تحضير وتشخيص معقدات الموليبيدنوم المحتويه على متصلات مختلطة من الكربونيل والأمين

الطالبة/ ميار فواز الربع

المشرف/ مطلق شديد الجحدلي – يوسف جمعان الغامدي

تم استعراض الأبحاث المنشورة عن مرتبطات قاعدة شيف مع فلزات الكربونيل وترجع أهمية هذة المرتبطات ومتراكباتها إلى نشاطها البيولوجى.

المرتبطات التى تم تحضيرها فى هذه الدراسة هى:

- N-N'- (ايثان ١-٢- دايل) ايثيلدين) ثنائى(١- (٤- ميثوكسى فينيل) ميثان ايمين) (EDMB).
- N-N'- (ايثان ١-٢- دايل) ايثيلدين) ثنائى(١- فينيل ميثيل ايمين) (EDB).
- N-N'- (ايثان ١-٢- دايل) ايثيلدين) ثنائى(١- (ثيوفين -٢- يل) ميثان ايمين) (EDThio).
- N-N'- (ايثان ١-٢- دايل) ايثيلدين) ثنائى(١- بارا- تولى ميثان ايمين) (EDTol).
- N-N'- (ايثان ١-٢- دايل) ايثيلدين) ثنائى(ازينيليدين) ثنائى (داى ميثيل ايمين) (EDN).

وصفت طرق تحضير المرتبطات (EDMB، EDB، EDThio، EDTol، EDN) ومتركباتها مع كربونيل الموليبديدينوم و قد تم توصيف هذه المركبات باستخدام الأشعة تحت الحمراء، الأشعة فوق البنفسجية والمرئية، التحليل الطيفى الكتلى ، الرنين النووى المغناطيسى للبروتون والكربون و التحليل الدقيق. كما تم عمل حسابات النمذجة الجزئية باستخدام الكمبيوتر و كذلك النشاط البيولوجى. جميع المتراكبات الصلبة النقية التى يتفاعل فيها المرتبط فى الصورة المتعادلة و كثنائى الارتباط عن طريق ذرتى النيتروجين (C=N).

قورنت أطياف الأشعة تحت الحمراء للمرتبطات ومتراكباتها ولوحظت تغيرات فى حزم الامتصاص المميزة للمرتبطات. أوضحت قياسات الطيف الالكترونى والقياسات المغناطيسية أن المتراكبات لها الشكل الفراغى ثمانى الأوجه .

فى النهاية تم عمل حسابات النمذجة الجزئية باستخدام الكمبيوتر ومنها تم حساب طول الروابط وقياس الزوايا وقيم الطاقة المختلفة وغيرها.

Synthesis and characterization of molybdenum complexes with mixed carbonyl/amine ligands

The synthesis and structural investigation and reaction of Schiff bases and their molybdenum carbonyl complexes have received a renewed attention in recent years, because of their biological activities. Therefore, this study has been devoted to search for potent Schiff bases which can be developed as safer drugs. In this respect, we have synthesized a number of Schiff bases .

Moreover, more elaborate efforts are needed in this direction. The present work is devoted to the preparation of ligands derived ethylenediamine and anisaldehyde, benzaldehyde, 2-thiophenecarboxaldehyde, 4-methylbenzaldehyde or 4-(dimethylamino)benzaldehyde. The isolated complexes derived from the interaction of these ligands with Mo(CO)4 were characterized by conventional physical and chemical methods. The potential coordination sites were determined using the infrared and 1H NMR spectra. The structures of the isolated solid complexes were proposed on the basis of the spectral (IR, 1H,13C NMR, MS and UV-Vis.). Also, computation studies based on DFT method were carried out for all the compounds to predict the host-gust interaction between the Schiff base and various metal cations. The molecular structure along with atom numbering of Schiff bases with their molybdenum carbonyl complexes were performed with evaluation of different quantum chemical parameters like (ELUMO) the energy of the lowest unoccupied molecular orbital and (EHOMO) energy of the highest occupied molecular orbital. Other properities, like (binding, spin polarization, kinetic, electrostatic, exchange-correlation, dipole moment and sum of atomic) energies were calculated.

الطالبة / ميار فواز الربع

المشرف/ مطلق شديد الجحدلي -- يوسف جمعان الغامدي