



البحث العلمي وسبلنا للحكمة العظيمة



دراسة نظرية لتأثير المعوضات على الصفات الفيزيائية لمركب phenyl-azo-β-naphthol

وعلى ثابت اتزان الامتزاز

احمد سعيد الدباغ¹ ، عماد عبدالاله صالح الحيالي² ، هازة ستار مجيد³

¹ قسم الهندسة الكيميائية ، كلية الهندسة ، جامعة تكريت ، تكريت ، العراق

² قسم الكيمياء ، كلية التربية للعلوم الصرفة ، جامعة الموصل ، الموصل ، العراق

³ قسم الكيمياء ، كلية التربية للعلوم الصرفة ، جامعة تكريت ، تكريت ، العراق

الملخص

يتضمن البحث دراسة نظرية لتأثير المعوضات على عدد من إصباع الازو المحضرة من تفاعل البيتا نفثول مع عدد من معوضات الانيلين [para-nitro aniline, meta-nitro aniline, ortho-nitro aniline, ortho-ortho-Hydroxy aniline , ortho-methyl aniline] على قيم ثابت اتزان الامتزاز (K)

استخدم البرنامج النظري Chem.Office لحساب بعض القيم ذات العلاقة بالإبعاد الهندسية للصبغات قيد الدراسة فضلا عن قيم طاقات الجزيئات وجهود التأين وطاقة أعلى اوربيتال جزيئي مشغول (HOMO) واوطا اوربيتال جزيئي غير مشغول (LUMO) والشحنات الموجودة على الذرات في جزيئة الصبغة ودراسة مدى علاقة هذه القيم بثابت الاتزان ومدى تأثير كل منها باستخدام طريقة التحليل الانحداري متعدد المتغيرات وباستعمال البرنامج الإحصائي المعروف بـ (SPSS). حيث اوضحت الدراسة النظرية ان الاعاقة الفراغية والحث والرنين فضلا عن الاواصر الهيدروجينية لها دور مهم في تحديد كفاءة الامتزاز وثابت اتزان الامتزاز (K) يشار الى ذلك من خلال قيم معامل الارتباط (R=0.970) الجيدة.

المقدمة

بساطتها وعدم استهلاكها للوقت كما انها تعطي في كثير من الحسابات نتائج مقبولة.

الجزء العملي

يعد برنامج (Chem.Office) من البرامج المتطورة في كيمياء الحسابية وهو يشتمل على حزمة من كل الطرق المذكورة أعلاه. وتكمن أهمية الكيمياء النظرية في انجاز العديد من العمليات الحسابية المتنوعة وفي اتجاهات عديدة (9, 10):

استخدم برنامج (Cs Chem. Office pro version 8) لدراسة تأثير المعوضات المختلفة في مواقع الاورثو والميتا والبارا من الحلقة الاورماتية على بعض الصفات الفيزيائية لمركب phenyl-azo-β-naphthol. ان البرنامج المذكور مجهز من قبل (Cambridge soft corporation) ولحساب الصفات الفيزيائية للمركب استخدم تطبيق (MOPAC). ومن الصفات التي تم دراسة تأثيرها: جهد التأين I.P والألفة الالكترونية EP والشحنة Charge على الذرات في المركب التي حسبت باستخدام طريقة هيكل الموسعة (Extended Huckel Charges) وذلك بعد ان انجزت عملية تخفيض الطاقة ثم

