جمهورية العراق

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

جامعة ذي قار/كلية العلوم

تحضير وتشخيص ودراسة الخصائص الكهربائية لبعض مركبات السلينيوم العضوية الجديدة المشتقة من ٨-هيدروكسي كوينولين

رسالة مقدمة الى

مجلس كلية العلوم/ جامعة ذي قار

وهي جزء من متطلبات نيل شهادة الماجستير في علوم الكيمياء

من قبل

محمد علوان كاظم علي

بكالوريوس علوم كيمياء/٢٠١٦

تحت أشراف

أ.م. د. نهى حسين مزهر السعداوي

١٤٤٢هـ ٢٠٢١م

بسم الله الرحمن الرحيم

﴿هُوَ الَّذِي جَعَلَ الشَّمْسَ ضِيَاءً وَالْقَمَرَ نُورًا وَقَدَّرَهُ مَنَازِلَ لِتَعْلَمُوا عَدَدَ السِّنِينَ وَالْحِسَابَ مَا خَلَقَ اللَّهُ ذَلِكَ إِلَّا بِالْحَقِّ يُفَصِّلُ الْآيَاتِ لِقَوْمٍ يَعْلَمُونَ﴾

صدق الله العلي العظيم

[يونس: ٥]

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة ذي قار
كلية العلوم
مكتب العميد

The Ministry of Higher
Education & Scientific Research
University of Thi-Qar
College of science
Dean's Office

العدد: ٣٠ س/ ١١٩
التاريخ: ٥/ ٢/ ٢٠٢١

Ref:
Date: / / 20

الى /رئاسة قسم الكيمياء / كليتنا

م/ استلال الكتروني

تحية طيبة ...

إشارة الى طلبكم في ٢٠٢١/٣/٨ نحيل اليكم تقرير استلال والمعد قبل اطلاع المقوم العلمي لرسالة طالب الماجستير (محمد علوان كاظم) الموسومة:

تحضير وتشخيص ودراسة الخصائص الكهربائية لبعض مركبات السلينيوم العضوية المشتقة من ٣,٤-ثنائي امينو حامض البنزويك

والذي بلغت نسبة استلاله (١٠٪) فقط.

... مع خالص التقدير ...

المرفقات:

- تقرير ورقي
- قرص CD

11-3-2021

أ.م.د. هيثم عبدالامير ميناس
العميد وكالة

نسخه منه إلى:

- مكتب السيد العميد المحترم/للتفضل بالاطلاع.....مع التقدير.
- ملفة الاستلال.
- الصـــــادرة.

Web site:-http://thiqar-scince.com/joomla_1/index.php
E-mail:info@thiqar-scince.com
الناصرية - حي الشامية - مجاور متنزه الناصرية

استمارة تدقيق الاستلال للرسائل والاطاريح الجامعية

جامعة ذي قار – كلية العلوم

رقم كتاب لجنة الاستلال (في القسم) : تاريخه :

الرسالة/ الاطروحة الموسومة:

تحضير وتشخيص ودراسة الخصائص الكهربائية لبعض مركبات السليتيوم العضوية المشتقة من ٣،٤-ثنائي امينو حامض البنزويك

الاختصاص العـام للرسالة / الاطروحة:

الاختصاص الدقيق للرسالة / الاطروحة:

المحتويات الخاضعة لتحديد نسبة الاستلال	نسبة الاستلال المعتمدة من قبل الوزارة	النسب الواردة في تقرير برنامج الاستلال
١- عنوان الرسالة / الاطروحة ٢- الخلاصة ٣- النتائج ٤- الاستنتاجات ٥- التوصيات	(صفر%)	٠٪ فقط
١- طرق البحث	لا تزيد عن (5%) لرسائل الماجستير واطاريح الدكتوراه	
١- الجانب العملي ٢- بناء المشكلة وتصميمها ٣- الفرضيات ٤- الخوارزميات	○ (صفر%) لاطاريح الدكتوراه ○ لا تزيد عن (5%) لرسائل الماجستر	٠٪ فقط
١- المقدمة ٢- الجانب النظري ٣- ادبيات البحث	لا تزيد عن (10 %)	١٠٪ فقط

ملاحظات هامة :

١- التأكد من عدم اقتباس فقرات كاملة نصا الا مع وجود تبرير مثل التعاريف المقرة رسميا اودوليا والا يتوجب إعادة الصياغة.

٢- لا تسلم الرسالة / الاطروحة من قبل القسم العلمي لأغراض التقويم العلمي وتشكيل لجنة المناقشة ما لم تحقق النسب الواردة في أعلاه.

٣- مصادقة وتوقيع رئيس القسم وأعضاء اللجنة على استمارة التدقيق، حيث يكتب إضافة للقب العلمي امام كل عضو من أعضاء لجنة الاستلال بما فيهم رئيس اللجنة الاتي :

- الاسم :
- التخصص العام :
- التخصص الدقيق :

ختم وتوقيع رئيس القسم وأعضاء اللجنة على استمارة تدقيق استلال البحوث والاطاريح الجامعية

نسبة الاستلال الكلي (10%) فقط

٦/ أ.م.د. هيثم عبدالامير ميتاس

العميد وكالة

جامعة ذي قار
كلية العلوم

أستمارة تعهد الالتزام بأخلاقيات البحث العلمي

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

نتعهد بالتقيد التام بما جاء في مضمون كتاب وزارة التعليم العالي والبحث العلمي/جهاز الاشراف والتقويم المرقم ج ت/425 الصادر بتاريخ 2014/3/24، والمبلغ الينا بكتاب رئاسة جامعة ذي قار/قسم البحث والتطوير المرقم4704/54/7 والصادر بتاريخ 2014/3/31، عند أعداد الرسالة أو الاطروحة الموسومة:

تحضير وتشخيص وراثة الصفات الكمية لبعض سلالات الحنطة العراقية المدخلة من ICARDA تحت ظروف الشروبك

وبخلافه نتحمل نحن الموقعون أدناه المسؤولية القانونية حال وجود ما يخالف مضمون الكتاب أعلاه أو ما ينافي أخلاقيات البحث العلمي.

	الاسم	القسم والكلية أو المعهد	التوقيع	التاريخ
1-	المشرف الاول: أ.م.د. نهل حسين نهر	علوم الحياة		2019/10/21
2-	المشرف الثاني:			/ /
3-	طالب الدراسات: هاجر علوان ناظم	علوم الحياة		2019/10/21

ملاحظات هامة:

1- تعتبر استمارة التعهد هذه جزء من متطلبات اعتماد مشاريع طلبة الدراسات العليا وتوزع المشرفين على الطلبة.
2- تطبق استمارة التعهد هذه على السادة المشرفين على الرسالة أو الاطروحة وطلبة الماجستير والدكتوراه.
3- السطو العلمي هو سرقة لتاج فكري، وعند الاقتباس ضرورة الاشارة للمصدر، وفي حالات الاقتباس ضرورة اعادة صياغة الفقرة المقتبسة دون الخروج من حدود فكرة الفقرة الاصلية للمقتبسة والاشارة للمصدر هنا في متن الرسالة أو الاطروحة.
4- تشمل استمارة التعهد هذه الرسائل والاطاريح التي لم تنجز حتى تاريخ كتاب جهاز الاشراف والتقويم أعلاه.
5- أخذت استمارة التعهد هذه استنادا للفقرة 4 من كتاب وزارة التعليم العالي والبحث العلمي/جهاز الاشراف والتقويم المرقم ج ت/425 الصادر بتاريخ 2014/3/24 والمبلغ الينا عن طريق كتاب رئاسة جامعة ذي قار/قسم البحث والتطوير المرقم 4704/54/7 بتاريخ 2014/3/31.

استمارة تدقيق الاستلال للرسائل والاطاريح الجامعية

عنوان الرسالة المدروسة: تحضير وتشخيص ودراسة الخواص الفيزيائية لبعض المستحضرات الصيدلانية

الاختصاص الدقيق للرسالة / الأطروحة: كيمياء

الاختصاص الدقيق للرسالة/ الأطروحة: كيمياء عضوية

المحتويات القاضمة لتعليمات نسب الاستلال	نسبة الاستلال	
١- عنوان الرسالة/ الأطروحة. ٢- الخلاصة. ٣- النتائج. ٤- الاستنتاجات. ٥- التوصيات.	(صفر %)	صفر
١- طرق البحث	لا تزيد عن (٥ %) لرسائل الماجستير وأطاريح الدكتوراه	٥٪
١ الجانب العملي. ٢ بناء المشكلة وتصميمها. ٣ الفرضيات. ٤ الخوارزميات	- (صفر %) لأطاريح الدكتوراه. - لا تزيد عن (٥ %) لرسائل الماجستير.	صفر
١ المقدمة. ٢ الجانب النظري. ٣ الخلفيات البحث.	لا تزيد عن (١٠ %)	١٠٪

ملاحظة:

١. التأكد من عدم اقتباس فقرات كاملة نصاً الا مع وجود تبرير مثل التعاريف المقرة رسمياً او دولياً والا يتوجب اعادة الصياغة.

٢. لا تسلم الرسالة / الأطروحة من قبل القسم العلمي لأغراض التقويم العلمي وتشكيل لجنة المناقشة ما لم تدقق النسب الواردة في اعلاه.

توقيع لجنة الاستلال لقسم

- الاسم: م. زينب حسين لطيم م. د. محمود كاظم م. د. سعد
- التخصص العام: كيمياء كيمياء كيمياء
- التخصص الدقيق: كيمياء لا عضوية كيمياء عضوية كيمياء تحليلية

جامعة ذي قار
كلية العلوم
القسم: .....

استمارة المقوم الاحصائي

عنوان الرسالة/الاطروحة: عقيدة وشريعة ودراسة كتابه الهداية للمعلم ركائب الليثوم المصرية المتوفى سنة ٥٦٩ هـ وما بقي من مخطوطه الرباط

السنة الدراسية: | تاريخ التسليم: / / 20 | تاريخ الاستلام: / / 20 | التقييم

1- مستوى التحليل الاحصائي المستخدم؟	لا يوجد ☐	بسيط ☐	متوسط ☐	متقدم ☐	5 %
2- نوع تصميم الدراسة الاحصائية؟	وصفية ☐	تحليلية ☐			10%
3- نوع المتغير المستخدم؟	كمي ☐	نوعي ☐			10%
4- نوع الدراسة الاحصائية؟	تقييمية ☐	تشخيصية ☐	توقعية ☐	تجريبية ☐	10%
5- ملائمة نوع تصميم الدراسة للبيانات المستخدمة؟	غير ملائم ☐	نوعا ما ☐	ملائم ☐	ملائم جدا ☐	10%
6- هل تم التحقق من توفر شروط الاختبارات الإحصائية قبل استخدامها (على سبيل المثال اعتدالية التوزيع والاستقلالية)؟	نعم ☐	كلا ☐			10%

اذا كانت الإجابة ب(نعم) تذكر الأساليب المستخدمة في التحقق:

.1
.2

7- هل ان حجم العينة المستخدمة في التحليل الاحصائي مناسب للتحليل الاحصائي؟	نعم ☐	كلا ☐	10%
8- هل تم استخدام التحليل الإحصائي بالشكل الصحيح؟	نعم ☐	كلا ☐	10%
9- التحليل يحقق الهدف الرئيسي من الدراسة؟	نعم ☐	كلا ☐	10%
10- أستخدمت برامج احصائية ؟ كلا ☐ نعم (اذكر اسمائها)			10%
11- هل ان نتائج التحليل الاحصائي تدعم ما تم توصل اليه الباحث من استنتاجات؟	نعم ☐	كلا ☐	5 %
12- هل تقترح أضافات للتحليل الاحصائي الموجود في الرسالة او الأطروحة؟	نعم ☐	كلا ☐	

اذا كانت الإجابة بنعم تذكر الفقرات الإضافية:

.1
.2
.3

المجموع 100/

درجة التقييم كتابة: | درجة التقييم رقما:

اسم المقوم الاحصائي: أستاذ دكتور رياض رستم محسن | اللقب العلمي:

الاختصاص الدقيق: | العنوان:

توقيع المقوم الاحصائي:

ختم وتوقيع الشعبة القانونية في كلية المقوم: | أسم م.الشعبة القانونية:

هل تقترح أضافة مناقش إحصائي الى لجنة المناقشة نعم ☐ كلا ☐

ملاحظة: لا تتجاوز فترة التقييم أسبوعين من تاريخ أستلامها وبخلافها يتم استبدال المقوم

أسم وختم وتوقيع رئيس القسم

أسم وختم وتوقيع م.العميد للشؤون العلمية والدراسات العليا

أعدت الاستمارة: 1) أستنادا للامر الجامعي: ذي العدد 10553 بتاريخ: 2018/9/3، 2) واشاره الى كتاب وزارة التعليم العالي والبحث العلمي ذي العدد: ع ع/ ق/ 2631 بتاريخ:16/ 2018/8

نموذج رقم-1-

Annals of the Romanian Society for Cell Biology

February 13, 2021

Dear Mohammed Alwan. Kadhim and Nuha H. Al – Saadawy

Iraq, University of Thi-Qar, College of Science, Chemistry Department/ Iraq.

We would like to inform you that your manuscript id ARSCB-F748 has been accepted for publication in Annals of the Romanian Society for Cell Biology (ISSN: 1583-6258)

TITLE: Synthesis and characterization for some new organoselenium compounds depending on 8- hydroxyquinoline

Thanks for submission of your work with us.

Regards,

Professor Dr. Jimmy Marshal,

Guest Editor
Annals of the Romanian Society for Cell Biology

http://annalsofrscb.ro/index.php/journal

ACCEPTED

Ministry of Higher Education
& Scientific Research
University of Thi-Qar
College of Science
Unit Of Higher Studies

وزارة التعليم العالي و البحث العلمي
جامعة ذي قـــار ـــ كلية العلـــوم
وحـــدة الدراسات العليا

نؤيد لكم ان (.....) احد طلبة الدراسات العليا / .....
في قسم ..... بكليتنا, قد سلم .....الى القسم العلمي في يوم.....
المصادف.....قبل انتهاء السنتين التقويميتين , وقد اعد التأييد اعلاه بناءا على ما جاء في كتاب رئاسة جامعة ذي قار / قسم شؤون الدراسات العليا ذي العدد (14806) في تاريخ (2017/11/16).

تاريخ المباشرة.....رقم الامر الاداري.....تاريخه.....
تاريخ انتهاء السنتين التقويميتين.....،تاريخ انتهاء الثلاث سنوات تقويمية للدكتوراه
تاريخ التحويل.....تاريخ انتهاء التمديد الاول.....
رقم الامر الاداري.....تاريخه.....
تاريخ انتهاء التمديد الثاني(لطلبة الماجستير).....رقم الامر الاداري.....تاريخه.....

توقيع الطالب	توقيع مقرر الدراسات العليا في القســـــم اعـــلاه
اسم وتوقيع المشرف الثاني	اسم وتوقيع المشرف الاول
توقيع رئيس القسم	

المرفقات //
- ✓ توصية الاستاذ المشرف .
- ✓ الرسالة او الاطروحة .

أ.م.د. صباح حسين عنابه
م. العميد للشؤون العلمية
والدراسات العليا

ملاحظة :
تاريخ تسليم الرسالة:يعتبر تاريخ تسليم الرسالة وفقا لكتاب وزارة التعليم العالي والبحث العلمي –دائرة البحث والتطوير ب ت156/5 في تاريخ 2014/1/8 والمبلغ الينا عبر كتاب رئاسة جامعة ذي قار ذي العدد 54/7 372 في تاريخ 2014/1/12 نهاية مدة دراسة الطالب وليس نهاية مدة الاجازة الدراسية تاريخ انتهاء المدة تحددها توصية الاستاذ المشرف المقدمة الى رئاسة القسم او اللجنة العلمية في القسم وان كانت الرسالة مكتوبة باليد وغير مطبوعة . علما ان المدة الاصغرية للحصول على شهادة الماجستير سنة ونصف (18 شهرا) تقويمية، وتتم مناقشة الرسالة بعدها, ان المدة الاصغرية للحصول على شهادة الدكتوراه سنتان ونصف (30 شهرا) تقويمية، ولا تتم مناقشة الاطروحة الا بعدها.

مدة الدراسة :
مدة دراسة الماجستير سنتان تقويميتان بعد الدراسة الجامعية الاولية حتى انتهاء مناقشة الاطروحة، ويحق لمجلس الكلية تمديدها لستة اشهر، ولمجلس الجامعة، حسب قناعته، تمديدها لستة اشهر اخرى فقط على الا يقل عدد الوحدات الدراسية خلال هذه المدة عن (30)وحدة فصيلة، بضمنها الاطروحة، ولاتزيد على (36)وحدة، وان تشكل وحدات الاطروحة من (20-40%) من مجموع عدد الوحدات.

نسخه منه إلى//
- رئاسة جامعة ذي قار/قسم شؤون الدراسات العليا للتفضل بالاطلاع....مع التقدير.
- مكتب السيد العميد .....للتفضل بالاطلاع..... مع التقدير.
- مكتب السيد معاون العميد..... للتفضل بالاطلاع.....مع التقدير.
- الصـــــــادرة.

جامعة ذي قار – كلية العلوم – حي المتنزه هاتف 07813306316* Codean_drhaithem@sci.utq.edu.iq موقع جامعة ذي قار الإلكتروني Utq.edu.iq

المقومون

المقوم العلمي

1. م.د. مجيد يعقوب يوسف

جامعة البصرة / كلية العلوم

حسب الامر الإداري المرقم 30 س/ 113 في 2021/3/9 والصادر من كلية العلوم / جامعة ذي قار .

المقوم اللغوي

أ.د. ساهر حسين ناصر

جامعة ذي قار / كلية التربية للعلوم الإنسانية

حسب الامر الإداري المرقم 30س/ 112 في 2021/3/9 والصادر من كلية العلوم / جامعة ذي قار .

المقوم الاحصائي

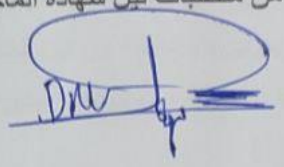
أ.د. رياض رستم محسن

جامعة ذي قار / كلية علوم الرياضيات والحاسوب

حسب الامر الإداري المرقم 3 /11 /480في 2021/3/9 والصادر من كلية العلوم / جامعة ذي قار .

إقرار المشرف

أشهد ان إعداد هذه الرسالة تم تحت إشرافي في قسم الكيمياء –كلية العلوم-جامعة ذي قار وهي جزء من متطلبات نيل شهادة الماجستير في علوم الكيمياء.



التوقيع

المشرف : نهى حسين مزهر السعداوي

المرتبة العلمية: أستاذ مساعد

التاريخ: ٣/٢٠٢١/

توصية رئيس قسم الكيمياء

إشارة الى التوصيات المتوفرة احيل هذه الرسالة الى لجنة المناقشة لدراستها وبيان الرأي فيها.

التوقيع:

الاسم: محمد عبد الرضا عطوف الطحان

المرتبة العلمية: استاذ مساعد

التاريخ: ٣/٢٠٢١/

اقرار لجنة المناقشة

نشهد نحن اعضاء لجنة المناقشة إننا اطلعنا على هذه الرسالة الموسومة (**تحضير وتشخيص ودراسة الخصائص الكهربائية لبعض مركبات السلينيوم العضوية الجديدة المشتقة من 8-هيدروكسي كوينولين**) والمقدمة من قبل الطالب (**محمد علوان كاظم**) وقد ناقشنا الطالب في محتوياتها وفيما له علاقة بها ووجدناها جديرة بالقبول لنيل درجة الماجستير في علوم الكيمياء وبتقدير ( ).

رئيس لجنة المناقشة

الاسم: علي جميل حميد

اللقب العلمي: استاذ

العنوان: جامعة البصرة/كلية العلوم

التاريخ : ٢٠٢١/٤/٩

عضو لجنة المناقشة

الاسم: حيدر عباس مهدي

اللقب العلمي: استاذ

العنوان: جامعة ذي قار/ كلية العلوم

التاريخ : / /2021

عضو لجنة المناقشة

الاسم: عذراء حاتم مكي

اللقب العلمي: استاذ مساعد

العنوان: جامعة ذي قار/ كلية العلوم

التاريخ : / /2021

عضو لجنة المناقشة (مشرفا)

الاسم: نهى حسين مزهر

اللقب العلمي: استاذ مساعد

العنوان : جامعة ذي قار / كلية العلوم

التاريخ : / /2021

مصادقة عمادة كلية العلوم

بناء1 على الصلاحيات المخولة لدينا نصادق على ما جاء في قرار لجنة المناقشة .

التوقيع: 25-5-2021

الاسم: اللقب العلمي: الأستاذ المساعد
الدكتور ياسر عبد الأمير الخالصي

التاريخ:

الاهداء

الى سيدي ومولاي..... صاحب العصر والزمان (عج)

الى من أشتاق إليه بكل جوارحي..... اخي الشهيد وسام.

الى من سقوا البلاد بدمائهم.....شهداء الوطن والثورة.

إلى مثال التفاني والإخلاص..... أبي الحبيب.

إلى من قدَّمت سعادتي وراحتي على سعادتها..... أمي الفاضلة.

الى من كان نعم السند لي.....اخي العزيز.

الى من لم يبخلن بكل شيء لي.....اخواتي العزيزات.

إلى من لم تبخل بمساعدتي يوم ما..... زوجتي العزيزة.

الى معنى البراءة.....**اولاد اخي الشهيد وابني.**

إلى كل اصدقائي..... و من دعا لي بالخير.

أهدي ثمرة جهدي المتواضع هذا.....

محمد

شكر وتقدير

ليس بعد تمام العمل من شيء اجمل ولا احلى من الحمد لله, فالحمد لله والشكر له كما ينبغي لجلال وجهه وعظيم سلطانه وكما ينبغي لجزيل فضله وعظيم احسانه على ما انعم به علي من اتمام هذا البحث المتواضع.

ثم انه لا يسعني الا ان اشيد بالفضل واقر بالمعروف لكل من ساهم في انجاز هذا البحث واخص بالذكر.....

استاذتي المشرفة (**أ.م. د نهى حسين مزهر**)على ما خصتني به من التوجيه والتصويب ....وما علمتني من فيض انسانيتها وخلقها الرفيع ومستواها العلمي الراقي.

شكري وتقديري الى عمادة كلية العلوم و المتمثلة ب (**أ.م. د. هيثم عبد الامير ميناس**) عميد كلية العلوم الذي ساهم في مساندتي في مدة البحث فله مني كل الحب والتقدير..

واتقدم بجزيل الشكر الى رئاسة قسم الكيمياء المتمثلة ب (**ا. م. د. محمد عبد الرضا عطوف**)

والهيئة التدريسية من اساتذتي الافاضل لكل ما قدموه لي من مساندة ومشورة.

شكري الجزيل والامتنان الكثير الى اخي العزيز الاستاذ (**م .م .عباس طالب**) لمساعدته لي في اجراء البحث من حيث المشورة او تجهيز المواد الكيميائية .

واتقدم بجزيل الشكر والعرفان للأستاذ الراقي الذي لم يبخل بأي شيء (**أ.م. محمد اسماعيل عبود**) فكان نعم الاستاذ والاخ والصديق في اي وقت لما قدم لي من مساعدة خلال مسيرة الدراسة والبحث. شكري وتقديري الى كل دكتور واستاذ في قسم الكيمياء. وختام شكري الى اخواني واخواتي من طلبة الدراسات العليا كافة الذين كان لهم سبب كبير في اكمال متطلبات البحث من حيث المساعدة والمساندة.

اللهم اجعل ختام شكري لأهلي واخواني وسندي الذين لم يبخلوا عليَ بأي شيء من الجهد والوقت..... بخير وصحة وعافية.

محمد

الخلاصة

اشتملت هذه الرسالة على تحضير مركبات عضوية فلزية جديدة لعنصر السيلينيوم حيث تم تحضير المركب 7-chloromethyl-8-hydroxyqunoline من تفاعل ٨-هيدروكسي كوينولين مع حامض الهيدروكلوريك المركز و الفورمالديهايد وقد تم مفاعلته مع عنصر السلينيوم وسيانيد الصوديوم باستخدام ثنائي مثيل سلفوكسايد كمذيب. تم التفاعل في جو خامل من النتروجين للحصول على 7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride.

مركب 7-methylene selenocyanato-8-hydroxy qunoline hydrochloride تمت مفاعلته مع الهالوجينات مثل اليود وكلوريد الثايونيل والبروم وبنسبة مولية (١:١) من عدد المولات, بالإضافة الى اختزال المركب 7-methyleneselenium tribromoid-8-hydroxyquinoline hydrochloride وبوجود مذيب مثل الايثانول ثم اضافة قطرات من الهيدرازين المذاب في الايثانول المطلق لنحصل على المركب Di-(7-methylene-8-hydroxy quinoline)diselenide hydrochloride و مفاعلة 7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride مع الصوديوم Na وبوجود مذيب مناسب مثل رباعي هيدروفيوران THF وباستخدام النتروجين كغاز خامل ثم اختزاله الى المركب Di-(7-methylene-8-hydroxy quinoline)selenide hydrochloride بإضافة المركب 7-chloromethyl-8-hydroxyqunoline hydrochloride. تم تشخيص هذا المركبات باستخدام تقنية الاشعة تحت الحمراء وتقنية الرنين النووي المغناطيسي للبروتون وطيف الكتلة وتم اختبار السلينوسيانيت والداي سلينايد كمضاد للبكتيريا حيث اثبتا فعاليتهما ضد اربعة انواع من البكتريا.

فهرس المواضيع

ت	الموضوع	الصفحة
	الفصل الأول / المقدمة	
١	السيلينيوم	١
١,١	تحضير ثنائي عضوي سلينيوم	١
١-١,١	ثنائي سيلينيدات المعدن القلوي	١
١,٢	تحضير مركبات السيلينوسيانات العضوية	٢
١-١,٢	تحضير مركبات سيلينوسيانات البوتاسيوم	٤
٢-١,٢	تفاعل سيلينوسيانات البوتاسيوم مع الإندولين والأوليفينات	١٢
١,٣	تحضير السيانوسيلين باستخدام ثنائي سلينو ثنائي سيانيد	١٣
١,٤	تحضير السلينوسيانيت باستخدام ثنائي سلينوسيانات النحاس	١٣
١,٥	التفاعلات الكيميائية لمركبات السيلينوسيانات العضوية	١٤
١-١,٥	اختزال مركبات السيلينوسيانات العضوية	١٥
٢-١,٥	الاكسدة لمركبات السيلينوسيانات العضوية	١٦
٣-١,٥	تفاعلات الاضافة لمركبات السيلينوسيانات العضوية	١٨
١,٦	الهدف من الدراسة	١٩
	الفصل الثاني/الجزء العملي	
١-٢	المواد الكيمياوية المستخدمة	٢٠
٢-٢	الاجهزة المستخدمة	٢١
١-٢-٢	جهاز مطيافية الاشعة تحت الحمراءFT-IR	٢١
٢-٢-٢	جهاز قياس درجة الانصهار M.P	٢١
٣-٢-٢	جهاز مطيافية الاشعة تحت الحمراء ^{1}H-NMR	٢١
٤-٢-٢	جهاز طيف الكتلة MASS	٢١
٣-٢	تحضير المركبات	٢٢
١-٣-٢	تحضير المركب C	٢٢
٢-٣-٢	تحضير المركب C1	٢٣
٣-٣-٢	تحضير المركب C2	٢٤
٤-٣-٢	تحضير المركب C3	٢٥
٥-٣-٢	تحضير المركب C4	٢٦
٦-٣-٢	تحضير المركب C5	٢٧
٧-٣-٢	تحضير المركب C6	٢٨
	الفصل الثالث /النتائج والمناقشة	
١-٣	مقدمة	٢٩

٢-٣	تشخيص مركبات السيلينيوم المحضرة	٣٠
١-٢-٣	طيف الاشعة تحت الحمراء FT-IR	٣١
١-١-٢-٣	طيف FT-IR المركب C1	٣١
٢-١-٢-٣	طيفFT-IR المركب C2	٣٢
٣-١-٢-٣	طيفFT-IR المركب C3	٣٣
٤-١-٢-٣	طيفFT-IR المركب C4	٣٤
٥-١-٢-٣	طيف FT-IR المركب C٥	٣٥
٦-١-٢-٣	طيف FT-IR المركب C٦	٣٦
٢-٢-٣	مطيافية الرنين النووي المغناطيسي ^{1}H NMR	٣٧
١-٢-٢-٣	طيف ^{1}H NMR المركب C١	٣٨
٢-٢-٢-٣	طيفH NMR^{1} المركب C2	٣٩
٣-٢-٢-٣	طيفH NMR^{1} المركب C3	٤٠
٤-٢-٢-٣	طيفH NMR^{1}للمركب C4	٤١
٥-٢-٢-٣	طيف ^{1}H NMR المركب C5	٤٢
٦-٢-٢-٣	طيفH NMR^{1} المركب C6	٤٣
٣-٢-٣	مطيافية الكتلة للمركبات المحضرة	٤٥
١-٣-٢-٣	طيف الكتلة للمركب C1	٤٥
٢-٣-٢-٣	طيف الكتلة للمركب C2	٤٧
٣-٣-٢-٣	طيف الكتلة للمركبC3	٤٩
٤-٣-٢-٣	طيف الكتلة للمركب C4	٥١
٥-٣-٢-٣	طيف الكتلة للمركب C5	٥٣
٦-٣-٢-٣	طيف الكتلة للمركب C6	٥٥
	الفصل الرابع/ نظرية الكثافة الوظيفية والفعالية البيولوجية	
١-٤	DFT	٥٧
٢-٤	الخصائص الالكترونية	٥٨
١-٢-٤	الكهروسلبية والالفة الالكترونية	٥٩
٢-٢-٤	طاقة التأين وتقارب الالكترون	٦١
٣-٢-٤	مبدأ الصلادة والليونة للحامض والقاعدة	٦٢
٣-٤	الاشكال الجزيئية للمركبات الكيمائية المحضرة	٦٤
٥-٤	الفعالية البيولوجية	٧٦
٦-٤	الاستنتاجات والتوصيات	
	المصادر References	

فهرس الجداول

١-٢	**المواد الكيمياوية المستخدمة**	٢٠
٢-٢	الاوزان الجزيئية وبعض الخصائص الفيزيائية للمركبات المحضرة	٢٨
١-٣	حزم امتصاص اطياف الأشعة تحت الحمراء للمركبات	٣٧
٢-٣	حزم طيف ^{1}H NMR للمركبات المحضرة	٤٤
١-٤	طاقات المدارات الجزيئية(LOMO ,HOMO) لمركبات السيلينيوم العضوي	٥٩
٢-٤	الالفة الالكترونية والكهرو سلبية للمركبات المحضرة	٦٠
٣-٤	يبين طاقة التأين وقوة جذب الالكترون لمركبات السيلينيوم	٦١
٤-٤	الصلادة والليونة الكيميائية لمركبات السيلينيوم العضوي	٦٣
٥-٤	يبين التراكيز المستخدمة من المركبات المحضرة ومنطقة التثبيط والتنشيط .	٧٨

فهرس الاشكال

ت	الشكل	الصفحة
١-١	مركبات السيانات,الثيوسيانات,السيلينوسيانات والتيلوروسيانات	
٢-١	طيفFT-IR للمركب C١	٣١
٢-٣	طيف FT-IR للمركب C2	٣٢
٣-٣	طيف FT-IR للمركب C3	٣٣
٤-٣	طيفFT-IR للمركب C4	٣٤

٣٥	طيف FT-IR للمركب C5	٣-٥
٣٦	طيفFT-IR للمركب C6	٣-٦
٣٩	طيف H^1 NMR للمركب C2	٣-٧
٤٠	^1H NMR للمركب C3	٣-٨
٤١	طيف ^1H NMR للمركب C4	٣-٩
٤٢	طيف ^1H NMR للمركب C5	٣-١٠
٤٣	طيف ^1H NMR للمركب C6	٣-١١
٤٦	طيف الكتلة للمركب C١	٣-١٢
٤٩	طيف الكتلة للمركب C2	٣-١٣
٥٢	طيف الكتلة للمركب C٣	٣-١٤
٥٥	طيف الكتلة للمركب C4	٣-١٥
٥٥	طيف الكتلة للمركب C5	٣-١٦
٥٦	طيف الكتلة للمركب C٦	٣-١٧
٦٤	الشكل الفراغي للمركب C١	٤-١
٦٤	الشكل الفراغي للمركب C1	٤-٢
٦٥	Homo للمركب C1	٤-٣
٦٥	Lomo للمركب C1	٤-٤
٦٦	الشكل الفراغي للمركب C2	٤-٥
٦٦	الشكل الفراغي للمركب C2	٤-٦
٦٧	Homo للمركب C2	٤-٧
٦٧	Lomo للمركب C٢	٤-٨
٦٨	الشكل الفراغي للمركب C3	٤-٩
٦٨	الشكل الفراغي للمركب C3	٤-١٠
٦٩	Homo للمركب C3	٤-١١

٤-١٢	Lumo للمركب C3	٧٠
٤-١٣	الشكل الفراغي للمركبC4	٧٠
٤-١٤	الشكل الفراغي للمركب C٤	٧١
٤-١٥	Homo للمركب C٤	٧١
٤-١٦	Lomo للمركب C4	٧٢
٤-١٧	الشكل الفراغي للمركبC5	٧٢
٤-١٨	الشكل الفراغي للمركب C٥	٧٣
٤-٢٠	Homo للمركب C5	٧٣
٤-٢١	Lomo للمركب C5	٧٤
٤-٢٢	الشكل الفراغي للمركبC6	٧٤
٤-٢٣	الشكل الفراغي للمركب C6	٧٥
٤-٢٤	Homo للمركب C6	٧٥
٤-٢٥	Lumo للمركب C٦	٧٦
٤-٢٦	Escherichia coli(25)mg Inhibition	٧٩
٤-٢٧	Staphylococcus aureus (25)mg Inactivation	٧٩
٤-٢٨	Klebsiella pneumoniae (25)mg Inhibition	٨٠
٤-٢٩	Streptococcus (25)mg Inactivation	٨٠

قائمة المختصرات

ت	المختصر	المصطلح العلمي
1	Hr	Hour
2	DMSO	Dimethyl Sulfoxide
4	m/z	Mass to- charge ratio
5	^{1}H NMR	Proton Nuclear Magnetic Resonance
6	THF	Tetrahydrofuran
10	DFT	Density Functional Theory
11	HOMO	Highest Occupied Molecular Orbital
12	LUMO	Lowest Unoccupied Molecular Orbital
١٣	HMPA	Hexa methyl phosphor amid
١٤	Bu	Butyl

١ـ السيلينيوم

عنصر معدني موجود في التربة رمزه الكيميائي Se وعدده الذري ٣٤،تم اكتشافه من قبل العالم جونز جاكوب برزيليوس بعزل وتحديد السيلينيوم في عام ١٨١٧م عندما قام بتحليل راسب احمر في جدار غرفة الرصاص المستخدمة في انتاج حامض الكبريتيك[١, ٢].

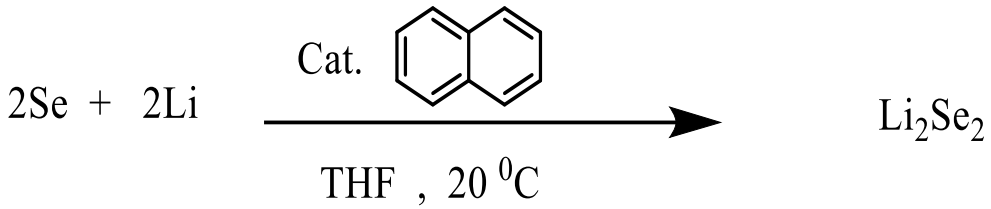
١ـ١ـتحضير ثنائي عضوي سلينيوم Preparation of Diorganyl selenium

١ـ١ـ١ـ من ثنائي سيلينيدات المعدن القلوي

from the alkali metal diselenides

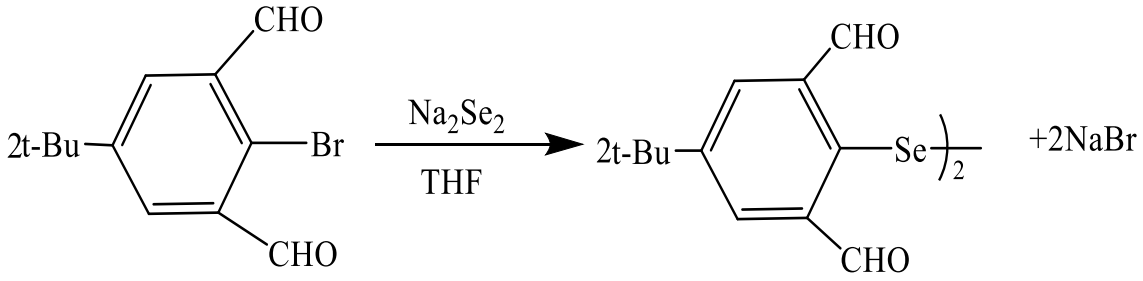
اكتشف طومسون وبودجوك تحضير سيلينيدات عضوية وثنائي سيلينيدات باستخدام تفاعل سيلينيدات الفلزات القلوية وثنائي سيلينيدات مع هاليدات الألكيل او الأريل. يتم اختزال السلينيوم بواسطة (الليثيوم, الصوديوم, البوتاسيوم) بوجود النفثالين المحفز للتفاعل . ويزاد معدل اختزال السيلينيوم مع النفثاليد الفلز القلوي بشكل كبير بتأثير الموجات فوق الصوتية بدرجة حرارة الغرفة لمزيج التفاعل. يستخدم رباعي هيدروفيوران كمذيب مناسب لتفاعل السيلينيوم مع الليثيوم بوجود ثنائي فينيل الاستلين كعامل محفز لتحضير ثنائي سيلينيد الليثيوم كما في المعادلة(١)،

الذي يتفاعل مع الإلكتروفيل والتي أعطت الألكيل أو الأريل داي سلينيدات، وفي بعض الحالات، السلينيدات تستخدم في تحضير مركبات اخرى[٣, ٤].



