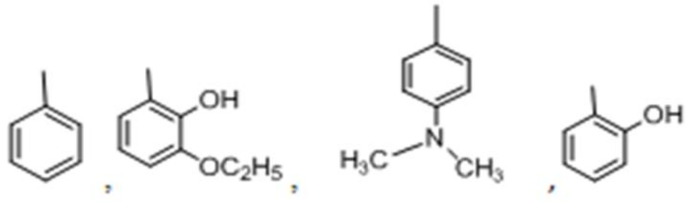
الكليه: التربيه للعلوم الصرفه　　　اسم الطالب: ساري حمد هلبان
القسم:الكيمياء　　　اسم المشرف: ا.د.ناجي علي عبود
التخصص: فيزياويه　　　الشهاده:ماجستير

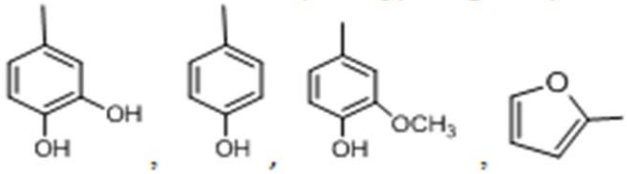
عنوان الرساله او الاطروحه

دراسة نظرية وعملية للتراكيب واطياف تحت الحمراء والرنين النووي المغناطيسي لبعض الهيدرازونات المشتقة من الالديهايدات باستخدام طريقة DFT

ملخص الرسالة او الاطروحة

تم دراسة تراكيب بعض الهيدرازونات المشتقة من الديهايدات اليفاتية واروماتية المتمثلة بالصيغة العامة $R-CH=N-NH_2$ حيث

. Where R = -H, $-CH_3$, $-CH_2CH3$, 



وقد حضرت ثمانية مركبات اروماتية وتم تشخيصها بالـCHN و IR و NMR . لجميع المركبات اجريت الحسابات النظريه بطريقة DFT وبالمستوى النظري B3LYP وعند الدوال الاساسية(6-31G(d,p لاطوال الاواصر والزوايا والشحن على الذرات وعزم ثنائي القطب وطاقات الـHOMO و الـ LUMO اضافه الى IR و NMR وتم مناقشتها . وحسب الحسابات توجد المشتقات الاليفاتية بشكل trans بينما الاروماتية توجد بشكل cis ولم يلاحظ اشارة NH_2 في اطياف الرنين النووي المغناطيسي .

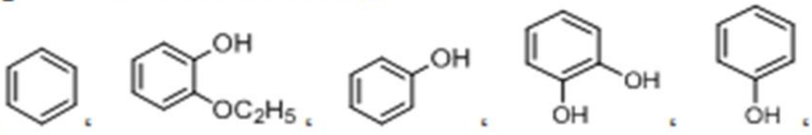
College: eduction college for pure scines　　　Name of student: Sari hamad hlban
Dept : Chemistry　　　Name of supervisor :PROF.Dr.Naji Ali Abood
Certificate: M.SC　　　Specialization: Physical Chemistry

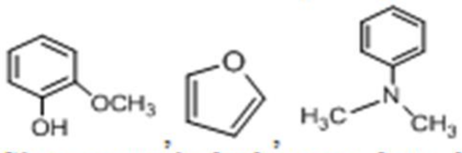
Title of thesis

Theoretical and experimental Study of Structures IR and NMR of some hydrazones derived from aldehydes using DFT method

Absract of thesis

This work involves study of some hydrazones were derived from aliphatic and aromatic aldehydes which were represented by general formula $R-CH=N-NH_2$

Where R = H ، CH_3 ، CH_2CH3 ، 



Since aromatic hydrazones have been prepared from reaction of the corresponding aldehydes with hydrazine and characterized by M.P,CHN analysis ,IR and NMR.

Theoretical calculations were carried out for the studied compounds using DFT method at B3LYP/6-31G(d,p). Theory calculation bond length and angles between atoms , charges on the atoms of the molecules, dipole moments and HOMO, LUMO energies, IR and NMR spectra. were predicted and compared with the experimental data according to the calculations the aliphatic derived expect in the trans form while the aromatic in cis form, the NH_2 signal has not been observed in NMR spectra.