تعد الكيمياء النظرية احد فروع الكيمياء الفيزيائية. وتصنف الى صنفين رئيسيين (1-2) هما ميكانيك الكم (Quantum Mechanics) والذي يعتمد على معادلة شرودنكر لوصف الجزيئات مع معالجة واضحة للتركيب الالكتروني والميكانيك الجزيئي (Molecular Mechanics)، ونتيجة لتطور النظريات والدراسات الحديثة فقد تراقف استخدام الطرائق الرياضية والفيزيائية في عملية الحسابات مع استخدام الكمبيوتر. ويمكن تقسيم طرائق ميكانيك الكم إلى نوعين هما: طريقة الحسابات الأساسية (او يطلق عليها احيانا الحسابات البدائية) Ab initio Methods (3,4) حيث تتضمن حلا رياضيا لجميع التكاملات وتعتمد على تطبيقات Rothan & Hall الحسابية، والطريقة الثانية تعرف بالطرائق شبه التجريبية Semi empirical Methods (5) اذ تتضمن هذه الطريقة اختزال عدد من التكاملات وذلك بتعويضها بقيم معلومة واختصار عدد التكاملات. وهناك عدة طرق تقع ضمن هذا النوع من الحسابات منها (8) AM1، PM3، و (6) MNDO/3، (7) CNDO، و (9) AM1، و (PM3) من اكثر الطرق شيوعا وأفضل الطرائق المستخدمة من حيث

المؤتمر الدولي الثاني والعلمي الرابع لكلية العلوم – جامعة تكريت / ج 2

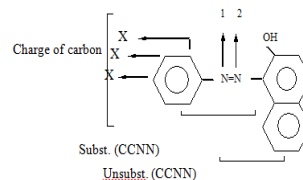
أذ تمثل :

- 1 : شحنة ذرة النتروجين على الحلقة الاروماتية المعوضة .
- 2 : شحنة ذرة النتروجين على الحلقة الاروماتية الغير معوضة .

النتائج والمناقشة

اولا الصفات الفيزيائية لمعوضات phenyl-azo-β-naphthol حسبت الصفات الفيزيائية النظرية لمعوضات مركب phenyl-azo-β-naphthol بعد عملية تخفيض الطاقة وباستخدام طريقة الـ(AM1) والنتائج التي تم الحصول عليها مدرجة في الجدول (1)

تم حساب طاقة الإعاقة الفراغية S.E. للمركب باستخدام طريقة الـ (MM2). والشكل التخطيطي (1) يبين مركب phenyl-azo-β-naphthol والمعوضات المرتبطة به وذرتي نتروجين مجموعة الازو المعوضة والغير معوضة :-



الشكل (1) معوضات phenyl-azo-β-naphthol المحسوبة نظريا مواقعها.

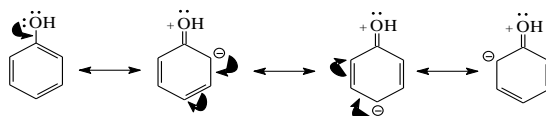
الجدول (1) الصفات الفيزيائية المحسوبة بالطريقة النظرية للمعوضات

Substituent	S.E.			Charge (C)		
	Ortho	Meta	Para	Ortho	Meta	Para
H	7.256	7.256	7.256	-0.07911	-0.1438	-0.1120
NO ₂	105.878	103.965	102.870	-0.0919	-0.1416	-0.1247
OH	12.750	11.858	9.849	0.1420	0.0686	0.0978
CH ₃	8.745	8.214	7.891	-0.0123	-0.0816	-0.0521
Substituent	S.E.			Charge (N)		
	غير المعوضة على الحلقة			المعوضة على الحلقة		
	Ortho	Meta	Para	Ortho	Meta	Para
H	-0.0601	-0.0601	-0.0601	-0.039	-0.039	-0.039
NO ₂	-0.0455	-0.0566	-0.0576	-0.0293	-0.0401	-0.0586
OH	-0.0769	-0.0768	-0.0772	-0.0613	-0.0428	-0.0738
CH ₃	-0.0746	-0.0721	-0.0730	-0.0495	-0.0472	-0.0398
Substituent	Ion .pot (eV)			LUMO (eV).		
	Ortho	Meta	Para	Ortho	Meta	Para
H	8.440	8.440	8.440	-0.710	-0.710	-0.710
NO ₂	8.650	8.725	8.645	-1.176	-1.263	-1.524
OH	8.495	8.501	8.379	-0.848	-0.981	-0.820
CH ₃	8.462	8.613	8.129	-0.839	-0.823	-0.842
Substituents	Deviation form the plane					
	Ortho	Meta	Para			
H				0	0	0
NO ₂				1.423	1.228	0.111
OH				1.081	0.989	0.981
CH ₃				0.329	0.328	0.320

حصل انحراف بشكل متزايد اكثر لتقليل الشد الناتج على الحلقة ، اذ يلاحظ ان هناك علاقة طردية بين الاعاقة الفراغية والانحراف عن المستوى.

