, and it was found that they were dependent on the following practical variables: (Temperature: The temperature was in the range (10-50 °C), which made it easier to calculate the rates of the thermodynamic variables ΔG° , ΔH , and ΔS° , as we notice that they are spontaneous reactions that produce heat through both negative signs of ΔG and ΔH . The same study also showed that the negative sign of ΔS° is consistent with the formation of complexes, The acidic function: The constants of stability were also studied for each tincture of the Azo - the two sorted at the three acidic aids: acidic with a value (5), equivalent with a value (7) and a basic value of (9), at five different thermal degrees. The mobility has been studied by the formation of the Azu dyes -as a result of the interaction of the satellites containing various mosques on the site of the inherita, meta and Para, with Para Para -Aminopzovinone in the PH7 function. And also a motor lesson to form each dye in its optimal conditions and at a range of thermal degrees between (10-50) m. Including the constants of the speed (K) and the age of the half ($t_{1/2}$) and the pharmodic functions of activation (ΔS^* , ΔG^* , ΔH^* , E_a), and were discussed with the appropriate interpretation of each of them. Just as the theoretical sites were studied using two methods of quantum mechanics, one of which used the basic accounts Abintio, which is the HF method, and the second method used semi - experimental accounts Semiempirical represented by the AM1 way, including

according to some physical constants such as the charge of Milkan and the values of urbanine, the HOMO and LOMO and their values have been calculated values Some of the functions that are related to the stability and effectiveness of the molecules such as birth, chemical effort and general electrofille guide.

**University of Mosul
College of Education
for Pure Science**



**Thermodynamic and kinetic study for the synthesis
a number of azo-chalcone dyes practically and
theoretically.**

Ahmed Qassem Hassan Haider AL-windawi

Ph.D. Thesis

Chemistry

Supervised By

Assistant Prof .

Dr.Mohammad Mahmoud Hussein Younes Al-Niemi

2024 A.D.

1445.H.