جـــامعة بنهـــا
كلية العلوم
قسم الكيمياء

# العلاقة بين التركيب ونشاط بعض المركبات غير متجانسة الحلقة

**رسالة**
**مقدمة للحصول على درجة الدكتوراة فى فلسفة العلوم فى الكيمياء**

**من الطالبة**

**صفاء عبد الفتاح السيد رجب**
**ماجستير الكيمياء - جامعة الأسكندرية**

**تحت اشراف**

الأستاذ الدكتور
**السيد حلمى العشرى**
استاذ متفرغ الكيمياء العضوية
قسم الكيمياء - كلية العلوم
جامعة الأسكندرية

المرحوم الأستاذ الدكتور
**سامى عيسوى**
استاذ متفرغ الكيمياء العضوية
قسم الكيمياء – كلية العلوم
جامعة بنها

**2011**

# الملخص العربي


تحتوي هذه الرسالة علي اربعة أجزاء رئيسية :

الفصل الأول من الرساله يحتوي علي تجميع وعرض للمركبات العضوية الغير متجانسة التي تم دراستها كمثبطات لتآكل الفولاذ في الوسط الحامضي. كما يحتوي علي الهدف من إجراء هذه الدراسه ويشرح بشكل مباشر أهمية البحث وأهمية إستخدام المدلول الحسابي في توقع المركبات التي يمكن إستخدامها كمثبطات لتآكل الفولاذ (الإستيل).

الفصل الثانى من هذه الرساله تم تقسيمه إلي خمس أجزاء: حيث يحتوي الجزء الأول علي استخدام حسابات الكوانتم الكيميائية لمركبات الأنيلين وبعض مشتقاتها بإستخدام طرق , MNDO & MINDO/3 , PM3 AM1 في كل من الهواء والوسط المائي ودراسة علاقة نتائج حسابات الكوانتم السابقه بمعدل تأثير مركبات الأنيلين كمثبطات لتآكل الفولاذ في الوسط الحامضي والتي تم الحصول عليها بالتجربه العمليه من أجل الوصول للعلاقات الرياضيه بين حسابات الكوانتم ونتائج المعمل وكذلك للحصول علي المودل الحسابي وإستخدامه في عمل توقع لتأثير مركبات أخري لم يتم دراستها معمليا . وقد إستخدمنا في هذه العلاقات كل من مجموع الشحنات السالبه علي المركبات (TNC) ومستويات معدلات الطاقه للمدار المشغول ($E_{HOMO}$) وللمدار الفارغ ($E_{LUMO}$) وكذلك طاقة تنافر الجزيئات (CCR) و $\mu$ ، الطاقة الكلية (TE) وحجم الجزئ والإستقطاب ($\pi^*$) وقد وجدت علاقه واضحه بين هذه النتائج وبين معدلات تثبيط التآكل للمواد تحت الدراسه. هذا وقد تم دراسة مستويات أعلي من حسابات الكوانتم من أجل تأكيد النتائج وهذا بإستخدام حسابات Single Point للشكل الذي تم الحصول عليه من حسابات AM1 وذلك بإستخدام نظريات الكوانتم الأعلي مثل B3LYP/6-31G . تم تقديم معادلات رياضيه تبين العلاقه وذلك بإستخدام التحليل الخطي للنتائج بإستخدام برنامج SPSS.

وبإستخدام المعادلات التي تم الحصول عليها وجد أن الحيود في النتائج كان يتراوح بين ٠.٠٣ إلي ٢.٣٧ ومن ٠.٠٢ إلي ٢.٧٤ بالنسبه للوسط الهوائي والمائي علي الترتيب . وقد وجد أن معدلات تثبيط التآكل مرتبطة بمعدلات مستوي الطاقة في مـــدار $E_{LUMO}$ في معظم المركبات التي تم دراستها . وبإستخدام العلاقات الرياضية الخطيه التي تم الحصول عليها أمكن توقع معدلات تثبيط تآكل الفولاذ لبعض مشتقات مركب الأنلين .

الجزء الثاني من الفصل الثانى يحتوي علي دراسة العلاقه بين نتائج الكوانتم لبعض مركبات الهيدرازيد الأروماتيه وبعض مشتقات Schiff base المحتويه علي البريدين والبيرميدين والأمينوفنيلين والسليسيل داي أمين ونتائج إستخدامها كمثبطات لتآكل الفولاذ في وسط حمضي عبارة عن ١ مول من حامض الهيدروكلوريك. هذا وقد تم استخدام طرق MNDO , MINDO/3 , PM3 , AM1 . وقد إستخدمت النتائج التي تم الحصول عليها من الطرق السابقة مثل : $E_{HOMO}$ , $E_{LUMO}$, $\mu$, TE, Vi , $\pi^*$ وايجاد علاقة بينها وبين النتائج المعملية لاستخدام المركبات السابقة كمثبطات لتاكل الفولاز فى الوسط الحامضى وقد وضحت النتائج التى تم الحصول عليها وجود علاقة جيدة حيث وصل معامل العلاقة الى اكبر من 0.96 $r >$ .