2- شحنة ذرة الكربون Charge of carbon

ان المجاميع الدافعة للاكترونات تدفع الالكترونات باتجاه الاورثو والبارا ولا تدفع باتجاه الميتا لذلك فهي تزيد الكثافة الالكترونية على الاورثو والبارا ولا تزيد على الميتا وحسب التراكيب الهجينة الاتية :



1- الإعاقة الفراغية Steric Energy

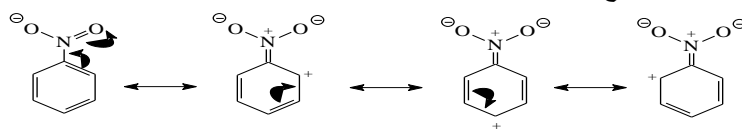
ان تأثير الإعاقة الفراغية الناتج عن وجود المعوضات يخضع للترتيب التالي :

Ortho > meta > para

ان تأثير الاعاقة الفراغية يكون أكبر في حالة وجود معوضات كبيرة مثل (-NO₂) (مقارنة مع المجاميع الاخرى) . كذلك يلاحظ ان عامل الاعاقة الفراغية الناتج عن وجود المعوض في موقع اورثو يؤدي الى انحراف المعوض عن مستوى الجزيئة وكلما كان المعوض اكبر

اما المجاميع الساحبة للالكترونات مثل (NO_2) فتزيد الكثافة

الالكترونية على الموقع ميتا وتقلل على الموقع اورثو وبارا وحسب



فيحتاج المركب الى طاقة قليلة لاكتساب الالكترون وتحواله الى الحالة المختزلة كما يلاحظ في جدول (1) .

7 - الانحراف عن المستوى Deviation from the plane

يلاحظ ان الانحراف عن المستوى يكون ظاهر بشكل كبير في المركبات المعوضة في موقع اورثو وكلما كان المعوض كبير يؤدي الى زيادة انحراف المعوض عن المستوى فيؤثر في الاعاقة الفراغية بصورة مباشرة اذ يلاحظ انه كلما كانت طول اصرة الازو قصيرة يؤدي الى التداخل والتقارب مع المعوضات القريبة فيؤدي الى زيادة الاعاقة الفراغية وتزيد قابليته على الانحراف كما يلاحظ في جدول (1) .

ثانيا - دراسة نظرية لتأثير الصفات الفيزيائية لمعوضات $\text{azo-}\beta$ -phenyl-naphthol على قيم ثابت الاتزان

درست الصفات الفيزيائية للمركب $\text{phenyl-azo-}\beta$ -naphthol ومعوضاتها من خلال معرفة قيمة ثابت الاتزان (K) لكل مركب والصيغة العامة للمركبات المدروسة يمكن تمثيلها كما في الشكل (1). ومن خلال القياسات المختبرية [11] للمركبات المذكورة في درجة حرارة (283) مطلقة وجد انها تمتلك قيمة ثابت اتزان (K) لكل معوض كما يأتي :

الجدول (2) ثابت الاتزان لمركبات $\text{phenyl-azo-}\beta$ -naphthol

ومعوضاتها في درجة حرارة (283) مطلقة

Substituted	(K)L/mole
H	19.99
o-OH	5.13
m-OH	6.07
p-OH	5.22
o- NO_2	12.27
m- NO_2	16.74
p- NO_2	13.67
o- CH_3	12.82

وقد استخدمت الحسابات النظرية (باستخدام طريقة الـ (AM1) لايجاد بعض العوامل الذي يعتقد بان لها تأثير مباشر او غير مباشر على قيمة K مثل طاقة الاعاقة الفراغية (S.E.) وشحنة ذرة الكربون المعوض (C) وشحنة ذرة النتروجين على الحلقة الاورماتية المعوضة (N-substi) وشحنة ذرة النتروجين على الحلقة الاورماتية الغير معوضة (N-Un.sub.) وطول اصرة مجموعة الازو (-N=N-) وقيمة الزاوية بين الوجيين للمستوى (CNNC) وجهد التأين (Ion pot) وطاقة الـ (LUMO) . القيم المحسوبة لهذه العوامل أدرجت في الجدول رقم (3).

