ملخص

الدراسة الطيفية والهيكلية لمنتجات الهالوجين الميثيل لمنتجات البنزين ذات الأهمية البيولوجية

علم البلورات هو جزء من العلم يسمح بالوصول إلى أكثر أجزاء المادة حميمية. بمعنى واسع ، يدرس التكوين والنمو والشكل الخارجي والبنية الداخلية والخصائص الفيزيائية للمادة المتبلورة. يعتمد على الظاهرة الفيزيائية لانحراف الموجات الكهرومغناطيسية (الأشعة السينية) أو النيوترونات أو الإلكترونات. في هذا العمل ، سيتم تقديم دراسة بلورية وطيفية ونتائج هذه المنتجات العضوية هي أساس الجزيئات النشطة بيولوجيًا ذات الطبيعة الطبيعية الأنشطة البيولوجية للمنتجات من عائلة الإيزوكسازول أو الاصطناعية. تم إثبات الأنشطة البيولوجية لهذه المنتجات لفترة طويلة

يعتمد العمل البحثي لهذه الأطروحة على التوليف والتحليل الهيكلي للمنتجات العضوية من عائلة المشتقات التي تشمل حلقتين من البنزين والإيزوكسازول من وجهة نظر بيولوجية

يتم العمل المقدم في هذه الرسالة في مختبر علم البلورات بالتعاون مع مختبر الكيمياء في قسنطينة. تركز الدراسة على في هذه المخطوطة ، يتم تقديم دراسة تجريبية من حيود الجزيئات العضوية التي تحتوي على الميثيل والهالوجينات ورابطة C-H الأشعة السينية والتي تتكون من إجراء تحليل هيكلي وكذلك في تحديد التركيب البلوري لمركباتنا

التشكل الجزيئي ثم إجراء دراسة طيفية للمركبات التالية

واحد و - (Hميثوكسي بنزيليدين) - 3-فينيل أيسوكسازول 5 (4-2) -4- (Z)

واحد- (Hميثيل-4- (ثيوفين-2-يلميثيليدين) إيزوكسازول -5 (4-3- (Z)

تتمثل إحدى التقنيات التكميلية للتحليل الهيكلي في تحليل السطح اغشفيلد ، والذي يتكون من إظهار بالتفصيل التفاعلات داخل الجزيئات وبين الجزيئات داخل البلورات للحصول على نظرة عامة على وجود الروابط الهيدروجينية والتفاعلات بين الجزيئات

التحليل الطيفي المستخدم هو الأشعة تحت الحمراء والتي تتكون من تحديد تكوين الجزيء وكذلك دراسة الديناميات الجزيئية عن طريق قياس ترددات الاهتزاز التي تميز حركة الجزيء

الهدف الرئيسي من هذا العمل هو العثور على الأنشطة البيولوجية للمنتجين المدروسين. تم إنشاء دراسة الالتحام الجزيئي على جزيء المنتج المريح باستخدام برنامج اوتودوك فينا

عرضت نتائج الدراسة التجريبية والنظرية على النحو التالي

بالنسبة للمركب C17H13NO

عند 293 كلفن إلى عوامل أدى تحسين المواضع الذرية ومعلمات الإزاحة الذرية متباينة الخواص لـ للمركب المدروس ينتمي المركب . S = 1.00 الموزون = 10.1٪ مع تباين (عامل الخير) يقدر بـ Rw و 5.7٪ = R موثوقية غير مرجحة بثمانية جزيئات لكل خلية3.9200 إلى النظام البلوري أحادي الميل ويتبلور في المجموعة الفضائية C2 / c

في المنتج المدروس ، يتم ضمان تماسك البلورة من خلال قوى التفاعل السائدة لنوع الهيدروجين والتي تقدم أقصر مسافات يتم ضمان تراكب .π- π التلامس على مستوى نفس الطبقات وفي التراص الجزيئي (الطبقات البينية) وجزئيًا من أصل د حيث تكون المسافات بين النقطتين Cg3 و Cg1 بين النقطتين النقطتين π-السلاسل المتكونة من خلال التفاعلات من النوع الوسطى 3.7049 (9) ° من السلسلة 9 3.9200(9) °

ركزت الدراسة النظرية بشكل أساسي على نظرية الكثافة الوظيفية التي استخدمناها من سلسلة برامج قوسيين 9 يؤكد الحساب أن الهندسة الأكثر استقرارًا يتم الحصول عليها من خلال التركيبة الهندسية لتبادل الارتباط الوضيفي DGDZVP /B3LYP

من نتائج الالتحام الجزيئي ، يُظهر المركب قيد الدراسة تقاربًا جيدًا للرابط مع إنزيم مضادات الأكسدة والإنزيم المضاد للورم.تشير هذه النتائج إلى أن الجزيء الحالي له تأثير كمضاد للأكسدة وعامل مضاد للورم

بالنسبة للمركب : $C_9H_7NO_2S$

أدى تنقيح المواضع الذرية ومعلمات الإزاحة الذرية متباينة الخواص للمنتج المدروس عند ثلاثمائة وواحد كلفن إلى عوامل الضبط النهائية التالية .(عامل الخير) S = 1.07 و Rw = 0.9 و R = 0.09

بثمانية P21 / c في النظام البلوري أحادي الميل مع المجموعة الفضائية n يتبلور التركيب الجزيئي للمركب المدروس .(Z = 8) جزيئات لكل خلية

يحدث التراص الجزيئي للمركب على طول المحور البلوري القصير ب. يتم ضمان التماسك الهيكلي في الهيكل البلوري بواسطة روابط من نوع الهيدروجين والأكسجين والنيتروجين ، لتشكيل سلسلة أحادية البعد على طول الاتجاه ب. يتم بين النقطتين الوسطى π-ضمان تراكب السلاسل المتكونة من خلال التفاعلات من النوع .Cg4 و Cg3 و Cg2 و Cg1

إن تحليل السطح الهوائي للمنتج الذي تمت دراسته عند مائتين وثمان وثلاثين كلفن يجعل من الممكن الحصول على مساهمة مختلف جهات الاتصال بين الجزيئات.

أظهر إسناد الأنماط المختلفة للاهتزاز لجزيء طيف الأشعة تحت الحمراء من الترددات التي تم الحصول عليها تجريبياً .ومن انحرافات الحسابات النظرية لبضعة سم -1

يؤكد الحساب أن ركزت الدراسة النظرية بشكل أساسي على نظرية الكثافة الوظيفية التي استخدمناها من سلسلة البرنامج قوسيين تسعة ان الهندسة الأكثر استقرارًا يتم الحصول عليها من وظيفة تبادل الارتباط هي كالتالي B3LYP / DGDZVP

لها تقارب جيد بين هذا الرابط مع البروتين والليغند ، وجد أن بنيةC9H7NO2S وفقًا لنتائج الالتحام الجزيئي لمركب مضادات الأكسدة والإنزيمات المضادة للميكروبات ويعرض خصائص مضادة للأكسدة ومضادة للميكروبات

الكلمات المفتاحية: حيود الأشعة السينية ، التحليل الطيفي للأشعة تحت الحمراء ، الإرساء ، الأنشطة البيولوجية