# ملخص

## إنشاء وتوصيف المنتجات العضوية ذات الأهمية البيولوجية التي يتم إعدادها إنطلاقا من الميثيل والهالوجينات


هذا العمل عبارة عن دراسة منهجية للمنتجات العضوية ذات الأهمية البيولوجية التي تم يصنيعها إنطلاقا من الميثيل والهالوجينات.

في هذه الأطروحة تم تقديم بعض التذكيرات النظرية المتعلقة بتحديد الهياكل البلورية من الأشعة السينية وكذلك المفاهيم النظرية في التحليل الطيفي البصري.

كما يتم تقديم مراجع فيما يتعلق بنظرية الكثافة الوظيفية (DFT) التي استخدمناها أثناء عملنا وكذلك على التمثيلات المختلفة لأسطح هيرشفيلد (Hirshfeld surface) التي جعلت من الممكن تحديد جميع الاتصالات بين الجزيئات التي تحدث داخل هذه البلورات.

أخيرًا ، استشهدنا ببعض طرق التوصيف البيولوجي لمعرفة تطبيقات منتجاتنا في المجال البيولوجي مثل التجارب في المختبر ) (In-vitroوحساب الديناميات الجزيئية للإلتحام الجزيئي .(molecular docking)

في عملنا ، يتم تقديم النتائج التوليفية والبلورية التجريبية لحيود الأشعة السينية المتعلقة بدقة بنية المنتجين:

N - ((4-Chlorophenyl) (2-Hydroxynaphtalen-1-YL) Methyl) Acetamide

(Z) -4- (4-hydroxybenzylidene) -3-methylisoxazol-5(4H) -oneو

في درجة حرارة الغرفة بالإضافة إلى دراسة مطيافية للأشعة تحت الحمراء IR ورامان Raman.

تم توضيح ودراسة جميع التفاعلات بين الجزيئات الموجودة في هذه المركبات من خلال إنشاءتحليل سطح هيرشفيلد (Hirshfeld surface analysis)

إلى جانب الدراسة التجريبية ، أجرينا دراسة محاكاة باستخدام رموز Gaussian 09 و VASP لإجراء الحساباتالنظرية بإستخدام نظرية الكثافة الوظيفية (DFT).

تمت مقارنة النتائج التي تم الحصول عليها من حسابات كيمياء الكم باستخدام النظرية الوظيفية مع التجربة. تتعلق هذه المقارنة بالمعلمات الهيكلية المستخرجة من حيود الأشعة السينية والأشعة تحت الحمراء (IR) والتحليل الطيفي لرامان Raman .

أدت تطبيقات هياكلنا في المجال الطبي إلى إجراء تحقيقات لخاصية مضادة الأكسدة فقط بالطرق التجريبية والنظرية.

في هذه الأطروحة ، يتم تقديم التوليف والتحليل الهيكلي عن طريق حيود الأشعة السينية لـ

N - ((4-Chlorophenyl) (2-Hydroxynaphtalen-1-YL) Methyl) Acetamide

($C_{19}H_{16}NClO_2$) و

(Z) -4- (4-hydroxybenzylidene) -3-methylisoxazol-5(4H) -one

($C_{11}H_9ON_3$)

عند درجة حرارة الغرفة والتي تتبلور على التوالي في مجموعات فضاء $P\ 2_1 / n$ مع أربعة جزيئات لكل شبكة و$C2 /c$ مع $Z = 8$ .

بفضل برنامج Crystal Explorer ، قمنا بتحليل سطحهيرشفيلد Hirshfeld، وتمكنا من فهم التراص البلوري وتحديد التفاعلات بين الجزيئات التي توفر التماسك في البلورات المدروسة.

