نوع الوثيقة : رسالة جامعية

عنوان الوثيقة : *التركيب الإلكتروني والطيف لبعض مشتقات ٥ -بيرازولون*

Electronic structure and spectra of some arylazopyrazolin 5- one derivatives

لغة الوثيقة : العربية

المستخلص : يحتوي هذا العمل على دراسة كاملة ووافية للتركيب الإلكتروني والطيفي لبعض مشتقات ٣-أمينو، ٣-ترافلوروميثيل بيرازولون. الهدف الرئيسي لهذا العمل هو التركيز على العوامل التركيبية المؤثرة على النشاط الصناعي لهذه الأصباغ. قد تم تعيين التركيب الإلكتروني في الحالة المستقرة (الأرضية) لمركبات ٣-أمينو، ٣-ترافلوروميثيل بيرازولون باستخدام طرق حسابية ab-initio عند مستوى RHF وباستخدام قواعد مجموعات مختلفة مثل٦-6-31G. ،*٣١G** تمت دراسة جميع الأشكال التوتوميرية لمركبات ٣-أمينو، ٣-ترافلوروميثيل بيرازولون. وقد أثبتت نتائج الحسابات الجزيئية باستخدام قاعدة المجموعة RHF/6-31G* أن الشكل الحلقي هيدرازوفينيل بيرازولون هو أكثر الأشكال التوتوميرية ثباتا من كيتو-آزو، إينول-آزو. كما تمت دراسة تأثير مجموعات استبدال مختلفة القوة على التركيب الإلكتروني للمركبات باستخدام طريقة AM1-MO التقريبية. وقد تم استعراض نتائج الحسابات الجزيئية بالمقارنة مع طاقة التأين، طاقة القابلية الإلكترونية، الشحنة المتركزة على المراكز المهمة من المركب وكذلك العزم القطبي. تم قياس طيف الامتصاص للمركبات تحت الدراسة في منطقتي الأشعة فوق البنفسجية والمرئية وذلك باستخدام مذيب قطبي (ميثانول) وكذلك مذيب غير قطبي (دايوكسان). كما تم إعداد دراسة مقارنة بين المشاهدات التجريبية والحسابات النظرية بالإضافة إلى توضيح وتعيين كمي لكل الإنتقالات الإلكترونية.

المشرف : أ.د.حسين محمد مصطفى ، د. فوزية محمد النويصري

سنة النشر : ٢٠٠٧