الجزء الثالث من الفصل الثانى يحتوى على دراسة العلاقة الرياضية بين حسابات الكوانتم لبعض مشتقات البنزاميدازول وخواصها كمثبطات لتآكل الفولاذ فى الوسط الحامضى وقد تم حساب , μ ,Vi ,π* $E_{LUMO}$, $E_{HOMO}$, TNC بإستخدام AM1 وتم تحقيق النتائج بإستخدام حسابات Single Point بإستخدام طريقة * B3LYP/6-31G كما تم حساب Optimization بنفس الطريقة وتم الحصول علي العلاقات بين النتائج المعملية لتثبيط التآكل ونتائج حسابات الكوانتم بإستخدام برنامج SPSS. وإستخدام المعادلات الرياضية الخطية التي تم الحصول عليها في توقع نتائج بعض مشتقات البنزاميدازول كمثبطات لتآكل الفولاذ في الوسط الحامضي وقد وجد أن الزيادة في طاقة مدار $E_{HOMO}$ تؤدي إلي زيادة في نسبه تثبيط تآكل الفولاذ في الوسط الحامضي.

الجزء الرابع من الفصل الثانى يعرض دراسة الكوانتم لبعض مشتقات مركبات التريازول والاكسادازول والثايادازول التي تم دراستها كمثبطات لتآكل الفولاذ في الوسط الحامضي وقد استخدمت طرق MNDO & MINDO/3 , PM3 , AM1 في حساب الكوانتم وتم عمل علاقات بين نتائج المعمل , U , Vi , π* $E_{LUMO}$, $E_{HOMO}$, TNC, CCR وقد استخدمت برنامج SPSS في الحصول علي العلاقات الرياضية وفي عمل معادلات غير خطية وتم حساب معدلات التثبيط بإستخدام المعادلات التي تم الحصول عليها ووجد أن معدل الحيود بين النتائج المعملية والحسابية يتراوح بين± 0.03 و± 4.18 وهي نتائج جيدة جدا. ووجد أيضا ان نتائج التثبيط المعملية تتناسب بشكل جيد مع $E_{HOMO}$, $E_{LUMO}$, μ.

وقد تم التحقق من نتائج الكوانتم بإستخدام Single Point للمركبات التي تم حساب AM1 لها كما تم إستخدام Optimize بإستخدام * B3LYP/6-31G كمستوي أعلي في حسابات الكوانتم. وأستخدمت المعادلات التي تم الحصول عليها في عمل توقع لنتائج بعض المركبات المتشابهه للمركبات السابقة كمثبطات لتأكل الفولاذ في الوسط الحامضي.

الجزء الخامس والأخير من الفصل الثانى: يعرض حسابات الكوانتم بإستخدام AM1 , * B3LYP/6- 31G لعشر مركبات من مشتقات البريدين تم دراستها كمثبطات لتآكل الفولاذ في الوسط الحامضي لإيجاد العلاقة بين حسابات الكوانتم والنتائج المعملية للمركبات السابقة كمثبطات لتآكل الفولاذ في الوسط الحامضي وقد أستخدم كل من $E_{LUMO}$, $E_{HOMO}$, TNC, μ , Vi , π* في ايجاد العلاقات الرياضية بإستخدام برنامج SPSS.

تم الحصول علي معادلات غير خطية أثبتت وجود علاقة قوية بين حسابات الكوانتم والنتائج المعملية وأمكن أستخدام هذه المعادلات في توقع نتائج ٢٤ مركب جديد كمثبطات لتأكل الفولاذ في الوسط الحامضي.

الفصل الثالث يحتوي علي الطرق المعملية المستخدمة في حساب الكوانتم وفي عمل العلاقات الرياضية والمعادلات الخطية والغير خطية.

الفصل الرابع يقدم تعليق مفصل علي النتائج التي تم التوصل اليها في هذه الرسالة ومدي امكانية استخدام المعادلات التي تم الحصول عليها سواء المعادلات الخطية والغير خطية في عمل توقع للنتائج المعملية لبعض المركبات من حيث إمكانية إستخدامها كمثبطات لتأكل الفولاذ في الوسط الحامضي.

وتختتم الرسالة في نهايتها بالمراجع التي تم الإعتماد عليها في الدراسة.