البحث الأول

تحويل الثيول إلى مشتق قاعدة شيف ثنائي كبريتيد: التوليف والتركيب الجزيئي والتركيب البلوري ودراسات

2019/7/1

الملخص العربي:

يعد تحويل مركبات الثيول الى ثنائي كبريتيدات المقابلة في ظل ظروف محايدة ومعتدلة طريقًا مهمًا في الكيمياء الصناعية العضوية والعمليات البيولوجية. لذلك فى هذا البحث، قمنا بتحضير قاعدة شيف ثنائي الكبريتيد بطريقة سهلة من قاعدة شيف بها مجموعة ثيول. في البداية تم تفاعل 2-هيدروكسي نفثالدهيد و2-أمينوثيوفينول في مذيب الإيثانول ليعطي قاعدة شيف(1) 2-(ميركابتوفينيل) إيمينو) ميثيل(نفثالين-2-أول). تم ذوبان مركب الثيول في البنزين ثم تسخينه حتى الغليان لمدة 3 ساعات في الهواء ليعطي مركب ثنائي الكبريتيد (2). للحصول على بلورات نقية من مركب الكبريتيد تم تسخينه في محلول البنزين ثم تبريده في درجة حرارة الغرفة. تم اثبات البنية الهيكلية لكلا المركبين باستخدام التحليل العنصري CHN ، الاشعة تحت الحمراء FTIR، والرنين النووي المغناطيسي للبروتون ^{1}HNMR و قياس طيف الكتلة Mass spectrometry . تم ايضا فصل المركب 2 في صورة بلورية مما ساعد على اثبات الشكل الفراغي بواسطة قياسه بالأشعة السينية احادية البلورة X-ray single crystal. لقد أظهرت الأشعة السينية أن المركب 2 متماثل مع محور تناظر C_2 والذي يمرعبر رابطة S-S أيضاً أثبتت أن طول رابطة S-S البالغ 2.023 Å قريب من متوسط القيمة الملحوظة في مركبات عضوية أخرى بها نفس المجموعة.

تم دراسة المحاكاة الحسابية المستندة إلى نظرية دالة الكثافة الوظيفية (DFT) للتحقق من بنية المركبات ودراسة خواصه التفاعلية بمعرفة HOMO and LUMO. اعتماد هذه الطريقة المعتدلة في تحضير مثل هذه المركبات لها مردودها الفعال في تحضير المركبات العضوية والمستحضرات الصيدلانية.