وبذلك يكون موقع الميتا اعلى كثافة الكترونية ، وبذلك فعند وقوع اصرة الازو في موقع ميتا فان الكثافة الالكترونية لا تتأثر بفعل هذه المجموعة الساحبة هذا بالنسبة لتأثير الحث ، اما تأثير الرزونانس فقد يكون عمله يقوى تأثير الحث او يعاكس عمله ويعتمد ذلك على نوع المعوض ونوع المركب .

3 - شحنة ذرة النتروجين على الحلقة المعوضة

Charge on nitrogen of the Substituted ring:

يلاحظ ان شحنة ذرة النتروجين على الحلقة الاورماتية غير المعوضة يكون تأثيرها كبير في حالة وجود المجاميع الدافعة للالكترونات إذ ان المجاميع الدافعة للالكترونات تزيد من الكثافة الالكترونية على الحلقة الاورماتية فتؤدي الى انتقال الالكترونات بحالة الرزونانس الى شحنة ذرة النتروجين المعوضة . في حين ان المجاميع الساحبة للالكترونات تؤدي الى انخفاض الكثافة الالكترونية في الحلقة الاورماتية .

4 - شحنة ذرة النتروجين على الحلقة غير المعوضة

Charge on nitrogen of the Un-Substituted ring

يلاحظ ان المجاميع الدافعة للالكترونات لها تأثير كبير على شحنة ذرة النايتروجين على الحلقة الاورماتية غير المعوضة عند مقارنتها مع المجاميع الساحبة للالكترونات ، اذ ان المجاميع الساحبة تقلل من شحنة النايتروجين على الحلقة الاورماتية ، وبصورة عامة يلاحظ ان تأثير المعوض في شحنة ذرة النايتروجين غير المعوضة قليل بغض النظر عن المجاميع الدافعة او الساحبة للالكترونات، اذ تكون شحناتها متقاربة .

5 - جهد التأين Ionization Potential

تكافئ قيمته طاقة الاوربيتال HOMO وقد لوحظ ان المجاميع الدافعة للالكترونات تؤثر في حلقتي البنزين (المعوضة وغير المعوضة) ومنها تؤدي الى زيادة الطاقة اللازمة لنزع الكترون على طول المركب وبالتالي تزداد طاقة جهد التأين في حين نجد ان المجاميع الساحبة للالكترونات تؤدي الى انخفاض في جهد التأين كما يلاحظ في جدول (1).

6 - قيمة الـ LUMO

ان المركب يحتاج الى طاقة عالية لاكتساب الكترون لتحواله الى الحالة المختزلة في المجاميع الدافعة للالكترونات سواء كانت في حالة الاورثو او الميتا او البارا اما في المجاميع الساحبة للالكترونات

الجدول (3) الحسابات النظرية لعدد من معوضات الـ phenyl-azo-β-naphthol الاحادية التعويض

Subst.	S.E.	N=N	C-N-N-C	LUMO	Ion.pot.
	Kcal/mole	(Å ⁻¹)	(°)	(eV)	(eV)
H	7.256	1.229	179.4	-0.7106	8.440
o-OH	12.750	1.230	179.5	-0.848	8.490
m-OH	11.858	1.230	179.3	-0.981	8.501
p-OH	9.849	1.229	178.96	-0.820	8.379
o-NO ₂	105.878	1.228	178.65	-1.176	8.650
m-NO ₂	103.965	1.229	179.17	-1.265	8.725
p-NO ₂	102.870	1.230	179.86	-1.524	8.645
o-CH ₃	8.745	1.230	179.76	-0.839	8.462

