نوع الوثيقة : رسالة جامعية

عنوان الوثيقة : *دراسة نظرية للتركيب الإلكتروني لبعض النيكليوسيدات المضادة لمرض الإيدز*

Theoretical Investigation Of The Electronic Structure Of Some Anti AIDS Deriven Nucleosides

لغة الوثيقة : العربية

المستخلص :

يقدم هذا العمل دراسة للتركيب الإلكتروني والبنية الفراغية لمجموعة من المركبات الحيوية وهي ٢؟ ، ٣ ؟ - داي ديؤكسي سيتيدين ، ٢؟ ، ٣ ؟ - داي ديؤكسي إينوسين ، ٢؟ ، ٣ ؟ - داي ديهيدرو - ٣ ؟ - ديؤكسي ثايميدين ، ٣ ؟ - أزيدو- ٣ ؟ - ديؤكسي ثايميدين و ٣ ؟ - أزيدو-٢؟ ، ٣ ؟- داي ديؤكسي يوريدين. هذه المركبات لها تأثير طبي ملموس في علاج مرض نقص المناعة المكتسبة (الإيدز). وقد تم تحديد الشكل الهندسي الأمثل لهذه المركبات وكذلك مكوناتها باستخدام نظرية هارتري – فوك وقاعدة المجموعة المنفصمة HF/6-31G*. وقد أظهرت نتائج الحسابات النظرية أن معظم المركبات تعتبر مانحة للإلكترونات أكثر من أي من مكوناتها ، وكذلك تتمتع هذه المركبات بقطبية عالية إذ أنها وصلت إلى ٧ وحدات ديباي. وقد اتضح أن اتجاه هذا العزم يكون بعيداً وحدة السكر. كما تم حساب طاقة نزع البروتون (PDE) من OH للسلسلة الجانبية لهذه المجموعة من العقاقير عند درجة حرارة ٢٩٨ كيلفين وضغط جوي واحد. وبصفة عامة فقد وجد أن عملية نزع البروتون تسبب تغيرات ملحوظة في نوع ودرجة التفاعل بين شقي الجزئ. إن ميكانيكية تأثير هذه العقاقير تبدأ بإدخال مجموعات الفوسفات للوصول إلى مشتق الفوسفات الثلاثي. ويبدو أن النشاط الحيوي للعقار يعتمد بدرجة عالية على سهولة وكفاءة هذه العملية. وفي البحث الحالي تمت دراسة هذا العملية وتعيين الشكل الهندسي الأمثل لمشتقات الفوسفات للعقاقير المدروسة. كما تمت دراسة تأثير إدخال مجموعات الفوسفات المتتالية على الخواص الإلكترونية للعقاقير تحت الدراسة ، وقد وجد أن هذه المجموعات تؤدي إلى تغيرات في الشكل الفراغي الهندسي وتوزيع الشحنة الإلكترونية وقدرة هذه العقاقير على منح واكتساب البروتونات. وتعتبر هذه التغيرات عامة للعقاقير تحت الدراسة وتختلف في شدتها من عقار إلى آخر.

المشرف : أ.د. حسين محمد أحمد مصطفى

سنة النشر : ٢٠٠٦