التحليل التركيبي لمركبات الفور مازان الحلقية وغير الحلقية وبعض متراكباتها باستخدام نظرية المدارات الجزيئية

فاتن عبد المحسن الجفري
أ.د. عادل أحمد محمد

المستخلص

تعتبر مركبات الفورمازان الحلقية التاجية وغير الحلقية من المركبات التي لها نشاط و أهمية كيميائية و طبية و صناعية كبيرة . فمن الناحية الطبية فإنها تستخدم في تقدير تأثير الأدوية المضادة للسرطان وتحديد نشاط الخلايا في الأورام الخبيثة وأيضا في زيادة حيوية الجسم . من الناحية التركيبية تحتوي هذه المركبات على روابط من النوع باي π مما يجعلها ذات ألوان تقع في المدى من اللون الأحمر الفاتح إلى اللون الأحمر البنفسجي . وهذا يعزى إلى الانتقال الالكتروني π-π^* وبالتالي فهي تستخدم في الصناعة كصبغات dyes . تستخدم أصباغ متراكبات الفورمازان بشكل واسع في صناعة المنسوجات shades لكونها تتمتع بمستوى ثبات عالي ضد الضوء والرطوبة . أما من الناحية الكيميائية فهي تعتبر ليجندات ligands قوية إذ أنها ذات خاصية انتقائية عالية high selectivity للايونات نظرا لوجود التجويفات holes في تركيبها . ومركبات الفورمازان التاجية ذات مجال تطبيقي واسع المدى في عملية استخلاص المعادن وتقديرها وهذا يعتمد في حد ذاته على قابلتيها لتكوين متراكبات مع الكاتيونات المختلفة . ولكون الأبحاث والدراسات النظرية التي أجريت على هذه المركبات ومتراكباتها محدودة برزت فكرة إلقاء الضوء أكثر على هذا النوع من المركبات ليتم دراستها نظريا في غضون تحقيق الأهداف المطروحة لدراسة هذا الموضوع بالإضافة إلى الجانب التطبيقي الهام لهذه المركبات في المجالات المتعددة . ويهدف البحث إلي دراسة ظاهرة photochromism وكذلك عملية التشكل isomerization لمركبات الفورمازان وما هي العوامل المؤثرة على تلك الخواص للفورمازانات مثل حجم ونوع ومكان المستبدلات وأيضا تأثير قطبية المذيب وذلك من خلال دراسة الأشكال التركيبية المختلفة لمركبات الفورمازان المفتوحة وإيجاد خواص الحالة الأرضية لهذه المركبات . وكذلك دراسة تأثير حجم التجويف والمستبدلات على الشكل التركيبي للفورمازانات التاجية وإيجاد خواص الحالة الأرضية لهذه الفورمازانات . وأخيرا سوف ندرس قابلية وانتقائية مركبات الفورمازان الحلقية لتكوين متراكبات مختلفة ومتنوعة مع الفلزات والعوامل المؤثره على ذلك .

Structure conformation anaiysis of cyclic and acyclic formazans and some of their complrxes using molrcular orbital theory

Faten abdul mohsen al –jiffry

Prof. Adel ahmad Mohamed

Abstract

Formazans are the compounds which contain the azohyrdazone system of conjugated double bonds. Initial applications of these compounds included the dye industry and histochemistry , where their ease of oxidation to the corresponding tetrazolium salt accompanied by distinctive color changes was invaluable in cell staining . Formazans are , also of interest because of their importance in analytical chemistry , biology , agriculture and industry as well as complexing . They are also used in the determination of the effects of anti cancer drugs and determine the activity of tumor cells . Formazans are both tautomerically and conformationally labile and can exist as chelate; syn,s-cis , semi-open; syn,s-trans and open forms; anti,s-cis , anti,s-trans isomers . Formazans are colored compounds due to the π- π^* transitions . The study of the structure , tautomeric , and photochromic isomers of formazans is important . In recent years crown formazans have been much studied due to their interesting chelate structures which can be utilized as ion selective electrodes due to the presence of holes in their structures . The applications of crown formazans in selective metal extraction and determination depend mainly on their ability to form complexes with metal cations . The cavity size of crown formazans as well as substituents on the macrocyclic ring play an important role in their complexing abilities and should then affect on the stability of their metal complexes . It is important to pinpoint and understand essential phenomena and applications of open and crown-formazans and the factors controlling them . For these reasons , this thesis was suggested aiming to ;

1 - Study the photochromism and isomerization of the formazans .

2- Investigate the various factors influencing the photochromic properties of formazans , such as size , type and position of substituents as well as the solvent polarity .

3- Give details of the ground state properties of formazans .

4- Study the conformational behavior of macrocyclic formazans as well as the ground state properties of macrocyclic formazans .

5- Explore the effect of cavity size and substituents on the conformation of crown formazans .

6- Account for the chelation and metal complexing power and selectively of the crown formazans .