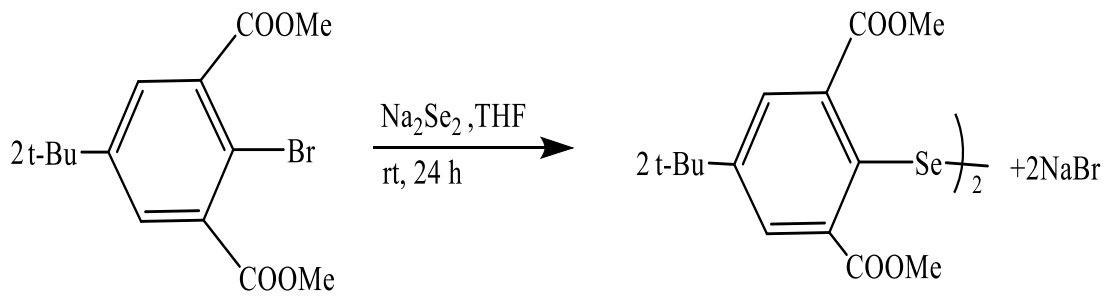
معادلة (١-١) تحضير السلينايد الثنائي من سيلينيدات المعادن القلوية

وقد أكتشف سينغ وزملاؤه تصنيع ديسلينايد٢($C_{12}H_{13}SeO_2$) عن طريق تفاعل المركب ($C_{12}H_{13}O_2Br$) مع ثنائي سلينايد ثنائي الصوديوم كما في المعادلة (٢). وتجدر الإشارة إلى أن البروم المرتبط بالكاربون في المركب ($C_{12}H_{13}O_2Br$) يمكن استبداله بسهولة بحيث يحدث هذا التفاعل عند درجة حرارة الصفر المئوية ، في حين أن تفاعل *o*-Chloro benzaldehyde مع ثنائي أوكسيد الكاربون يتطلب استخدام مذيب ذي قطبية عالية (HMPT) ودرجة حرارة عالية للحصول على ثنائي السلينايد المطلوب[٥, ٦].



معادلة(١-٢) تحضير ثنائي السلينايد

ان تحضير المركب ٢($C_{14}H_{17}O_4Se$) تم تحضيره بواسطة مشتق الاستر المقابل ($C_{14}H_{17}O_4Br$) مع ثنائي السلينايد ثنائي الصوديوم[٧].كما في المعادلة(٣).

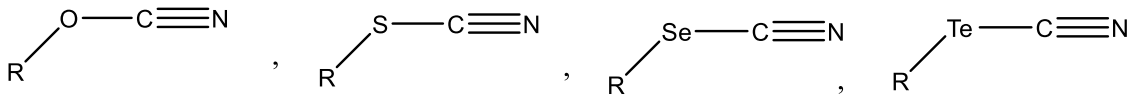


معادلة (١-٣) تحضير مركب ثنائي السلينايد

١-٢- تحضير مركبات السلينوسيانيت العضوية

Preparation of organoselenocyanate compounds

عندما ترتبط إحدى الذرات غير المتجانسة مثل (اوكسجين O ,كبريت S ,سلينيوم Se ,تلوريوم Te) على جانب واحد بمعوضات الهيدروكاربونات وعلى الجانب الآخر بمجموعة سيانيد CN ، يتم الحصول على السيانات والثيوسيانات والسيلينوسيانات والتيلوروسيانات على التوالي كما في الشكل (١).



Cyanate Thio cyanate Selenocynate tellurocyanate

Where R =alkyl or aryl

شكل (١-١) مركبات السيانات,الثيوسيانات,السيلينوسيانات والتيلوروسيانات

يختلف تركيب وخصائص هذه المركبات اختلافًا تامًا فالسيانات العضوية البسيطة المتداولة وحتى أبسط مشتقات الألكيل يصعب تصنيعها و تكون غير مستقرة حركيًا (١-٤) . أما الثيوسيانات العضوية والسيلينوسيانات، فيسهل تحضيرها بالنسبة لمعظمها، وتتميز بخصائص متشابهة كثيرة[٨-١٠].

يعتبر سيلينوسيانات البوتاسيوم (KSeCN)، مركباً متوفراً على نطاق واسع، ومادة اساسية مهمة لتحضير مركبات السلينوسيانيت العضوية. إنّ التفاعلات الأكثر استخداما والتي تنطوي على هذا الكاشف هي تفاعلات استبدال الكتروفيلي للذرات أو المجموعة الخارجية الأخرى مثل التفاعل مع أملاح الديازونيوم والإضافة على الاصرة الثنائية أو الثلاثية. سيلينوسيانات البوتاسيوم هي أيضا مادة أولية لتحضير الكواشف الأخرى لنفس الغرض مثل Bis-selenocyanate أو(dicyanodiselenide (NCSeSeCN أو السيلينيوم ثنائي سيلينوسيانيت (NCSeSe SeCN). يمكن أيضا تصنيع السيلينوسيانات العضوية عن طريق تفاعل ثنائي السلينايد (RSeSeR) مع السيانيد المعدني، فضلا عن تفاعل أنيون السيلينيوم العضوي (-RSe) مع هاليدات السيانوجين(NCF, NCBr , NCCl , NCI) .

يمكن تحضير سيلينوسيانات البوتاسيوم بسهولة عن طريق ذوبان سيانيد البوتاسيوم والسيلينيوم بكميات مولية متساوية[١١, ١٢]. كما في المعادلة (٤). كما يمكن إجراء التفاعل في ثنائي مثيل السلفوكسايد أوالميثانول. لقد تم تحضير ثنائي سلينوسيانات السيلينيوم عن طريق أكسدة محلول مائي من KSeCN بالكلور[١٣, ١٤]. كما في المعادلة (٥) . كما تم تحضير ثنائي سلينوسيانات السلينيوم عن طريق تفاعل المالونونيتريل مع ثاني أوكسيد السلينيوم[١٥]. كما في المعادلة (٦). كما أن تفاعل السلينيوم مع كلوريد السلفوريل (ليعطي ثنائي كلوريد السلينيوم في الموقع) متبوعاً بإضافة سيلينوسيانات الفضة مكونا ثنائي سلينوسيانات السلينيوم[١٦]. وتم الحصول على ثنائي السيلينوسيانات عن طريق الاضافة البطيئة للبروم أو اليود مع سيلينوسيانات البوتاسيوم عند درجة حرارة ($-50C^0$) في البنزين أو ثنائي كلورو الميثان[٩, ١٥]. كما في المعادلة (٧). من ناحية أخرى، ثنائي سيانيد السلينيوم (NCSeCN) هو كاشف فعال آخر لتحضير السيلينوسيانات العضوية. وقد تم تحضيره بتفاعل ثاني كلوريد السلينيوم مع سيانيد الفضة[١٧].

$$KCN + Se \xrightarrow{DMSO} KSeCN$$

$$3\ KSeCN \xrightarrow[-2KCl,\ -KCN]{Cl_2} Se(SeCN)_2$$

$$CH_2(CN)_2 \xrightarrow{SeO_2} Se(SeCN)_2$$

$$2KSeCN + Br_2 \xrightarrow{-50^0C} (SeCN)_2 + 2KBr$$

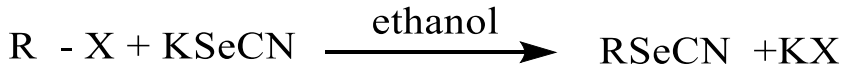
المعادلات من(١-٤)الى(١ -٧)توضح تحضير مركبات السيلينوسيانات المختلفة

وفي ادناه توضيح لبعض المواضيع التي تتطرق لاستخدام هذه المركبات في تحضير السيلينوسيانات العضوية المختلفة.

١-٢-١- تحضير مركبات سيلينوسيانات باستخدام سلينوسيانات البوتاسيوم

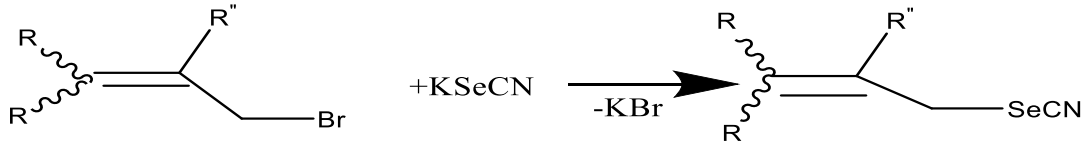
Preparation selenocyanate by potassium selenocyanate compounds

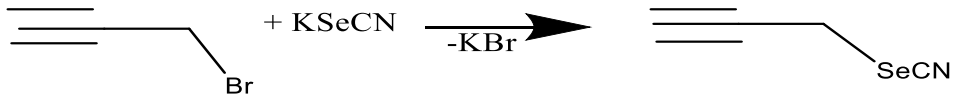
عند تسخين هاليدات الألكيل (Rx) مع سيلينوسيانيت البوتاسيوم (KSeCN) في مذيب مناسب وبدرجة حرارة معينة يتم الحصول على مركبات السلينوسيانيت العضوية[١١, ١٨, ١٩]. كما في المعادلة (٨).



معادلة(١-٩)تحضير مركبات السيلينوسيانات العضوية من سيلينوسيانات البوتاسيوم وهاليدات الألكيل

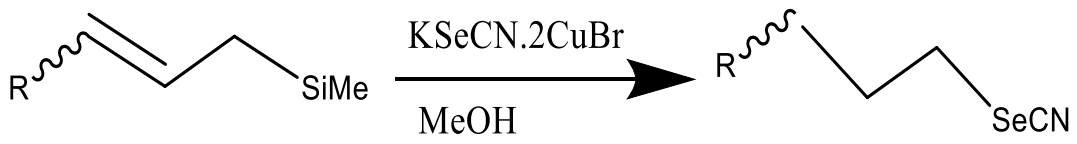
في حالة المركبات الأليلية أو البروبرجيلية، تم إجراء التفاعلات في درجة حرارة الغرفة واختيار الأسيتونيتريل كمذيب تجنبا لتكوين النواتج الثانوية وكانت حصيلة التفاعل الناتج نحو(80%)[٢٠-٢٢]. كما في المعادلتين(٩) و(١٠).





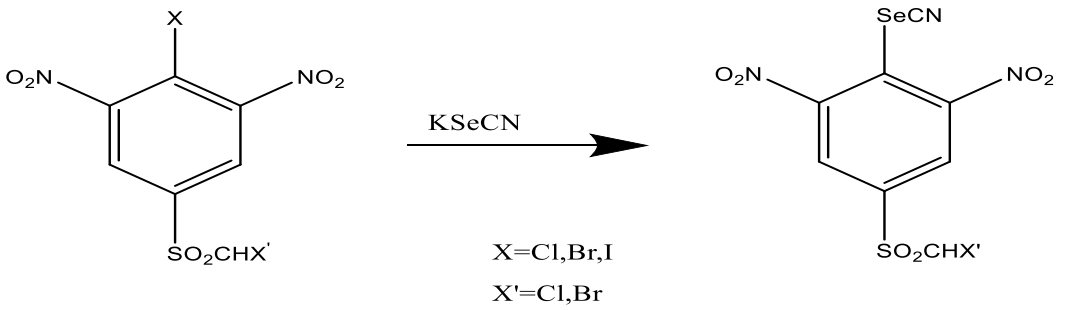
المعادلتين(١-٩,١٠) تفاعل سيلينوسيانات البوتاسيوم مع الأليل والبروباجيل

كما تم تحضير سيلينوسيانات الألياليك في حصيلة عالية (72%) من تفاعل سيليانات الألياليك مع سلينوسيانيت البوتاسيوم KSeCN بوجود بروميد النحاسCuBr , واستخدام الميثانول كمذيب[٢٣]. كما في المعادلة (١١).



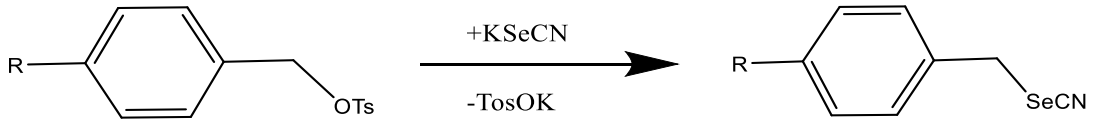
المعادلة(١-١١) تحضير سيلينوسيانات الأليليك KSeCN. 2CuBr

يمكن الحصول على السلينوسيانات العضوية من تنشيط الحلقة بواسطة المعوضات الساحبة للإلكترونات وتعطي نفس النواتج المتوقعة للتفاعلات وبحصيلة تتراوح بين(45-61%)[٢٢, ٢٤, ٢٥].كما هو موضح في المعادلة(١٢).



المعادلتين(١-,١٢) تفاعل سيلينوسيانات البوتاسيوم مع هاليدات الأريل المنشطة

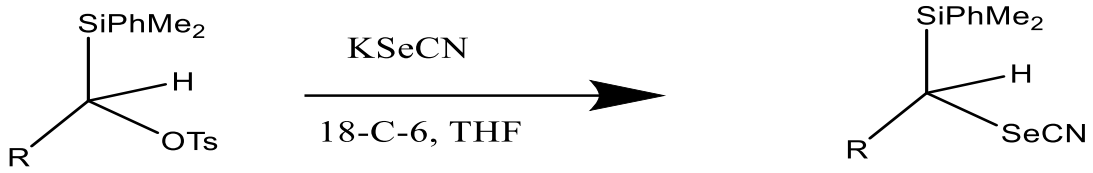
تتفاعل التوسيلات العضوية مع KSeCN للحصول على مشتق السلينوسيانيت العضوي في الأسيتونيتريل بدرجة حرارة الغرفة. وتتراوح حصيلة التفاعل بين(% 80-60) [١٥, ١٩].كما هو موضح في المعادلة (١٣).



R =H, F, Me, MeO, t-Bu

معادلة (١-١٣)تفاعل التوسيلات العضوية مع سيلينوسيانات البوتاسيوم

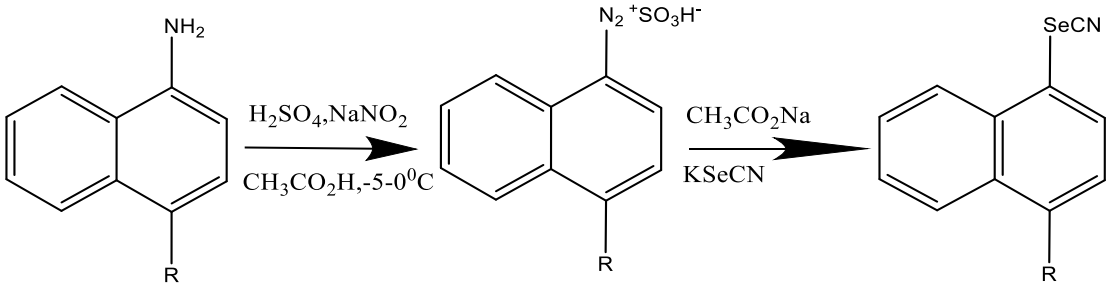
الفا- سيليل سيلينوسيانات (α-Silyl Selenocyanates) يمكننا تحضيرها بسهولة بواسطة هذه الميكانيكية[٢٦, ٢٧].كما هو موضح في المعادلة (١٤).



R =H ,F ,Me ,MeO ,t-Bu

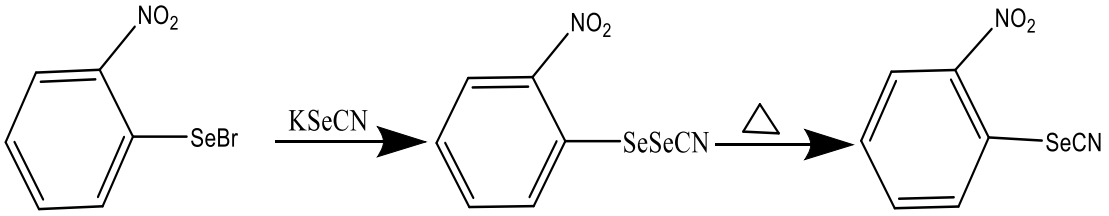
معادلة (١٤) تحضير الفا- سيليل سيلينوسيانات

ومن ناحية أخرى، تم استخدام تفاعل أملاح دايزونيوم مع KSeCN بشكل واسع لتحضير سلينوسيانات الأريل مخطط(١), تكون الحصيلة منخفضة بشكل عام ما لم يتم تحفيز التفاعل بإضافة أسيتات الصوديوم (الرقم الهيدروجيني pH =5.5)[٢٨-٣٠].كما هو موضح في المعادلة (١٥).



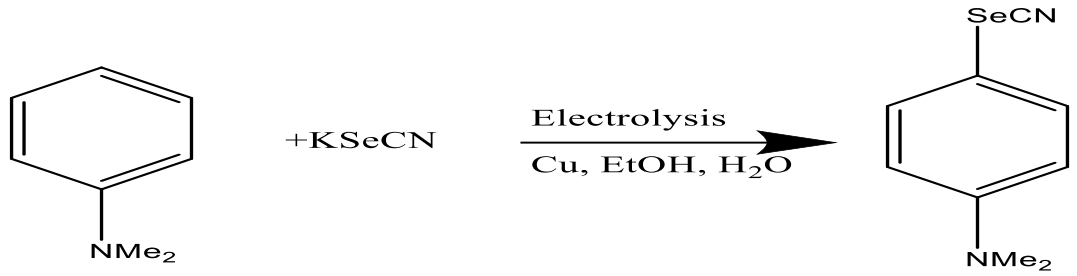
معادلة (١-١٥) تفاعل املاح الدايزونيوم مع سيلينوسيانات البوتاسيوم

كما تم استخدام هاليدات-أريل-سلينايل كمادة اساسية في تحضير مشتقات السلينوسيانيت العضوية حيث كانت حصيلة التفاعل(78%), ولم يلاحظ تكوين ثنائي السلينايد[٣١]. كما هو موضح في المعادلة (١٦).



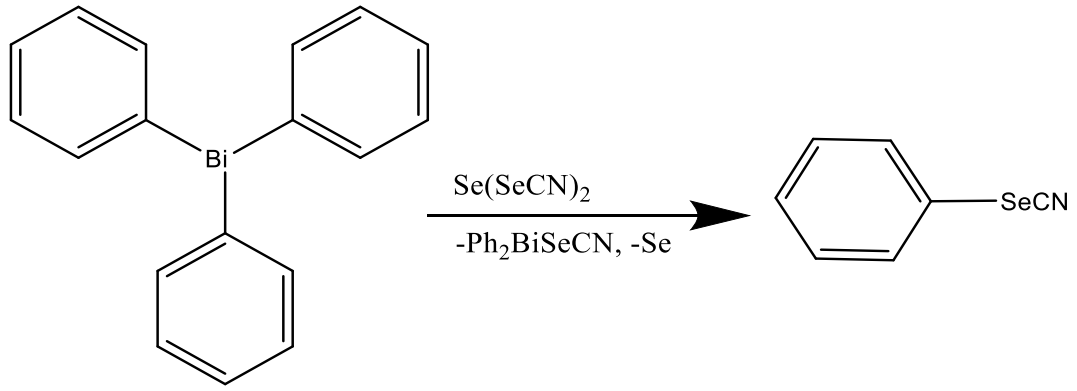
معادلة (١-١٦) تفكك سيلينوسيانات السلينايل بالتسخين الى السيلينوسيانات

ويؤدي التحلل الكهربائي لأملاح HSeCN في اثناء وجود مواد عضوية في قطب الآنود إلى تكوين سيلينوسيانات عضوية. وقد استُخدم مركب النحاس ككاثود واستُخدم آنود من الكرافت الدوّار[١١].كما هو موضح في المعادلة (١٧).



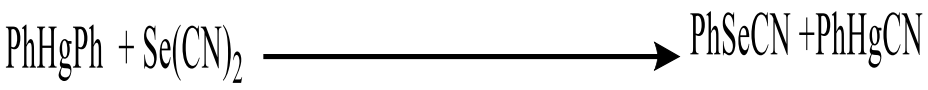
معادلة (١-١٧) تحضير مركب N,N-dimethyl-4-selnocyanatoanilin

بالنسبة لبعض المشتقات الاروماتية، يمكننا تحضير السيلينوسيانات مثلاً عن طريق التعويض الإلكتروفيلي باستخدام ثنائي سيلينوسيانات السيلينيوم $Se\ (SeCN)_2$ ككاشف. لقد تم استخدام العديد من المركبات المعدنية العضوية كمادة أولية لتحضير الأريل سيلينوسيانات. وتم تحضير سلينوسيانيت الفنيل من تفاعل ثلاثي فنيل البزموث مع ثنائي ثنائي سلينوسيانيت السلينيوم[٣٢]. كما هو موضح في المعادلة (١٨).



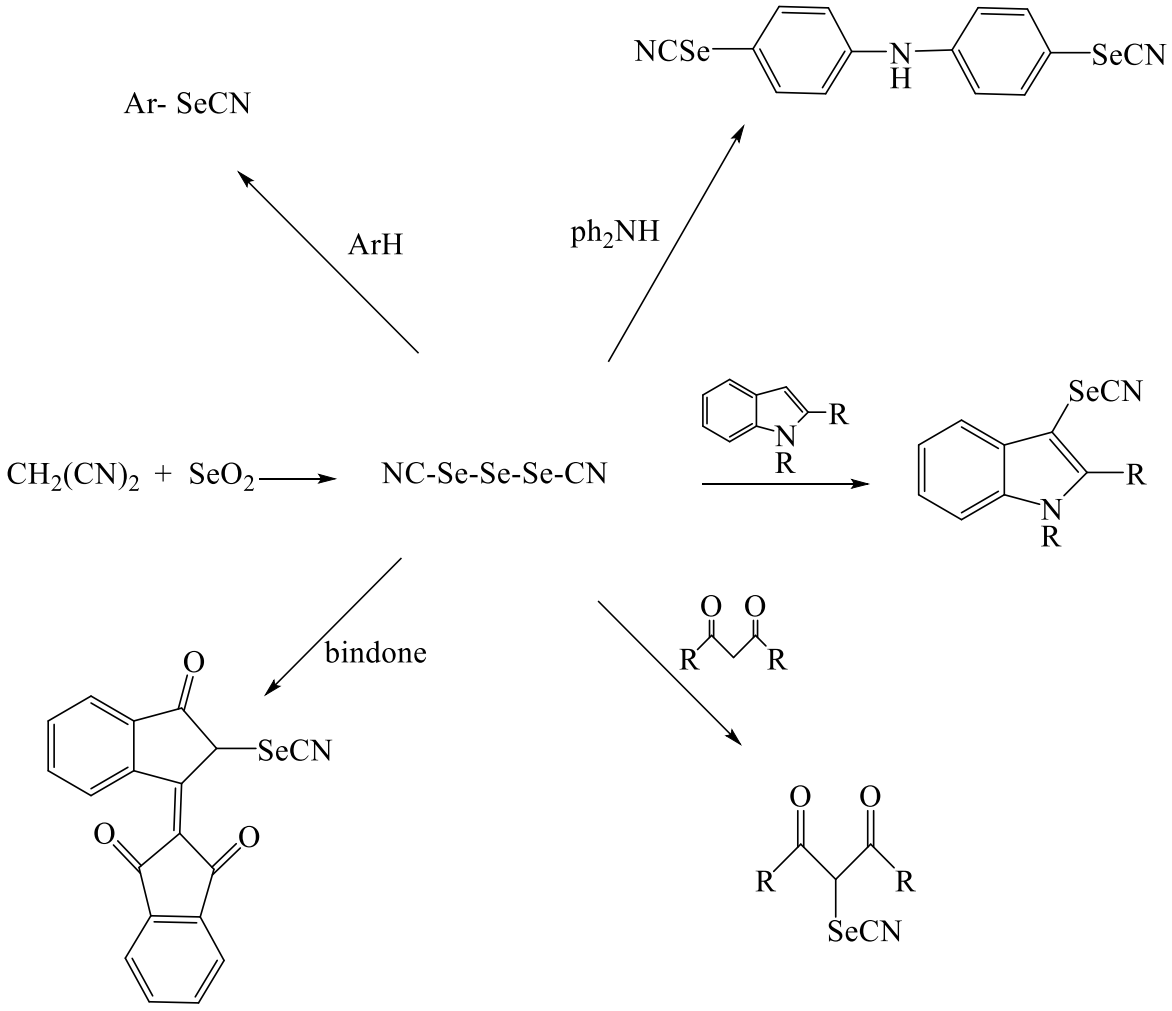
معادلة(١-١٨) تحضير فينيل –سيلينوسيانات

كما وتم تحضير المركب نفسه من مشتقات الزئبق, بدءا بمركب ثنائي فنيل الزئبق وسلينيوم ثنائي السيانيد في البنزين وتتراوح حصيلة التفاعل بين (٢٨-٨٥٪)[٣٣].كما في المعادلة(١٩).



معادلة(١٩)تحضير سيانيد-فينيل-الزئبق(II)و فينيل-سيلينوسيانات

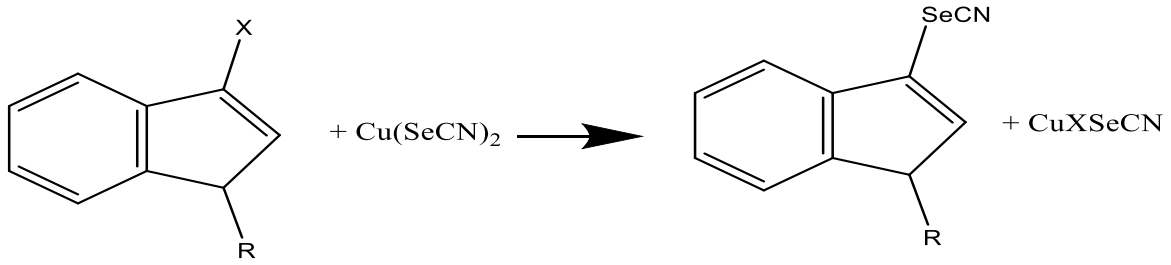
يتم تحضير ثنائي سلينوسيانيت السلينيوم من تفاعل المالونتريل $CH_2(CN)_2$ مع ثنائي اوكسيد السلينيوم (SeO_2) ومن ثم تفاعل الاخير مع الامينات الاروماتية, الاندول وبعض مركبات المثلين النشطة لينتج مشتقات السلينوسيانيت العضوية[٣٤].كما في المخطط (١).



Ar = 4-aminophennyl , 4- aminopholinodiphenyl , 4- aminonaphtyl , 4-amino-3-carboxyphenyl ,...

مخطط (١-١)تحضير مركبات السيلينوسيانات العضوية

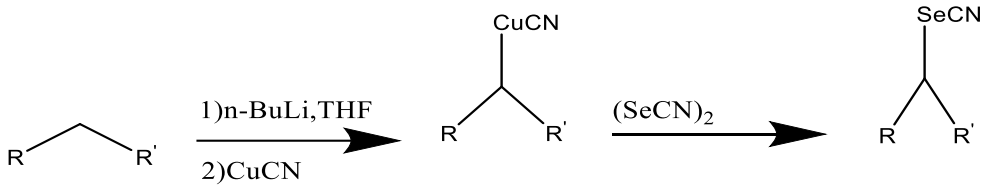
اما في حالة الأزولينات ثنائية التعويض، يمكننا استخدام ثنائي سلينوسيانيت النحاس لاستبدال ذرة الهالوجين[٣٥]. كما في المعادلة(٢٠).



X = Cl ,Br ,I R = MeO > Ph > COPh > SO_2Ph > NO_2

معادلة(١-٢٠) استبدال ذرة الهالوجين بمجموعة سلينوسيانيت

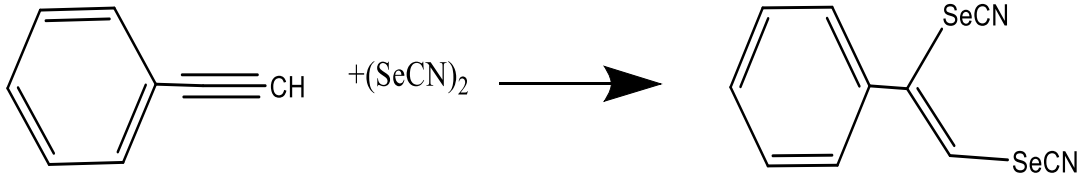
لقد تم استخدام ثنائي سيانو ثنائي سلينايد في العديد من التطبيقات لتحضير السيلينوسيانات العضوية. تؤدي إضافة سيانيد النحاس الى ثنائي سلينوسيانيت الحصول على السلينوسيانات بحصيلة تتراوح السيانو-نحاس إلى ديسيلينوسيانات الحصول على السيلينوسيانات المقابلة بحصيلة تتراوح بين (% 81-61)[٣٦]. كما في المعادلة (٢١).



RCH_2R'=$Me_3PhSiCH_2$-CCH,$Me_3SiCH_2CH=CH_2$, $PhMe_2Si$-CC-CH_3,...

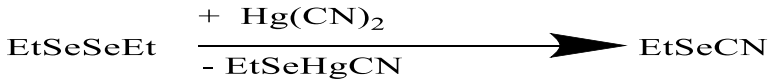
مخطط (١-٢١) اضافة سيانيد النحاس الى ثنائي السلينوسيانات للحصول على السيلينوسيانات

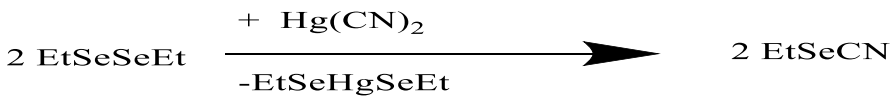
ومن جهة اخرى، يمكن إضافة ثنائي سلينوسيانيت إلى الألكاينات لإعطاء ألكينيل ١-٢- ثنائي سلينوسيانيت (Alkynyl-1,2-diselenocyanate)[٣٧]. كما في المعادلة(٢٣).



معادلة (١-٢٣) تحضير alkynyl-1,2-diselenocyanate

يتم كسر رابطة Se-Se لثنائي السلينايد بواسطة ثنائي سيانيد الزئبق (II) ليعطي السيلينوسيانات العضوية[٣٨]. كما في المعادلتين (٢٤)و(٢٥).



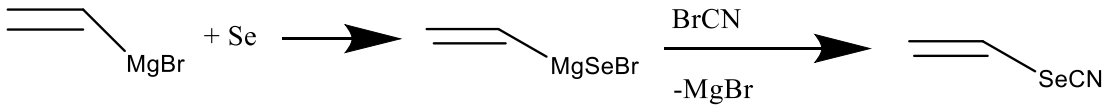


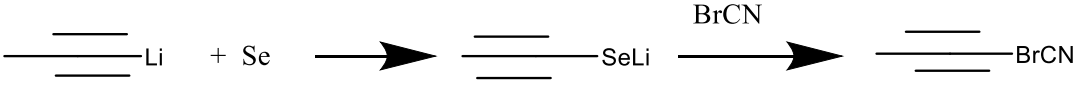
معادلة (١-٢٤,٢٥) تحضير EtSeCN عن طريق كسر رابطة (Se-Se)

يحضر فنيل سلينوسيانيت من تفاعل كلوريد فنيل السيلينيل مع سيانيد مثيل السيلينيل[٣٩, ٤٠]. كما في المعادلة(٢٦).

معادلة(١-٢٦) تحضير الأريل-سيلينوسيانات عن طريقphenylselenenyl chloride و trimethylsilyl cyanide

يمكن الحصول على مركبات السلينوسيانيت العضوية من تفاعل مركبات الليثيوم العضوية او كاشف غرينيارد مع عنصر السلينيوم ليتكون مركب وسطي سرعان ما يتحول الى مشتق السلينوسيانيت العضوي[١٥].كما في المخطط (٢).



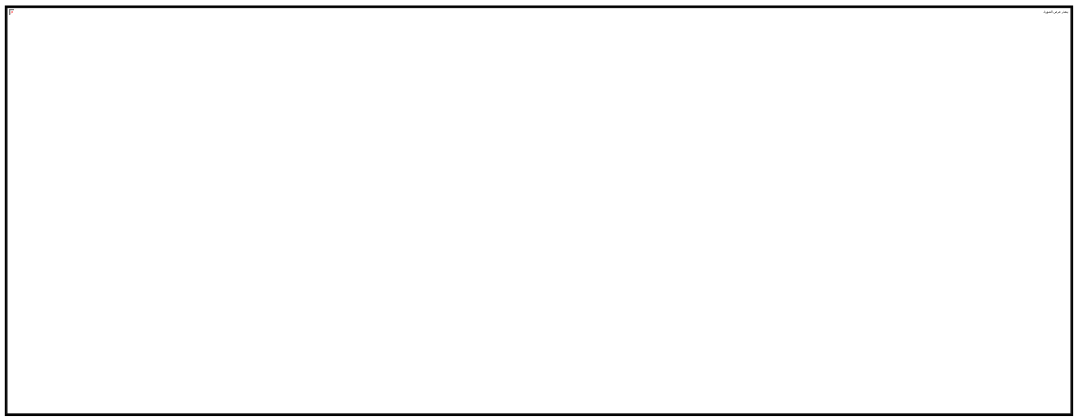


مخطط(١-٢) تحضير السيلينوسيانات بوجود السيلينيوم ومركبات الليثيوم او كاشف غرينيارد

١-٢-٢- تفاعل سيلينوسيانات البوتاسيوم مع الإندولين والأوليفينات.

Reaction of potassium selenocyanate with indoles and olefins

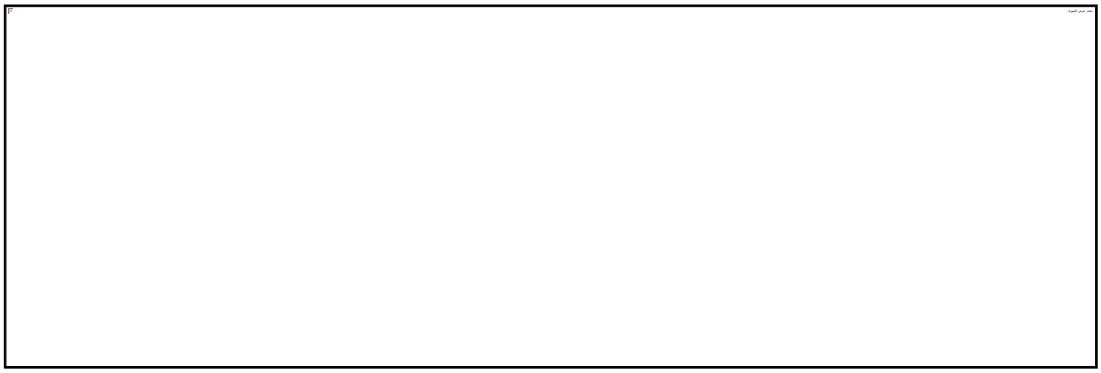
استنتج ناير(Nair) وجماعته بان الاندولات قد يحصل بها تفاعل تعويضي لسلينوسيانيت في حصيلة جيدة (٧٢ ٪) باستخدام نترات امونيوم السيريوم cerium(IV) (IV))(CAN) (ammonium nitrate) وسيلانوسيانات البوتاسيوم في الميثانول[٤١].كما في المعادلة(٢٧).



معادلة (١-٢٧) تفاعل الاندولات

وتم تحضير مشتق سيلينوسيانات من الستايرين والفينيل نفثالين (styrenes and vinyl naphthalenes) بوجود cerium(IV) ammonium nitrate) CAN)

وكانت حصيلة التفاعل (46-67%)[٤١].كما في المعادلة(٢٨).



معادلة (١-٢٨) تحضير مشتق السيلينوسيانات

١-٣-السلينوسيانات

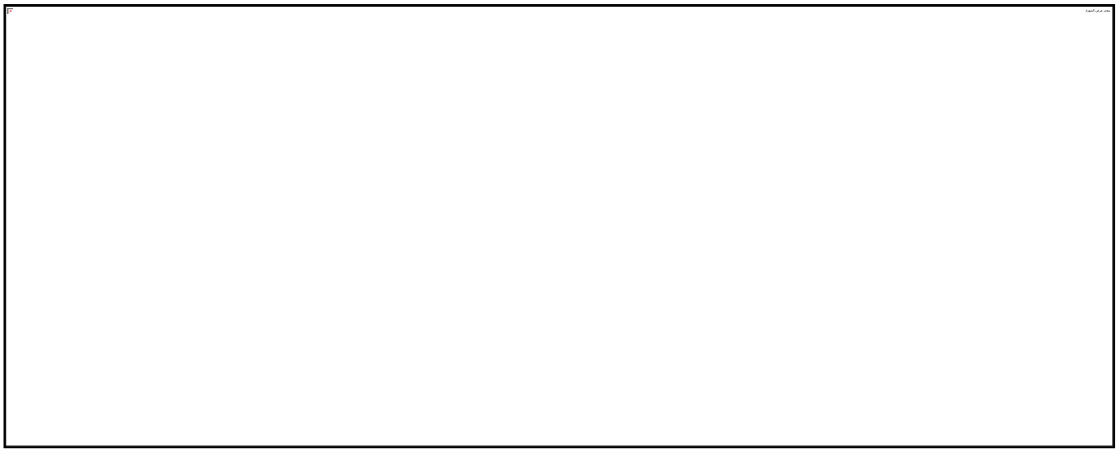
سيلينوسيانوجين (Selenocyanogen) $(SeCN)_2$ يحضر من تفاعل سيلينوسيانات الفضة مع اليود[٤٢]. وتم استخدامه لتحضير مركبات سيلينوسيات مختلفة التي لا يمكن تحضيرها بواسطة التفاعلات المذكورة سابقا. وهكذا، تم تحضير ألينيل سيلينوسيانيت (allenylselenocyanate) بواسطة تفاعل سيلينوسيانوجين مع بروبارجيل ثلاثي بيوتيل القصدير-propargyl tri-n-butylstannane)) من خلال تفاعل إعادة ترتيب البروبكيل – ألينيل -propargyl-allenyl في حصيلة(٥٥ ٪) [٤٣].كما في المعادلة(٢٩).

معادلة (١-٢٩) تحضير ألينيل سيلينوسيانيت

١-٤- تحضير السلينوسيانيت باستخدام ثنائي سلينوسيانات النحاس

Cyanoselenation using copper diselenocyanate.

مركبات الازيولين ثنائية التعويض (disubstitutedazulenes) تتفاعل مع ثنائي سلينوسيانيت النحاس لتحضيرالسيلينوسيانات المقابلة وقد وجد أن المعوض الثاني يؤدي دورًا مهما في معدل سرعة التفاعل[٤٣]. كما في المعادلة(٣٠).



