وصف و دراسات حركيه حراريه على بعض مركبات انتقال الشحنة لمستبدلات ٤,٤'- الباي بيريديليوم

ليلى محمد عياده الحربي

المستخلص

مركبات٤,٤'- الباي بيردين أكتسبت أهميه كبرى نتيجة لتطبيقاتها الواسعه في المجالات المختلفة و لكون متراكبات انتقال الشحنه تعطى فرصه لتحسين الخواص الفيزيائيه و الكيميائيه للمعطيات المختلفه فأنه تم تحضير مركبات انتقال شحنه مختلفة من ٤,٤'- باي بيردين و مشتقاته ن،ن'- داي الكايل مع ٣,٢ – داي كلورو-٦,٥-داي سيانو-١,٤- بينزوكينون (DDQ)، ٥,٢ – داي كلورو-٦,٣-داي سيانو-٤,١- بينزوكينون (CHA)، – داي كلورو ١,٤- بينزوكينون (CHL). و لقد تمت دراسة النسبه التركبيه للمركبات المختلفه بواسطة طريقة جوب ، و لقد تم حساب الدوال الثيرموديناميكيه(الطاقة الحره (ΔG)، الانثالبي(ΔH) و الانتروبي (ΔS)) ، حساب ثابت معدل التفاعل(*k*)، و الطاقه التنشيطيه (Ka) . كما تم دراسة حركيه حراريه لهذه المركبات و منها تعرفنا على درجة ثباتها و مكانيكية التكسر الحراري لهذه المركبات . و قد تم دراسة التكسير الحراري في الهواء باستخدام طرق التحليل الحراري المختلفة . و قد تم دراسة حركية خطوات التكسير الحراري باستخدام طرق التحليل الحراري الوزني بالطرق الغير ايزوثرمية . و قد موقشت النتائج في ضوء طرق التحليل التكاملي المختلفه لطريقة التراكم ،طريقة كوتس-ريدفيرن و طريقة أوزاوا. و قد وجد أن تفاعل التحليل للمواد الصلبه يعتمد على أطوار مختلفة معتمدا على نوعية المركب المانح و المستقبل.و تم حساب معاملات التنشيط و مناقشتها و ذلك لكل خطوة من خطوات التكسير. كما تمت دراسة

الشكل الظاهري لهذه الجزيئات بواسطة تقنيتي المسح و النفاذيه المكروسكوبيه و لقد دلت ان هذه الجزيئات نانومترية الحجم .

Characterization and Thermal Kinetic Studies on Some Substituted 4,4'-bipyridylium Charge Transfer Compounds

By

Laila Mohamed Al- Harbi

ABSTRACT

4,4'-Bipyridine belong to an important class of compounds with wide application in different fields and since the formation of charge transfer compounds give opportunity to improve the physical and chemical properties of different donors, so charge transfer compounds of 4,4'-bipyridine and its N,N'-di-alkyl derivatives with 2,3-dichloro-5,6 -dicyano-1,4-benzoquinone(DDQ) , 2,5-dichloro-3,6-dihydroxy-1,4- benzoquinone [chloranilic acid] (CHA) and 2,3,5,6-tetrachloro-1,4-benzoquinone [choloranil](CHL) were studied. The stoichiometries of the reactions were determined from Job's method of continuous variations. Although the thermodynamic parameters (Gibbs free energy (ΔG°), enthalpy (ΔH°), and entropy change (ΔS°)), rate constant (k), activation energy (Ea) were calculated. The thermal kinetic studies of these compounds performed to examine the degree of the stability. The kinetics of the non-isothermal decomposition in air were studied using thermogravimetric techniques. Analyses of the kinetic data were performed using integral methods due to composite, Coats-Redfern and Ozawa methods. The results of the kinetic

analysis of the non-isothermal data were discussed in view of various solid state reaction models. The results showed that the solid state reaction model which gives the best fit of data depend on the type of the acceptors as well as the type of the donors. The activation parameters were calculated and discussed for each decomposition step. The structural morphology was investigated by scanning electron microscopy (SEM) and Transmission Electron Microscopy (TEM) and show that these molecules are of nanosize.