ملخص الرسالة:

مركبات التريازولوبيرميدين (Triazolopyrimidine) هي مركبات عطرية غير متجانسة وتتكون من حلقتين الاولى هي حلقة سداسية البرميدين (pyrimidine) والاخرى حلقة خماسية تريازول (triazoles)، ينتج عن ارتباط الحلقتين اربع مجموعات من المتشكلات تختلف بترتيب ذرات النيتروجين داخل الحلقة السداسية والخماسية اثنين من هذه المتشكلات هي مركبات تتكون بسرعة (Kinetically favor) وهي 4,3-a & 4,3-c مع العلم انها غير مستقرة من ناحية الديناميكا الحركية، المجموعتان الاخريان 1,5-a & 1,5-c هما مستقرتان حراريا (thermodynamically stable).

احد هذه المتشكلات (1,5-a) تم دراستها بشكل مستفيض من ناحية التحضير العضوي للمركبات ودراسة تأثيراتها البيولوجية وتحضير معقدات من المركبات وقد وجدت كيمياء التشاركية ثرية بالتشكيلات المختلفة التي تم تحضيرها بسبب أن المركب يمكن أن يتشارك المعدن بطرق وأماكن ارتباط مختلفة تم تحضيرها بسبب أن المركب يمكن أن يكون روابط بطرق وأماكن ارتباط مختلفة مما أدى إلى تحضير مركبات أحادية، ثنائية، ومركبات متسلسلة. بعض هذه المركبات كحان له تأثيرات بيولوجية واضحة وبعضها كان له أهمية من ناحية فيزيائية.

في هذه الرسالة قمنا بتحضير ودراسة المركب 7,8-dihydro-7-oxo-1,2,4-triazolo[4,3-a]pyrimidine، تحضيره وتشخيصه بواسطة التقنيات المختلفة وتحضير مركبات معقدة منه. لا يوجد دراسات سابقة في هذا الموضوع وهذه تعتبر بداية مسار بحثي جديد في الكيمياء التشاركية لهذا المتشكل سيما أن هذا المركب يعتبر غير مستقر من ناحية الديناميكا الحركية، خلال هذا البحث قمنا بدراسة بداية هذا المركب من ناحية نظرية باستخدام طريقة semiempirical والتي هي جزء من موضوع الكيمياء الحسابية (Computational chemistry) وقد تم التعرف على (tautomer) الأكثر استقرارا وتم احتساب توزيع الشحنات، الكثافة الإلكترونية و وحسابات الأفلاك الجزيئية لهذا المركب ومن هذه الدراسة تبين انه لا يوجد مكان ارتباط مفضل لعمل روابط تشاركية في المعقدات.

بعد تحضير المركب استخدم في تحضير عدد من المعقدات لبعض لمعادن من الدورة الرابعة والخامسة للعناصر الانتقالية و كنتيجة لذلك حصلنا على عدد من المركبات بشكل بلوري مما سمح لنا تشخيصها بواسطة أشعة X

ومن هذه المركبات التي تم تحضيرها $CuL_2Cl_2.(H_2O)_3$، $CuL_2Cl_2.(H_2O)$، $NiL_2(H_2O)_5$، $Ni_9L_8(NO_3)_4(NH_4)_3.(H2O)_{16}$، و $Ag_2L_2(NO_3)_2.(H_2O)_2$ فصل منها مركبي الفضة والنيكل على شكل بلوري.

بالنسبة لمركب النيكل $Ni_9L_8(NO_3)_4(NH_4)_3.(H2O)_{16}$ تكون مركب مبعثر(cluster) يتكون من تسع ذرات نيكل وجد أن ligand ارتبط معه بثلاث أماكن مختلفة N1,N2 & O بدون تفضيل احدها على الآخر وهذا يتفق مع الدراسة النظرية، وبعد الدراسات المغناطيسية وجد أن له صفات ferromagnetic & antiferromagnetic وهذه المركبات لها تطبيقات في الالكترونيات في مجال تخزين المعلومات في الحاسوب.

وخلال محاولتنا تحضير معقد للكوبالت فصلت مادة على شكل بلوري شخصت باستخدام أشعة X وتبين انه المركب المتشكل الآخر وهو 1,5-a تحول خلال عملية التحضير وذلك حسب الطريقة التي ذكرت هذه العملية (Dimroth rearrangement) .