الجدول (4) قيم معامل الارتباط (R) للتحليل الانحداري البسيط بين الصفات الفيزيائية للمعوضات في مركب phenyl-azo-β-nophthol

	K	S.E.	-N=N-	C-N-N-C	I.P.	LUMO	Charge (c)	Charge (N)un.sub.	Charge (N) sub.
K	1.000								
S.E	0.380	1.000							
(-N=N-)	0.618	0.311	1.000						
(C-N-N-C)	0.897**	0.565	0.860	1.000					
I.P	0.390	0.937**	0.343	0.505	1.000				
LUMO	-0.340	-0.916**	-0.370	-0.572	-0.959*	1.000			
Charge(c)	-0.508	-0.567	-0.529	-0.537	-0.653	0.620	1.000		
Charge(N) un.subst.	0.021	0.576	0.104	0.127	0.509	-0.347	-0.307	1.000	
Charge(N) subst	0.166	-0.157	-0.308	-0.032	-0.375	0.436	0.570	-0.053	1.000

** Correlation is Significant at the 0.01 level (2-tailed)

كمتغير معتمد dependent variable والمتغيرات الاخرى المحسوبة التي تم ذكرها سابقا كمعغيرات مستقلة Independent variables حيث تم ادخال متغيرين او اكثر من المتغيرات ذات التأثير الاكبر (R اعلى) بشكل متتابع الى ان يتم الحصول على افضل علاقة (اعلى قيمة ل R واقل قيمة انحراف قياسي) لحساب قيمة ثابت الاتزان (K).

ان نتيجة هذه الدراسة يمكن تمثيلها بالمعادلات التالية :

$$K = 7529.9 - 6114.04 (N=N) + 2.34 \times 10^{-2} (-CNNC) \dots [R=0.971]$$

$$K = 11.103 - 214 \times 10^{-2} (S.E) + 3.003 \times 10^{-2} (CNNC) [R=0.910]$$

$$K = 10.201 - 2.038(\text{charge C}) + 2.63 \times 10^{-2} (CNNC) [R=0.897]$$

$$K = 15750 + 7.14 \times 10^{-2} (S.E) - 1.279 (-N=N-) \dots [R=0.862]$$

$$K = 26.727 - 52.444(\text{charge C}) + 388.985 (N\text{-sub}) \dots [R=0.750]$$

$$K = -198 + 25.3(\text{Ion.pot}) - 7.2(\text{LUMO}) \dots [R=0.650]$$

$$K = 6.186 - 32.494(\text{charge C}) - 63.022 (N\text{-un-sub.}) \dots [R=0.526]$$

ومن ملاحظة النتائج اعلاه نجد ان العوامل التي تؤثر على ثابت توازن امتزاز الصبغات قيد الدراسة هي الحركة الالكترونية التي تمر عبر اصرة الازرو وتتباين حسب نوع وموقع التعويض وهي بذلك تؤثر على طول الاصرة (-N=N-) والاعاقفة الفراغية (S.E.) وشحنة ذرة الكاربون المعوض (C) وشحنة ذرة النتروجين الموجودة على مجموعة الازرو (-N=N-) على الحلقة الاروماتية المعوضة (N-substituted) و (CNNC). واخيرا تم استخدام طريقة الانحدار الخطي المتعدد المتغيرات لايجاد اهم العوامل المؤثرة على ثابت الاتزان (K) وذلك باعتماد طريقة الـ(Enter) التي يتم فيها ادخال جميع