معادلة (١-٣٠) تفاعل مركبات الازيولين ثنائية التعويض مع ثنائي سلينوسيانيت النحاس لتحضيرالسيلينوسيانات المقابلة

١-٥- التفاعلات الكيميائية لمركبات السيلينوسيانات العضوية

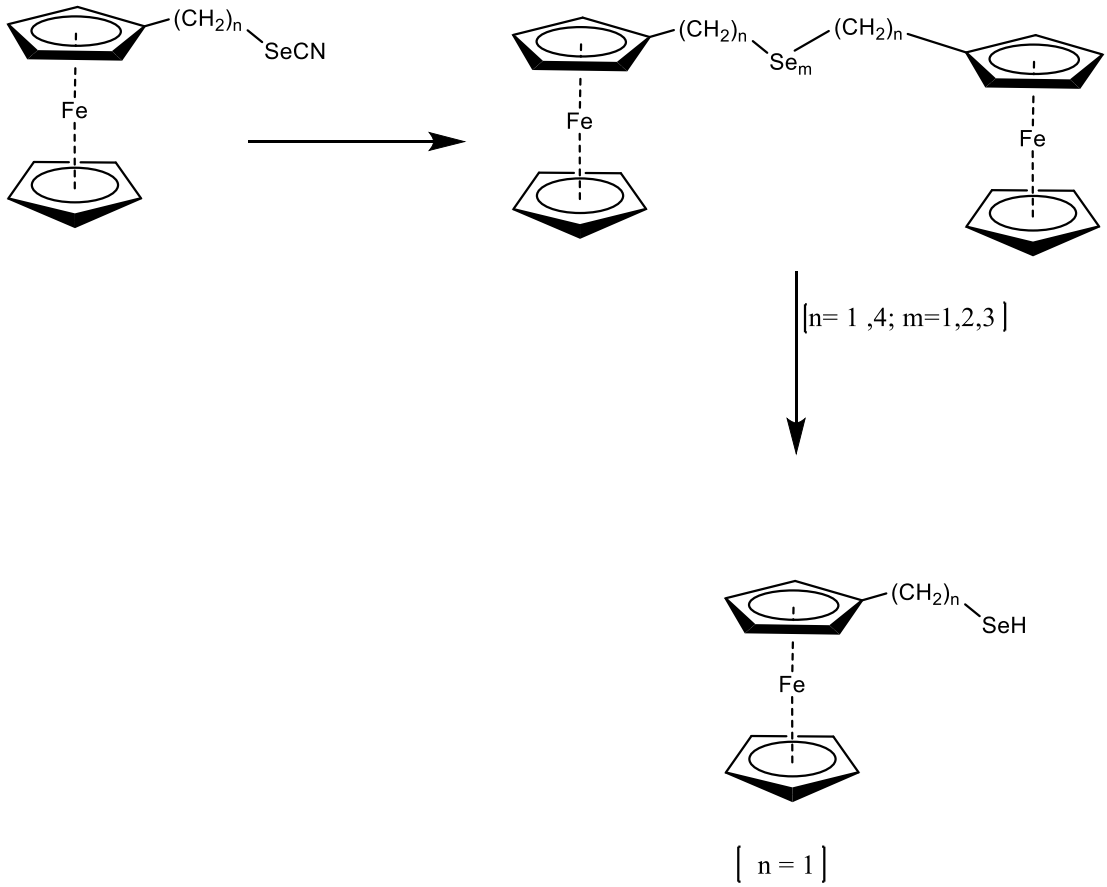
Reactions of Organic Selenocyanates

السلينوسيانات مركبات عضوية ذات رائحة كريهة. تتميز بانها مستقرة وغالبا ما تتواجد بحالة زيتية في درجة حرارة الغرفة ومن اهم التقنيات التي يمكن ان تشخص بها (مطيافية الاشعة تحت الحمراء ، مطيافية الرنين النووي المغناطيسي ، الدراسات الكهروضوئية ودراسة الميكروويف)ووصفت في المصادر[٤٤]. وفي السنوات الاخيرة تم تحضير العديد من مركبات السيلينيوم العضوية باستخدام السلينوسيانيت العضوية (organoselenocyanates). ومن الممكن تحويل هذه المركبات إلى مشتقات تحضر منها مركبات السلينيوم (Se) العضوية بما في ذلك السيلنول ، السلينيدات (المتماثلة وغير المتماثلة) وثنائي السلينايد[٤٥, ٤٦] و يمكن أيضًا أن تحضرالألكينات والألكاينات والكحوليات والألدهيدات والأحماض الكربوكسيلية من مشتقات سيلينوسيانات العضوية [٤٧, ٤٨]. ومع ذلك ، فإن بعض هذه التفاعلات ذكرت منذ عقود ولم تعد تستخدم. وتشمل هذه التفاعلات مع الهالوجينات ، والثايولات والأحماض أو السيلنول[٤٦, ٤٩] . تشمل التفاعلات الأخرى تفاعل إضافة السيلانوسيانيتات العضوية إلى الألكينات أو الألكاينات أو الإينامينات[٩, ٥٠] .

١-٥-١- اختزال مركبات السلينوسيانات العضوية

Reduction of organic selenocyanates

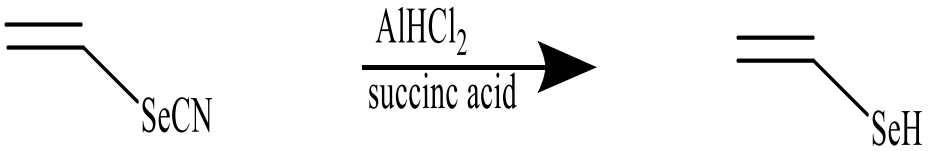
هيدريدات المعادن القلوية مثل هيدريد الألمنيوم الليثيوم (lithium aluminum hydride) وهيدريد ثنائي كلورو الألمنيوم (dichloroaluminum hydride) وهيدريد الصوديوم (sodium hydride) تعتبر كواشف تستخدم لاختزال السلينوسيانات (organoselenocyanates) للحصول على مركب السلينايد الثنائي (diselenides) ،اما اذا تم استخدام كمية قليلة وغير كافية من هذه العوامل المختزلة[٥١]. كما في المخطط (٣).



مخطط (١-٣) تفاعلات المركب ثنائي -سلينايد

تم اختبار الاختزال للمركبات غير المشبعة مثل ألينيل- سيلينوسيانات-Allenyl) selenocyanate) باستخدام هيدريد ثنائي كلورو ألومينيوم -(Dichloroaluminum Hydride) ، يعطي مركباً عضوياً من الينيل سيلينول[٥١].كما في المعادلة(٣١).تم اجراء

الاختزال الكيميائي للمركبات غير المشبعة مثل أليل سلينوسيانات باستخدام هيدريد ثنائي كلورو ألومينيوم($AlHCl_2$), والذي اعطى مركب لينيل سيلينول[٥١].كما في المعادلة (٢٨).

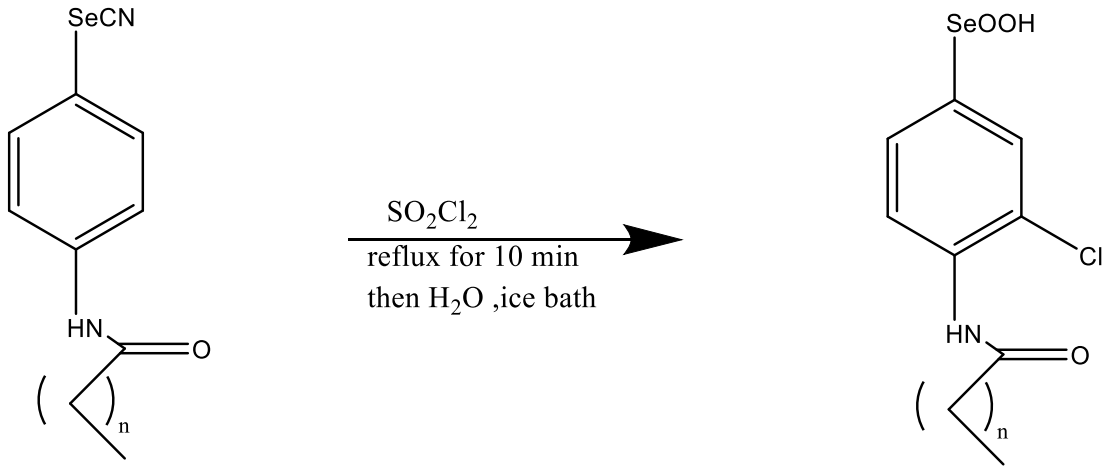


معادلة (١-٣١) تحضير مركب الينيل- سيلينول بالاختزال

١-٥-٢- الاكسدة لمركبات السيلينوسيانات العضوية

Oxidation of organic selenocyanates

ان اجراء عملية الاكسدة لمركبات السلينوسيانات العضوية تعطي حامض السيلينيك المقابل ومن خواصه يكون فعالاً جداً وغير مستقر. في عام ٢٠١٤ ، توصل كل من دو (Do) وزملاؤه من أكسدة فينيل سيلينوسيانات (Phenyl selenocyanate) لما يقابله من حامض السيلينيك الفعال[٥٢]. وكانت حصيلة التفاعل بحدود (55%)كما في المعادلة (٣٢).

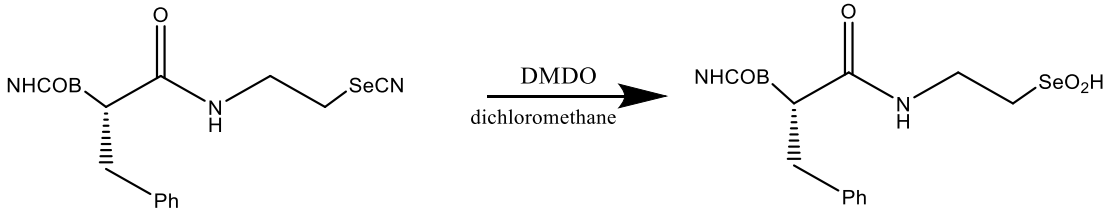


$$\left[\ n = 6\ ,\ 8\ ,\ 10\ ,12\ ,\ 14\ \right]$$

معادلة(١-٣٢) تحضير حامض السيلينيك بالأكسدة

لقد استخدم (DMSO) لتحضير حامض السيلينيك وكانت حصيلة التفاعل الناتج مقدارها (70%) ويتم تخليقه ايضا من اكسدة السيلينوسيانات المقابلة في كلورو الميثان(

Chloromethane)[٥٣]. ان تفاعل املاح الديازونيوم –الميثانونات مع الفا-سيلينوسيانات-الاسيتوفينونات يعطي 4,5-dihydro-5-imino-4-aryl-1,3,4-selenadiazol-2-yl)(aryl)methanones) . وتم عن طريق اضافة راسب من انيلينو هيدرازون لمجموعة سيلينوسيانات[٥٤]. كما موضح في المعادلة(٣٣).

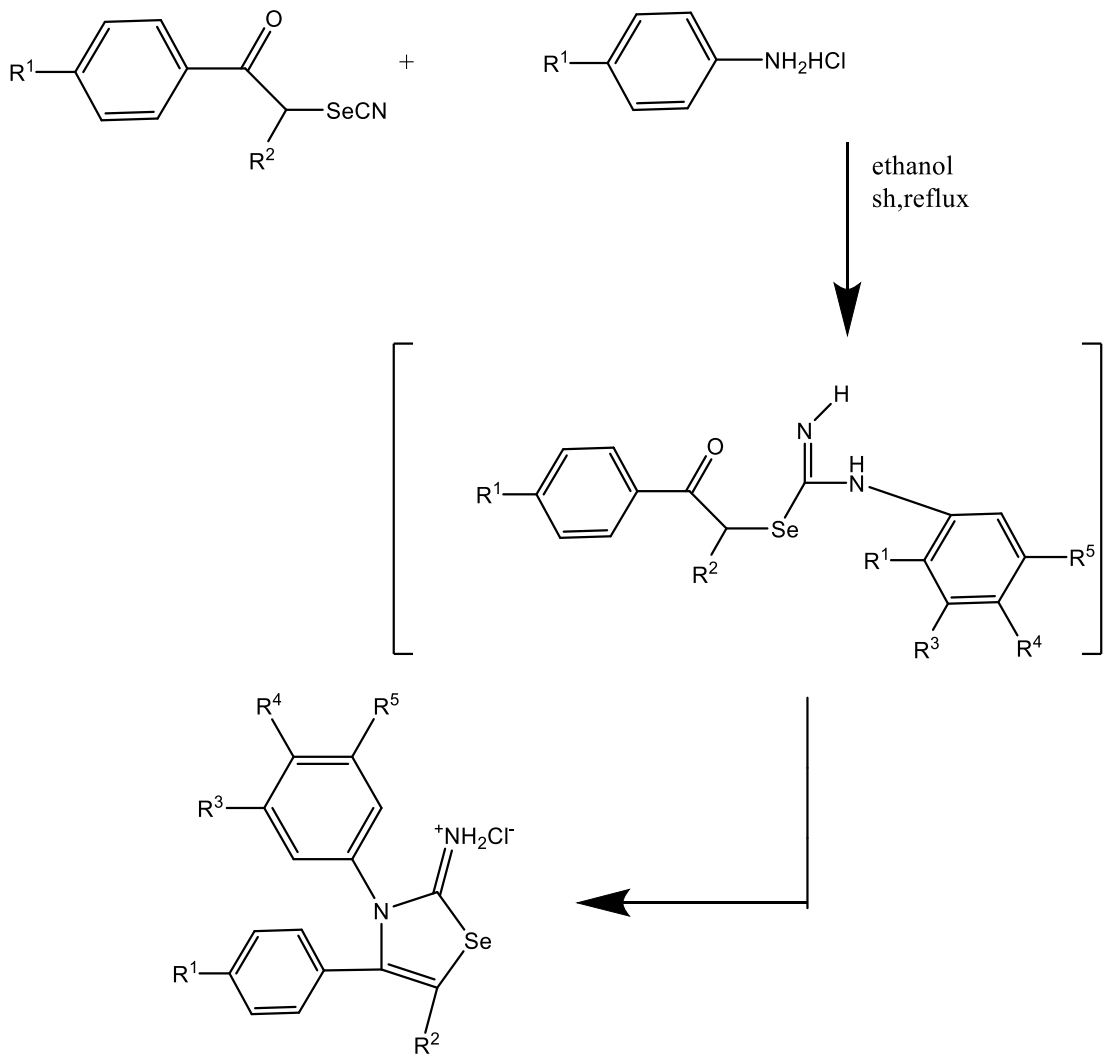


معادلة (١-٣٣) تحضير حامض السيلينيك باستخدام ثنائي كلورو ميثان

١-٥-٣- تفاعلات الاضافة لمركبات السيلينوسيانات العضوية

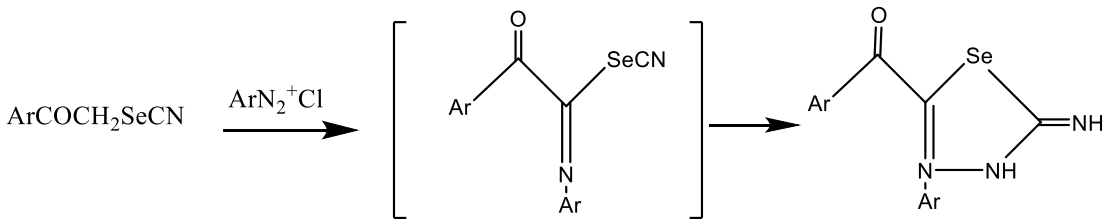
Addition reactions of organic selenocyanates

ان التفاعل الذي يحصل بين املاح هيدروكلوريد الانيلين مع الفا-سيلينوسيانات الاسيتو فينون في الوسط الحامضي للحصول على السيلينازول-ايمين وحصيلة التفاعل كانت منخفضة بحدود (٢٧٪).وتم توضيح هذا التفاعل عن طريق الاضافة المحفزة بالحامض لمجموعة امين-الانيلين الى السيلينوسيانات[٥٥] كما في المخطط (٤).



مخطط (١-٤) تحضي مركب السيلينازول-ايمين Selenazolimine

ان تفاعل املاح الديازونيوم –الميثانونات مع الفا-سيلينوسيانات-الاسيتوفينونات يعطي -4,5 dihydro-5-imino-4-aryl-1,3,4-selenadiazol-2-yl)(aryl)methanones) . وتم عن طريق اضافة راسب من انيلينو هيدرازون لمجموعة سيلينوسيانات[٥٦]. كما موضح في المعادلة(٣٤).



[Ar = C_6H_5 , 4 -$CH_3C_6H_4$]

معادلة (١-٣٤) تحضير

4,5-dihydro-5-imino-4-aryl-1,3,4-selenadiazol-2-yl)(aryl)methanones)

١-٦- الهدف من الدراسة:

Aim of the study

١- تحضير مركبات السلينيوم العضوية المشتقة من ٨-هيدروكسي كوينولين .
٢- طرق اثبات التراكيب للمركبات المحضرة بالتقنيات الطيفية مثل مطيافية الاشعة تحت الحمراء, مطيافية الرنين النووي المغناطيسي للبروتون وطيف الكتلة.
٣- دراسة بعض المركبات المحضرة كمضادات للبكتريا.
٤- دراسة نظرية للمركبات المحضرة بواسطة برنامج Gaussian
٥- ادخال المركبات المحضرة ضمن المجال الصحي والصناعي.

٢-١ : المواد الكيمياوية المستخدمة :

المواد الكيمياوية الآتية المستخدمة في تحضير المركبات :-

جدول (٢- ١) المواد الكيمياوية المستخدمة

ت	المادة الكيميائية	درجة النقاوة	الشركة المجهزة
١	DMSO	٪٩٩	Romil / England
٢	Diethyl ether	٪٩٩,٨	Scharlo/ Spanish
٣	Bromine	٪٩٨	Sigma Aldrich/ Germany
٤	Selenium metal	٪٩٩	Sigma Aldrich/ Germany
٥	Sodium cyanide	٪٩٧	Fluka / England

٦	Iodine	٪٩٩	Romil / England
٧	Ethanol absolute	٪٩٩,٩	Romil / England
٨	Hydrochloric acid	٪٣٧	Scharlo/ Spanish
٩	n- Hexane	٪٩٩	Scharlo/ Spanish
١٠	Thionyl chloride	٪٩٨	Sigma Aldrich/ Germany
١١	Methanol absolute	٪٩٩,٩	Romil / England
١٢	THF	٪٩٩	Sigma Aldrich/ Germany

*** B.D.H:British Drug House**

٢-٢- الاجهزة المستخدمة :

تم استخدام الاجهزة الآتية في اكمال متطلبات هذه الدراسة:

٢-٢-٢- جهاز مطياف الاشعة تحت الحمراء

Infrared spectrophotometer :-

تم تسجيل أطياف FT-IR للمركبات المحضرة ضمن المدى ($500-4000cm^{-1}$) باستخدام جهاز من نوع (Bruker) وبتقنية اقراص (KBr) في جامعة ذي قار/ قسم الكيمياء- كلية العلوم .

٢-٢-١- جهاز قياس درجة الانصهار Melting point :-

تم قياس درجة الانصهار للمركبات المحضرة باستخدام جهاز من نوع Melting point SMP31/ في جامعة ذي قار / كلية العلوم - قسم الكيمياء .

٢-٢-٣- جهاز مطيافية الرنين النووي المغناطيسي للبروتون:-

(Nuclear Magnetic Resonance spectrometer (^{1}H NMR):-

سجلت أطياف الرنين النووي المغناطيسي ^{1}H NMR للمركبات المحضرة بواسطة جهازمن نوع (Bruker AVANCE-DRX 300MHZ) باستخدام المذيب DMSO في جامعة طهران/ايران .

٢-٢-٤- جهاز مطيافية الكتلة (MASS) :-

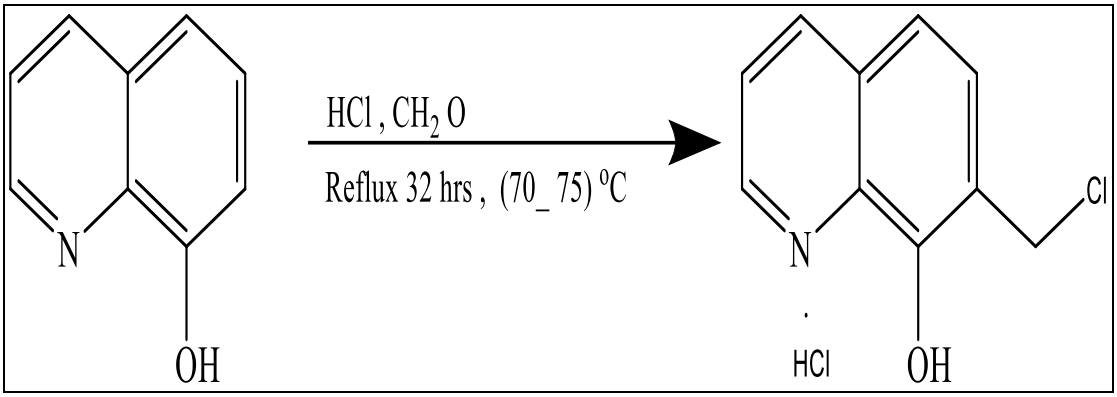
تم تسجيل اطياف الكتلة للمركبات المحضرة بواسطة جهاز من (triple quad LC/MS 6410, agilent) في جامعة طهران /ايران.

٢-٣- تحضير المركبات :

٢-٣-١- تحضير المركب 7-chloromethylene-8-hydroxyqunoline hydrochloride

يذاب(0.006mol , 0.9gm) من ٨_هيدروكسي كوينولين في (1ml)من حامض الهيدروكلوريك المركز مع التحريك المستمر حتى ذوبان المادة بشكل تام بعدها يتم اضافة (1ml)من الفورمالديهايد واستمرارية التحريك لمدة ثلاث ساعات مع اضافة ثلاث قطرات من حامض الهيدروكلوريك كل (15) دقيقة بعد اكتمال الوقت يحرك باستمرار مع (reflex) لمدة(32) ساعة بعد كل(8) ساعات يضاف (5ml) من حامض الهيدروكلوريك المركز وبدرجة حرارة (70 ^{o}C) نلاحظ تكون بلورات صفراء اللون براقة بعدها يرشح المحلول ومن ثم

الحصول على الراسب ثم يتم غسله بكمية من حامض الهيدروكلوريك للتخلص من الشوائب وحصيلة التفاعل مقدارها(85%) , الوزن الناتج (0.99gm) ودرجة انصهار (278-280 ^{o}C)[٥٧].كما موضح في المعادلة ادناه.



معادلة (٢-١) تحضير المركب

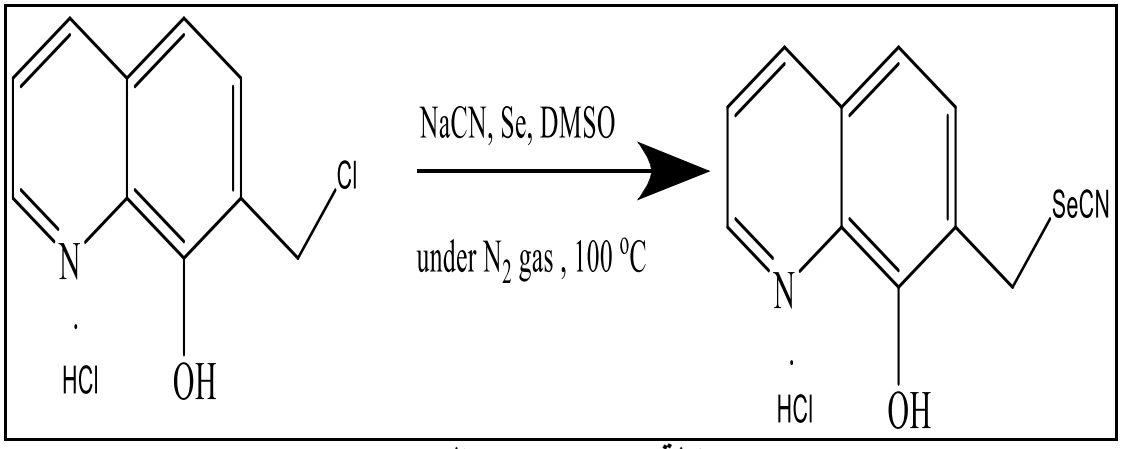
7-chloromethylene-8-hydroxyqunoline hydrochloride

٢-٣-٢- تحضير المركبC1

7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride

اضافة (0.44gm , 0.0056mol) من السيلينيوم الى (0.27gm , 0.0055mol) من سيانيد الصوديوم ثم اذابتهما معا في (15ml)من ثنائي ميثيل سلفوكساييد (DMSO) المقطر حديثا, يحرك المزيج لمدة ساعة واحدة وبدرجة حرارة(100 ^{o}C) بوجود النتروجين(N_2) كغاز خامل. بعدها يضاف (15ml)من (DMSO) للمزيج الساخن ثم يترك ليبرد بدرجة حرارة المختبر فيتغير لونه الى الاصفر الباهت, يضاف له (0.95gm, 0.0056mol)من-7 chloromethylene-8-hydroxyqunoline hydrochloride ويصعد ارجاعيا بوجود (N_2) لساعتين وبحرارة(١٠٠^{o}C) وتم مراقبة التفاعل بTLC ثم يرشح المحلول وهو ساخن ثم يبرد ويسكب في (300ml) من الماء المقطر البارد فتتكون بلورات صفراء نرشح المحلول ثم

نغسله بالإيثانول فكانت حصيلة التفاعل (60%),الوزن الناتج (0.99gm)ودرجة انصهار (178-180 °C) كما موضح في المعادلة ادناه .



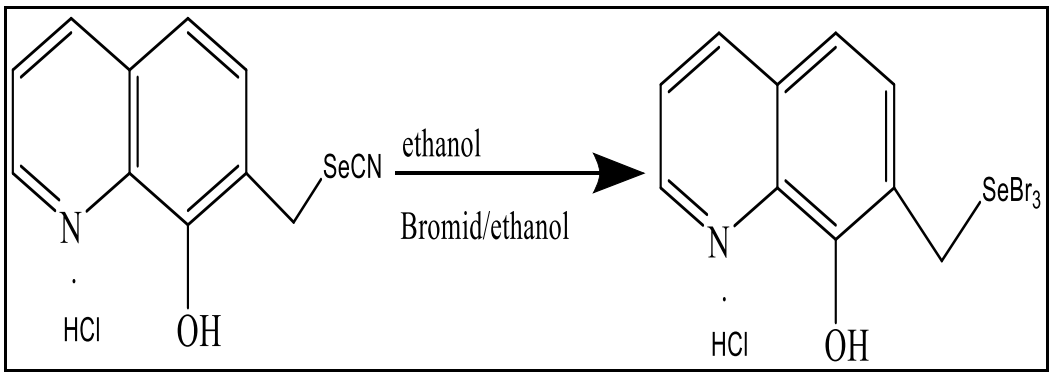
معادلة (٢-٢) تحضير المركب

7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride

٢-٣-٣- تحضير المركبC2

7-methylene selenium tri bromoid-8-hydroxyquinoline hydrochloride

اذيب (0.002mol , 0.5gm)من مركب 7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride في (50ml)من الايثانول المطلق ثم اضيف له (5ml) من البروم المذاب في(15ml) من الايثانول المطلق ببطء مع التحريك المستمر فنلاحظ تكون بلورات اثناء الاضافة نترك المزيج لمدة ساعة واحدة في درجة حرارة المختبر وتم مراقبة التفاعل بTLC, ثم نرشح المحلول ونغسل الراسب بالإيثانول المطلق بعدها يجفف وتعاد بلورته بواسطة مزيج من الكحول الاثيلي والكلوروفورم (1:1) فنحصل على بلورات صفراء اللون وبحصيلة (48%),الوزن الناتج (0.25gm) ودرجة انصهار (213-215 °C) كما في المعادلة ادناه .



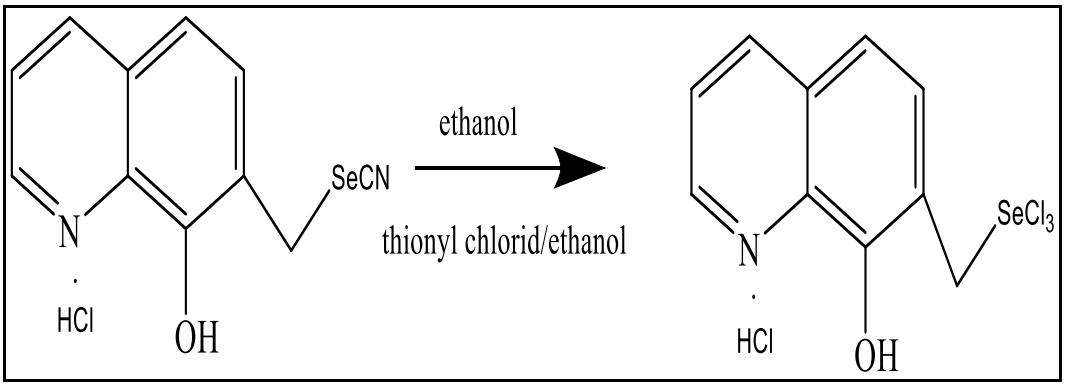
معادلة (٢-٣) تحضير المركب

7-methylene selenium tri bromoid-8-hydroxyquinoline hydrochloride

تحضير المركب C3

7-methylene selenium trichlorid-8-hydroxyquinoline hydrochloride

يذاب (0.002mol , 0.5gm) من مركب 7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride في (50ml) من الايثانول المطلق ثم يضاف له (5ml) من كلوريد الثايونيل المذاب في (15ml) من الايثانول المطلق بشكل دفعات صغيرة مع التحريك المستمر لمدة ساعة واحة وتم مراقبة التفاعل بTLC ولحين تغير لون السلينوسيانات من الاصفر الى اللون البرتقالي نبخر المذيب ونجمع الراسب ثم نجففه وتعاد بلورته بواسطة مزيج من الكحول الاثيلي والكلوروفورم (1:1) فنحصل على بلورات ذات لون برتقالي وبحصيلة مقدارها (52%),الوزن الناتج (0.2gm) ودرجة انصهار (198-200 °C) كما في المعادلة ادناه .



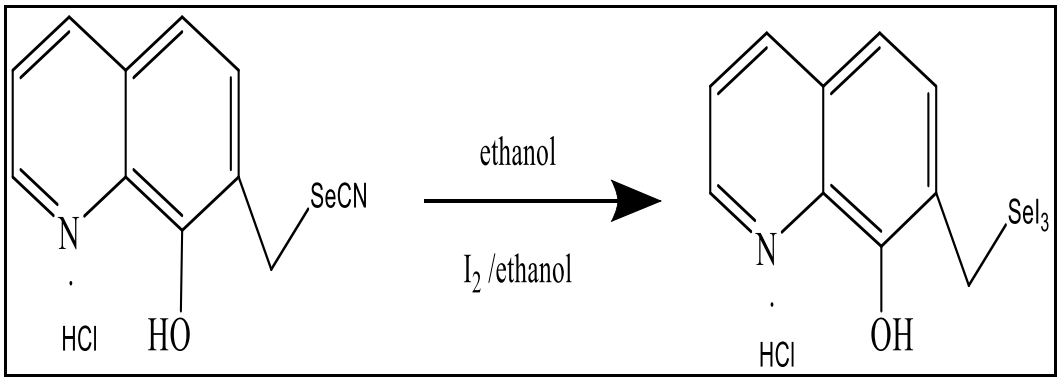
معادلة(٢-٤) تحضير المركب

7-methyleneselenium trichloride-8-hydroxyquinoline hydrochloride

٢-٣-٥- تحضير المركبC4

7-methylene selenium tri iodide-8-hydroxyquinoline hydrochloride

يذاب (0.002 mole , 0.5gm) من مركب 7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride في(50ml) من الايثانول المطلق ثم يتم اضافة اليود بمقدار(0.5gm)المذاب في(15ml)من الايثانول المطلق بشكل دفعات متقطعة مع التحريك المستمر لمدة ساعة واحدة وتم مراقبة التفاعل ب TLC. فنلاحظ تكون راسب احمر نبخر المذيب ثم نجفف الراسب وتعاد بلورته باستخدام مزيج من الميثانول وثنائي كلوريد الميثان (2:3) بعد التجفيف نحصل على بلورات حمراء اللون وبحصيلة مقدارها (30%),الوزن الناتج (0.2gm) ودرجة انصهار (179-181 ^{o}C) كما في المعادلة ادناه .



معادلة (٢-٥) تحضير المركب

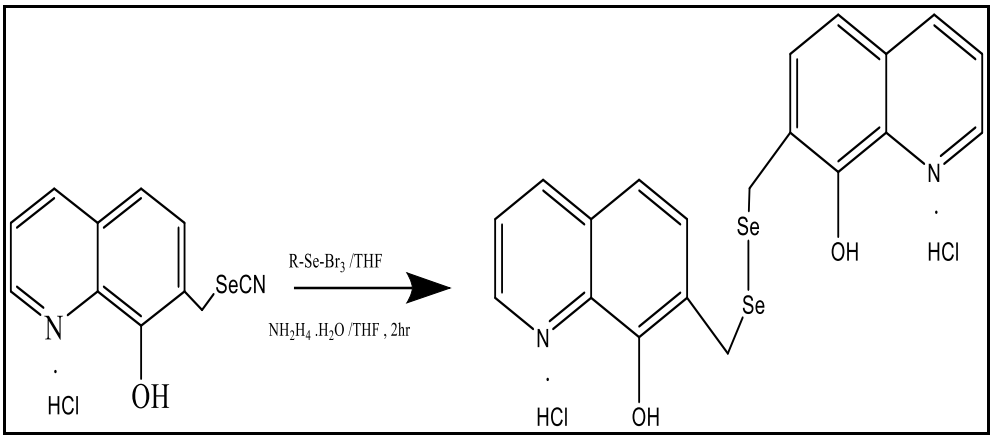
7-methylene selenium tri iodide-8-hydroxyquinoline hydrochloride

٢-٣-٦- تحضير المركبC5

Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)diselenide hydrochloride

يذاب (0.002mol , 0.5gm) من مركب 7-methylene seleno tri bromoid-8-hydroxyquinoline hydrochloride ($RSeBr_3$) في (15ml) من الايثانول ويسخن في حمام مائي بدرجة حرارة (50 ^{o}C) ثم يضاف له (7 قطرات) من محلول (0.05gm , 0.001m)الهيدرازين المائي في (10ml)من الايثانول المطلق ويحرك المزيج لمدة ساعتين وتم

مراقبة التفاعل ب TLC ثم نلاحظ تكون بلورات لونها بني محمر بحصيلة تفاعل (54%) , الوزن الناتج (0.3gm) ودرجة انصهار مقدارها (183-185 ^{o}C) كما في المعادلة ادناه .



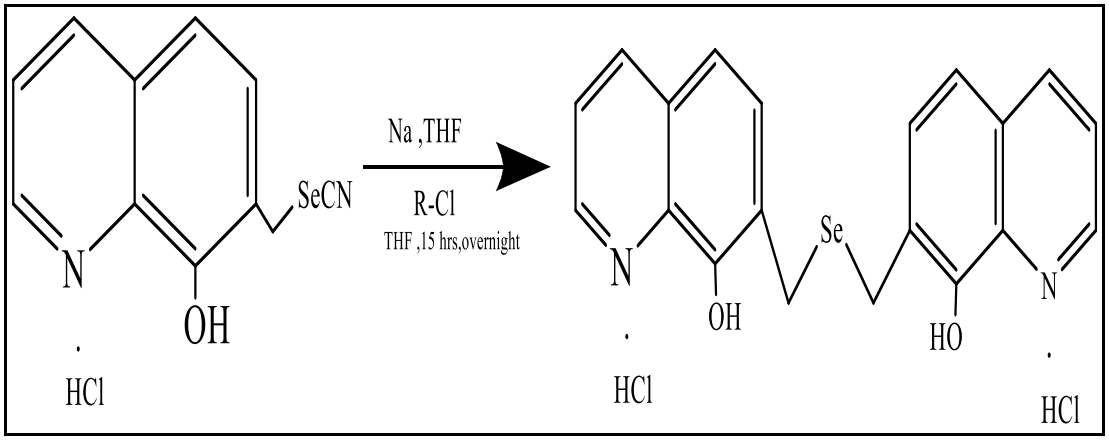
معادلة(٢-٦) تحضير مركب

Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)diselenide hydrochloride

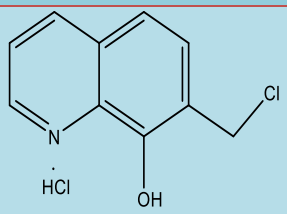
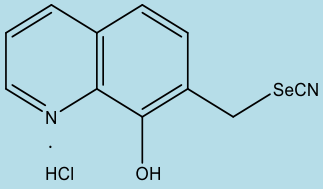
تحضير المركب C6

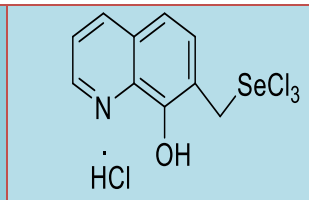
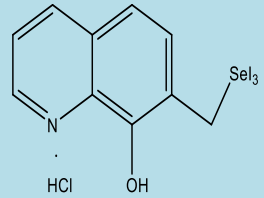
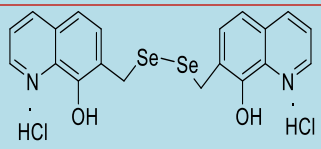
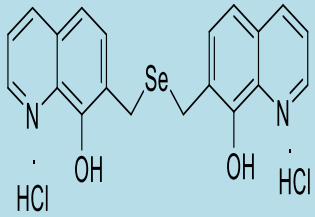
Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)selenide hydrochloride

يذاب (0.01mole , 0.23gm)من الصوديوم (يقطع قطع صغيرة وتزال الطبقة الرمادية عليه بحيث يكون سطحه لامعا براقا) في 15مل من رباعي هيدروفيوران في جو خامل من النتروجين ويحرك المزيج الى ان نلاحظ اختفاء الصوديوم من التفاعل ثم نضيف اليه ببطء (0.002mole , 0.5gm) من 7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride المذاب في (15ml) من THF وتتم الاضافة عن طريق (قمع الاضافة) عندما يكتمل التفاعل نبدأ بإضافة (0.9gm , 0.006mole) من 7-chloromethylene-8-hydroxyqunoline hydrochloride المذاب (15ml) منTHF ويحرك المزيج لمدة نصف ساعة وبدرجة حرارة الغرفة ثم يترك لمدة (15hr) في مكان بعيد عن الضوء وتم مراقبة التفاعل ب TLC, بعدها نلاحظ تكون راسب ذو لون احمر نقوم بترشيحه وجمع الراسب وغسله بمذيب مناسب مثل الايثانول المطلق ثم نجففه نلاحظ تغير لونه الى الاخضر وبحصيلة مقدارها (42%) ,الوزن الناتج (0.2gm) ودرجة انصهار (176-178 ^{o}C) كما في المعادلة ادناه .



معادلة(٢-٧) تحضير المركب Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)selenide hydrochloride

المركب	الصيغة التركيبية	الوزن الجزيئي	اللون	درجة الانصهار	الحصيلة
C		193.63	اصفر-براق	278-280D	85%
C1		263.16	اصفر شاحب	173-175D	60%
C2		476.85	برتقالي – مصفر	213-215D	48%

C3		343.49	برتقالي	198-200D	52%
C4		617.8	احمر	179-181D	30%
C5		474.28	بني-محمر	183-185D	54%
C6		395.32	اخضر	176-178D	42%

*** D: Decompose**

جدول رقم (٢ -٢) الاوزان الجزيئية وبعض الخصائص الفيزيائية للمركبات المحضرة

٢-١ : المواد الكيمياوية المستخدمة :

المواد الكيمياوية الآتية المستخدمة في تحضير المركبات :-

جدول (٢- ١) المواد الكيمياوية المستخدمة

ت	المادة الكيميائية	درجة النقاوة	الشركة المجهزة
١	DMSO	٪٩٩	Romil / England
٢	Diethyl ether	٪٩٩,٨	Scharlo/ Spanish
٣	Bromine	٪٩٨	Sigma Aldrich/ Germany

٤	Selenium metal	٪٩٩	Sigma Aldrich/ Germany
٥	Sodium cyanide	٪٩٧	Fluka / England
٦	Iodine	٪٩٩	Romil / England
٧	Ethanol absolute	٪٩٩,٩	Romil / England
٨	Hydrochloric acid	٪٣٧	Scharlo/ Spanish
٩	n- Hexane	٪٩٩	Scharlo/ Spanish
١٠	Thionyl chloride	٪٩٨	Sigma Aldrich/ Germany
١١	Methanol absolute	٪٩٩,٩	Romil / England
١٢	THF	٪٩٩	Sigma Aldrich/ Germany

*** B.D.H:British Drug House**

٢-٢- الاجهزة المستخدمة :

تم استخدام الاجهزة الآتية في اكمال متطلبات هذه الدراسة:

٢-٢-٢- جهاز مطياف الاشعة تحت الحمراء

Infrared spectrophotometer :-

تم تسجيل أطياف FT-IR للمركبات المحضرة ضمن المدى ($500\text{-}4000 cm^{-1}$) باستخدام جهاز من نوع (Bruker) وبتقنية اقراص (KBr) في جامعة ذي قار/ قسم الكيمياء- كلية العلوم .

