



جامعة الموصل

كلية التربية للعلوم الصرفة

تحضير ودراسة الارساء الجزيئي لعدد من المركبات المشتقة من  
الانثراسين بواسطة تفاعل ديلز- الدر وتقييم الفعالية البايولوجية  
لها

زينه ليث خليل قاسم

رسالة ماجستير

الكيمياء

بإشراف

الاستاذ

الدكتور ياسر شكيب محمد

٢٠٢٥ م

١٤٤٦ هـ

## الخلاصة

تضمنت الدراسة استخدام تفاعل ديلز - ألدلر لتحضير عدد من معوضات قواعد شف وأصبغ الأزو الجديدة من خلال أربع سلاسل ، كما تم اجراء دراسة نظرية باستخدام تقنية الإنحاء الجزيئي (moleculer docking) ، لدراسة فعالية مركبات المحضرة نظرياً من خلال تحديد مواقع ارتباط المركبات مع هذا البروتين (3VSL) .

في السلسلة الأولى ، تم الحصول على مركب كيتون فيورانوانثراسين ( $Z_1$ ) من خلال تفاعل ديلز - ألدلر بين الأنثراسين وانهيدريد المالك . بعد ذلك ، تم تفاعل الناتج مع اثنين من مشتقات الأنلين وهي بارا فنلين ثنائي امين و البنزيدين ، لتحضير المركب ( $Z_{2,3}$ ) ومن ثم مفاعلتها مع حامض الكبريتيك و نترتيت الصوديوم ووجود ثنائي مثيل سلفوكسايد لتحضير ملح الديازونيوم ( $Z_{4,5}$ ) ، وبعدها تم مفاعلتها مع الريزورسينول و الفلوروكسينول لإعطاء اصباغ الازو ( $Z_{6,7,8,9}$ ) .

كذلك من المادة الأولية نفسها تم تحضير العديد من قواعد شف بمفاعلة المركب ( $Z_{2,3}$ ) مع العديد من معوضات البنزالديهايد والاسيتوفينون للحصول على مركبات ( $Z_{10-25}$ ) .

أما السلسلة الثانية ، فتم مفاعلة مركب كيتون فيورانوانثراسين ( $Z_1$ ) مع اليوريا بالصهر المباشر ، و تم الحصول على المركب ( $Z_{26}$ )، بعدها تم تفاعل هذا المركب مع الفورمالديهد بنسبة (40%) ، بوجود الماء وثنائي مثيل فورماميد كمذيبان للحصول على مركب ( $Z_{27}$ ) ليتم تفاعله مع معوضات الأنلين للحصول على مركبات ( $Z_{28-34}$ ) . ومن ثم الحصول على معقدات البلاتبين بنسبة (١:٢) الناتج من تفاعل الليكنيدات المحضرة ( $Z_{28,29,30}$ ) مع ملح الفلز ( $H_2PtCl_6.XH_2O$ ) للحصول على المعقدات ( $Z_{52,53,54}$ ) .

و السلسلة الثالثة ، تم تفاعل ( $Z_1$ ) مع بعض من الأحماض الأمينية وهي (الكلايسين ، الأنين، الفالين ) بوجود حامض الخليك الثلجي كمذيب للحصول على المركبات ( $Z_{35,36,37}$ ) وبعدها تم تفاعلهم مع أورثو فنلين ثنائي أمين ليتم الحصول على حلقة الايميدازول للمركبات ( $Z_{38,39,40}$ ). كذلك أخذ مولين من مركب كيتون فيورانوانثراسين ( $Z_1$ ) ليتم تفاعله مع مشتقات الانلين وهي بارا فنلين ثنائي امين و البنزيدين للحصول على المركبات ( $Z_{41,42}$ ) .

و تضمنت السلسلة الرابعة، تفاعل المركب كيتون فيورانوانثراسين ( $Z_1$ ) مع الانلين للحصول على المركب ( $Z_{43}$ ) ، بعد ذلك يتم تفاعل المركب ( $Z_{43}$ ) مع حامض كلورسلفونيل ( $\text{HSO}_3\text{Cl}$ ) لتحضير المركب ( $Z_{44}$ ) وبمفاعله مع هيدرازين هيدرات بنسبة 80% تم الحصول على المركب ( $Z_{45}$ )، وأخيراً تم تفاعل المركب ( $Z_{45}$ ) مع معوضات البنزالديهايد للحصول على مركبات ( $Z_{44-51}$ ).

