الخلاصة

تضمنت هذه الرسالة تحضير وتشخيص ثلاثة ليكاندات لمعوضات 1, 3, 4- اوكسادايازول وهي :-

1- [Ethanedial (5-phenyl-1,3,4-Oxadiazole-2-yl)hydrazone] (L1).

2.[4-methoxybenzaldehyde(5-phenyl-1,3,4-Oxadiayl-2-yl)hydrazone](L2)

3-[butan-2-one(5-phenyl-1,3,4-oxadiazol-2- yl)hydrazone] (L3).

وتم تحضير معقدات العناصر بتفاعل الليكاندات(L3,L2,L1) مع املاح العناصر الانتقالية التالية :-

($CrCl_3.6H_2O$,$FeCl_3.6H_2O$,$CoCl_3$,$NiCl_2.6H_2O$,$CuBr_2.6H_2O$)

وشخصت الليكاندات ومعقداتها باستخدام تقنية التحليل الدقيق للعناصر (CHN) ،اطياف الكتلة ،اطياف تحت الحمراء (IR) ،اطياف الرنين النووي المغناطيس (^{1}H -NMR)،التوصيل المولاري واثبتت النتائج مطابقة لما هو متوقع نظريا".

وشملت الدراسة الشكل الفراغي للمعقدات المحضرة وكما يلي :-

1- معقدات الكروم الثلاثي ثمانية السطوح.

2- معقدات الحديد الثلاثي ثمانية السطوح واطئة البرم .

3- معقدات الكوبلت الثلاثي ثمانية السطوح دايا مغناطيسي .

4- معقدات النيكل الثنائي رباعية السطوح.

5- معقدات النحاس الثنائي تمتلك شكل رباعية السطوح مع الليكاند (L2) على وفق الصيغة [Cu(L2)Cl]Cl بينما الصيغة $[Cu(L)_2Cl_2]$ هي ثمانية السطوح حيث L=L1,L3.

اجريت دراسة نظرية لهذه الليكاندات ومعقداتها باستخدام المستوى النظري شبه التجريبي (Semi-empirical) وتم احتساب طاقة هذه المركبات المحضرة (طاقة الجزيئة وطاقة الاواصر وكذلك حرارة التكوين ودراسة المواقع الفعالة لليكاندات ومعقداتها .