٢-٢-١- جهاز قياس درجة الانصهار Melting point :-

تم قياس درجة الانصهار للمركبات المحضرة باستخدام جهاز من نوع Melting point SMP31/ في جامعة ذي قار / كلية العلوم - قسم الكيمياء .

٢-٢-٣- جهاز مطيافية الرنين النووي المغناطيسي للبروتون:-

(Nuclear Magnetic Resonance spectrometer (^{1}H NMR):-

سجلت أطياف الرنين النووي المغناطيسي ^{1}H NMR للمركبات المحضرة بواسطة جهازمن نوع (Bruker AVANCE-DRX 300MHZ) باستخدام المذيب DMSO في جامعة طهران/ايران .

٢-٢-٤- جهاز مطيافية الكتلة (MASS) :-

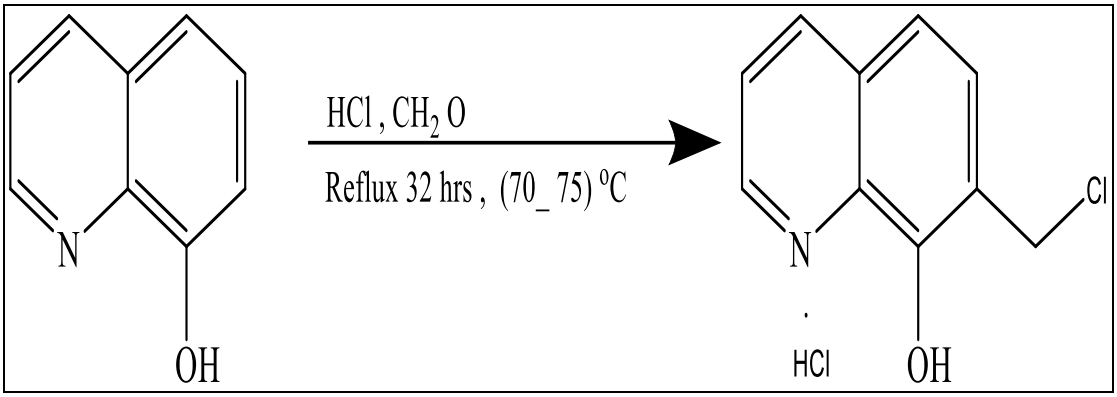
تم تسجيل اطياف الكتلة للمركبات المحضرة بواسطة جهاز من (triple quad LC/MS 6410, agilent) في جامعة طهران /ايران.

٢-٣- تحضير المركبات :

٢-٣-١- تحضير المركب 7-chloromethylene-8-hydroxyqunoline hydrochloride

يذاب(0.006mol , 0.9gm) من ٨_هيدروكسي كوينولين في (1ml)من حامض الهيدروكلوريك المركز مع التحريك المستمر حتى ذوبان المادة بشكل تام بعدها يتم اضافة (1ml)من الفورمالديهايد واستمرارية التحريك لمدة ثلاث ساعات مع اضافة ثلاث قطرات من حامض الهيدروكلوريك كل (15) دقيقة بعد اكتمال الوقت يحرك باستمرار مع (reflex) لمدة(32) ساعة بعد كل(8) ساعات يضاف (5ml) من حامض الهيدروكلوريك المركز وبدرجة حرارة (70 ^{o}C) نلاحظ تكون بلورات صفراء اللون براقة بعدها يرشح المحلول ومن ثم

الحصول على الراسب ثم يتم غسله بكمية من حامض الهيدروكلوريك للتخلص من الشوائب وحصيلة التفاعل مقدارها(85%) , الوزن الناتج (0.99gm) ودرجة انصهار (278-280 °C)[٥٧].كما موضح في المعادلة ادناه.



معادلة (٢-١) تحضير المركب

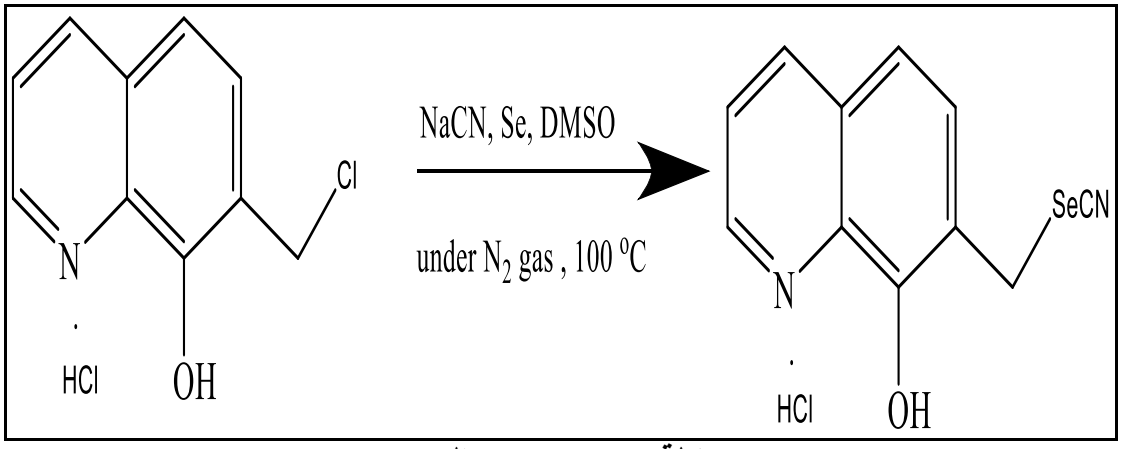
7-chloromethylene-8-hydroxyqunoline hydrochloride

٢-٣-٢- تحضير المركبC1

7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride

اضافة (0.44gm , 0.0056mol) من السيلينيوم الى (0.27gm , 0.0055mol) من سيانيد الصوديوم ثم اذابتهما معا في (15ml)من ثنائي ميثيل سلفوكساید (DMSO) المقطر حديثا, يحرك المزيج لمدة ساعة واحدة وبدرجة حرارة(100 °C) بوجود النتروجين(N_2) كغاز خامل. بعدها يضاف (15ml)من (DMSO) للمزيج الساخن ثم يترك ليبرد بدرجة حرارة المختبر فيتغير لونه الى الاصفر الباهت, يضاف له (0.95gm ,0.0056mol)من-7 chloromethylene-8-hydroxyqunoline hydrochloride ويصعد ارجاعيا بوجود (N_2) لساعتين وبحرارة(١٠٠°C) وتم مراقبة التفاعل بTLC ثم يرشح المحلول وهو ساخن ثم يبرد ويسكب في (300ml) من الماء المقطر البارد فتتكون بلورات صفراء نرشح المحلول ثم

نغسله بالإيثانول فكانت حصيلة التفاعل (60%),الوزن الناتج (0.99gm)ودرجة انصهار (178-180 °C) كما موضح في المعادلة ادناه .



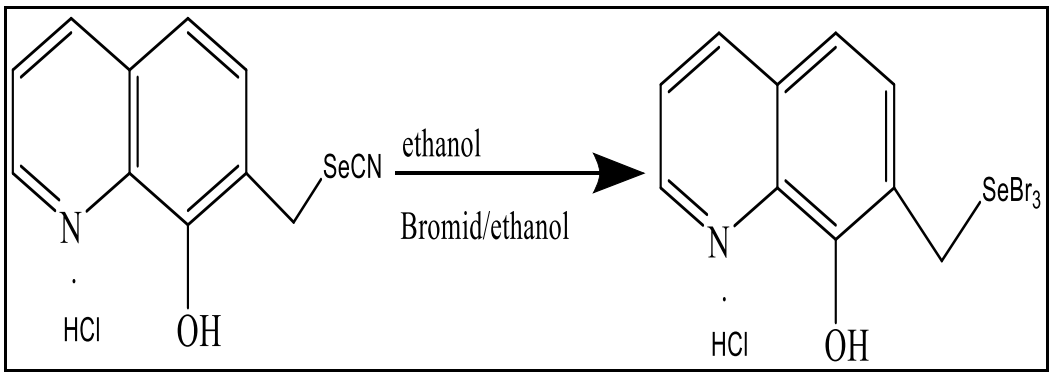
معادلة (٢-٢) تحضير المركب

7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride

٢-٣-٣- تحضير المركبC2

7-methylene selenium tri bromoid-8-hydroxyquinoline hydrochloride

اذيب (0.002mol , 0.5gm)من مركب 7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride في (50ml)من الايثانول المطلق ثم اضيف له (5ml) من البروم المذاب في(15ml) من الايثانول المطلق ببطء مع التحريك المستمر فنلاحظ تكون بلورات اثناء الاضافة نترك المزيج لمدة ساعة واحدة في درجة حرارة المختبر وتم مراقبة التفاعل بTLC, ثم نرشح المحلول ونغسل الراسب بالإيثانول المطلق بعدها يجفف وتعاد بلورته بواسطة مزيج من الكحول الاثيلي والكلوروفورم (1:1) فنحصل على بلورات صفراء اللون وبحصيلة (48%),الوزن الناتج (0.25gm) ودرجة انصهار (213-215 °C) كما في المعادلة ادناه .



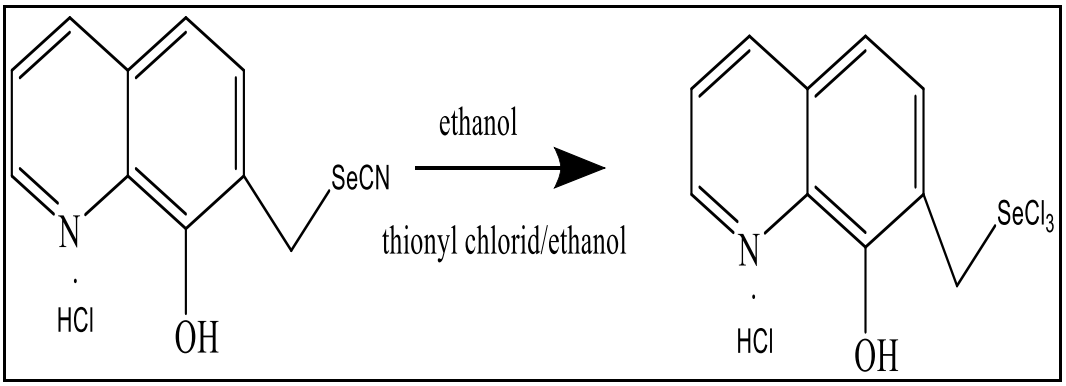
معادلة (٢-٣) تحضير المركب

7-methylene selenium tri bromoid-8-hydroxyquinoline hydrochloride

تحضير المركب C3

7-methylene selenium trichlorid-8-hydroxyquinoline hydrochloride

يذاب (0.002mol , 0.5gm) من مركب 7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride في (50ml) من الايثانول المطلق ثم يضاف له (5ml) من كلوريد الثايونيل المذاب في (15ml) من الايثانول المطلق بشكل دفعات صغيرة مع التحريك المستمر لمدة ساعة واحة وتم مراقبة التفاعل بTLC ولحين تغير لون السلينوسيانات من الاصفر الى اللون البرتقالي نبخر المذيب ونجمع الراسب ثم نجففه وتعاد بلورته بواسطة مزيج من الكحول الاثيلي والكلوروفورم (1:1) فنحصل على بلورات ذات لون برتقالي وبحصيلة مقدارها (52%),الوزن الناتج (0.2gm) ودرجة انصهار (198-200 °C) كما في المعادلة ادناه .



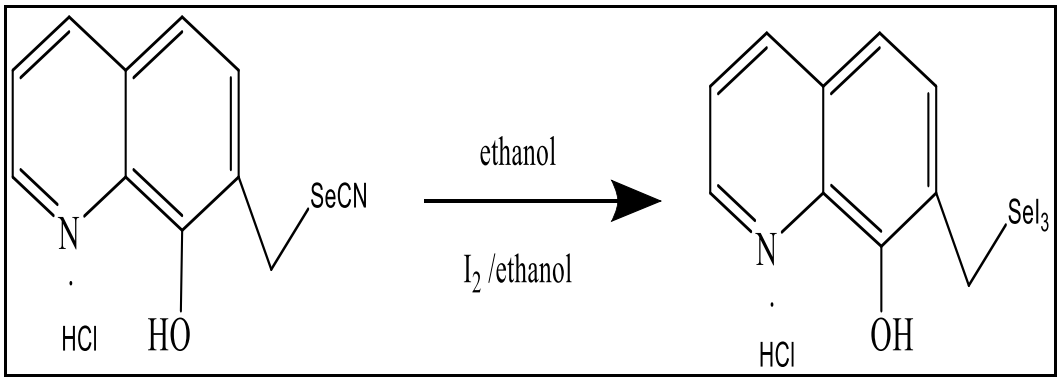
معادلة(٢-٤) تحضير المركب

7-methyleneselenium trichloride-8-hydroxyquinoline hydrochloride

٢-٣-٥- تحضير المركبC4

7-methylene selenium tri iodide-8-hydroxyquinoline hydrochloride

يذاب (0.002 mole , 0.5gm) من مركب 7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride في(50ml) من الايثانول المطلق ثم يتم اضافة اليود بمقدار(0.5gm)المذاب في(15ml)من الايثانول المطلق بشكل دفعات متقطعة مع التحريك المستمر لمدة ساعة واحدة وتم مراقبة التفاعل ب TLC. فنلاحظ تكون راسب احمر نبخر المذيب ثم نجفف الراسب وتعاد بلورته باستخدام مزيج من الميثانول وثنائي كلوريد الميثان (2:3) بعد التجفيف نحصل على بلورات حمراء اللون وبحصيلة مقدارها (30%),الوزن الناتج (0.2gm) ودرجة انصهار (179-181 ^{o}C) كما في المعادلة ادناه .



معادلة (٢-٥) تحضير المركب

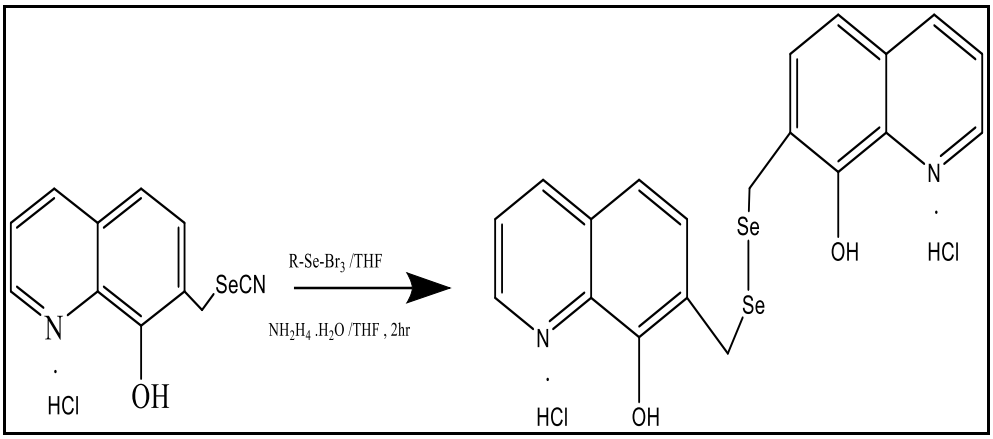
7-methylene selenium tri iodide-8-hydroxyquinoline hydrochloride

٢-٣-٦- تحضير المركبC5

Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)diselenide hydrochloride

يذاب (0.002mol , 0.5gm) من مركب 7-methylene seleno tri bromoid-8-hydroxyquinoline hydrochloride ($RSeBr_3$) في (15ml) من الايثانول ويسخن في حمام مائي بدرجة حرارة (50 ^{o}C) ثم يضاف له (7 قطرات) من محلول (0.05gm , 0.001m)الهيدرازين المائي في (10ml)من الايثانول المطلق ويحرك المزيج لمدة ساعتين وتم

مراقبة التفاعل ب TLC ثم نلاحظ تكون بلورات لونها بني محمر بحصيلة تفاعل (54%) , الوزن الناتج (0.3gm) ودرجة انصهار مقدارها (183-185 ^{o}C) كما في المعادلة ادناه .



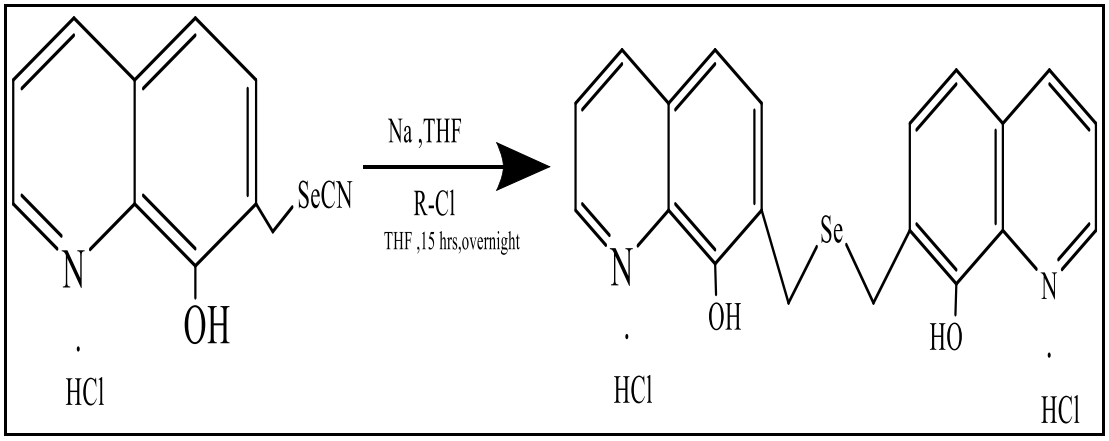
معادلة(٢-٦) تحضير مركب

Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)diselenide hydrochloride

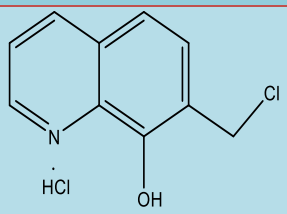
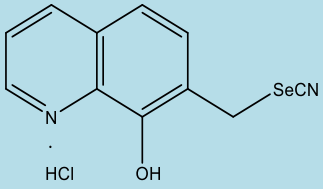
تحضير المركب C6

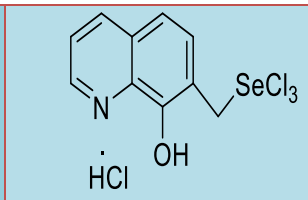
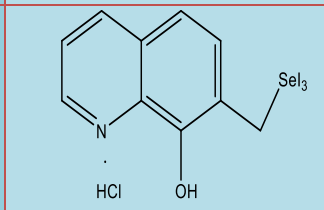
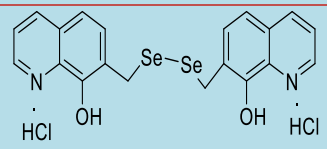
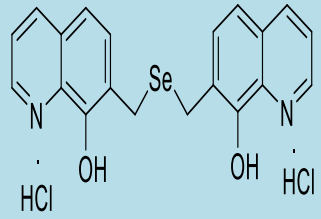
Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)selenide hydrochloride

يذاب (0.01mole , 0.23gm)من الصوديوم (يقطع قطع صغيرة وتزال الطبقة الرمادية عليه بحيث يكون سطحه لامعا براقا) في 15مل من رباعي هيدروفيوران في جو خامل من النتروجين ويحرك المزيج الى ان نلاحظ اختفاء الصوديوم من التفاعل ثم نضيف اليه ببطء (0.002mole , 0.5gm) من 7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride المذاب في (15ml) من THF وتتم الاضافة عن طريق (قمع الاضافة) عندما يكتمل التفاعل نبدأ بإضافة (0.9gm , 0.006mole) من 7-chloromethylene-8-hydroxyqunoline hydrochloride المذاب (15ml) منTHF ويحرك المزيج لمدة نصف ساعة وبدرجة حرارة الغرفة ثم يترك لمدة (15hr) في مكان بعيد عن الضوء وتم مراقبة التفاعل ب TLC, بعدها نلاحظ تكون راسب ذو لون احمر نقوم بترشيحه وجمع الراسب وغسله بمذيب مناسب مثل الايثانول المطلق ثم نجففه نلاحظ تغير لونه الى الاخضر وبحصيلة مقدارها (42%) ,الوزن الناتج (0.2gm) ودرجة انصهار (176-178 ^{o}C) كما في المعادلة ادناه .



معادلة(٢-٧) تحضير المركب Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)selenide hydrochloride

المركب	الصيغة التركيبية	الوزن الجزيئي	اللون	درجة الانصهار	الحصيلة
C		193.63	اصفر-براق	278-280D	85%
C1		263.16	اصفر شاحب	173-175D	60%
C2		476.85	برتقالي – مصفر	213-215D	48%

C3		343.49	برتقالي	198-200D	52%
C4		617.8	احمر	179-181D	30%
C5		474.28	بني-محمر	183-185D	54%
C6		395.32	اخضر	176-178D	42%

*** D: Decompose**

جدول رقم (٢ -٢) الاوزان الجزيئية وبعض الخصائص الفيزيائية للمركبات المحضرة

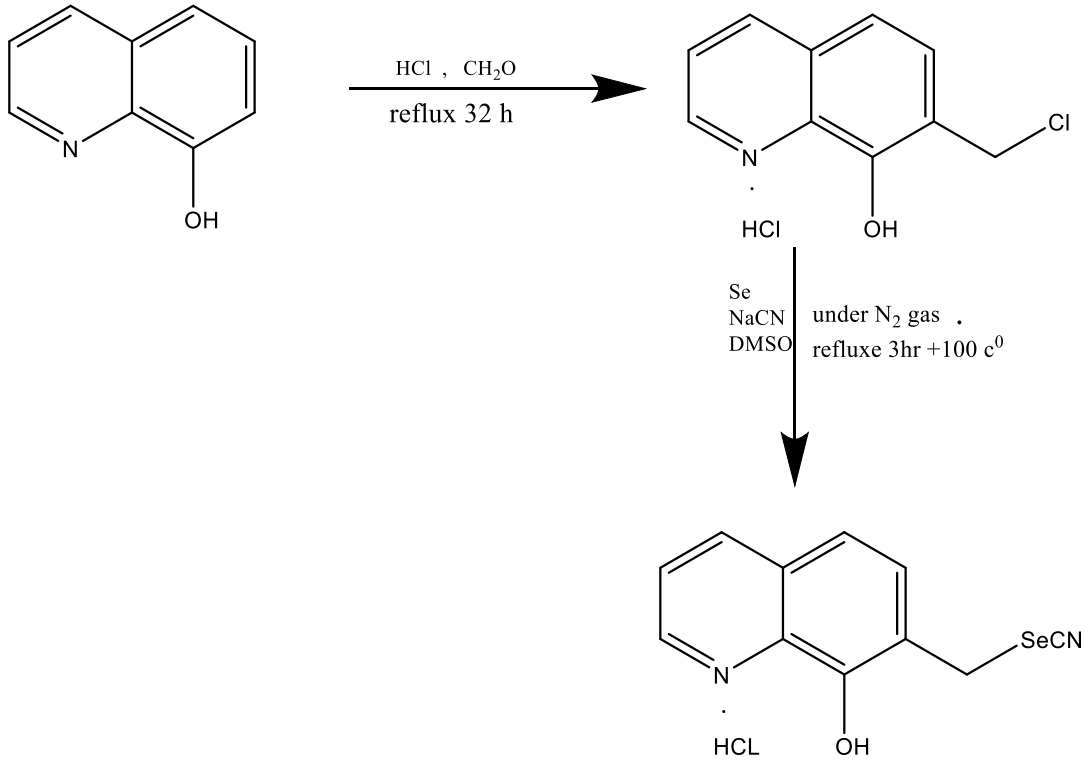
٣-١- مقدمة Introduction

في هذه الدراسة تم تحضير مركب عضوي للسلينوسيانيت هو 7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride والناتج من مفاعلة مولات متساوية بنسبة (١:١) من سلينوسيانيت الصوديوم (الناتج من تفاعل عنصر السلينيوم مع سيانيد الصوديوم في ثنائي مثيل السلفوكسايد تحت جو من النتروجين الخامل). و كان ناتج التفاعل مادة صلبة ذات لون اصفر شاحب ثم تم ادخال هذا المركب بسلسلة تفاعلات مختلفة هي :

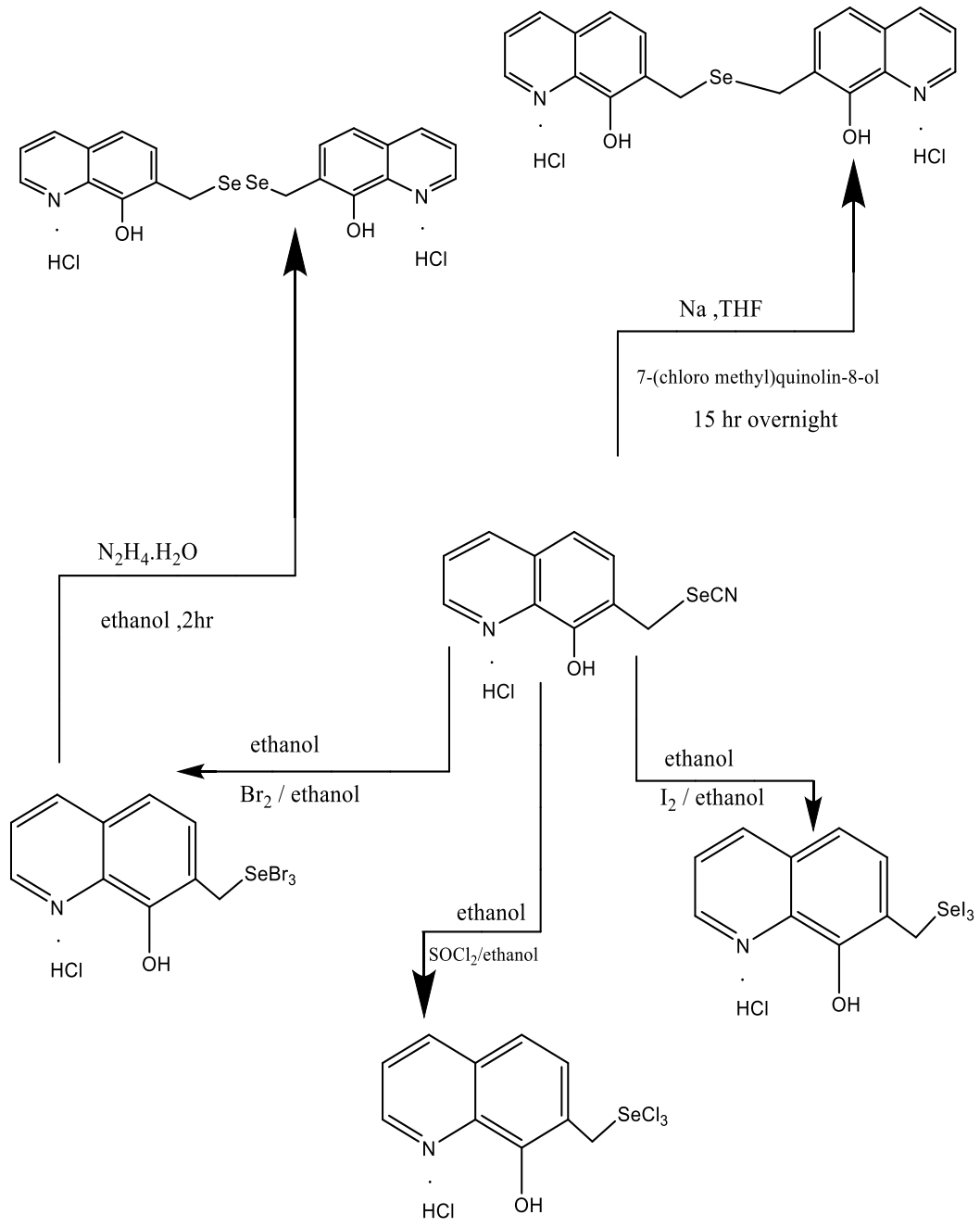
١- الحصول على مشتقات ثلاثي هاليد من خلال مفاعلة المركب الاساس اعلاه مع البروم وكلوريد الثايونيل واليود.

٢- تحضير ثنائي عضوي ثنائي سلينايد المشتق من ناتج تفاعل Chloromethylation للمركب العضوي ٨- هيدروكسي كوينولين.

٣- تحضير ثنائي عضوي سلينايد المشتق من ناتج تفاعل Chloromethylation للمركب العضوي ٨- هيدروكسي كوينولين, كما موضح في المخططات ادناه:



مخطط (٣-١) تحضير المركب 7-(selenocyanato methyl)quinolin-8-ol



مخطط (٣-٢) تحضير مركبات السلينيوم العضوية

٣-٢- تشخيص مركبات السلينيوم Se المحضرة :

تم تشخيص هذه المركبات المحضرة اعتمادا على نتائج طيف الاشعة تحت الحمراء (FT-IR)
, طيف الرنين النووي المغناطيسي للبروتون(^1H NMR) , طيف الكتلة (MASS)

٣-٢-١- طيف الاشعة تحت الحمراء FT-IR

تعد تقنية طيف الاشعة تحت الحمراء من التقنيات المهمة في تشخيص المركبات من خلال تحديد المواقع للمجاميع الفعالة وتردداتها الاهتزازية التي تعطي اعداداً موجية محددة تؤكد وجود هذه المجاميع في المركب المقترح وتشخيصه .

٣-٢-١-١- طيف المركبC1

7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride

اظهر طيف الاشعة تحت الحمراء مجموعة من الحزم التشخيصية وهي ظهور حزمة واضحة عند (3359 cm^{-1}). تعود الى اهتزاز المط لأصرة O-H الفينولية ، اما الاصرة C–H الاروماتية فتظهر حزمة عند (3059 cm^{-1}) , واصرة C–H الاليفاتية فتظهر حزمة عند(2919 cm^{-1}) , وظهور حزمة واضحة وحادة عند (2062 cm^{-1}) تعود للآصرة C≡N , في حين تظهر مجموعة C=Nحزمة واضحة جداً عند (1647 cm^{-1}) ، وظهور حزمة CH=CH التي تشير للحلقة الاروماتية عند (1549 cm^{-1}). الجدول رقم (٣-١) يظهر حزم امتصاص تحت الحمراء وان الشكل رقم (٣-١) يظهر طيف FT-IR للمركب .

شكل (٣-١) طيفFT-IR للمركب 7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride

٣-٢-١-٢- طيف المركب C2

7-methylene selenium tri bromoid-8-hydroxyquinoline hydrochloride

اظهر طيف تحت الحمراء حزمة واضحة عند (3353 cm^{-1}) تعود الى مجموعة OH الاروماتية ، اما الاصرة C-H الاروماتية فتظهر حزمتها عند (3008cm^{-1}), وتظهر حزمة الاصرة C-H الاليفاتية حزم عند (2925 cm^{-1}) ، وظهور حزمة عند (1618cm^{-1}) تعود الى C=N الاروماتية الموجودة ضمن الحلقة، وظهور حزمة عائدة للآصرة CH=CH عند (1588cm^{-1}) . الجدول رقم (٣-١) يظهر حزم امتصاص تحت الحمراء وان الشكل رقم (٣-٢) يظهر طيف تحت الحمراء للمركب .

شكل (٣-٢) طيف FT-IR للمركب 7-methylene selenium tri bromoid-8-hydroxyquinoline hydrochloride

٣-٢-١-٣- طيف المركب C3

7-methylene selenium tri chlorid-8-hydroxyquinoline hydrochloride

اظهر الطيف العديد من الحزم منها ظهور حزمة OH الفينولية عند (3353 cm^{-1}) اما حزمة الاصرة C-H الاروماتية فتظهر عند ($3005cm^{-1}$) , ظهور حزمة اخرى في المنطقة ($2918cm^{-1}$) تشير الى مجموعة C-H الاليفاتية , وظهور حزمة في المنطقة ($1607cm^{-1}$) تعود الى مجموعه C=N الاروماتية, اما حزمة CH = CH فتظهر عند (1547 cm^{-1}) . الجدول رقم (٣-١) يظهر حزم امتصاص تحت الحمراء وان الشكل رقم (٣-٣) يظهر طيف تحت الحمراء للمركب .

شكل (٣-٣) طيف FT-IR للمركب

7-methylene selenium tri chlorid-8-hydroxyquinoline hydrochloride

٣-٢-١-٤- طيف المركب C4

7-methylene selenium tri iodide-8-hydroxyquinoline hydrochloride

اظهر طيف FT-IR حزمة عند (3328 cm^{-1}) تعود الى مجموعة OH الفينولية , وظهرت حزمة عند (3054cm^{-1}) تعود الى اصرة C-H الاروماتية .كما ظهرت حزمة المجموعة C=N عند الموقع (1653cm^{-1}) بينما ظهرت حزمة الاصرة HC=CH عند (1586cm^{-1}) . الجدول رقم (٣-١) يظهر حزم امتصاص الاشعة تحت الحمراء وان الشكل رقم (٣-٤) يظهر طيف تحت الحمراء للمركب .

شكل (٣-٤) طيفFT-IR للمركب-7-methylene selenium tri iodide-8-hydroxyquinoline hydrochloride

٣-٢-١-٥- طيف المركب C5

Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)diselenide hydrochloride

اظهر الطيف مجموعة من الحزم منها ظهور حزمة عند (3242 cm^{-1}). تعود الى مجموعة OH الفينولية, وحزمة عند(3133-3034 cm^{-1}) عائدة الى اصرة C-H الاروماتية وظهور حزمة عند (2969 cm^{-1}) تعود الى اصرة C-H الاليفاتية , , وظهور حزمة عند (1498 cm^{-1}) تعود الى مجموعة CH=CH, كما تظهر حزمة عند (1562cm^{-1}) تعود الى مجموعة C=N الاروماتية. الجدول رقم (٣-١) يظهر حزم امتصاص تحت الحمراء وان الشكل رقم (٣-٥) يظهر طيف تحت الحمراء للمركب .

شكل (٣-٥) طيف FT-IR للمركب

Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)diselenide hydrochloride

٣-٢-١-٦- طيف المركب

Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)selenide hydrochloride

اظهر طيف الاشعة تحت الحمراء لهذا المركب العديد من الحزم التشخيصية وهي ظهور حزمة عند ($3338cm^{-1}$) تعود الى مجموعة OH الفينولية , وظهور حزمة عند ($3063\ cm^{-1}$) تشير الى مجموعة C-H الاروماتية وظهور حزمة عند المدى ($2912\ cm^{-1}$) تعود الى مجموعة C-H الاليفاتية, ظهور حزمة عند ($1642cm^{-1}$) تشير الى مجموعة C=N الموجودة ضمن الحلقة الاروماتية. الجدول رقم (٣-١) يظهر حزم امتصاص طيف تحت الحمراء وان الشكل رقم (٣-٦) يبين طيف تحت الحمراء للمركب.

شكل (٣-٦) طيفFT-IR للمركب

Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)selenide hydrochloride

No	OH الفينولية Cm^{-1}	C-H الاروماتية Cm^{-1}	C-H الاليفاتية Cm^{-1}	C≡N Cm^{-1}	C=N الاروماتية Cm^{-1}	C =C الاروماتية Cm^{-1}
C1	3359	3059	2919	2062	1647	1549
C2	3353	3008	2925	_	1618	1588
C3	3353	3005	2918	_	1607	1547
C4	3328	3054	_	_	1653	1586
C5	3242	3133	2969	_	1630	1562
C6	3338	3063	2912	_	1642	1586

جدول (٣-١) حزم امتصاص اطياف الأشعة تحت الحمراء للمركبات المحضرة

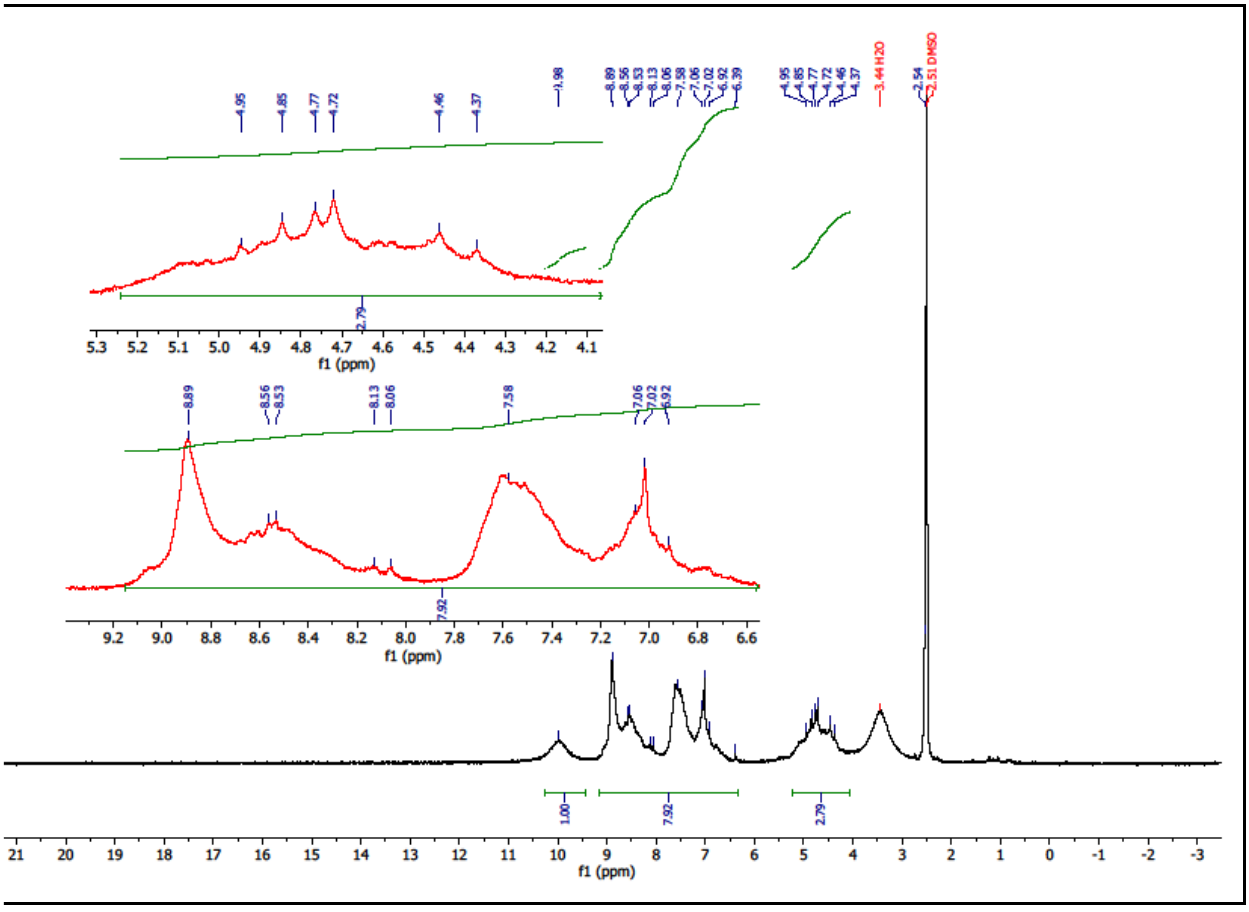
٣-٢-٢- اطياف الرنين النووي المغناطيسي للبروتون ^1H NMR :-

تعد قياسات طيف الرنين النووي المغناطيسي ^1H NMR احد التقنيات المهمة في تشخيص التركيب من خلال الاستدلال على موقع البروتونات الموجودة ضمن المركب, وتم استخدام مذيب $DMSO-d_6$ في اكمال قياسات طيف الرنين النووي المغناطيسي.

