

الخلاصة

تناولت هذه الأطروحة تحضير والتشخيص وتقييم الفعالية الكهرو كيميائية والبيولوجية لصنف جديد من مركبات السيلينيوم والتيلوريوم العضوية. تضمن العمل تفاعل سيلة لـ 4-aminobenzophenone (ABP) بواسطة مشتق الحامض الكربوكسيلي (CAC) chloroacetyl chloride لتكوين الاستمايد المقابل (CAP) N-(4-benzoylphenyl)-2-chloroacetamide, الحاوي عل مجموعة كلور طرفية. المركب N-(4-benzoylphenyl)-2-chloroacetamide (CAP) تمت معاملته لاحقاً مع KSeCN و KTeCN لتخليق سيانات السيلينيوم العضوية (CAP-Se-CN) وسيانات التيلوريوم العضوية (CAP-Te-CN). هذه المركبات خضعت فيما بعد لتفاعلات oxidative addition مع الهالوجينات لانتاج مركبات السلينيوم و التوليوريوم العضوية ثلاثية الهاليد. ان النشاط البيولوجي المعروف وخصائص الاكسدة والاختزال القابلة للضبط هي التي عززت ترجيح النحو بهذا المنحى من التخليق.

استخدم البحث تفاعلات التعويض النيكلوفيلي والهجنة الالكتروفيلية تحت ظرف معتدلة، تمت متبعة تقدم التفاعل باستخدام ال TLC والتحليل الطيفي، تم تنقية المركبات الناتجة التأكد من بنيتها باستخدام $^1\text{H-NMR}$, FT-IR وطيف الكتلة، ما اثبت وجود المجموعات الوظيفية المميزة للاستمايد والحلقات الاروماتية والعناصر المستهدفة.

تم التقصي عن الخصائص الالكترونية باستخدام دالة الكثافة الوظيفية (DFT) والتركيز على قيم طاقات مدارات HOMO و LUMO و الموصفات العامة (ΔE , χ , η , S , ω).

مركبات السلينيوم والتيلوريوم العضوية ثلاثية الهاليد أظهرت فجوات ضيقة (0.51–0.71 eV), نعومة عالية، وتزايد بالالفة الالكترونية، مع تحديد المركبين CAP-Te-I₃ و CAP-Se-I₃ كأكثر المرشحين نشاطاً وفاعلية.