وقد استخدم البرنامج الاحصائي (SPSS) لحساب قيمة معامل الارتباط (R) الخطي باستخدام طريقة التحليل الانحداري البسيط الجدول رقم (4) لغرض اختبار قوة العلاقة بين قيمة ثابت الاتزان الذي تم الحصول عليه من الدراسة العملية لامتزاز الصبغة المذكورة على الكاربون المنشط مع كل من هذه العوامل منفردا كاختبار اولي لغرض اشتقاق معادلات رياضية باستخدام اكثر العوامل تاثيرا على قيم ثابت الاتزان. وقد استخدمت قيمة معامل الارتباط كدلالة على قوة العلاقة المدروسة. ونتائج العلاقات التي تم الحصول عليها ادرجت بالمعادلات التالية :

$$K = 9.562 + 4.29 \times 10^{-2} (S.E) \dots [R = 0.380]$$

$$K = 2881 - 2835 (-N=N-) \dots [R=0.618]$$

$$K = 10.3 + 2.69 \times 10^{-2} (CNNC) \dots [R = 0.897]$$

$$K = -88 + 11.6 (I.P) \dots [R= 0.390]$$

$$K = 5.54 - 5.95 (LUMO) \dots [R= 0.34]$$

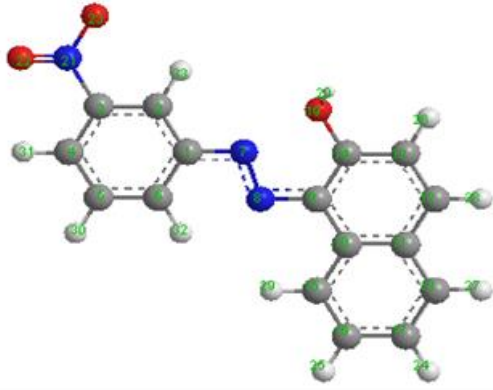
$$K = 9.90 - 29.8 (\text{charge}) \dots [R=0.508]$$

$$K = 12.0 + 9.0 (\text{charge N-un.sub.}) \dots [R=0.021]$$

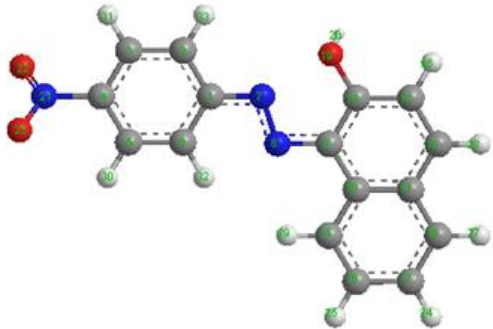
$$K = 15.9 + 95.8 (\text{charge N-sub.}) \dots [R=0.166]$$

ان التحليل الانحداري البسيط لا يعطي وصفا كاملا للنظام المدروس لذلك فان نتائجه تعد للحصول على فكرة اولية حول طبيعة العلاقات الثنائية بين المتغيرات قيد الدراسة والتهيئة للدراسة اللاحقة.

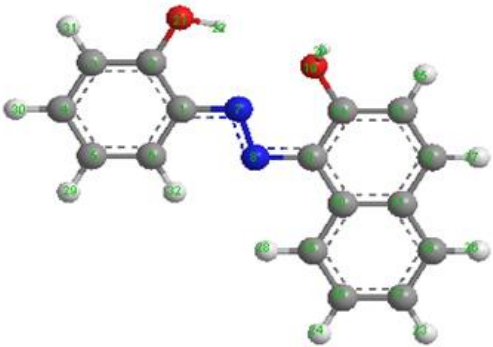
وانطلاقا من معرفة اهم العوامل المؤثرة على قيمة ثابت الاتزان من خلال قوة العلاقة التي يشار لها بـ قيم معامل الارتباط استخدم التحليل الانحداري الخطي المتعدد المتغيرات باعتماد قيم ثابت الاتزان (K)



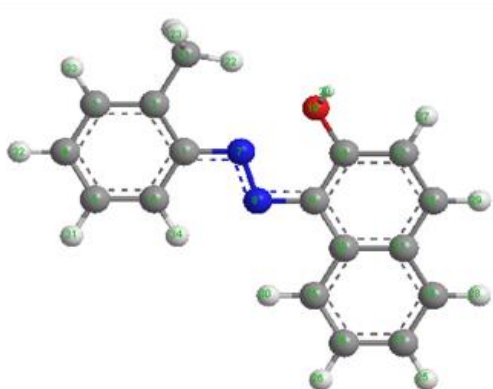
شكل (4) الهيئة المثلى للصبغة (m-NAβ)