٣-٢-٢-١- طيف المركبC1

7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride

اظهر طيف ^1H NMR إشارة متعددة عند (4.72ppm) تعود الى CH_2 المجاورة لذرة السيلينيوم. وظهرت بروتونات المنطقة الاروماتية حزمة متعددة ضمن ازاحة تمتد من (8.89- 6.92 ppm). و تظهر حزمة احادية عند (9.98 ppm) تعود الى مجموعة الهيدروكسيد (OH) الفينولية . كما في الشكل(٣-٧) الجدول(٣-٣).



شكل (٣-٧) طيف ^1H NMR للمركب 7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride

٣-٢-٢-٢ طيف المركب C2

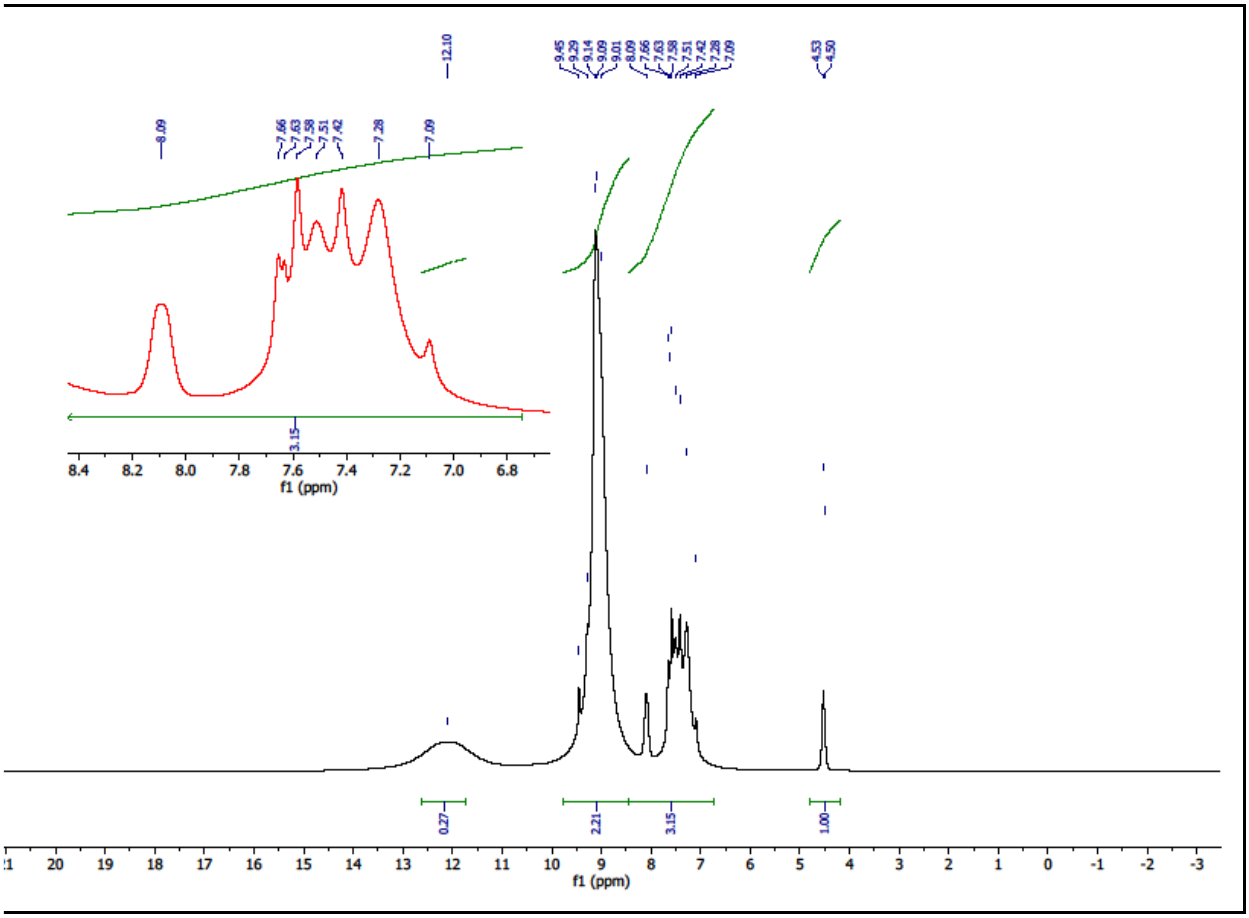
7-methylene selenium tri bromoid-8-hydroxyquinoline hydrochloride

اظهر طيف الرنين النووي المغناطيسي اشارة متعددة عند (4.69 ppm) تعود الى مجموعة CH_2 المجاورة لذرة السيلينيوم . اشارات المنطقة الاروماتية ذات حزمة متعددة تمتد بين (8.86-6.87 ppm) . ظهور حزمة احادية عند (9.58 ppm) تعود الى مجموعة OH الفينولية . ويمكن ملاحظة حزم الطيف في الجدول (٣-٣).

٣-٢-٢-٣- طيف المركب C3

7-methylene selenium tri chlorid-8-hydroxyquinoline hydrochloride

اظهر طيف ^1H NMR اشارة ثلاثية عند (4.80 ppm)عائدة لـ CH_2 المجاورة لذرة السيلينيوم . وظهور مجموعة من الحزم المتعددة عند ازاحة تمتد بين (8.95-7.12 ppm) عائدة الى المنطقة الاروماتية .اما بروتون الهيدروكسيد(OH الفينولية) فيظهر اشارة احادية عند المدى (10.42ppm). والشكل رقم (٣ –٩) والجدول (٣-٣) يوضح حزم الطيف للمركب اعلاه.

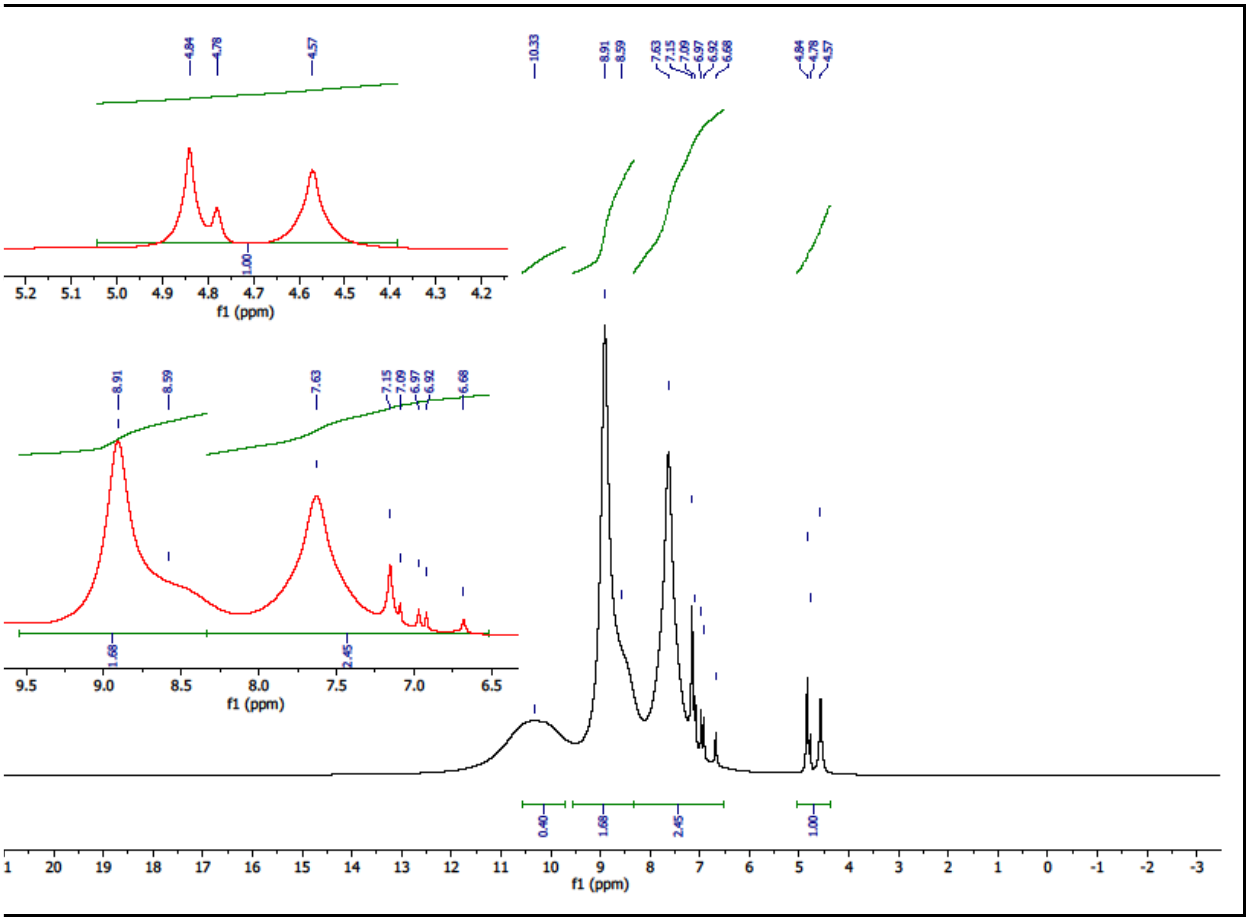


شكل (٣ - ٨) ^{1}H NMR للمركب 7-methylene selenium tri chlorid-8-hydroxyquinoline hydrochloride

٣-٢-٢-٤- طيف المركبC4

7-methylene selenium tri iodide-8-hydroxyquinoline hydrochloride

اظهر طيف ^{1}H NMR اشارات متعددة منها اشارة ثنائية-ثنائية عند (4.94 ppm) وبتكامل بروتونين تعود الى مجموعة CH_2 المجاورة لذرة السيلينيوم , وظهور حزم متعددة تعود للمجموعة الاروماتية التي تمتد ما بين (9.17-7.00 ppm). ظهرت حزمة احادية عند الازاحة (10.09ppm) تعود الى مجموعة (OH) الفينولية . والشكل (٣ –١٠) والجدول (٣-٣) يوضح طيف المركب اعلاه .

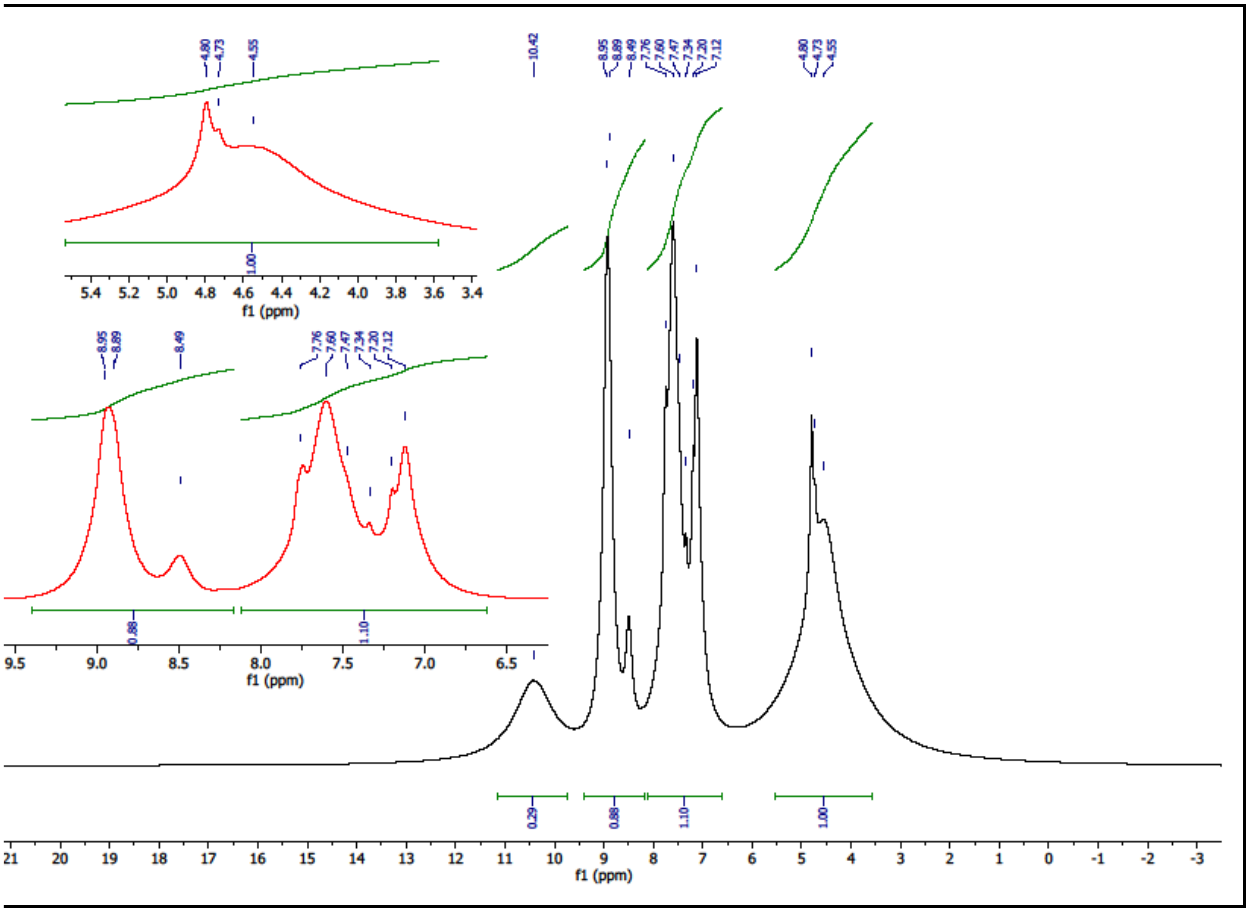


شكل (٣ -٩) طيف ^1H NMR للمركب 7-methylene selenium tri iodide-8-hydroxyquinoline hydrochloride

٣-٢-٢-٥- طيف المركب C5

Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)diselenide hydrochloride

اظهر طيف الرنين النووي المغناطيسي مجموعة من الاشارات وبإزاحات مختلفة منها ظهور اشارة متعددة عند (4.53ppm) تعود الى مجموعتي CH_2 المتناظرتين والمجاورتين لذرة السيلينيوم .واظهر الطيف ايضا مجموعة من حزم المنطقة الاروماتية المتعددة تمتد بين (8.98-7.09 ppm) عائدة للمجموعتين الحلقيتين المتناظرتين . اما مجموعتي OH الفينولية فتظهر لها اشارة (عريضة) احادية عند (12.10 ppm).ويمكن ملاحظة حزم الطيف في الشكل رقم (٣ – ١١) والجدول (٣-٣).

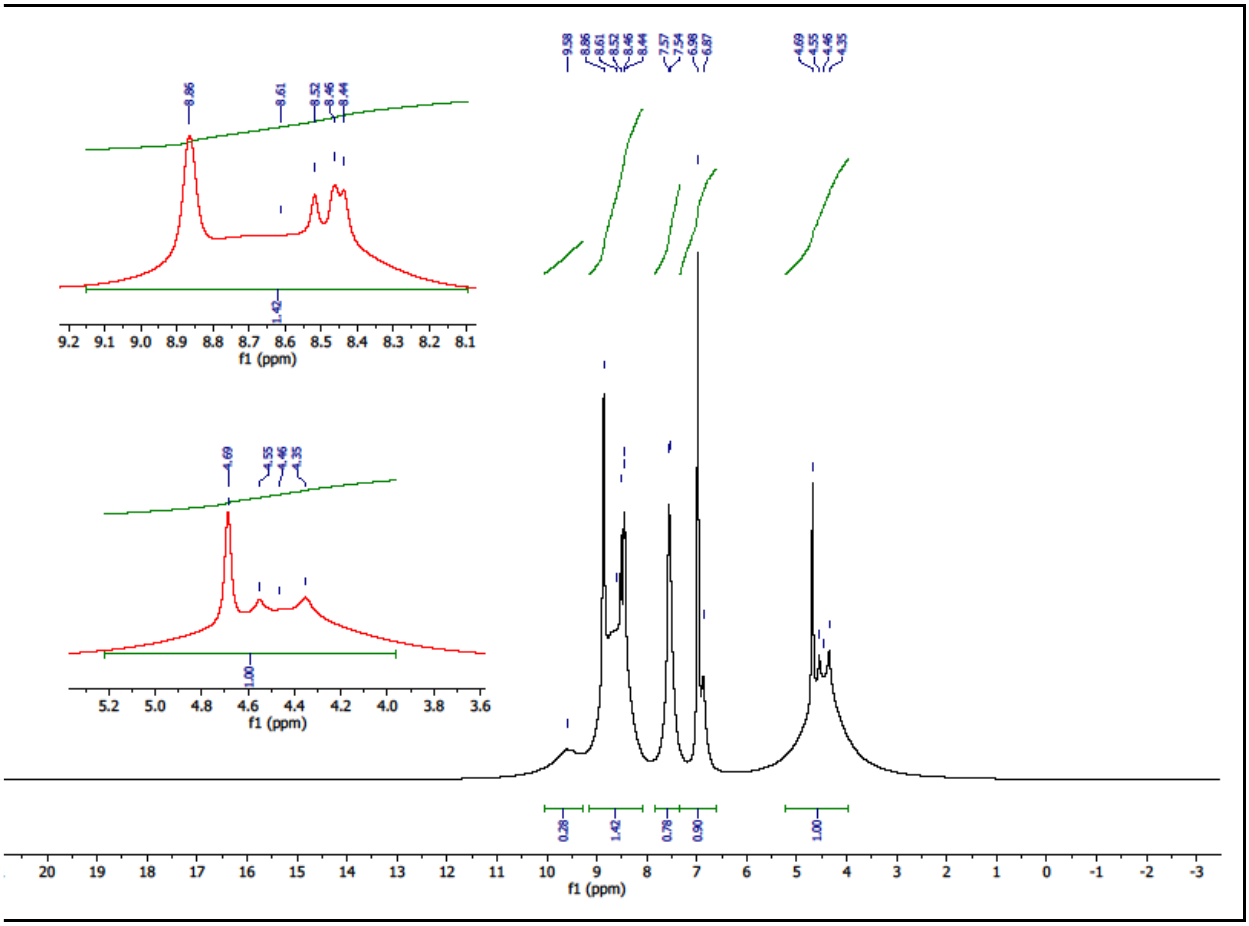


شكل (٣-١٠) طيف ^{1}H NMR للمركب Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)diselenide hydrochloride

٣-٢-٢-٦- طيف المركبC6

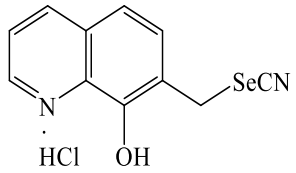
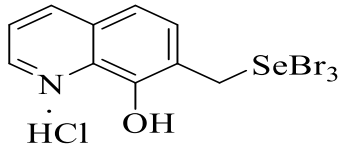
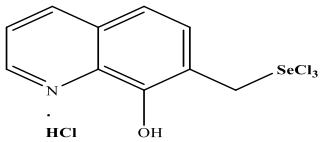
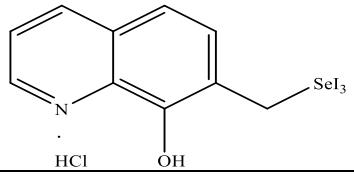
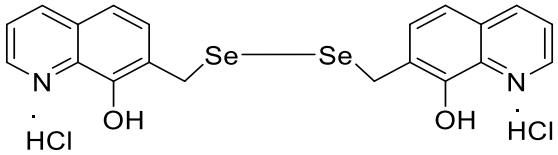
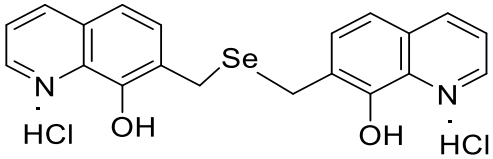
Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)selenide hydrochloride

اثبت طيف ^{1}H NMR ظهور حزمة متعددة في المنطقة (4.57 ppm) عائدة الى مجموعتي CH_2 المتناظرة والمجاورتين لذرة السيلينيوم .وظهور حزم متعددة تمتد من (8.91-6.68 ppm) عائدة للمجموعتين الحلقيتين المتناظرتين , وظهور حزمة احادية عند ازاحة (10.33ppm) عائدة الى مجموعتي الهيدروكسيد (OH) الفينولية . ويمكن ملاحظة الطيف في الشكل رقم (٣-١٢) والجدول(٣-٣).



شكل (٣ –١١) طيف ^{1}H NMR للمركب

Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)selenide hydrochloride

المركب	الصيغة التركيبية	^{1}HNMR حزم طيف
C1		4.72 (m,2H,CH_2) , 6.92-8.89 (m,5H,Ar-H) , 9.98 (s, 1H,OH)
C2		4.8 (m,2H,CH_2) , 9.17-7.00 (m, 5H,Ar-H), 10.09 (s , 1H,OH)
C3		4.53 (s, 2H,CH_2), 7.09-9.45 (m,5H,Ar-H),12.10 (s,1H,OH)
C4		4.57 (m,2H ,CH_2), 6.92-8.91 (m,5H,Ar-H), 10.33 (s,1H,OH)
C5		4.8 (m,4H,CH_2) , 7.12-8.89 (m ,10H,Ar-H), 10.42 (s,2H,OH)
C6		4.5(m,4H,CH_2) , 6.87-8.86 (m,10H,Ar-H) , 9.58 (s,2H,OH)

جدول رقم (٣-٢) حزم طيف ^{1}H NMR للمركبات المحضرة

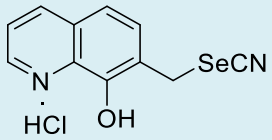
٣-٢-٣- اطياف الكتلة (Mass):

يعطي طيف الكتلة (Mass) دلائل توضح صيغ المركبات المحضرة من خلال ملاحظة الوزن الجزيئي للأيون الاساس (الايون الام) بالإضافة الى ملاحظة الحزم الاساس ذات الذروة العالية والتي تشير الى الاستقرارية العالية للجزيء المتشظي ووجود حزم اخرى يعطي تصورا عن الصيغة التركيبية للمركبات واحتمالية تكون الايونات التي تعتمد على قواعد التجزؤ .

٣-٢-٣-١- طيف المركب C1

7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride

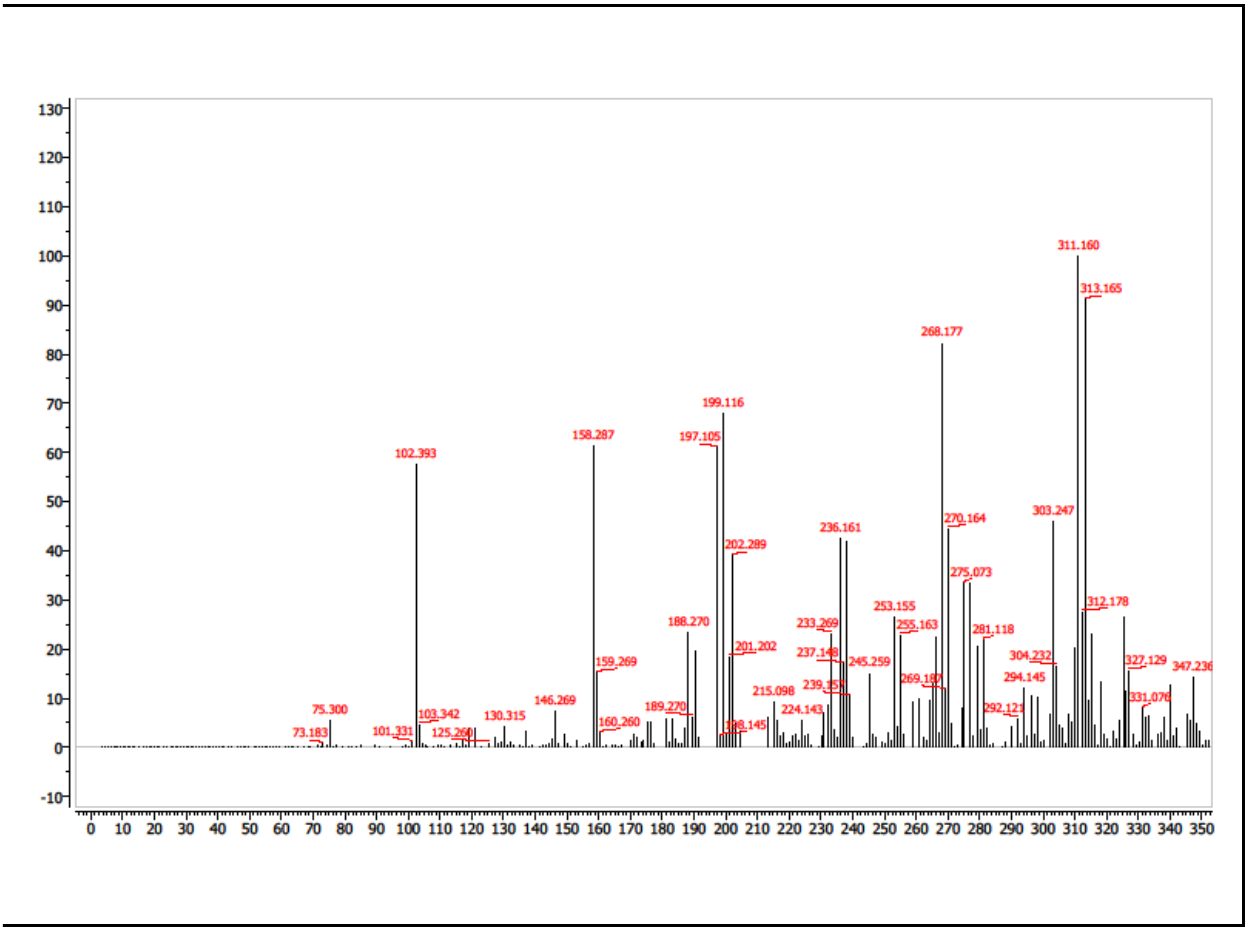
اظهر طيف الكتلة للمركب اعلاه حزمة الايون الام عند (268 m/z) والتي تشير الى الوزن الجزيئي للمركب الناتج , كما اظهر الطيف الحزمة الأساس ذات الوفرة النسبية العالية عند (199 m/z) تعود للمجموعة $[C_8H_{11}NSe]^{+\cdot}$ وحزمة ذات وفرة جيدة عند (158m/z) تشير للمجموعة $[C_{10}H_9NO]^{+\cdot}$, واظهر الطيف حزما اخرى يمكن ملاحظتها من خلال الجدول رقم (٣-٣) ويمكن توضيح ميكانيكية تكسير المركب من خلال المخطط رقم (٣ -٣) وشكل الطيف يمكن ملاحظته من خلال الشكل رقم (٣ - ١٣) .



7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride

الصيغة الجزيئية	m/z	الصيغة الجزيئية	m/z
$C_{11}H_8N_2OSe$	**268**	$[C_9H_7NO]^{\cdot+}$	**146**
$[C_{10}H_8NOSe]^{\cdot+}$	**236**	$[C_7H_7N]^{\cdot+}$	**102**
$[C_{10}H_9NO]^{\cdot+}$	**158**	$[C_8H_{11}NSe]^{\cdot+}$	**199**

جدول رقم (٣-٣) اهم قمم انشطارات المركب 7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride



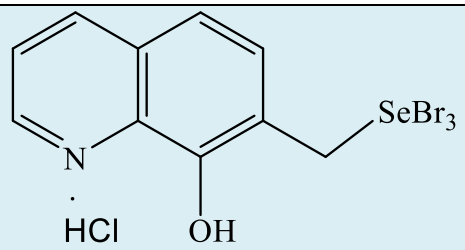
شكل (٣-١٢) طيف الكتلة للمركب

7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride

٣-٢-٣-٢- طيف المركبC2

7-methylene selenium tri bromoid-8-hydroxyquinoline hydrochloride

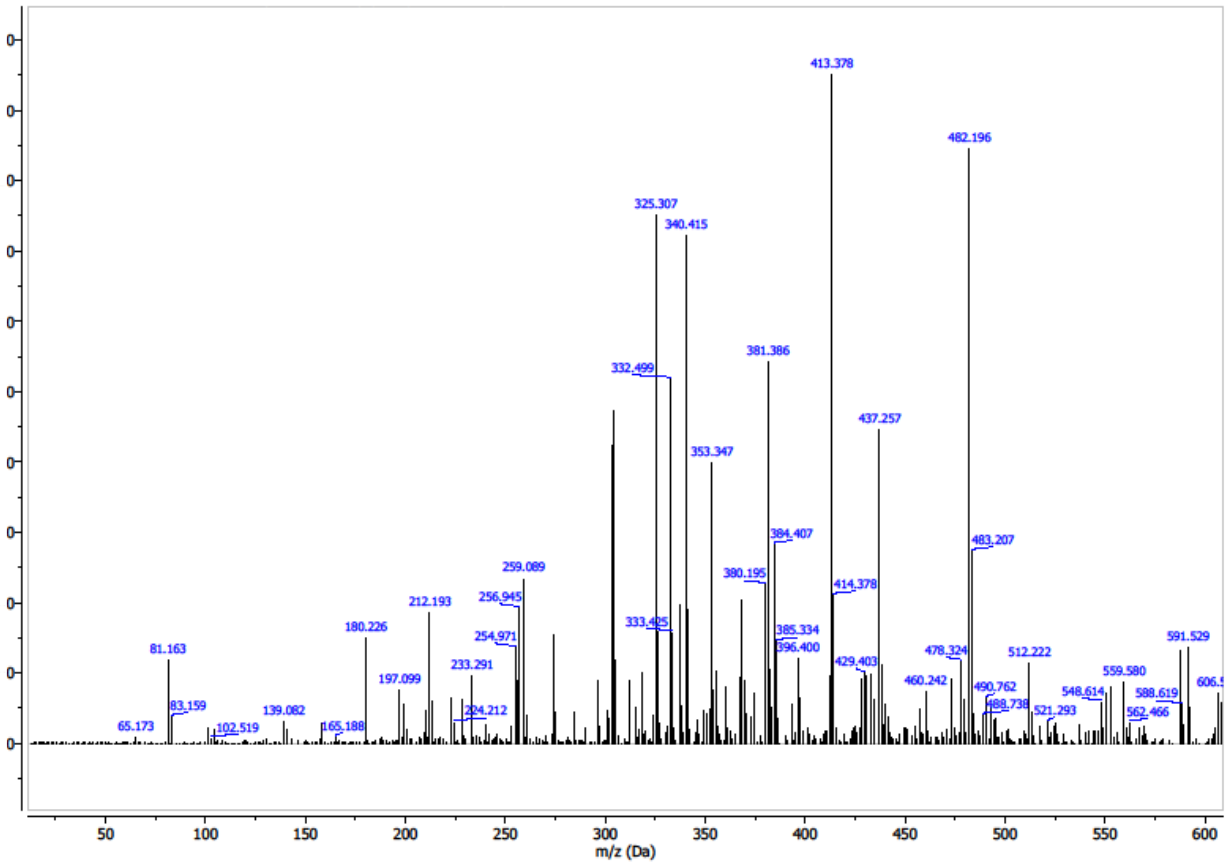
اظهر طيف الكتلة للمركب اعلاه حزمة الايون الام عند (478m/z) والتي تشير الى الوزن الجزيئي للمركب الناتج , كما واظهر الطيف الحزمة الأساس ذات الوفرة النسبية العالية عند (413 m/z) تعود للمجموعة $[C_7H_{11}Br_3Se]^{+\cdot}$ بالإضافة الى حزمة ذات وفرة جيدة عند (381 m/z) تشير الى مجموعة $[C_{10}H_8Br_2NSe]^{+\cdot}$ و حزمةً اخرى عند (460 m/z) تعود للمجموعة $[C_{10}H_8Br_3NSe]^{+\cdot}$ واظهر الطيف حزما اخرى يمكن ملاحظتها من خلال الجدول رقم (٣-٤) اما ميكانيكية تكسير المركب فيمكن ملاحظتها من المخطط رقم (٣-٤) وشكل الطيف يمكن ملاحظته من خلال الشكل رقم (٣ -١٤).



7-methylene selenium tri bromoid-8-hydroxyquinoline hydrochloride

الصيغة الجزيئية	m/z	الصيغة الجزيئية	m/z
$C_{10}H_8Br_3NOSe$	**474**	$[C_{10}H_8Br_3NSe]^{\cdot+}$	**460**
$[C_{10}H_8Br_2NOSe]^{\cdot+}$	**396**	$[C_9H_{13}Br_3Se]^{\cdot+}$	**437**
$[C_{10}H_8Br_2NSe]^{\cdot+}$	**381**	$[C_7H_{11}Br_3Se]^{\cdot+}$	**413**
$[C_{10}H_8NSe]^{\cdot+}$	**224**		

جدول (٣-٤) اهم قمم انشطارات المركب 7-methylene selenium tri bromoid-8-hydroxyquinoline hydrochloride



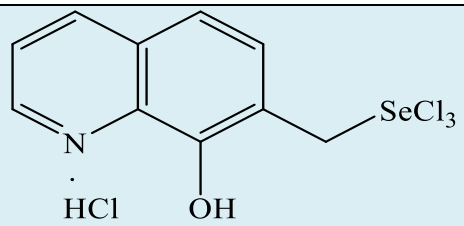
شكل رقم (٣ -١٣) طيف الكتلة للمركب

7-methylene selenium tri bromoid-8-hydroxyquinoline hydrochloride

٣-٢-٣-٣- طيف المركبC3

7-methylene selenium tri chlorid-8-hydroxyquinoline hydrochloride

اظهر طيف الكتلة للمركب اعلاه حزمة الايون الام عند (340 m/z) والتي تشير الى الوزن الجزيئي للمركب الناتج , كما واظهر الطيف الحزمة الأساس ذات الوفرة النسبية العالية عند (259 m/z) تعود للمجموعة $[C_5H_9Cl_3Se]^{+\cdot}$ وظهور حزمة ذات وفرة جيدة عند (304 m/z) عائدة للمجموعة $[C_9H_{13}Cl_3Se]^{+\cdot}$ واظهر الطيف حزماً اخرى يمكن ملاحظتها من خلال الجدول رقم (٣-٥) اما ميكانيكية تكسير المركب فيمكن ملاحظتها من خلال المخطط رقم (٣-٥) وشكل الطيف يمكن ملاحظته من خلال الشكل رقم (٣ - ١٥).

