عنوان البحث	**Synthesis and Bandgap Engineering of D-A-D Chalcones for Optoelectronic Applications**
اسم الطالب	دنا بنت زيد بن عبد المحسن الحمادي، شادن بنت محمد بن سليمان الرسيني، لينا بنت مقبل بن نهار بن جديع نوره بنت عبد العزيز بن عبد الله ال زنان، فاطمه بنت مرعي بن عيسى النعمي
اسم المشرف	د. سندس المحمود
الملخص باللغة العربية	في هذه الدراسة، تم تصنيع سلسلة من مشتقات الشالكون ذات النظام المانح-المستقبل-المانح (D-A-D) باستخدام تفاعل Claisen–Schmidt condensation ، بهدف استكشاف إمكانياتها في التطبيقات البصرية والإلكترونية. تم إدخال مجموعة amine على أحد المركبات، ومجموعة methoxy على مركب آخر، وتمت مقارنة نتائجهما مع مركب ثالث لا يحتوي على أي مجموعات وظيفية مانحة للإلكترونات، وكان المردود (yield) للمركبات الثلاثة في النطاق (50–97%). تم توصيف المركبات باستخدام تقنيتي FT-IR وUV-Vis، حيث أكدت النتائج تكوين مركبات كيتونية غير مشبعة من نوع α,β، كما أظهرت تعزيزًا في انتقال الشحنة داخل الجزيء نتيجة لوجود المجموعات المانحة. وفرت الحسابات النظرية باستخدام نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) فهماً لمستويات طاقتي HOMO وLUMO وفجوة النطاق (Eg)، وكان مدى فجوة النطاق بين (3.200–3.900 eV) بالترتيب التالي CHB > CHM > CHN، موضحة تأثير المجموعات المستبدلة على الخصائص الإلكترونية. وأظهرت الدراسات البصرية اختلافاً ملحوظاً في أطوال الموجات الممتصة والفجوات البصرية، حيث أظهرت المركبات المحتوية على مجموعات مانحة قوية للإلكترونات فجوات نطاق أصغر وتحولاً نحو الأحمر (bathochromic shift) في الامتصاص، مقارنة بالمركب الخالي من المجموعات المانحة. تؤكد هذه النتائج قابلية تعديل خصائص مشتقات الشالكون لاستخدامها في أشباه الموصلات العضوية، من خلال التعديل البنيوي للتحكم في انتقال الشحنة والخصائص البصرية.
Abstract	In this study, a series of chalcone derivatives with a donor–acceptor–donor (D–A–D) sys tem were synthesized using the Claisen–Schmidt condensation reaction, aiming to ex plore their potential in optical and electronic applications. An amine group was introduced into one compound, a methoxy group into another, and their results were compared with a third compound that contains no electron-donating functional groups. The yield for the three compounds was in the range of 50–97%. The compounds were characterized using FT-IR and UV-Vis techniques, which confirmed the formation of α, β-unsaturated ke tones and showed enhanced intramolecular charge transfer due to the presence of donor groups. Theoretical calculations using Density Functional Theory (DFT) provided in sights into the HOMO–LUMO energy levels and the energy gap (Eg), with values ranging from 3.200 to 3.900 eV in the following order: CHB > CHM > CHN, indicating the effect of substituent groups on electronic properties. Optical studies showed significant differ ences in the absorbed wavelengths and optical bandgaps, where compounds with strong electron-donating groups exhibited lower bandgaps and a bathochromic shift in absorp tion compared to the unsubstituted compound. These results confirm the tunability of chalcone derivatives for use in organic semiconductors through structural modification to control charge transfer and optical properties.