شكل (5) الهيئة المثلى للصبغة (p-NAβ)



شكل (6) الهيئة المثلى للصبغة (o-HAβ)

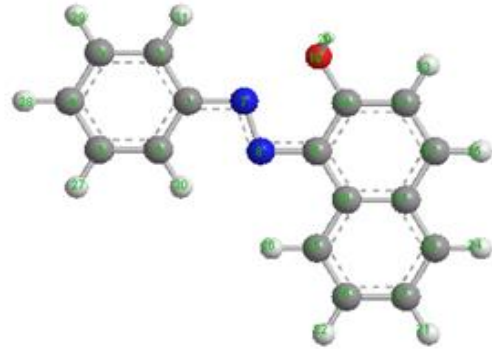


شكل (7) الهيئة المثلى للصبغة (o-MAβ)

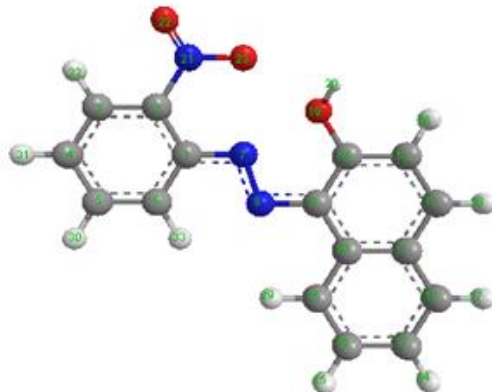
المتغيرات المستقلة الى معادلة الانحدار بدون استثناء ثم يستخرج العامل ذو التأثير الاقل تلقائيا ، والمعادلة الناتجة من هذه العملية هي كالآتي :

$$K = 7589 - 3.549 (\text{charge}) - 6162.2 (N=N) + 2.24 \times 10^{-2} (\text{CNNC}) \dots [R=0.972]$$

يلاحظ ان الحركة الالكترونية التي ينتج عنها زيادة طول الاصرة (-N=N-) نتيجة الحث او الرنين للمعوض يؤدي الى نقصان قيمة ثابت الاتزان وذلك لانخفاض الكثافة الالكترونية حول ذرتي النيتروجين لمجموعة الازو (-N=N-). ويلاحظ ايضا ان لزيادة شحنة ذرة الكربون المعوضة على الحلقة الاروماتية تأثيرا سلبيا على قيمة ثابت الاتزان وربما يعود سبب ذلك الى ان زيادة شحنة الكربون يرافقه نقصان الشحنة على اصرة الازو المسؤولة عن حصول الارتباط مع السطح الماز الذي يكون غالبا من نوع القوى الفيزيائية . التأثير السليبي الاخر لذرة النيتروجين غير المعوضة ربما يعود لاشتراك هذه الذرة بتكوين اواصر هيدروجينية مع مجموعة OH الموجودة على حلقة البيتا نفشول في حين تشير العلاقة الطردية بين الشحنة على ذرة النيتروجين المرتبطة بالحلقة المعوضة و K الى احتمال كون هذه الذرة هي المسؤولة على الارتباط بين الصبغة مع سطح الكربون المنشط وهذا يتوافق مع ما توصلت اليه دراسات سابقة [15-12].



شكل (2) الهيئة المثلى للصبغة (PAβ)



شكل (3) الهيئة المثلى للصبغة (o-NAβ)