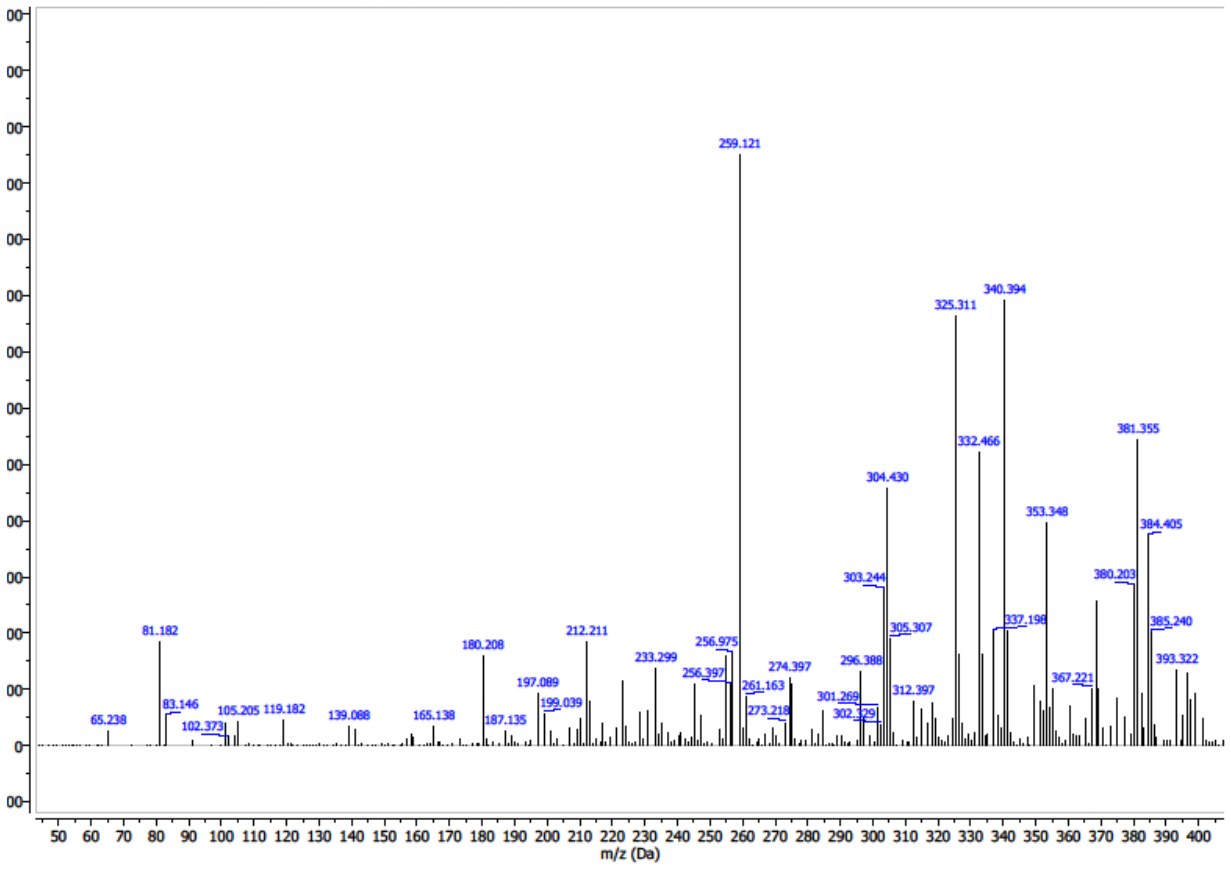


7-methylene selenium tri chlorid-8-hydroxyquinoline hydrochloride

الصيغة الجزيئية	m/z	الصيغة الجزيئية	m/z
$C_{10}H_9Cl_3NOSe$	**379**	$[C_{10}H_8NOSe]^{\cdot+}$	**237**
$[C_{10}H_8Cl_3NSe]^{\cdot+}$	**325**	$[C_8H_9N]^{\cdot+}$	**119**
$[C_9H_{13}Cl_3Se]^{\cdot+}$	**304**	$[C_5H_5N]^{\cdot+}$	**81**
$[C_5H_9Cl_3Se]^{\cdot+}$	**259**		

جدول (٣-٥) اهم قمم انشطارات المركب

7-methylene selenium tri chlorid-8-hydroxyquinoline hydrochloride

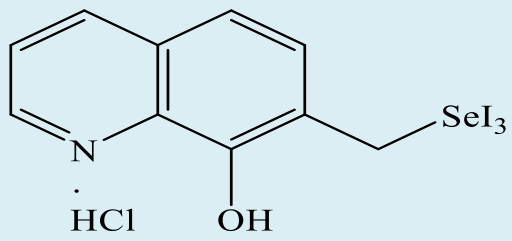


شكل (٣-١٤) طيف الكتلة للمركب 7-methylene selenium tri chlorid-8-hydroxyquinoline hydrochloride

٣-٢-٣-٤- طيف المركبC4

7-methylene selenium tri iodide-8-hydroxyquinoline hydrochloride

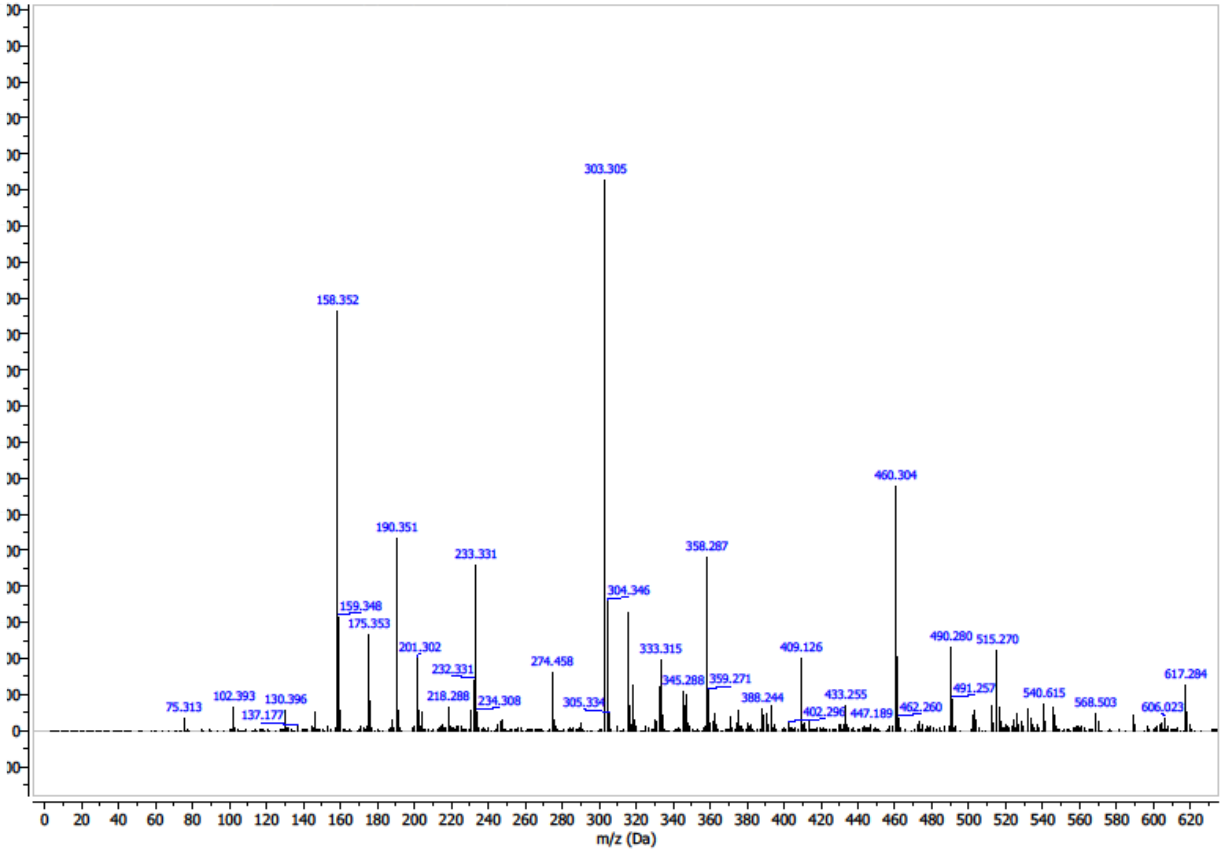
اظهر طيف الكتلة للمركب اعلاه حزمة الايون الام عند (617m/z) والتي تشير الى الوزن الجزيئي للمركب الناتج , كما واظهر الطيف الحزمة الأساس ذات الوفرة النسبية العالية عند (460 m/z) تعود للمجموعة $[I_3Se]^{+\cdot}$. بالإضافة الى ظهور حزمة ذات وفرة جيدة عند (158 m/z) تعود للمجموعة $[C_{10}H_9NO]^{+\cdot}$ واظهر الطيف حزماً اخرى يمكن ملاحظتها من خلال الجدول رقم (٣-٦) اما ميكانيكية تكسير المركب فيمكن ملاحظتها من خلال المخطط رقم (٣ -٦) وطيف المركب يمكن ملاحظته من خلال الشكل رقم (٣-١٦) .



7-methylene selenium tri iodide-8-hydroxyquinoline hydrochlorid

الصيغة الجزيئية	m/z	الصيغة الجزيئية	m/z
$C_{10}H_8I_3NOSe$	**617**	$[C_{10}H_8I_2NOSe]^{\cdot+}$	**490**
$[C_7H_9I_3OSe]^{\cdot+}$	**568**	$[C_{11}H_{11}NO]^{\cdot+}$	**175**
$[C_6H_9I_3Se]^{\cdot+}$	**540**	$[C_{10}H_9NO]^{\cdot+}$	**158**
$[I_3Se]^{\cdot+}$	**460**		

جدول (٣-٦) اهم قمم انشطارات المركب-7-methylene selenium tri iodide-8-hydroxyquinoline hydrochloride



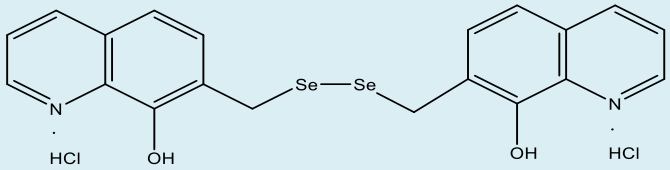
شكل (٣ ـ ١٥) طيف الكتلة للمركب

7-methylene selenium tri iodide-8-hydroxyquinoline hydrochloride

٣-٢-٣-٥- طيف المركب C5

Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)diselenide hydrochloride

اظهر طيف الكتلة للمركب اعلاه حزمة الايون الام عند (472m/z) والتي تشير الى الوزن الجزيئي للمركب الناتج , كما واظهر الطيف الحزمة الأساس ذات الوفرة النسبية العالية عند (158 m/z) تعود للمجموعة $[C_{11}H_{11}N]^{\cdot+}$ وحزمة ذات وفرة جيدة عند (315 m/z) تشير للمجموعة $[C_{11}H_{11}NSe_2]^{\cdot+}$ واظهر الطيف حزماً اخرى يمكن ملاحظتها على من خلال الجدول رقم (٣-٧) اما ميكانيكية تكسير المركب فيمكن ملاحظتها من خلال المخطط رقم (٣ -٧) وشكل الطيف فيمكن ملاحظته من خلال الشكل رقم (٣ -١٧)

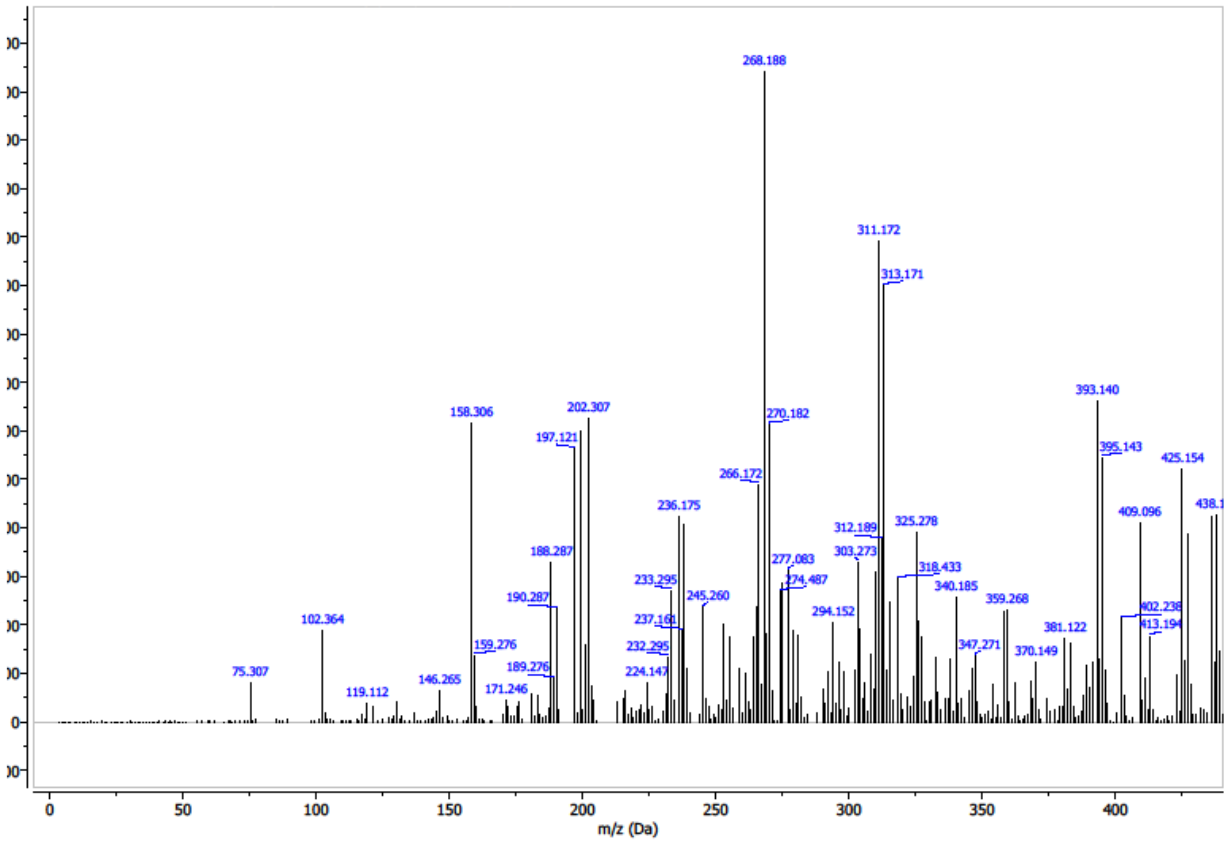


Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)diselenide hydrochloride

الصيغة الجزيئية	m/z	الصيغة الجزيئية	m/z
$C_{20}H_{16}N_2O_2\ Se_2$	**472**	$[C_{11}H_{11}NSe_2]^{\cdot+}$	**315**
$[C_{20}H_{16}N_2OSe_2]^{\cdot+}$	**460**	$[C_{11}H_{11}N]^{\cdot+}$	**158**
$[C_{17}H_{17}NOSe_2]^{\cdot+}$	**409**	$[C_{10}H_9NO]^{\cdot+}$	**159**
$[C_{13}H_{13}NOSe_2]^{\cdot+}$	**358**		

جدول رقم (٣-٧) أهم قمم انشطار المركب

Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)diselenide hydrochloride



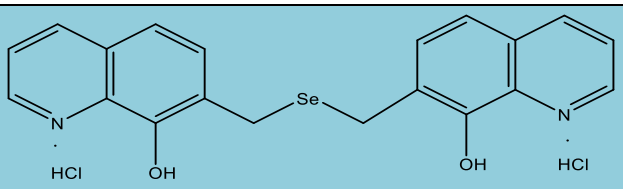
شكل رقم (٣ ـ ١٦) طيف الكتلة للمركب

Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)diselenide hydrochloride

٣ـ٢ـ٣ـ٦ـ طيف المركبC6

Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)selenide hydrochloride

اظهر طيف الكتلة للمركب اعلاه حزمة الايون الام عند (393m/z) والتي تشير الى الوزن الجزيئي للمركب الناتج , كما اظهر الطيف الحزمة الاساس ذات الوفرة النسبية العالية عند (158 m/z) تعود للمجموعة $[C_{10}H_9NO]^{\cdot+}$ وحزمة ذات وفرة جيدة عند (268m/z) تشير للمجموعة $[C_{15}H_{17}NOSe]^{\cdot+}$, و حزماً اخرى يمكن ملاحظتها من خلال الجدول رقم (٣-٨) ,اما ميكانيكية تكسير المركب فيمكن ملاحظتها من خلال المخطط رقم (٣ -٨) وشكل الطيف فيمكن ملاحظته من خلال الشكل رقم (٣ -١٨) .

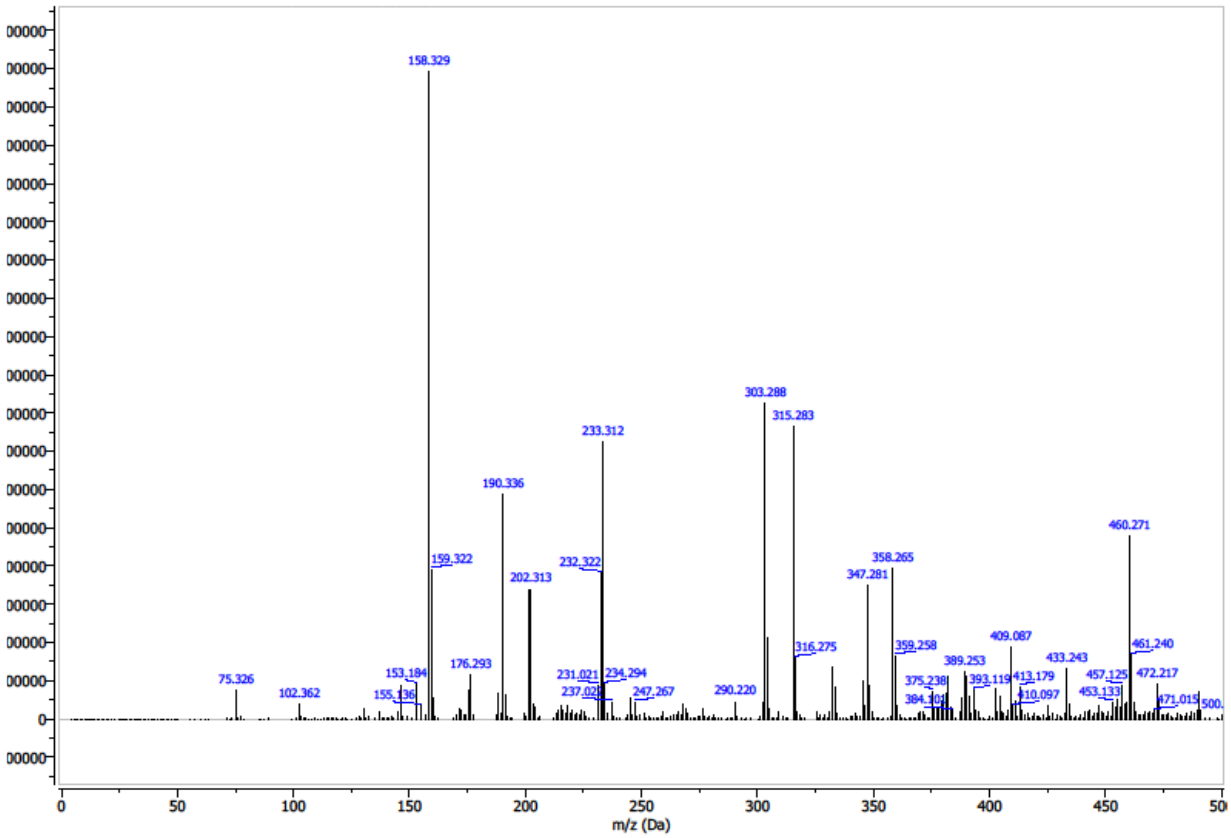


Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)selenide hydrochloride

الصيغة الجزيئية	m/z	الصيغة الجزيئية	m/z
$C_{20}H_{16}N_2O_2$ Se	**393**	$[C_{14}H_{17}NOSe]^{\cdot+}$	**294**
$[C_{19}H_{21}NOSe]^{\cdot+}$	**359**	$[C_{12}H_{13}NOSe]^{\cdot+}$	**268**
$[C_{16}H_{17}NOSe]^{\cdot+}$	**318**	$[C_{10}H_9NO]^{\cdot+}$	**159**
$[C_{11}H_{11}N]^{\cdot+}$	**158**		

جدول (٣-٨) اهم قمم انشطارات المركب

Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)selenide hydrochloride



شكل (٣ ـ ١٧) طيف الكتلة للمركب

Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)selenide hydrochloride

٤ـ١ـ نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) density Functional theory

هي احدى الطرق المستخدمة في دراسة التراكيب الجزيئية والخصائص الالكترونية ,وخطوط المحيط والاسطح للذرات الفردية والجزيئات[٥٨].تستخدم هذه الطريقة بشكل كبير في علم المواد وفيزياء الحالة الصلبة[٥٩].نظريةDFT تتعامل مع كثافة الالكترون بدلا من دالة الموجة ,اي ان كثافة الالكترون تعتمد فقط على الاحداثيات المكانية دون النظر الى كيفية تواجد الالكترونات في النظام[٦٠]. لكن الدالة الموجية تفترض متغيرات مكانية 3N واحداثيات واحدة للدوران حيث تم تثبيت مواضع النواة [٦١].يمكن تعريف DFT هي طريقة لإيجاد حل تقريبي لمعادلة شرود نكر للعديد من انظمة الجسيمات[٦٢].

نظرية الدالة الوظيفية للكثافة (DFT, Density Functional Theory) هي أحد أهم الطرق المستعملة في الفيزياء والكيمياء النظريين وبواسطتها نستطيع أن نحدد خصائص نظام متعدد الجسيمات (الطاقة الكلية للنظام، الكثافة الإلكترونية للمدارات، المعاملات الفيزيائية والضوئية للمادة....)، وهي واحدة من أكثر الطرق استخداما في العمليات الحسابية الكمية بسبب إمكانية تطبيقها على أنظمة متنوعة وبتكلفة واطئة وسرعة عالية.

تعتمد الطرق التقليدية في حلها معادلة شرودنكر لنظام مكون من عدة ذرات ولا سيما نظرية هارتري-فوك والطرق المستنبطة منها على الدالة الموجية ذات 3N متغير (حيث N هو العدد الإجمالي لجزيئات النظام)، لذلك تكون لمعادلات المراد حلها جد معقدة وتتطلب جهدا كبيرا٠ الهدف الرئيسي نظرية الدالة الوظيفية للكثافة هو استبدال الدالة الموجية بالدالة الوظيفية للكثافة ذات ثلاثة متغيرات فقط وجعلها قاعدة للحساب، لذلك فالتعامل معها كمفهوم رياضي أو فيزيائي هو أسهل بكثير، فمبدأ DFT هو إعادة صياغة للمسألة الكمومية وتحويلها من مسألة لنظام متعدد الجسيمات إلى مسألة أحادية الجسيمة .

تعود جذور DFT للنموذج الذي وضعه لويلين توماس و انريكو فيرمي في أواخر ١٩٢٠. ومع ذلك فإنه لم يكن ب الإمكان استعمالها حتى منتصف ١٩٦٠. ومنذ ذلك الوقت وهي في تطور متصاعد. مع تطور وقوة البرامج المعلوماتية وسرعة تطبيق العمليات الحسابية. جاءت نتائج (DFT) النظرية قريبة على نحو مرض تماما مع البيانات التجريبية وبتكاليف منخفضة نسبيا مع الطرق التقليدية التي تستهلك المال والوقت معا، ولكن على الرغم من التحسن الكبير الذي طرأ مؤخرا والتحسين المستمر للبرامج، لا تزال هناك بعض الصعوبات في استخدام نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) لوصف التفاعلات بين الجزيئات وخاصة القوى الضعيفة (فان دير وال), الحالات الانتقالية للإلكترونات، حساب الفجوة (band Gap) في أشباه الموصلات, هذه الثغرات

يمكن أن تؤثر على نتائج (DFT) "على الأقل عندما تستعمل وحدها دون تصحيح" حيث يتم تطوير طرق جديدة ل (DFT) للتغلب على هذه المشكلة، من خلال إحداث تعديلات على الدالة الوظيفية أو إدراج شروط في برامج الحساب وهو موضوع البحث الحالي في هذا المجال.

٤-٢- الخصائص الإلكترونية Electronic properties

LUMO , HOMO هي مصطلحات تستخدم للإشارة الى وضع المدارات الجزيئية من حيث انشغالها بالإلكترونات حيث ان HOMO هو اعلى مدار جزيئي مشغول بالإلكترونات و LOMO يمثل ادنى مدار جزيئي غير مشغول بالإلكترونات[٦٣]. .يستخدم فرق الطاقة بين هذين المدارين الحدوديين في معرفة استقراريه وثباتيه العناصر بالإضافة الى اللون الذي يظهره في المحاليل(فجوة الطاقة)

فجوة الطاقة هي مقدار الطاقة اللازمة التي يحتاجها الالكترون للانتقال من مستوى التكافؤ الى مستوى التوصيل[٦٤]. ومن خلال هذه القيمة (فجوة الطاقة) يمكننا معرفة العناصر او المواد ما اذا كانت موصلة او عازلة او اشباه موصلات. حيث يمكن حساب فجوة الطاقة من خلال فرق الطاقة بين مستوى الطاقة الادنى ومستوى الطاقة الاعلى[٦٥].

$$Eg = E_{LUMO} - E_{HOMO} \ldots\ldots\ldots (1)$$

من خلال الجدول(٤-١)نلاحظ ان قيم طاقات HOMO اعلى لمركب السلينايد واقلها عند ثلاثي البروميد بينما طاقة LUMO تكون اعلى عند السلينوسيانيت واقلها عند ثلاثي اليوديد اما فجوة الطاقة تكون اعلى قيمة عند السلينوسيانيت واقلها عند ثنائي السلينايد.

المركب	HOMO (eV)	LUMO (eV)	فجوة الطاقة(eV)

$C_{11}H_8N_2OSe$	-5.9834	-1.7387	4.2447
$C_{20}H_{16}N_2O_2Se_2$	-4.2474	-2.7373	1.5101
$C_{20}H_{16}N_2O_2Se$	-4.3672	-2.3019	2.0653
$C_{10}H_8Br_3NOSe$	-5.1889	-2.5005	2.6884
$C_{10}H_9Cl_3NOSe$	-5.6188	-2.6937	2.9251
$C_{10}H_8I_3NOSe$	-5.3005	-2.8461	2.4544

يوضح الجدول (٤-١) طاقات المدارات الجزيئية(LOMO ,HOMO) لمركبات السيلينيوم العضوي

٤-٢-١- الكهرو سلبية والالفة الالكترونية

Electronegativity and Electron affinity

تُعرّف الكهروسلبية بأنها قدرة الذرة على جذب الكترونات التآصر نحوها في أي مركب كيميائي حيث يعتبر الفلور هو اكثر العناصر كهرو سلبية . تزداد الكهرو سلبية كلما ازدادت الاعداد الذرية للعناصر. بالإضافة الى انه يمكن تعريف الألفة الالكترونية بأنها قابلية الذرة المتعادلة كهربائيا في الحالة الغازية على اكتساب الكترون واحد وتحرير مقدارا من الطاقة, فكلما زاد العدد الذري ازدادت صعوبة اضافة الالكترون . يمكن حساب الكهرو سلبية والالفة الالكترونية على التوالي من العلاقتين(٢)و(٣)[٦٦].

الكهروسلبية $x = \frac{E_{HOMO}+E_{LUMO}}{2}$ .....(2)

$$\omega = \frac{x^2}{2\eta}$$ .....(3) الالفة الالكترونية

من خلال الجدول(٤-٢) نلاحظ ان اعلى كهروسلبية تعود للمركب السلينوسيانيت واقلها لثلاثي الكلورو اما الالفة الالكترونية فتكون قيمتها الاعلى عند ثلاثي الكلورو واقلها عند السلينوسيانيت فيكون جذب الالكترونات اكبر للسلينوسيانيت(تعتبر متبرعا), بينما تقبل الالكترونات يكون اكبر لثلاثي الكلورو.

المركب	الكهرو سلبية(eV)	الالفة الالكترونية(eV)
$C_{11}H_8N_2OSe$	-3.8608	15.8172
$C_{20}H_{16}N_2O_2Se_2$	-6.9847	18.4167
$C_{20}H_{16}N_2O_2Se$	-6.6692	22.9641
$C_{10}H_8Br_3NOSe$	-7.6894	39.7391
$C_{10}H_9Cl_3NOSe$	-8.3125	50.5276
$C_{10}H_8I_3NOSe$	-8.1466	40.7228

جدول (٤-٢) الالفة الالكترونية والكهرو سلبية للمركبات المحضرة

٤-٢-٢- طاقة التأين والالفة الالكترونية

Ionization potential and electron affinity

طاقة التأين وتعرف بانها مقدار الطاقة اللازمة لانتزاع الكترونا واحدا من ذرة عنصر معين متعادل الشحنة في حالته الغازية, على سبيل المثال ذرة الهيدروجين لها طاقة تأين واحدة في الغلاف الخارجي لأنها تمتلك الكتروناً واحداً, بينما تمتلك الذرات التي تحتوي على اكثر من الكترون في غلافها الاخير طاقة تأين لكل الكترون[٦٧]. بينما يمكن تعريف الالفة الالكترونية

بأنها مقداراً الطاقة التي تتحرر عندما تكتسب الذرة الكترونا يعادل الطاقة المطلوبة لإزالة الكترون من الايونات السالبة . فمثلا الذرات التي تحتوي سبعة الكترونات في الغلاف الخارجي لها تمتلك تجاذباً الكترونياً قوياً وعكسها تماما اذا كانت الذرات لها غلاف مغلق فيكون لها تجاذب الكتروني ضعيف[٦٨], وبحسب نظرية كوبمان[٦٩].

$$I.P = -E_{HOMO} \quad \text{.....(4)} \quad \text{طاقة التأين}$$

$$E.A = -E_{LUMO} \quad \text{.....(5)} \quad \text{الالفة الالكترونية}$$

من خلال الجدول(٤-٣) نلاحظ ان اعلى طاقة تأين تعود لمركب السلينوسيانيت واقلها لثنائي السلينايد, اما الالفة الالكترونية فتكون قيمتها العليا عند ثلاثي اليوديد واقلها عند السلينوسيانيت.

المركب	طاقة التأين (eV)	جذب الالكترون(eV)
$C_{11}H_8N_2OSe$	5.9834	1.7387
$C_{20}H_{16}N_2O_2Se_2$	4.2474	2.7373
$C_{20}H_{16}N_2O_2Se$	4.3672	2.3019
$C_{10}H_8Br_3NOSe$	5.1889	2.5005
$C_{10}H_9Cl_3NOSe$	5.6188	2.6937
$C_{10}H_8I_3NOSe$	5.3005	2.8461

جدول (٤-٣) يبين طاقة التأين والالفة الالكترونية لمركبات السيلينيوم

٤-٢-٣- مبدأ الصلادة والليونة للحامض والقاعدة

Hardness Softness Acid Base

تعتبر الصلابة الكيميائية من المفاهيم المفيدة للغاية في الكيمياء والفيزياء حيث من خلالها يمكن معرفة مقاومة او تشوه الذرات ,الجزيئات او الايونات[٧٠]. وبناءً على هذا المفهوم صنفت

احماض وقواعد لويس على انها صلبة ولينة وهذا المبدأ وصفه بيرسون, يمكن تعريف القاعدة اللينة على انها الذرة المانحة التي تكون ذات قابلية عالية للاستقطاب وذات كهرو سلبية منخفضة وتتأكسد بسهولة وترتبط بمدارات منخفضة فارغة. أما القاعدة الصلبة فتكون الذرة المانحة ذات قابلية استقطاب منخفضة وكهرو سلبية عالية وتتأكسد بسهولة وترتبط مع مدارات فارغة ذات طاقة عالية. بينما يمكن تعريف الحامض اللين باعتباره الذرة المستقبلة ذات شحنة موجبة منخفضة, كبيرة الحجم وقابلة للاستقطاب اما الحامض الصلب فتكون الذرة المستقبلة فيه ذات شحنة موجبة عالية ,صغيرة الحجم وغير قابلة للاستقطاب.

يتضمن هذا المبدأ وصفًا لسلوك الجزيئات أو الذرات كأحماض وقواعد في الكيمياء. من الضروري الإشارة إلى أن القاعدة اللينة والقاعدة الصلبة تمثل المتبرعين ، لكن الحامض اللين والحمض الصلب يمثلان المتقبلات. يمكن التعبير عن الصلابة والليونة بالمعادلات التالية[٧١].

$$\eta = \frac{I.P - E.A}{2} \quad \text{.....(6)}$$

$$\sigma = \frac{1}{2\eta} \quad \text{.....(7)}$$

(σ) يشير إلى الليونة الكيميائية

(η) يشير إلى الصلادة الكيميائية

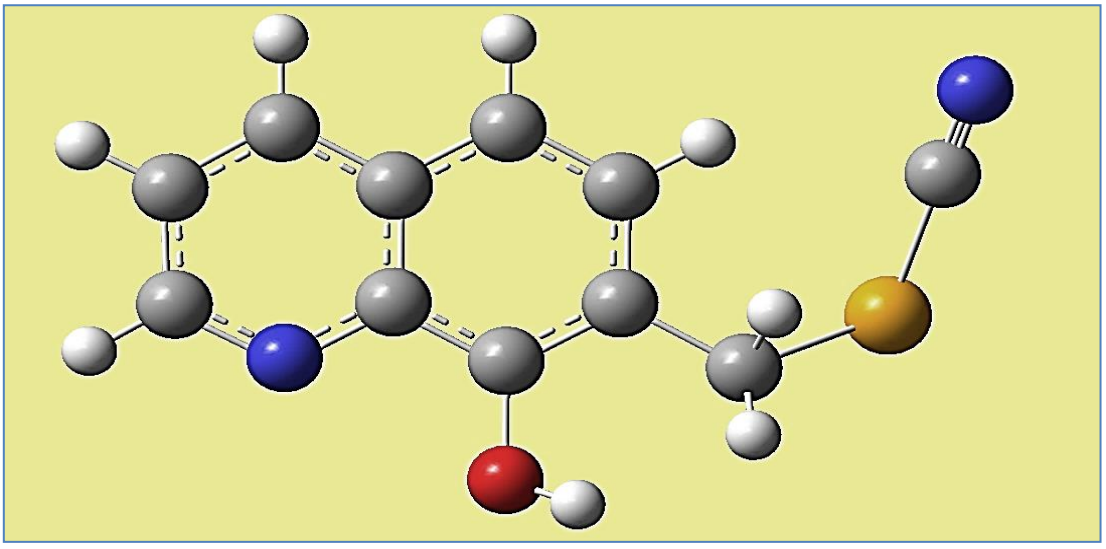
من خلال الجدول (٤-٤) نلاحظ ان السلينوسيانيت يكون اكثر صلابة مقارنة ببقية المركبات واقلها ثنائي السلينايد, اما النعومة فتتمثل السلينوسيانيت واقل بثنائي السلينايد.

المركب	الصلابة الكيميائية	الليونة الكيميائية
$C_{11}H_8N_2OSe$	2.1223	1.0611
$C_{20}H_{16}N_2O_2Se_2$	0.7550	0.3775

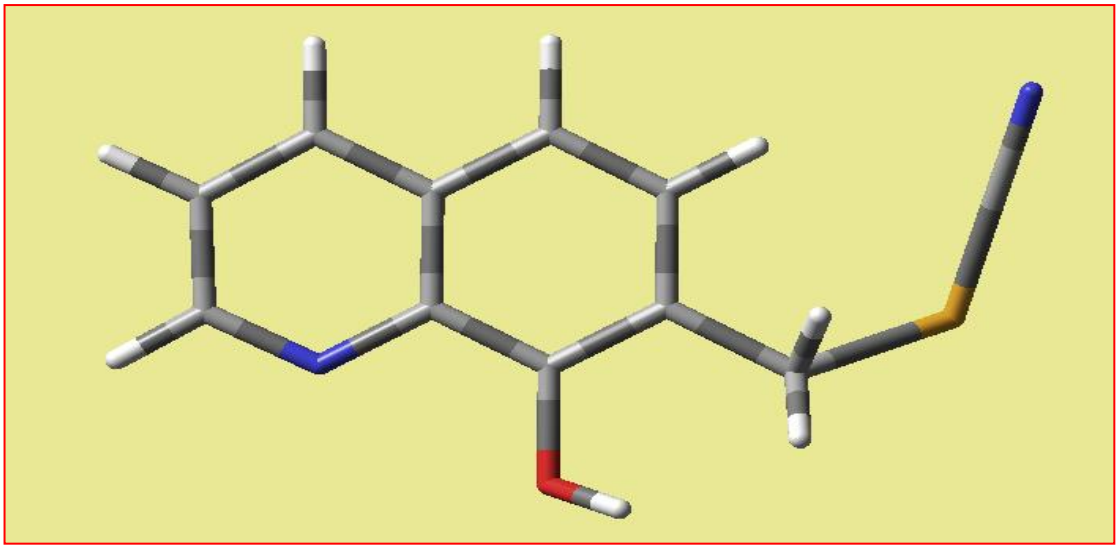
$C_{20}H_{16}N_2O_2Se$	1.0326	0.5163
$C_{10}H_8Br_3NOSe$	1.3442	0.6721
$C_{10}H_9Cl_3NOSe$	1.4625	0.7312
$C_{10}H_8I_3NOSe$	1.2272	0.6136

جدول (٤-٤) الصلادة والليونة الكيميائية لمركبات السيلينيوم العضوي

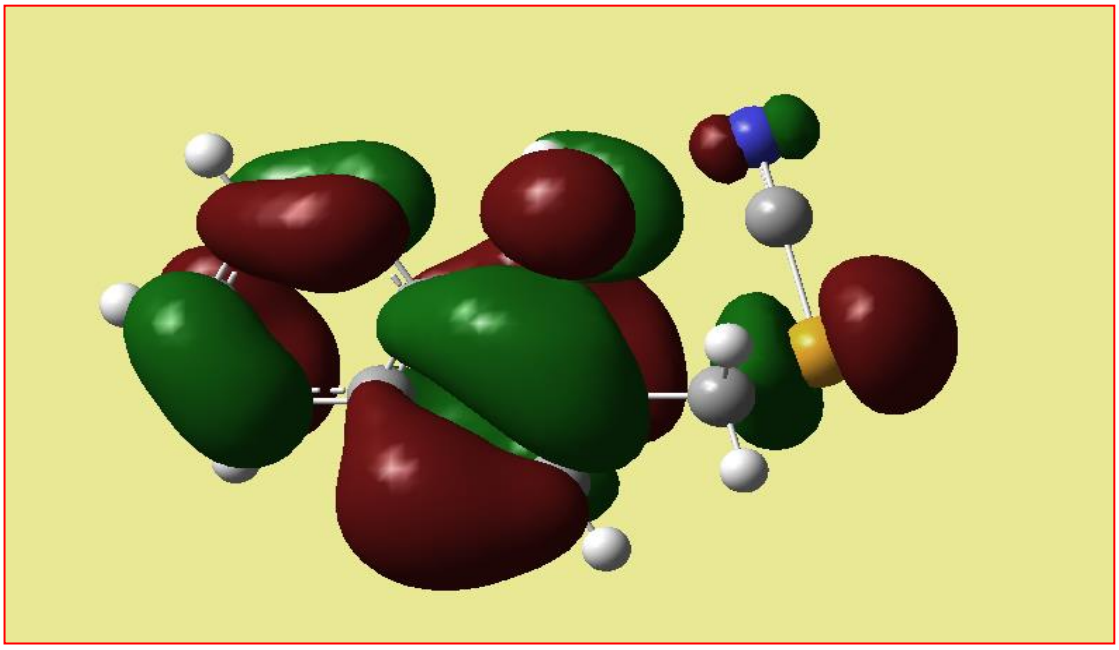
٤-٣- اشكال المركبات الكيميائية المحضرة



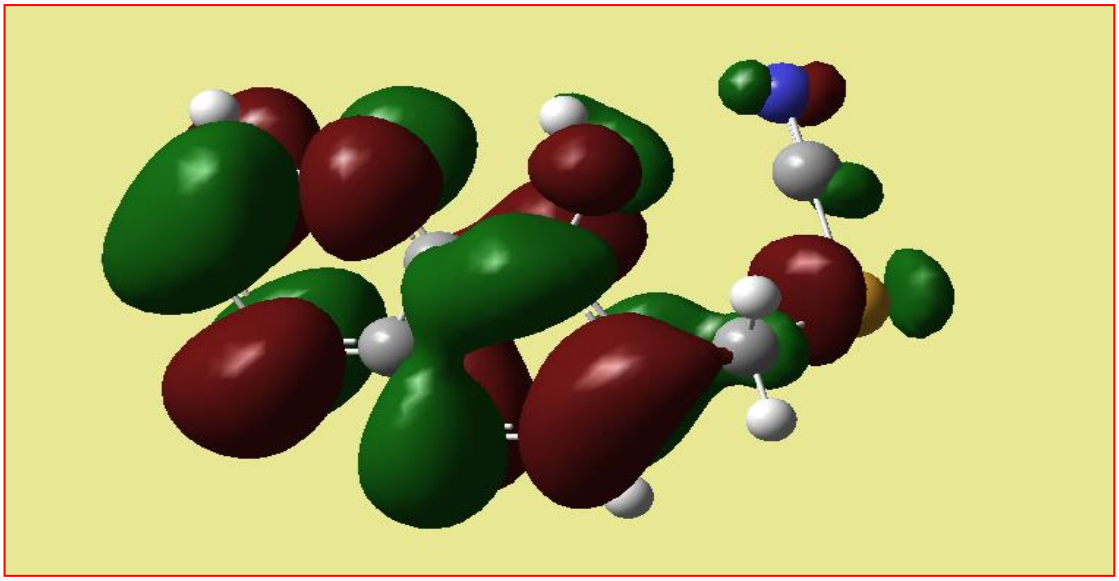
شكل (٤-١) الشكل الفراغي للمركب 7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride



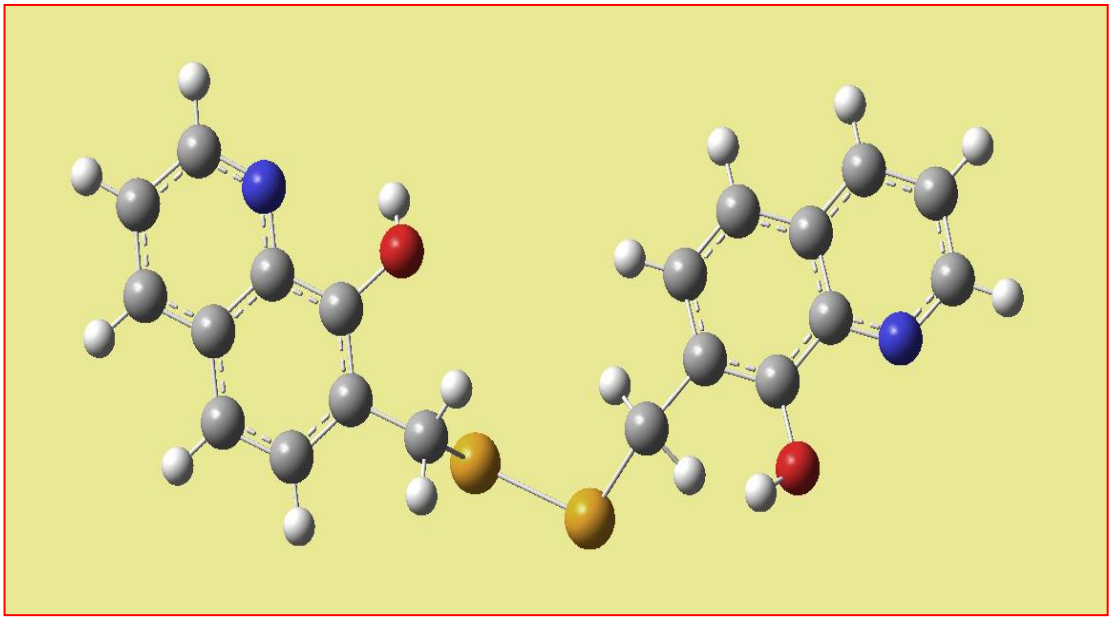
شكل (٤-٢)الشكل الفراغي للمركب 7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride



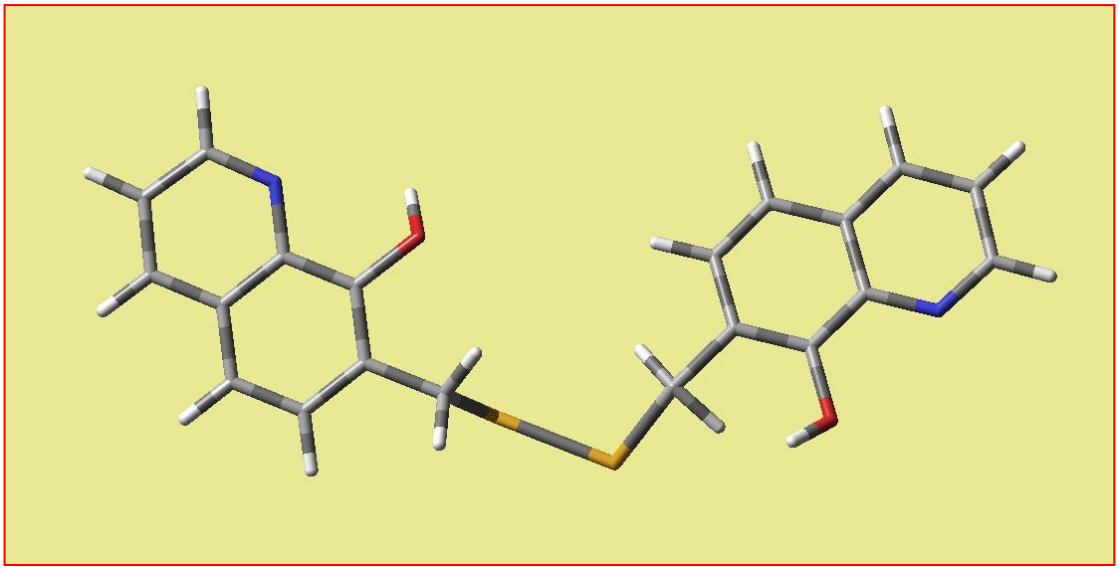
شكل (٤-٣) شكل الاوربيتال HOMO للمركب 7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride



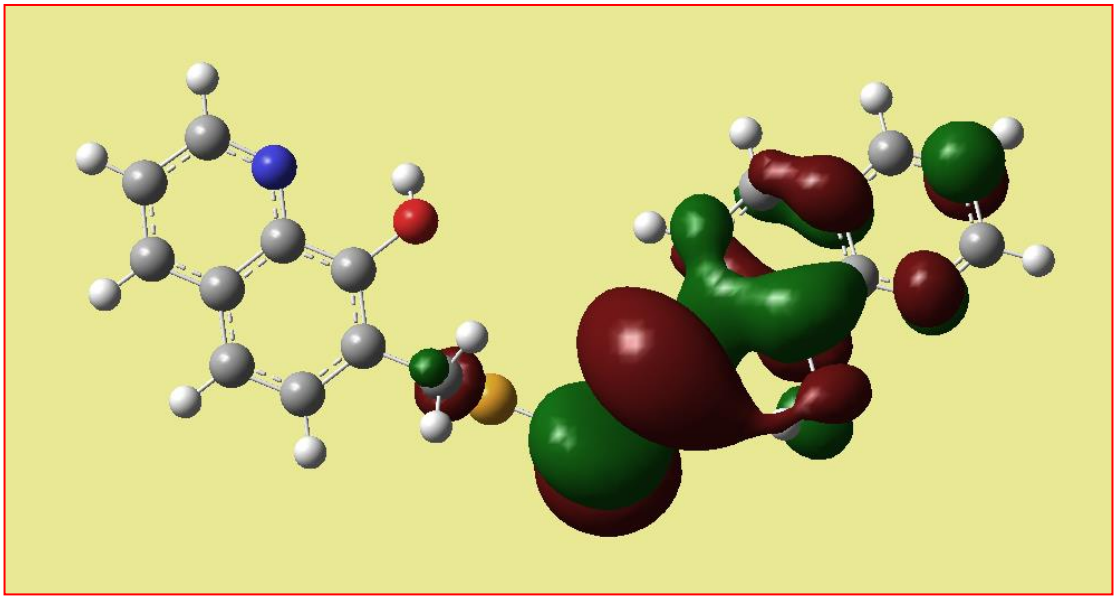
شكل (٤-٤) شكل الاوربيتال LUMO للمركب-7-methylene selenocyanato-8 hydroxy quinoline hydrochloride



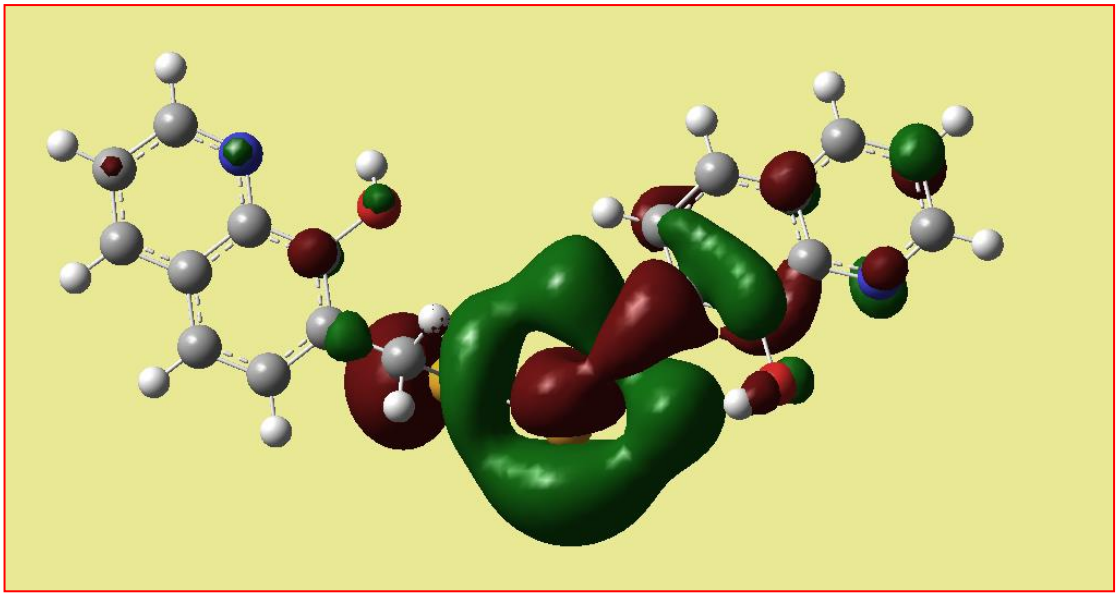
شكل (٤-٥) الشكل الفراغي للمركب -Di-(7-methlene-8 hydroxyquinoline)diselenide hydrochloride



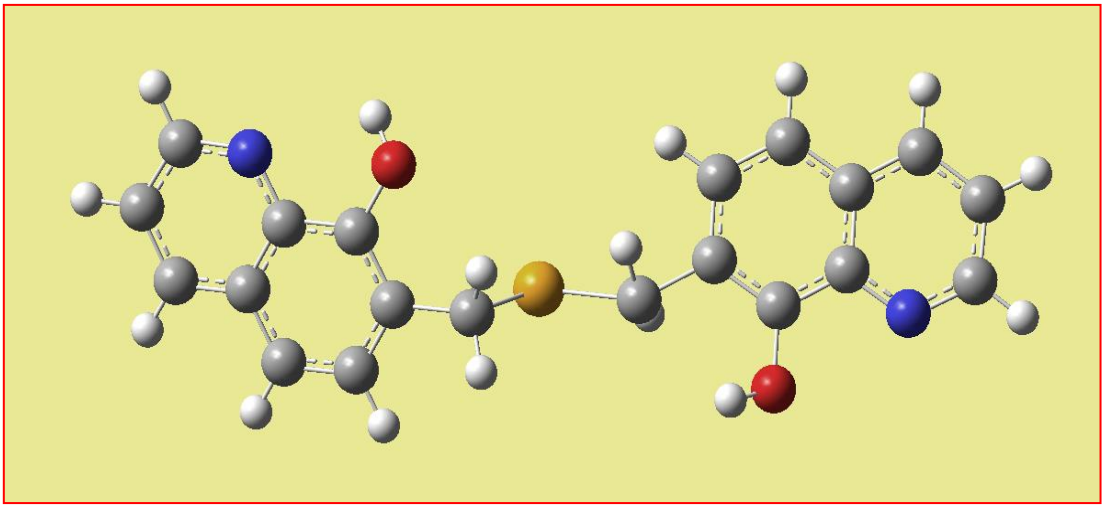
شكل (٤-٦) الشكل الفراغي للمركب Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)diselenide hydrochloride



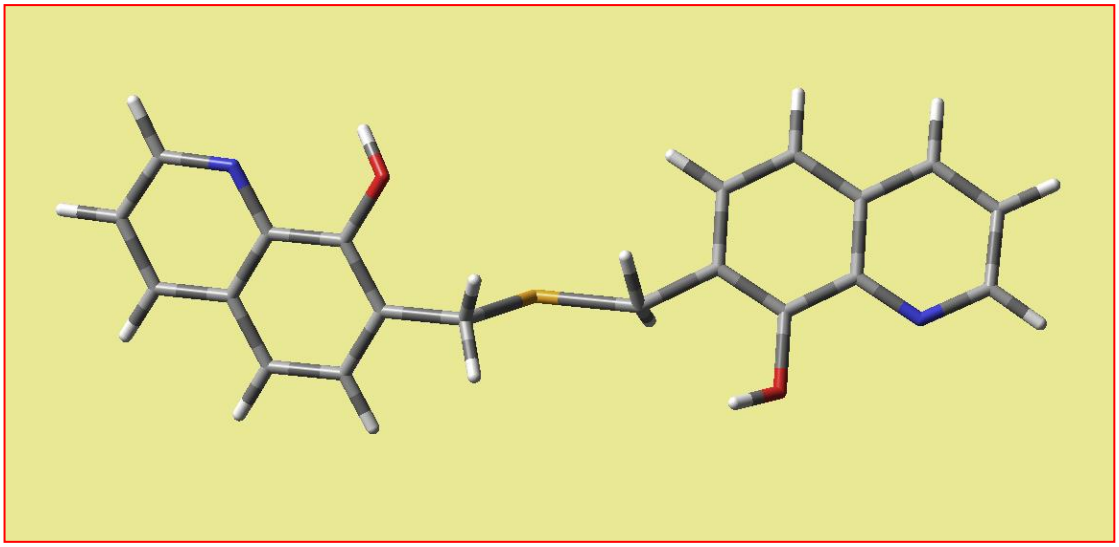
شكل (٤-٧) شكل الاوربيتال HOMO للمركب Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)diselenide hydrochloride



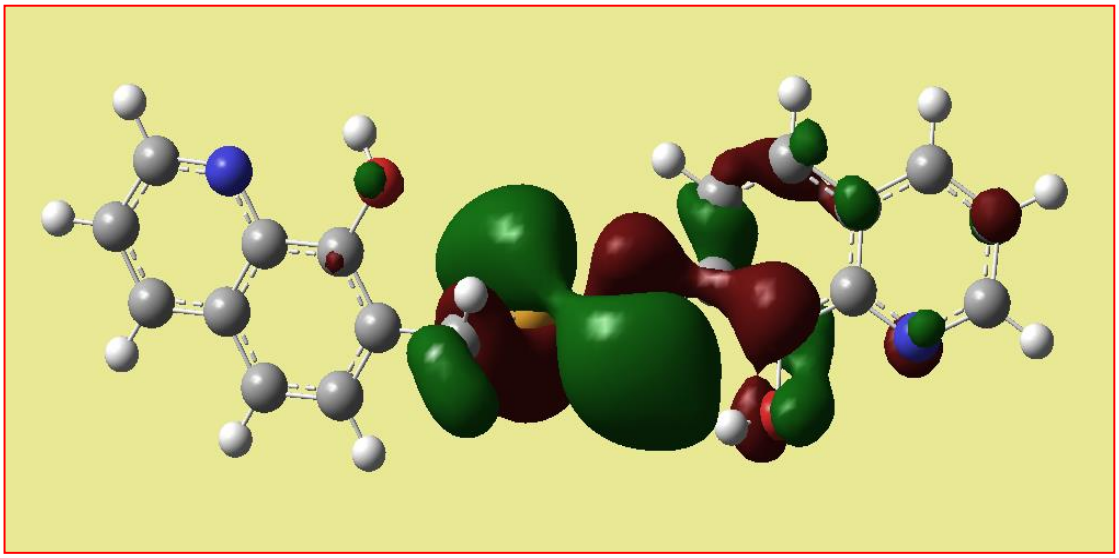
شكل (٤-٨) شكل الاوربيتال LUMO للمركب Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)diselenide hydrochloride



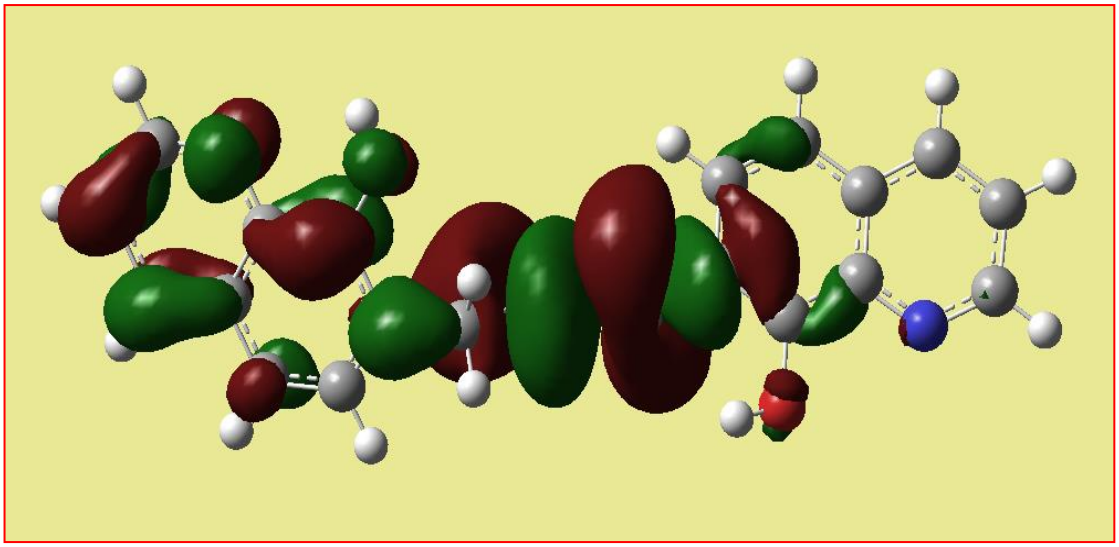
شكل (٤-٩) الشكل الفراغي للمركب Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)selenide hydrochloride



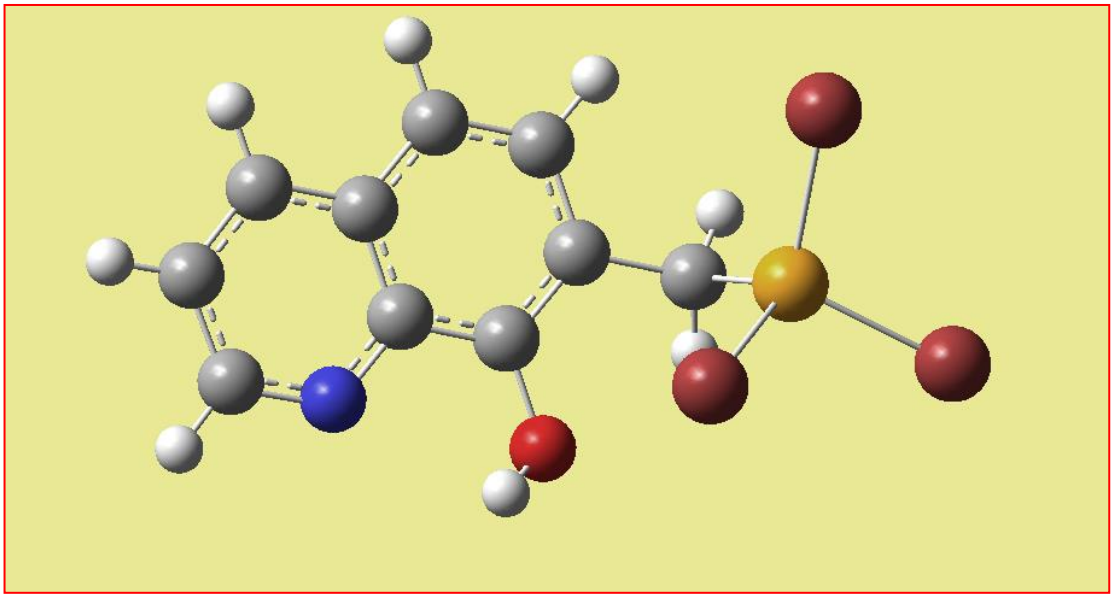
شكل (٤-١٠) الشكل الفراغي للمركب Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)selenide hydrochloride



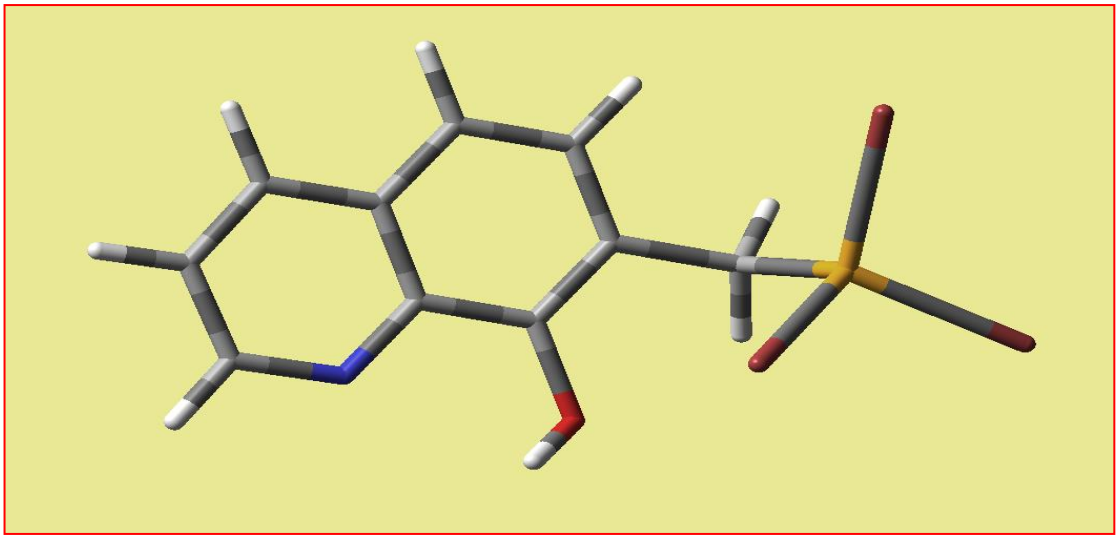
شكل (٤-١١) شكل الاوربيتال HOMO للمركب Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)selenide hydrochloride



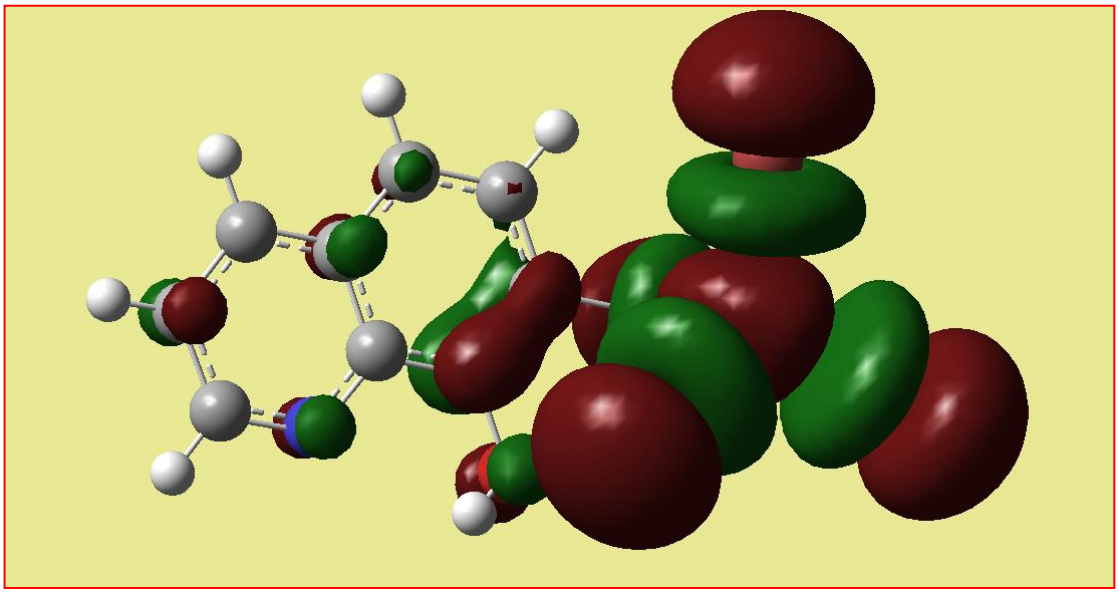
شكل (٤-١٢) شكل الاوربيتال LUMO للمركب Di-(7-methlene-8-hydroxyquinoline)selenide hydrochloride



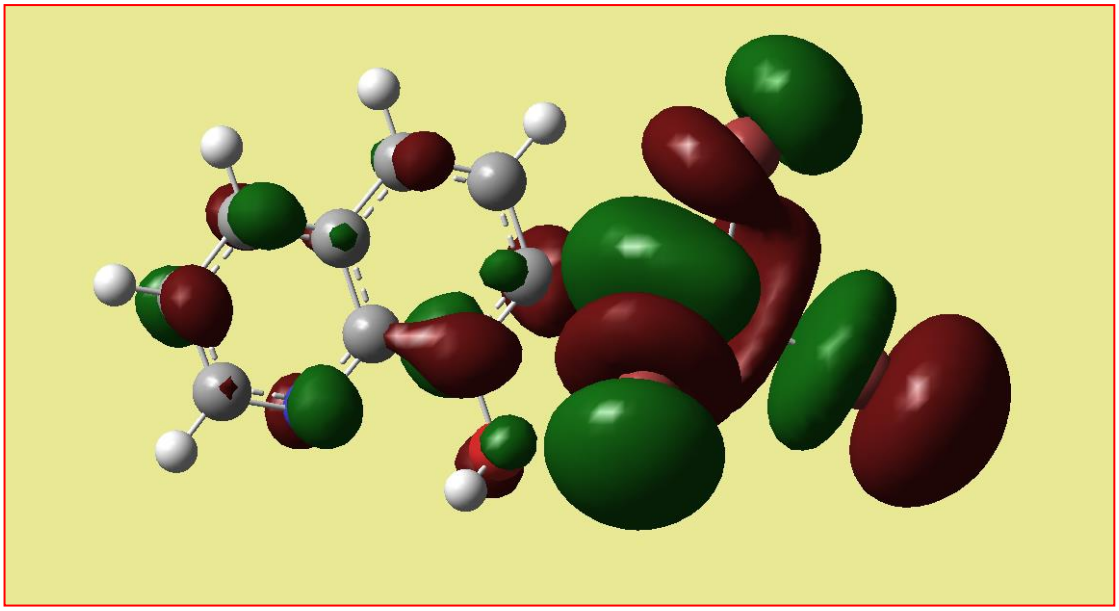
شكل (٤-١٣) الشكل الفراغي للمركب7-methylene selenium tri bromoid-8-hydroxyquinoline hydrochloride



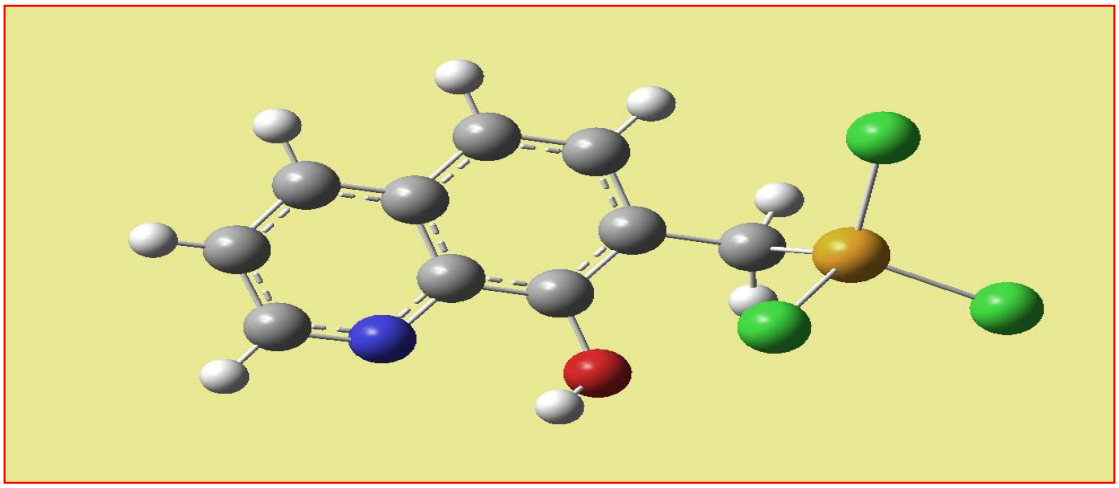
شكل (٤-١٥) الشكل الفراغي للمركب 7-methylene selenium tri bromoid-8-hydroxyquinoline hydrochloride



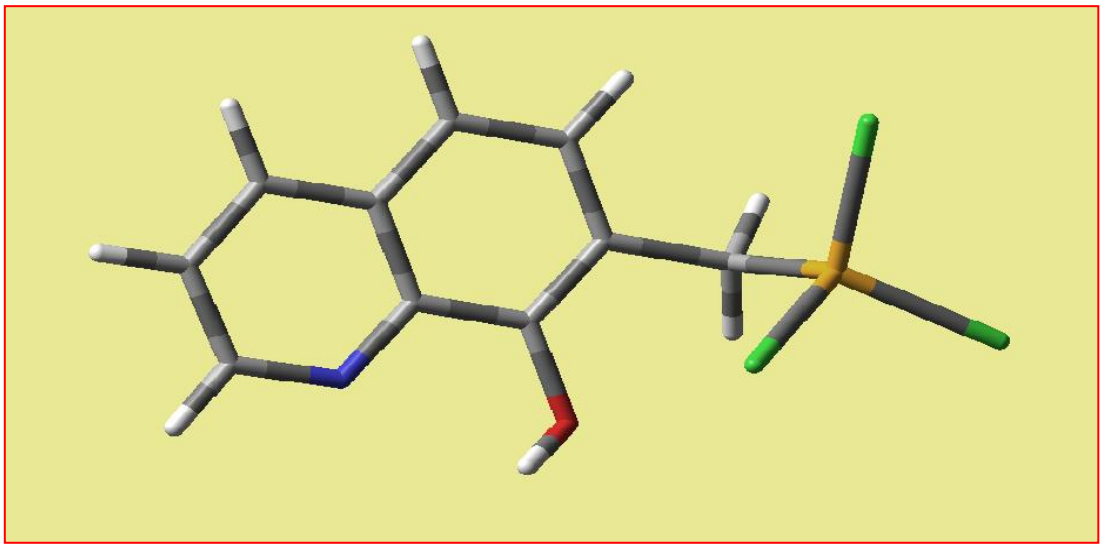
شكل (٤-١٦) شكل الاوربيتال HOMO للمركب 7-methylene selenium tri bromoid-8-hydroxyquinoline hydrochloride



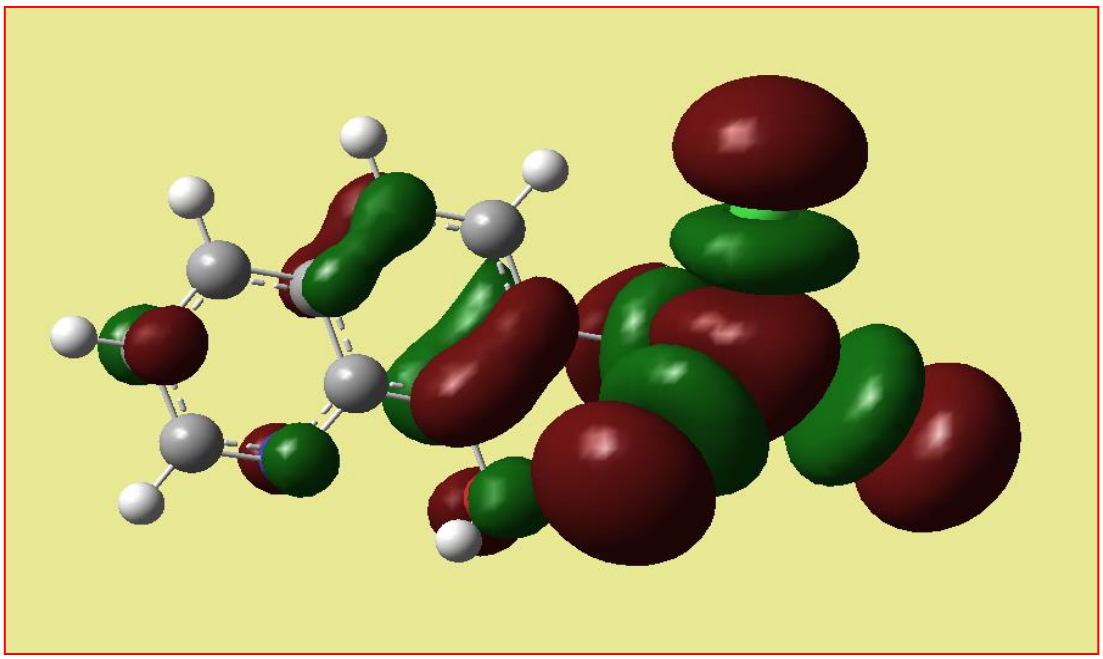
شكل (٤-١٧) شكل الاوربيتال LUMO للمركب 7-methylene selenium tri bromoid-8-hydroxyquinoline hydrochloride



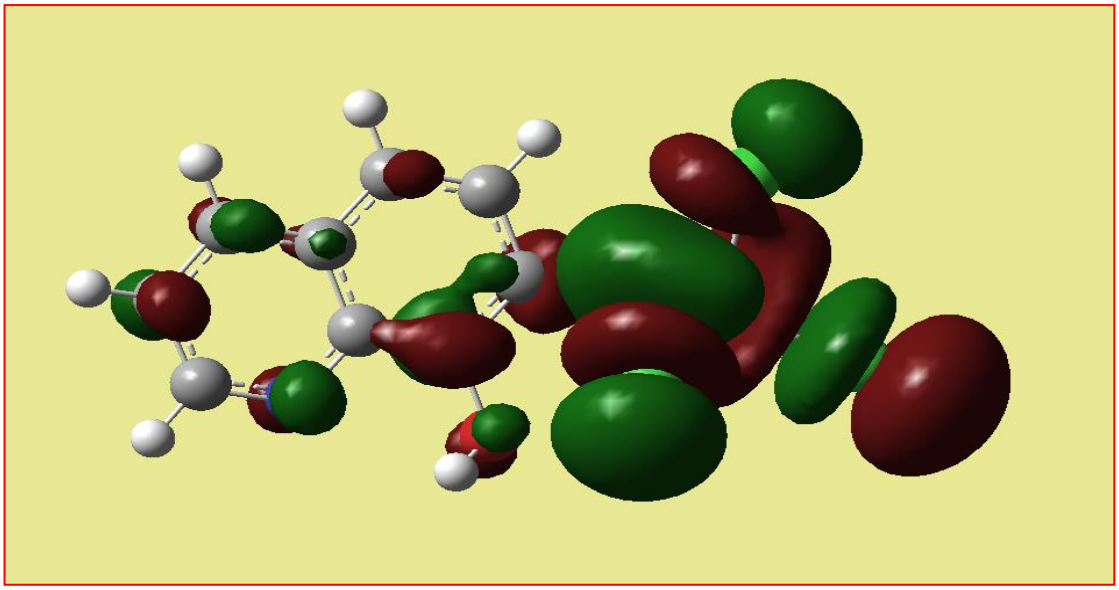
شكل (٤-١٨) الشكل الفراغي للمركب 7-methylene selenium tri chlorid-8-hydroxyquinoline hydrochloride



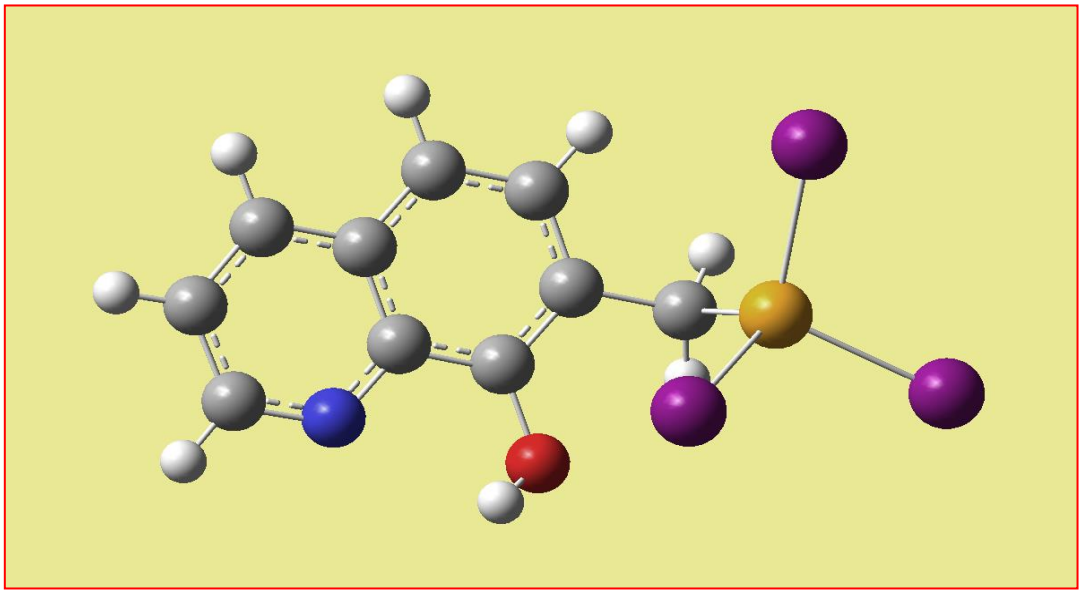
شكل (٤-١٩) الشكل الفراغي للمركب 7-methylene selenium tri chlorid-8-hydroxyquinoline hydrochloride



شكل (٤-٢٠) شكل الاوربيتال HOMO للمركب 7-methylene selenium tri chlorid-8-hydroxyquinoline hydrochloride

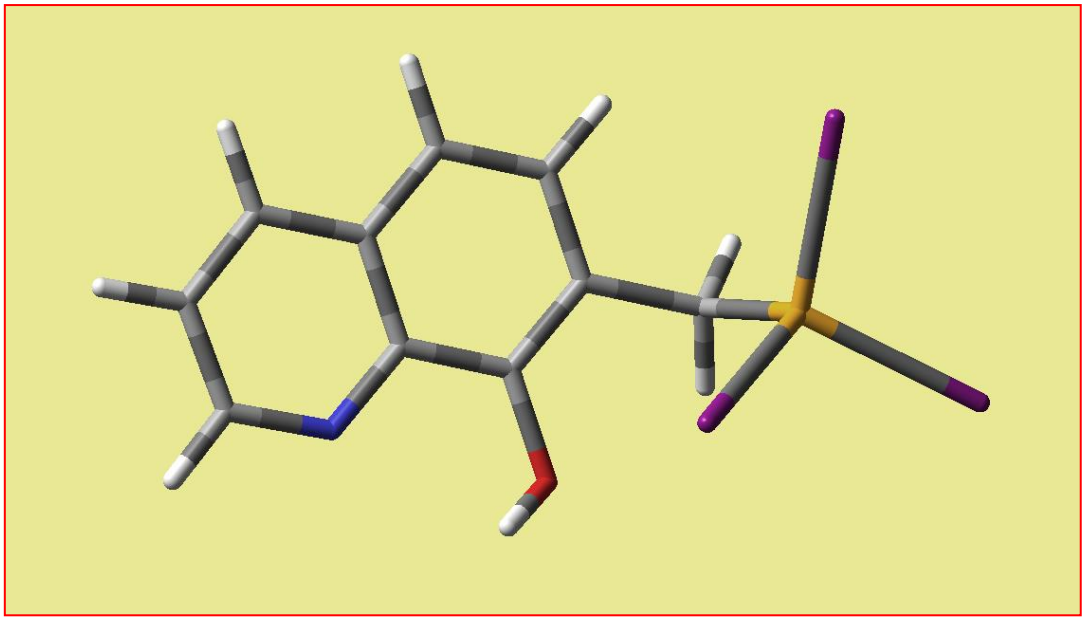


شكل (٤-٢١) شكل الاوربيتال LUMO للمركب 7-methylene selenium tri chlorid-8-hydroxyquinoline hydrochloride