و أظهرت جميع المركبات المحضرة نتائج جيدة، أذ تم تشخيصها باستخدام الخواص الفيزيائية (اللون، درجة الانصهار) ومطيافية الأشعة تحت الحمراء (FT-IR)، والتي أظهرت حزم امتصاص تتوافق مع المجاميع الفعالة للمركبات المقترحة. كما تم استخدام مطيافية الرنين النووي المغناطيسي للبروتون ( $^1\text{H-NMR}$ ) للتأكد صحة المركبات من خلال التكاملات ومواقع الإشارات. فضلاً عن ذلك، تم قياس التوصيلية الكهربائية المولارية للمُعقدات ( $Z_{52,53,54}$ ). كما تمت الاستعانة بتقنية (UV-Spectroscopy) للتأكد من شكل الهندسي المقترح للمعقدات، وتم استخدام تقنية التحليل الدقيق للعناصر (C.H.N) للمعقدات.

واخيرا تم دراسة فعالية عدد من هذه المركبات كمضادات بكتيرية لاربعة انواع من البكتريا ثلاث منها سالبة لصبغة كرام وواحدة موجبة لصبغة كرام.

## Abstract

In this study, the Diels-Alder reaction was used to prepare a number of novel Schiff base compensators and azo dyes through four series, and a theoretical study was performed using molecular docking to study the efficacy of the theoretically prepared compounds by identifying the binding sites of the compounds with this protein (3VSL).

In the first series, a furanoanthracene ketone ( $Z_1$ ) was obtained through a Diels-Alder reaction between anthracene and maleic anhydride. Then, the product was reacted with two aniline derivatives, para-phenylene diamine and benzidine, to prepare the compound ( $Z_{2,3}$ ) and then reacted with sulfuric acid, sodium nitrite and dimethyl sulfoxide to prepare the diazonium salt ( $Z_{4,5}$ ), and then reacted with resorcinol and fluorocresol to give azo dyes ( $Z_{6,7,8,9}$ ).

From the same starting material, several Schiff bases were prepared by reacting compound ( $Z_{2,3}$ ) with various benzaldehyde and acetophenone compensators to obtain compounds ( $Z_{10-25}$ ).

In the second series, the ketone furananthracene compound ( $Z_1$ ) was reacted with urea by direct fusion, and compound ( $Z_{26}$ ) was obtained, then this compound was reacted with formaldehyde (40%), in the presence of water and dimethylformamide as solvents to obtain compound ( $Z_{27}$ ) to be reacted with aniline compensators to obtain compounds ( $Z_{28-34}$ ). Then, platinum complexes were obtained in the ratio (1:2) resulting from the reaction of the prepared ligands ( $Z_{28,29,30}$ ) with metal salt ( $H_2PtCl_6 \cdot XH_2O$ ) to obtain complexes ( $Z_{52,53,54}$ ).

In the third series, ( $Z_1$ ) was reacted with some amino acids (glycine, alanine, valine) in the presence of ice acetic acid as solvent to obtain compounds ( $Z_{35,36,37}$ ) and then they were reacted with

orthophenylene diamine to obtain the imidazole ring of compounds ( $Z_{38,39,40}$ ). Two moles of the ketone furananthracene compound ( $Z_1$ ) were reacted with the aniline derivatives para-phenylenediamine and benzidine to obtain compounds ( $Z_{41,42}$ ).

In the fourth series, ( $Z_1$ ) was reacted with aniline to obtain compound ( $Z_{43}$ ), then compound ( $Z_{43}$ ) was reacted with chlorosulfonyl acid ( $\text{HSO}_3\text{Cl}$ ) to prepare compound ( $Z_{44}$ ), and by reacting it with 80% hydrazine hydrate, compound ( $Z_{45}$ ) was obtained, and finally compound ( $Z_{45}$ ) was reacted with benzaldehyde to obtain compounds ( $Z_{44-51}$ )

All the prepared compounds showed good results, as they were characterized using physical properties (color, melting point) and FT-IR spectroscopy, which showed absorption bands corresponding to the active groups of the proposed compounds. Proton nuclear magnetic resonance spectroscopy ( $^1\text{H-NMR}$ ) was also used to validate the compounds through integrations and signal positions. In addition, the molar electrical conductivity of the complexes ( $Z_{52,53,54}$ ) was measured. UV-Spectroscopy was used to confirm the proposed geometry of the complexes, and C.H.N. elemental analysis was used for the complexes.

Finally, the efficacy of a number of these compounds as antibacterial compounds was studied against four types of bacteria, three of which are Gram-negative and one is Gram-positive.

**University of Mosul**  
**College of Education**  
**For pure Science**



**Synthesis and molecular docking study of a  
number of anthracene-derived compounds by  
Diels-Alder reaction and evaluation of their  
biological activity**

**Zeina Leith Khalil Qasim**

**M.Sc. Thesis**

**Chemistry**

**Supervised by**

**Prof.**

**Dr. Yasser Shakib Mohammed**

**1446 A.H.**

**2025 A.D.**