



جامعة الموصل
كلية التربية للعلوم الصرفة

تحضير وتشخيص بعض المركبات الحلقية غير المتجانسة الخماسية
والسداسية المشتقة من مركبات الكربونيل α, β - غير المشبعة وتقييم
الفعالية البيولوجية لبعض منها

ايمان محمود حسن زمزوم

أطروحة الدكتوراه
الكيمياء / الكيمياء العضوية

بإشراف

الأستاذ الدكتور
هاشم جلال عزيز

الأستاذ الدكتور
عبد الوهاب جعفر الحمداني

الخلاصة :

تم تشييد عدد من الحلقات الخماسية والسداسية غير المتجانسة الحاوية على النتروجين من خلال تحضير :

عدد من مركبات الكاربونيل الفا،بيتا – غير المشبعة بواسطة تكاثف كلينزن-شميدت بين ثنائي الاسيتيل والبنزالديهيد ومعوذاته وبنسبة (1:1) للحصول على المركبات المقابلة (10-18 A) وبنسبة (1:2) للحصول على المركبات المقابلة (10-18 B) .
ان معاملة البنزالديهيد ومعوذاته مع البنزائل امين بتصعيد حراري ولمدة ساعة مما يؤدي الى تكوين قواعد شف المقابلة (1-9).

وللحصول على الحلقات غير المتجانسة (البايروليدينات ،البايرازولينات ، البيرييميدينونات و البيرييميدين ثايونات) فقد تم تشييدها كما يأتي :

- تكثيف المركبات (10-18 A) مع قواعد شف (1-9) للحصول على البايروليدينات المقابلة (20-26) .

- معاملة المركبات (10-18 A) ، (10-18 B) مع الهيدرازين المائي للحصول على البايرازولينات المقابلة (50-58 A) ، (50-58 B) على التوالي .

- تكثيف المركبات (10-18 A) مع اليوريا والثايوريا ادى الى تكوين البيرييميدينات والبيرييميدين ثايونات المقابلة (30-36 A) ، (40-48 A) على التوالي .

- تكثيف المركبات (10-18 B) مع اليوريا والثايوريا ادى الى تكوين البيرييميدينات والبيرييميدين ثايونات المقابلة (30-36 B) ، (40-48 B) على التوالي.

تم تشخيص تراكيب المركبات الناتجة بالاعتماد على الخواص الفيزيائية والبيانات الطيفية (U.V, FTIR, ¹H-NMR , ¹³C-NMR , Mass) فضلا عن ذلك فقد تم التأكد من الميكانيكية

المقترحة لهذه التفاعلات بالاعتماد على البيانات الطيفية ، مضافا لها بعض النتائج النظرية مثل

حرارة التكوين (HF) وطاقة الاعاقة الفراغية (S.E) باعتماد النتائج الاكثر استقرارا وباستعمال

برنامج Chem office وكما تم فحص الفعالية البايولوجية لبعض المركبات تجاه انواع من البكتريا

..

Abstract :

A number of five and six-membered heterocycles (containing nitrogen atoms) had been synthesized via the preparation of :

Number of α,β -unsaturated carbonyl compounds by Claisen-Schmidt condensation of diacetyl and benzaldehyde and substituted benzaldehydes using (1:1) ratio to afford the corresponding compounds (10-18 A) while the ratio of (1:2) leads to the corresponding products (10-18 B) .

In the other hand the treatment of benzyl amine with benzaldehyde and its substituted ones under refluxing conditions leads to the formation of the corresponding Schiff bases (1-9).

In order to get the heterocycles of the planned project (Pyrrolidines , Pyrazolines , Pyrimidinones and Pyrimidine thiones), the following steps had been followed:

Condensation of Schiff bases (1-9) with (10-18 A) afforded the corresponding pyrrolidines (20-26).

Treatment of hydrazine hydrate with (10-18 A) AND (10-18 B) lead to the synthesis of the corresponding pyrazolines (50-58 A), (50-58B) respectively. Finally the condensation of urea and thiourea with (10-18 A) ,(10-18B) produced the corresponding pyrimidinones and pyrimidine thiones (30-36 A),(40-48 A) ,(30-36B) and (40-48 B) respectively .

The structures of the products were identified according to their physical properties and spectral data (U.V,FTIR,¹H-NMR , ¹³C-NMR , Mass).

The suggested mechanism for these reactions were investigated depending on the spectral evidences as well as some theoretical parameters such as heat of formation (H.F) and steric energy (S.E) to suggest the predominant product (the more stable product).by using Chem office version 2016 .

The biological activity of some selected compounds was evaluated tested against some types of bacteria (Gram+ve and Gram -ve)