1. *C.Liu*, (1999). "User's guide manual, Chem., 3D molecular modeling and analysis", Cs Chem. 3D 5.0 for Windows and Macintosh Cambridge, USA, p.146.
2. *E. A. Al-Hyali, N.A. Al-Azzawi and F.M. Al-Abady*; "Statistical Study For The Prediction of pKa Values of Substituted Benzaldoxim Based on Quantum Chemical Methods"; Journal of the Korean Chemical Society, Vol.55, No. 5, pp.733-748(2011)
3. *M.J.S., Dewar*, (1969). "The Molecular Orbital Theory of Organic Chemistry", McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, p.42.
4. *M.J.S., Dewar*, (1969). "The Molecular Orbital Theory of Organic Chemistry", McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, p.42.
5. *J.A.Pople, D.I. Beveridge and P.A. Dobosh*, (1967), "Approximate Self-Consistent molecular – Orbital theory, Intermediate neglect of differential overlap", J.Chem. phys., 47, p.2026-2033
6. *R.C. Bingham and M.J.S., Dewar*, (1975). "Ground States of molecules XXV! MINDO/3. An Improved version of the MINDO Semiempirical SCF-Mo method²", J. Am. Chem. Soc. 97, p.1285.
7. *M.J.S. Dewar and W. Theil*, (1977). "Ground states of molecules 38! The MINDO method approximations and Parameters", J. Am. Chem. Soc. 99, p.4899.
8. *H.S. Freeman, M.B.Polk and G.C.Lickfield*, (August 1995). "A Molecular Orbital Approach to Molecular Design", national Textile center annual report
9. *J.A. Pople, and R.K. Nesbet*, (1954). J. Chem. Phys. 22, 571.
10. *G.J.Barden, and H.F. Schafer* (2000). pure Appl.chem.,72,(8), p.1423 .
11. *H.S. Majeed*, (2008). "Comparative study of the factors affecting the equilibrium constants adsorption of some azo dye compounds", M.Sc. Thesis, Tikrit University
12. *W. Zhou, et al.* (2016); "High-accuracy QSAR models of narcosis toxicities of phenols based on various data partition, descriptor selection and modeling methods"; RSC. Adv. 6, 106847–106855 (2016).
- 13- *Khalid A.O. AL-Memary, Emad A.S. Al-Hyali, Homam T. S. AL-Sayd Toohi*, (2019), Adsorption of New Azo Dyes Derived From 4-Aminoantipyrine from Aqueous solution by A New Type of Activated Carbon: Equilibrium and Kinetic Studies, Research J. Pharm. and Tech. 12(3): 1206-1218.
- 14- *Emad A. S. Al-Hyali and Amal Esmail*, (2020) Estimation of The Stability Constants of Complexes Derived From Azo Dyes and A Number of Transition Metal Ions, Thermodynamic Study, World Journal Of Pharmacy And Pharmaceutical Sciences, V. 9, Issue 7, 2111-2137
15. *E.A. Al-Hyali*; "Estimation of pKa, Analgesic, CNS Depressant Activities of Imidazolinone Derivatives By Correlation With Theoretical Parameters Based on Quantum Chemical Method"; J. Educ. & Sci V.27 No.4 , 29-45(2018).

Theoretical study of the substituents effect on the physical properties and adsorption equilibrium constant of phenyl-azo-β-naphthol compound

Ahmed S. Othman , Emad A. S. Al-Hyali , Haza sattar majeed

Abstract

The research included a theoretical study to estimate the effect of various substituents on the equilibrium constant of Adsorption (K) of a number of azo dyes prepared from the reaction of beta-naphthol with a number of aniline substituents (para-nitro aniline, meta-nitro aniline, ortho-nitro aniline, ortho - Hydroxy aniline, ortho-methyl aniline).

The theoretical program Chem. office was used to calculate some values related to the geometrical dimensions of the dyes under study as well as the values of the molecular energies, ionization potential, energy of the higher occupied molecular orbital (HOMO), lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) and the charges present on the atoms of the dye molecule and studying the extent of their relationships. These values are correlated with the equilibrium constant. The extent of their effect was investigated using the method of multi parametric regression analysis. This analysis was carried out by employing the statistical program (SPSS). The results of the theoretical study indicated that, the steric, inductive and resonance effects as well as the hydrogen bonds play an important role in determining the adsorption efficiency and the values of adsorption equilibrium constants (K). These effects are indicated by the good values of the correlation coefficient (R=0.970).