تم إجراء حسابات المطابقة الجزيئية على

N - ((4-Chlorophenyl) (2-Hydroxynaphtalen-1-YL) Methyl) Acetamide

من الهجين الوظيفي B3LYP مع مجموعة من قاعدتين 6-311 Gو DGDZVP ، مما أدى لمطابقة التناظر C1 مع طاقات تشكيل ضئيلة متقاربة . لقد احتفظنا في حساباتنا ، بوظيفة B3LYP مع قاعدة DGDZVP ، حيث تكون طاقة التكوين ضئيلة-) (38071.881731 eV معامل إتفاق $R^2$ (التركيبات الهندسية) أفضل في الزوايا والأطوال.

بخصوص- (Z) -4- (4-hydroxybenzylidene) -3-methylisoxazol-5 (4H) one, تم إجراء حسابات المطابقة الجزيئية من B3lyp الوظيفية مع مجموعة من القواعد 6-G311 و DGTZVP ، مما أدى إلى تطابق تناظر C1 و Cs مع طاقات تشكيل متشابهة. استنادًا إلى نتائج طاقات التكوين المقدمة ، يمكن استنتاج أن التشكل الأكثر ثباتًا لـ (Z) -4- (4-hydroxybenzylidene) -3-methylisoxazol-5 (4H) -one هو الذي أعطى الحد الأدنى من الطاقة قيمة تساوي(19185.027675 eV- )، و عزم ثنائية قطبية قطبية ضعيفة تساوي 8.4928 Debye ،ومعامل اتفاق $R^2$ جيد جدًا (من الزوايا واطوال الروابط) مع النموذج التجريبي ، والذي يتوافق مع قاعدة DGTZVP مع B3lyp الوظيفية.

تم تحقيق التشكل الجزيئي

لـ CHMA و- (Z) -4- (4-hydroxybenzylidene) -3-methylisoxazol-5(4H) one أيضًا بواسطة كود الحساب النظري VASP (Vienna Ab initio Simulation Package)، حيث هذه المرة يتم اتخاذ دورية الكريستال بعين الاعتبار. بعد التحسين الهندسي ، فإن النتائج التي تم العثور عليها لأطوال الروابط وزواياها قريبة جدًا من التجربة.

تمت مقارنة نتائج حساب التردد النظري التي تم الحصول عليها من كيمياء الكم (DFT) مع نتائج الأشعة تحت الحمراءIR ونتائج Raman الطيفية التجريبية.

سمحت حسابات التحليل الطيفي النظرية بتحديد الأنماط المختلفة لاهتزاز الجزيء.

الأبحاث و التحريات حول تطبيقات

N - ((4-Chlorophenyl) (2-Hydroxynaphtalen-1-YL) Methyl) Acetamide

(Z) -4- (4-hydroxybenzylidene) -3-methylisoxazol-5(4H) -oneو

قادتنا لإجراء تجارب في المختبر ضد خاصية الأكسدة متبوعة بحساب الالتحام الجزيئي.

أظهر CHMA بعد التحليلات DPPH و ABTS وphenanthroline assay و CUPRACأنه يحتوي على خاصية مضادة للأكسدة. تم تأكيد هذه النتيجة من خلال حساب الالتحام الجزيئي الذي يوضح التفاعلات المختلفة بين الجزيء والبروتين.

أدى الالتحام الجزيئي ل (Z) -4- (4-hydroxybenzylidene) -3- methylisoxazol-5(4H) -one

مع العامل DPPH إلى التشكل الجزيئي الذي يُظهر طاقة التكوين $\Delta G = -8$ Kcal / mol ومثبط ثابت

$\mu M$ Ki = 1.36، مما يؤكد أن بنية $C_{11}H_9O_3N$ تظهر نتيجة جيدة جدًا مقابل اختبار DPPHلخاصية مضادات الأكسدة.

كمنظورات: القياسات في درجات حرارة منخفضة على هذه المنتجات ومنتجات النظائر من حيود النيوترون ضرورية لتحديد سلوك جذر الميثيل بشكل أفضل.

قياسات النشاط البيولوجي لمنتجات النظائر مقابل الخصائص الأخرى ، بالإضافة إلى الدراسات الطيفية المرئية للأشعة فوق البنفسجية لإكمال فجوة الانتقال.