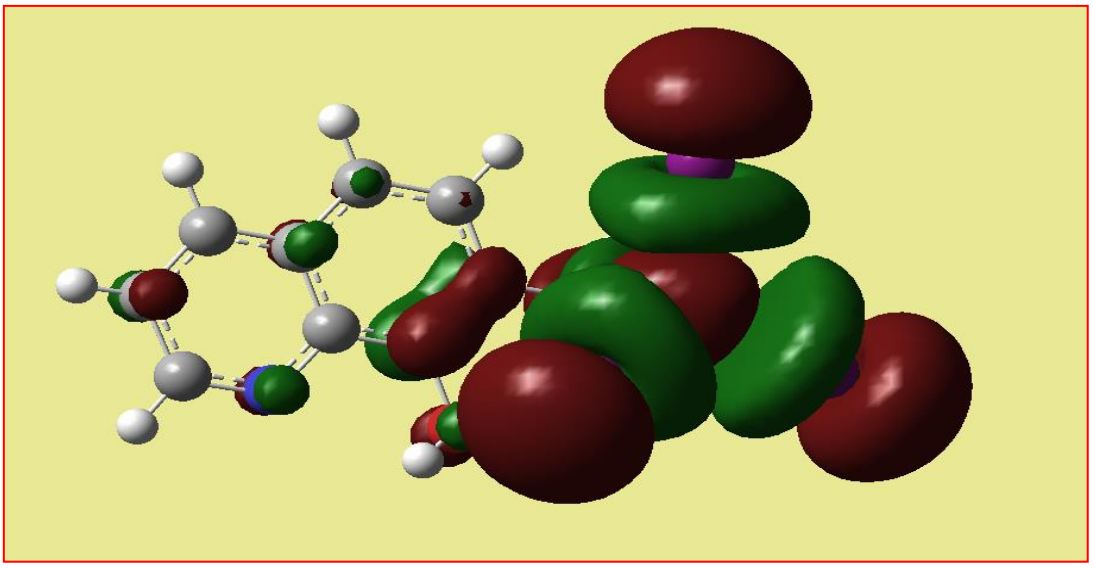


شكل (٤-٢٢)الشكل الفراغي للمركب

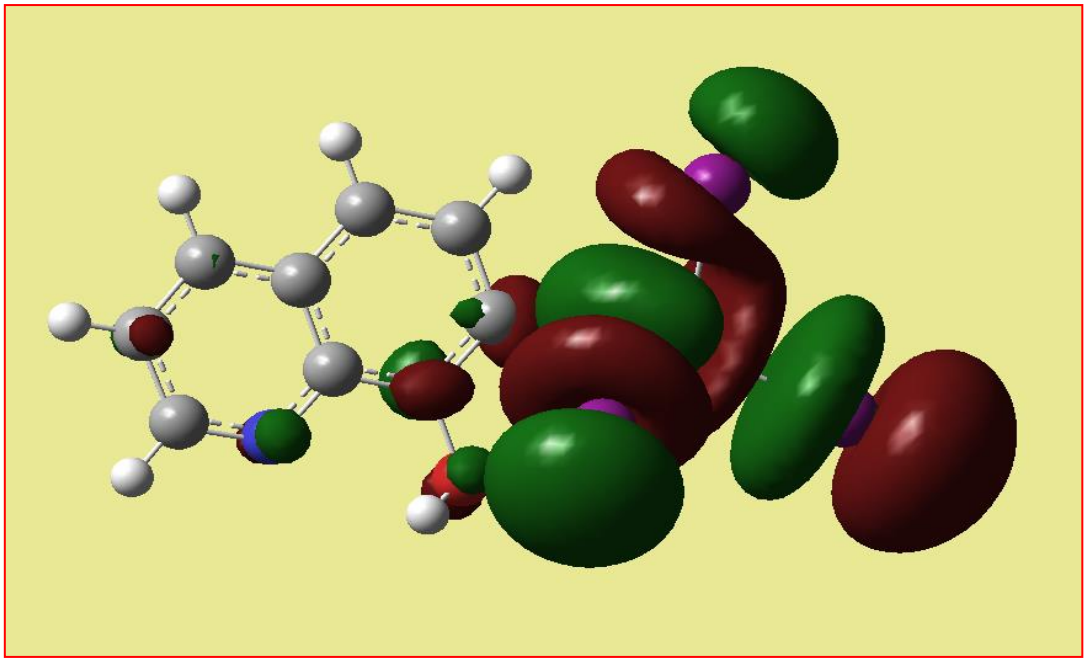
7-methylene selenium tri iodide-8-hydroxyquinoline hydrochloride



شكل (٤-٢٣) الشكل الفراغي للمركب 7-methylene selenium tri iodide-8-hydroxyquinoline hydrochloride



شكل (٤-٢٤) شكل الاوربيتال HOMO للمركب 7-methylene selenium tri iodide-8-hydroxyquinoline hydrochloride



شكل (٤-٢٥) شكل الاوربيتال LUMO للمركب 7-methylene selenium tri iodide-8-hydroxyquinoline hydrochloride

٧- الفعالية البيولوجية Biological Activity

تتميز مركبات السيلينيوم العضوية بأنها تمتلك خصائص بيولوجية متعددة بحيث استخدمت كمضادات فرط ضغط الدم (antihypertensive) ومضادة للبكتيريا (anti-bacterial ، أو كعوامل كيميائية وقائية ضد السرطان (chemo preventive anticancer agents)[٧٢, ٧٣]. حصلت مركبات السيلينيوم العضوية ومنها المحضرة مثل السلينوسيانيت على اهمية واسعة كعلاج لأمراض السرطان . فضلاً عن امتلاكها خصائص مضادات الفطريات (antifungal) ومضادات الأكسدة (ant oxidative) والصناعات الدوائية والطبية (pharmaceutical and biomedical industry)[٧٤, ٧٥] . كما ان هذه المركبات أظهرت فعالية مضادة للفيروسات (antivirus) ومضادة للطفيليات مثل الليشمانيا (antileishmanial) عن طريق تحسين الاستجابة المناعية للمضيفين للأنواع الفيروسية والطفيلية [٧٦]

تعتمد الفعالية البيولوجية لمركبات السيلينوسيانات العضوية على الهيكل التركيبي للمركب العضوي و طبيعة المعوضات . وقد أظهرت الدراسات المستفيضة أن اقحام مجموعة السيلينوسيانات في المركبات العضوية تعزز الفعالية الدوائية للمركبات عن طريق تزويدها بخصائص تثبيط اكثر فعالية[٧٧]. علاوة على ذلك ، فان استبدال السيلينيوم بالكبريت (أي تحويل سيلينوسيانات إلى ثيوسيانات) في بعض المركبات يقلل من الفعالية العلاجية لهذه المركبات. وأظهرت هذه المركبات انظمة حماية متعددة ضد انواع متعددة من السرطانات , تنظم مستويات الجلوتاثيون المختزل والإنزيمات المضادة للأكسدة ، تعديل مستويات انزيم الترانس اميناز ألانين alanine transaminase levels) [٥٣, ٧٨].(ومن المعروف أن المركبات العضوية السيلينية يتم تأيضها إلى السلينولات المقابلة (corresponding selenols) وهناك بحوث عدة تثبت نشاطها المضاد للسرطان فهذه المركبات تساعد على موت الخلايا السرطانية.

إلى جانب خواصها المضادة للأورام ،إذ أظهرت السلينوسيانيت العضوية نشاطاً مضاداً مختبرياً للطفيليات كداء الليشمانية مختبرياً[٧٩]. ومن المثير للاهتمام ، أن بعضهم يمتلك نشاطاً أفضل بكثير من الأدوية الموصوفة عن طريق الفم (Impavido and edlfosine) يعزى ذلك إلى قدرتها على التداخل مع نظام اكسدة الطفيليات واختزالها (system parasites redox)[٧٦].
من بين أكثر السيلينيوسيات دراسة المستخدمة في العلاج الكيميائي للسرطان سيلينوكوكسيب - ١ [Selenocoxib-1، 4,1- فينيلين بس (الميثيلين) سيلينوسيانات ١،٤-phenylenebis(methylene)selenocyanate، ثنائي فينيل ميثيل سيلينوسيانات و ثنائي فينيل ميثيل (diphenylmethylselenocyanate).
أظهر(diphenylmethylselenocyanate) أنه أكثر المركبات كفاءة وفعالية ضد مرض السرطان تم تحضير ١،٤- فينيلين بس (الميثيلين) سيلينوسيانات ١،٤- Phenylenebis(methylene)selenocyanate)) لتكون أقل سمية وأكثر فعالية من سيلينوميثيونين ((11-118) selenomethionine) وقد وجد أن هذا المركب يقلل من تراكيزسيكلوكسيجيناز -٢(cyclooxygenase-2) وفسفوليباز (phospholipase)[٧٨].علاوة على ذلك ، يوفر سيلينوكوكسيب -١ ميزة في التثبيط و السيطرة على نمو سرطان البروستات[٨٠]

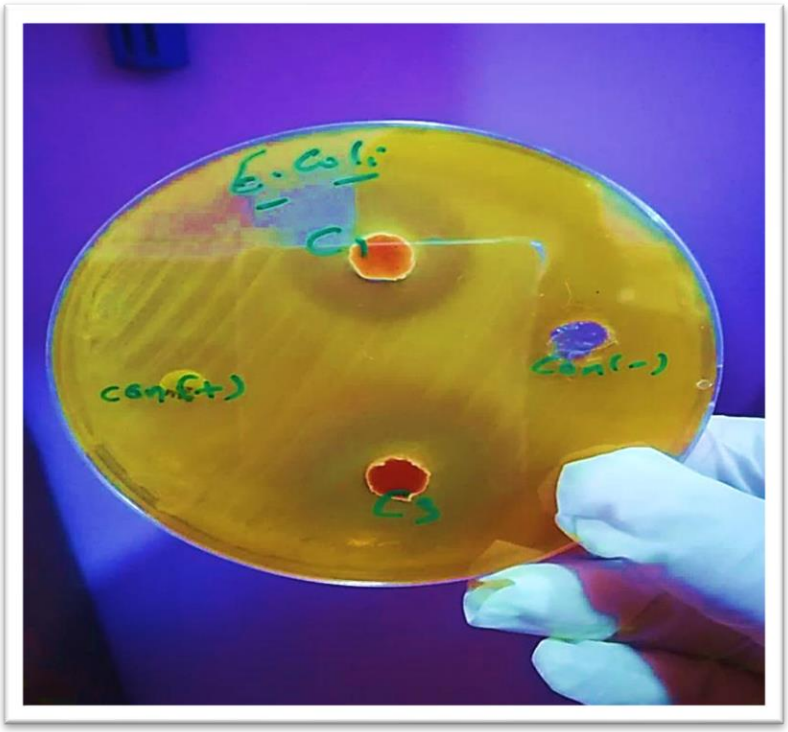
تم اجراء اختبار مضادات البكتريا للمركبات المحضرة للمركب الاول (C1) والمركب الثالث (C5) ضد اربعة انواع من البكتريا وهي (Escherichia coli) إشريكية قولونية سالبة الصبغة, (Staphylococcus aureus) مكورة عنقودية ذهبية موجبة الصبغة , (Klebsiella pneumoniae) الكلبسيلة الرئوية سالبة الصبغة و (Streptococcus) بكتريا عقدية موجبة الصبغة, ومن دراسة نتائج الفعالية للمركبات مع الانواع الاربعة للبكتريا وباستخدام مذيب ثنائي مثيل سلفوكساييد (DMSO) وكانت لهذه المركبات فعالية عالية نحو البكتيريا والمبينة في الجدول (٤-٥) .ومن خلاله نلاحظ ان منطقة التثبيط تكون اكبر لمركب ثنائي السلينايد واقل منها بالنسبة لمركب السلينوسيانيت.

No	Type of bacterial	Inhibition zone C_1	Inhibition zone C_5	Con (+)	Con (-)
1	Escherichia coli(25)mg Inhibition	20	28	15	Zero
2	Staphylococcus aureus (25)mg	22	25	Zero	Zero

	Inactivation				
3	**Klebsiella pneumoniae (25)mg** **Inhibition**	18	32	8	Zero
4	**Streptococcus (25)mg** **Inactivation**	20	25	10	Zero

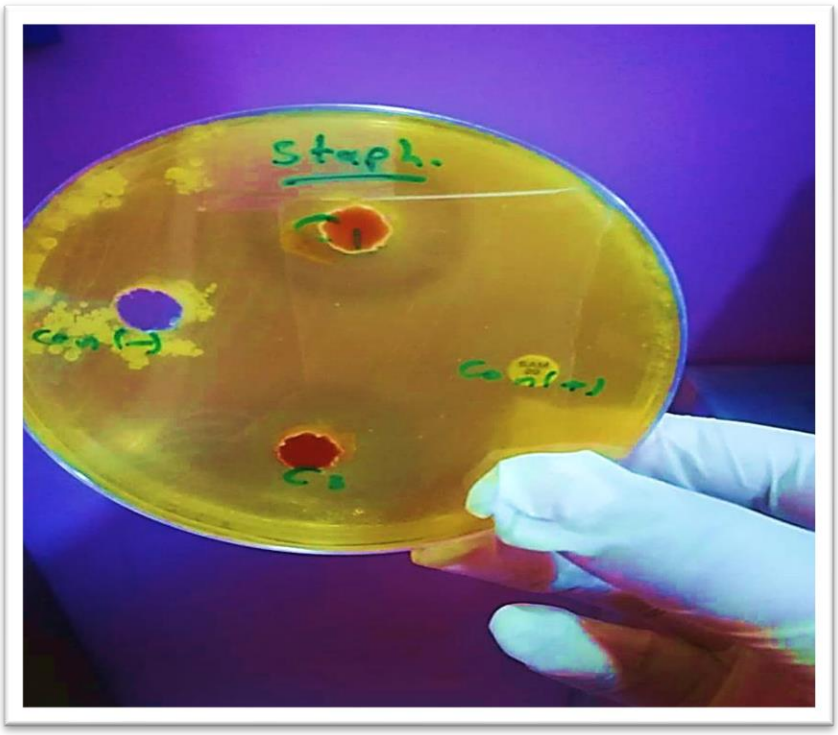
الجدول (٤-٥) يبين التراكيز المستخدمة من المركبات المحضرة ومنطقة التثبيط والتنشيط .

الاشكال التوضحية للانواع الاربعة من البكتريا



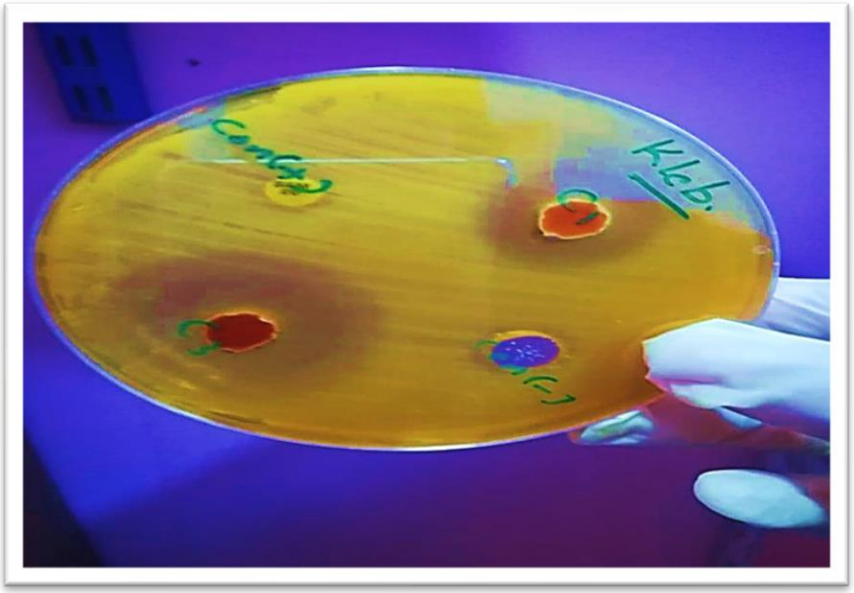
Escherichia coli(25)mg(٢٦-٤) شكل

Inhibition



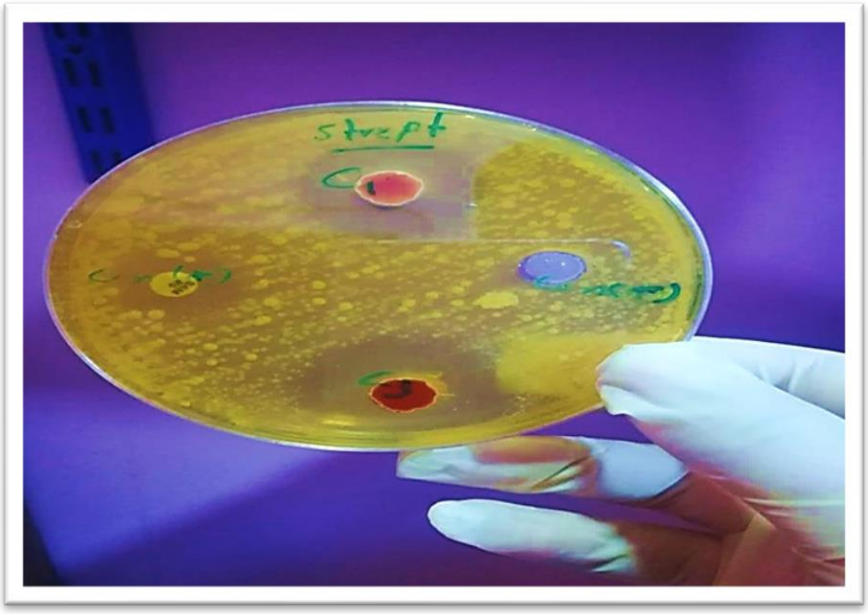
***Staphylococcus aureus (25)mg*(٢٧-٤)شكل**

Inactivation



Klebsiella pneumoniae (25)mg **شكل(٤-٢٨)**

Inhibition



Streptococcus (25)mg(٤-٢٨)شكل

Inactivation

الاستنتاجات

١- المركبات الجديدة المحضرة هي مركبات عضوية فلزية مشتقة من ٨- هيدروكسي كوينولين .

٢- اظهرت المركبات المحضرة ومنها 7-(selenocyanato methyl)quinolin-8-ol و 7,7-(diselanediylbis(methylene))bis(quinolin-8-ol)انها تعمل كمضادات للبكتريا.

التوصيات

١- تحضير مركبات مشابهة لعنصر الكبريت والتلوريوم.

٢- المركبات العضوية الفلزية الجديدة التي حصلنا عليها نوصي باحتمالية استخدامها كعلاجات مضادة للسرطان والالتهابات نتيجة لفعاليتها العالية.

٣- اكمال البحث للحصول على مركبات متعددة تمتلك فعالية جيدة باختزال مركبات ثلاثي البروم والكلور واليود.

١. Nogueira, C.W., N.V. Barbosa, and J.B. Rocha, *Toxicology and pharmacology of synthetic organoselenium compounds: an update.* Archives of Toxicology, 2021: p. 1-48.

٢. Reddy, K.M. and G. Mugesh, *10 Understanding the Chemistry of Selenoenzymes by Synthetic Organoselenium Compounds.* Organoselenium Chemistry, 2020: p. 381.

٣. Duchardt, M., et al., *Flow-Oriented Synthesis of Li2S and Li3PS4· 3THF: Opening Up a Completely Solvent-Based Solid Electrolyte Value Chain.* ACS Applied Energy Materials, 2020. **3**(7): p-٦٩٣٧ . ٦٩٤٥.

٤. Thompson, D.P. and P. Boudjouk, *A convenient synthesis of alkali metal selenides and diselenides in tetrahydrofuran and the reactivity differences exhibited by these salts toward organic bromides. Effect of ultrasound.* The Journal of Organic Chemistry, 1988. **53**(9): p. 2109-2112.

٥. Zade, S.S., H.B. Singh, and R.J. Butcher, *The Isolation and Crystal Structure of a Cyclic Selenenate Ester Derived from Bis (2, 6-diformyl-4-tert-butylphenyl) diselenide and its Glutathione Peroxidase-Like Activity.* Angewandte Chemie, 2004. **116**(34): p. 4613-4615.

٦. Kheirabadi, R., M. Izadyar, and M.R. Housiandokht, *Computational kinetic modeling of the selenol catalytic activity as the glutathione peroxidase nanomimic.* Journal of theoretical biology, 2016. **409** :p. 108-114.

٧. Selvakumar, K., H.B. Singh, and R.J. Butcher, *Aromatic ring strain in arylselenenyl bromides: Role in facile synthesis of selenenate esters via intramolecular cyclization.* Chemistry–A European Journal, 2010. **16**(34): p. 10576-10591.

.٨ Husain, A.A. and K.S. Bisht, *Thiocyanation and 2-amino-1, 3-thiazole formation in water using recoverable and reusable glycosylated resorcin [4] arene cavitands.* The Journal of Organic Chemistry, 2020. **85**(15): p. 9928-9935.

.٩ Shaaban, S., M.A. Arafat, and W.S. Hamama, *Vistas in the domain of organoselenocyanates.* 2014.

.١٠ Muttenthaler, M. and P.F. Alewood, *Selenopeptide chemistry.* Journal of peptide science: an official publication of the European Peptide Society, 2008. **14**(12): p. 1223-1239.

.١١ Guillemin ,J.-C., *Organic selenocyanates: synthesis, characterization and uses in chemistry and biology.* Current Organic Chemistry, 2011. **15**(11): p. 1670-1687.

.١٢ Salsi, F., et al., *Effect of Fluorination on the Structure and Anti-Trypanosoma cruzy Activity of Oxorhenium (V) Complexes with S, N, S-Tridentate Thiosemicarbazones and Benzoylthioureas. Synthesis and Structures of Technetium (V) Analogues.* Inorganic chemistry, 2019. **58**(15): p. 10129-10138.

.١٣ Cataldo, F., *13C NMR and FT-IR spectra of thiocyanogen, S2*) *CN) 2, selenocyanogen, Se2 (CN) 2, and related compounds.* Polyhedron, 2000. **19**(6): p. 681-688.

.١٤ Al-Tamimi, A.-M.S., et al., *Discovery of new organoselenium compounds as antileishmanial agents.* Bioorganic chemistry, 2019. **86**: p. 339-345.

.١٥ Guillemin ,J.-C., et al., *Allenyl and alkynyl selenols and selenocyanates. Synthesis, spectroscopic characterization, and quantum chemical study.* Organometallics, 2007. **26**(10): p. 2507-2518.

.١٦ Krief, A. and M. Derock, *Synthesis of diselenides and selenides from elemental selenium.* Tetrahedron letters, 2002. **43**(16): p. 3083-3086.

.١٧ Botteselle, G.D.V., *Desenvolvimento de novas metodologias para a preparação de disselenetos orgânicos funcionalizados: aplicações sintéticas e biológicas.* 2013.

.١٨ Krief, A., C. Delmotte, and W. Dumont, *Chemoselective reduction of organoselenocyanates to diselenides and selenolates.* Tetrahedron, 1997. **53**(36): p. 12147-12158.

.١٩ Jacob, L.A., et al., *A facile synthesis of substituted benzyl selenocyanates.* Molecules, 2004. **9**(8): p. 622.٦٢٦-

.٢٠ Bayeh, L., P.Q. Le, and U.K. Tambar, *Catalytic allylic oxidation of internal alkenes to a multifunctional chiral building block.* Nature, 2017. **547**(7662): p. 196-200.

.٢١ Banert, K. and C. Toth, *Synthesis and reactions of vinyl isoselenocyanates* .Angewandte Chemie International Edition in English, 1995. **34**(15): p. 1627-1629.

.٢٢ Paulmier, C. and F. Outurquin, *Thiényl-et séléniénylthiocyanates et sélénocyanates. 4. Synthèses de thiéno [2, 3-d] thiazoles, de thiéno [2, 3-e] thiazines et de quelques analogues sélénophéniques.* Journal of Heterocyclic Chemistry, 1983. **20**(1): p. 113-119.

.٢٣ Toshimitsu, A., *Organic selenocyanates, tellurocyanates and related compounds.* PATAI'S Chemistry of Functional Groups, 2009.

.٢٤ SUZUKI, H., *COPPER (I) IODIDE-CATALYZED REACTION OF NON-ACTIVATED ARYL IODIDES AND POTASSIUM SELENOCYANATE. A NEW CONVENIENT ROUTE TO ARYL SELENOCYANATES.* 1977.

.٢٥ Suzuki, H., K. Miyoshi, and M. Shinoda, *The Copper (I) Iodide-assisted Reaction of Nonactivated Aryl Iodides with Some Alkali Metal Pseudohalides.* Bulletin of the Chemical Society of Japan, 1980. **53**(6): p. 1765-1766.

.٢٦ Wu, D., et al., *Lewis Acid-Catalyzed Asymmetric Selenocyanation of β-Ketoesters with N-Selenocyanatosaccharin.* The Journal of organic chemistry, 2019. **85**(2 :(p. 934-941.

.٢٧ Meinke, P.T. and G.A. Krafft, *Synthesis and cycloaddition reactivity of selenoaldehydes.* Journal of the American Chemical Society, 1988. **110**(26): p. 8671-8679.

.٢٨ Alcolea, V., et al., *Chalcogen containing heterocyclic scaffolds: New hybrids with antitumoral activity.* European journal of medicinal chemistry, 2016. **123**: p. 407-418.

.٢٩ Rheinboldt, H. and E. Giesbrecht, *Über Selenensäuren, IV. Mitteil.: 2-Benzoyl-benzol-selenensäure-(1).* Chemische Berichte, 1956. **89**(3): p. 631-636.

.٣٠ Gosselck, J. and E. Wolters, *Untersuchungen an Organoselen-Verbindungen, IV. Darstellung von Selenoflavanonen.* Chemische Berichte, 1962. **95**(5): p. 1237-1244.

.٣١ Zimmermann, E.G., et al., *A selenium-based ionic liquid as a recyclable solvent for the catalyst-free synthesis of 3-selenylindoles.* Molecules, 2013. **18**(4): p. 4081-4090.

.٣٢ Crich, D., et al., *Catalysis of stannane-mediated radical chain reactions by benzeneselenol.* Accounts of chemical research, 2007. **40**(6): p. 453-463.

.٣٣ Rakesh, P., et al., *Synthesis, structure and reactivity of [o-(2, 6-diisopropylphenyliminomethinyl) phenyl] selenenyl selenocyanate (RSeSeCN) and related derivatives.* Dalton Transactions, 2014. **43**(25): p. 9431-9437.

.٣٤ Goswami, S., et al., *Triselenium dicyanide (TSD) as a new cyanation reagent: Synthesis of cyano pterins and quinoxalines along with library of cyano N-heterocyclic compounds.* Synthetic Communications®, 2009. **39**(3): p. 407-415.

.٣٥ Nefedov, V., et al., *OXIDATIVE SUBSTITUTION. XIV. SUBSTITUTION OF HALOGEN IN AN AROMATIC NUCLEUS.. NEW CONCEPTS OF THE MECHANISM OF EFFECT OF CUX2.* Chemischer Informationsdienst, 1981. **12**(28): p. no-no.

.٣٦ Avdeenko, A., et al., *Halogenation of N-substituted p-quinone monoimines and p-quinone monooxime ethers: XIV. Halogenation of N-[arylsulfonylimino (phenyl) methyl]-2, 5-dialkyl-1, 4-benzoquinone monoimines and their reduction products.* Russian Journal of Organic Chemistry, 2012. **48**(7): p. 928-937.

.٣٧ Sonawane, A.D., et al., *Synthesis of Seleno-Heterocycles via Electrophilic/Radical Cyclization of Alkyne Containing Heteroatoms.* Advanced Synthesis & Catalysis, 2020. **362**(17): p. 3485-3515.

.٣٨ Bian, H., et al., *Mode-specific intermolecular vibrational energy transfer. I. Phenyl selenocyanate and deuterated chloroform mixture.* The Journal of Chemical Physics, 2010. **132**(18): p. 184505.

.٣٩ Tomoda, S., Y. Takeuchi, and Y. Nomura, *A convenient synthesis of phenyl selenocyanate.* Chemistry Letters, 1981. **10**(8): p. 1069-1070.

.٤٠ Kang, Y.H. and J.L. Kice, *Further studies of selenosulfonation . Photoaddition of bis (p-tolylsulfonyl) selenide and alkaneselenosulfonates to alkenes and the selenosulfonation of. beta.-pinene and 1, 6-heptadiene.* The Journal of Organic Chemistry, 1984. **49**(9): p. 1507-1511.

.٤١ Nair, V., et al., *Recent advances in synthetic transformations mediated by cerium (IV) ammonium nitrate.* Accounts of chemical research, 2004. **37**(1): p. 21-30.

.٤٢ Kaminskii, V.A., et al., *Oxidative coupling of malononitrile with formation of 1, 1, 2, 3, 3-pentacyanopropene salts.* Tetrahedron letters, 2003. **44**(1): p. 139-140.

.٤٣ Burchell, C.J., et al., *E2 (CN) 2 (E= S, Se) and related compounds.* Inorganic chemistry, 2006. **45**(2): p. 710-716.

.٤٤ Adams, C.J., et al., *Cooperative spin transition in the two-dimensional coordination polymer [Fe (4-′٤ ,bipyridine) 2 (NCX) 2]· 4CHCl3 (X= S, Se).* Inorganic chemistry, 2011. **50**(21): p. 10633-10642.

.٤٥ Back, T.G. and D.J. McPhee, *A caveat concerning the use of N-(phenylseleno) phthalimide and tri-n-butylphosphine for the conversion of alcohols to selenides. Formation of 3-phthalimido derivatives from an allylic 3-sterol.* The Journal of Organic Chemistry, 1984. **49**(20): p. 3842-3843.

.٤٦ Renson, M. and J. Piette, *Properties of o-chloroselenobenzoyl chloride. Application to the synthesis of o-alkylselenoacylphenones.* Bull. Soc. Chim. Belg, 1964. **73**: p. 507-517.

.٤٧ Marciniec, K., et al., *Synthesis and anticancer activity evaluation of a quinoline-based 1, 2, 3-triazoles.* Medicinal Chemistry Research, 2017. **26**(10): p. 2432-2442.

.٤٨ Krief, A., W. Dumont, and C. Delmotte, *Reaction of Organic Selenocyanates with Hydroxides: The One-Pot Synthesis of Dialkyl Diselenides from Alkyl Bromides.* Angewandte Chemie International Edition, 2000. **39**(9): p. 1669-1672.

٤٩. Block, E., et al., *Synthesis, properties, oxidation ,and electrochemistry of 1, 2-dichalcogenins.* Journal of the American Chemical Society, 2000. **122**(21): p. 5052-5064.

٥٠. Valentine Jr, D.H. and J.H. Hillhouse, *Alkyl phosphines as reagents and catalysts in organic synthesis.* Synthesis, 2003. **2003**(03): p.٠٣٣٤-٠٣١٧ .

٥١. Koch, R., et al., *[3, 3]-sigmatropic shifts and retro-ene rearrangements in cyanates, isocyanates, thiocyanates, and isothiocyanates of the form RX-YCN and RX-NCY.* The Journal of organic chemistry, 2012. **77**(4): p. 1749-1759.

٥٢. Møllendal ,H., R. Mokso, and J.-C. Guillemin, *A Microwave Spectroscopic and Quantum Chemical Study of 3-Butyne-1-selenol (HSeCH2CH2C⁝CH).* The Journal of Physical Chemistry A, 2008. **112**(14): p. 3053-3060.

٥٣. Abdo, M., Z. Sun, and S. Knapp, *Biohybrid-Se-S-coupling reactions of an amino acid derived seleninate.* Molecules, 2013. **18**(2): p. 1963-1972.

٥٤. Abdelhamid, A.O., A.A. Fahmi, and B.S. Baaui, *Reaction with Hydrazonoyl Halides 64: Synthesis of Some New Triazolino [4, 3-a] pyrimidines, 1, 3, 4-Thiadiazoles, and 5-Arylazothiazoles.* Journal of Heterocyclic Chemistry, 2012. **49**(5): p. 1098-1107.

٥٥. Chauhan, R., et al., *Understanding selenium metabolism in plants and its role as a beneficial element.* Critical Reviews in Environmental Science and Technology, 2019. **49** :(٢١)p. 1937-1958.

٥٦. Marpna, I.D., et al., *Selenocyanation of Aryl and Styryl Methyl Ketones in the Presence of Selenium Dioxide and Malononitrile: An Approach for the Synthesis of α-Carbonyl Selenocyanates.* The Journal of Organic Chemistry, 2020.

.٥٧ Fernando, Q., W. Ludekens, and K. Gnanasoorian, *Chloromethylation of 8-hydroxyquinoline.* Analytica Chimica Acta, 1956. **14**: p. 297-299.

.٥٨ Parr, R.G., *Density functional theory of atoms and molecules*, in *Horizons of quantum chemistry*. 1980, Springer. p. 5.١٥-

.٥٩ Koch, W. and M. Holthausen, *A Chemist's Guide to Density Functional Theory, Wiley*. 2001, VCH, Weinheim, Germany.

.٦٠ Ali, A.M., *Investigations of some antioxidant materials by using density functional and semiempirical theories.* P. hD. Thesis, University of Basrah, College of Science, Department of Physics, 2009.

.٦١ Young, D., *Computational chemistry: a practical guide for applying techniques to real world problems*. 2004: John Wiley & Sons.

.٦٢ Lipkowitz, K.B. and D.B. Boyd, *Reviews in Computational Chemistry 6*. 1995: Wiley Online Library.

.٦٣ Hassan, F., B. Daraam, and A. Shwya, *Density Functional Theory Investigation for Sodium Atom on Copper Clusters*. 2015, IJSR.

.٦٤ Kittel, C., P. McEuen, and P. McEuen, *Introduction to solid state physics*. Vol. 8. 1996: Wiley New York.

.٦٥ Suzuki, M.S., *PHYS. 472/572 (Solid State Physics).* 2019.

.٦٦ Udhayakala, P., et al., *Quantum chemical vibrational study, molecular property and HOMO-LUMO energies of 3-bromoacetophenone for Pharmaceutical application.* J. Chem. Pharm. Res, 2011. **3**(3): p. 610-625.

.٦٧ Beistel, D., *A computer-oriented course in chemical spectroscopy.* Journal of Chemical Education, 1973. **50**(2): p. 145.

.٦٨ Kukolich, S.G., *Microwave Spectroscopy and Molecular Structure: Some Undergraduate Laboratory Projects.* American Journal of Physics, 1973. **41**(9): p. 1084-1086.

.٦٩ Lee, C., W. Yang, and R.G. Parr, *Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density.* Physical review B, 1988. **37**(2): p. 785.

.٧٠ Kaya, S., et al., *Effect of some electron donor and electron acceptor groups on stability of complexes according to the principle of HSAB.* Journal of New Results in Science, 2014. **3**(4): p. 1-1.

.٧١ Baer, R. and D. Neuhauser, *Density functional theory with correct long-range asymptotic behavior.* Physical review letters, 2005. **94**(4): p. 043002.

.٧٢ Nguyen, N., et al., *Melanoma chemoprevention in skin reconstructs and mouse xenografts using isoselenocyanate-4.* Cancer prevention research, 2011. **4**(2): p. 248.٢٥٨-

.٧٣ Ji, W., et al., *Synthesis and study of three novel macrocyclic selena [n] ferrocenophanes containing a naphthalene unit.* Inorganic chemistry, 2013. **52**(10): p. 5786-5793.

.٧٤ Ross, T.M., et al., *Polymorphism and spin crossover in mononuclear Fe II species containing new dipyridylamino-substituted s-triazine ligands.* Dalton Transactions, 2012. **41**(5): p. 1512-1523.

.٧٥ Baker, M., *Barnard., PJ; Brayshaw, SK; Hickey, JL; Skelton, BW; White, AH.* Dalton Trans, 2005. **1**: p. 37-43.

.٧٦ Plano, D., et al., *Selenocyanates and diselenides: a new class of potent antileishmanial agents.* European journal of medicinal chemistry, 2011. **46**(8): p. 3315-3323.

.٧٧ Gowda, R., et al., *Simultaneous targeting of COX-2 and AKT using selenocoxib-1-GSH to inhibit melanoma.* Molecular cancer therapeutics, 2013. **12**(1): p. 3-15.

.٧٨ Facompre, N.D., et al., *1, 4-phenylenebis (methylene) selenocyanate, but not selenomethionine, inhibits androgen receptor and Akt signaling in human prostate cancer cells.* Cancer Prevention Research :(٨)٣ .٢٠١٠ ,p. 975-984.

.٧٩ Bajor, G., et al., *Alkenyl selenols and selenocyanates: synthesis, spectroscopic characterization by photoelectron spectroscopy, and quantum chemical study.* Chemistry–A European Journal, 2004. **10**(15): p. 3649-3656.

.٨٠ Das, R.K ,.S.U. Hossain, and S. Bhattacharya, *Protective effect of diphenylmethyl selenocyanate against CCl4-induced hepatic injury.* Journal of Applied Toxicology: An International Journal, 2007. **27**(6): p. 527-537.

ABSTRACT

This study included the preparation of new organometallic compounds for the element selenium. The compound 7-chloromethyl-8-hydroxyqunolinehydrochloride, was prepared from the reaction of 8-hydroxyquinoline with concentrated hydrochloric acid and formaldehyde and it was reacted with selenium and sodium cyanide using dimethyl sulfoxide as a solvent. The reaction was carried out in an inert atmosphere of nitrogen to obtain 7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline hydrochloride,7-methylene selenocyanato-8-hydroxy qunoline hydrochloride was reacted with halogens such as iodide, thionyl chloride and bromide, with a molar ratio (1: 1) of the number of moles, In addition to reducing the compound 7-methylene seleno tri bromoid-8-hydroxyquinolinehydrochloride in the presence of a solvent such as ethanol, then adding drops of hydrazine dissolved in absolute ethanol to obtain the compound Di- (7-methylene-8-hydroxy quinoline) diselenide hydrochloride with a reddish brown color, and Reaction of 7-methylene selenocyanato-8-hydroxy quinoline with Na and in the presence of a suitable solvent such as THF and using nitrogen as an inert gas and then reducing it to the compound Di- (7-methylene-8-hydroxy quinoline) selenide hydrochloride by adding the compound 7-chloromethyl-8-hydroxyqunoline hydrochloride . These compounds were diagnosed using infrared technology, proton nuclear magnetic resonance technology, and mass spectroscopy. Selenocyanate and di-selenide were tested as anti-bacterial and proved to be effective against four types of bacteria.

Republic of Iraq

Ministry of Higher Education & Scientific Research

University of Thi-Qar

College of Science

Preparation, Identification and study of the electrical properties for some anew organoselenium compounds derived from 8-hydroxy quinoline

A Thesis

Submitted to the Council of College of Science / Thi-Qar University, as Partial Fulfillment of the requirements for the degree master of in Chemistry

By

Mohammed Alwan Kadhim

B.Sc.2016

Supervisor by

Asst. Prof .Dr. Nuha Hussein Mzher

2021A.D
1442A.H