تحضير وتحوير بعض البوليمرات الدوائية الجديدة لثنائي أمين الأثلين رباعي حامض الخليك ودراسة بعض التطبيقات له

Synthesis and modification of some new pro drug polymers based on ethylene di amine tetra acetic acid and study some of their application

أمير سالم عبد الأمير

طالب ماجستير

بأشراف:

أ.م. د. فارس حمود محمد العمشاوي

الخلاصة:

في هذا الدراسة تتضمنت ثلاثة مسارات **المسار الأول** تم تحضير بوليمرات دوائية جديدة من تفاعل ثنائي أمين الأثلين رباعي حامض الخليك مع **الكيتوسان** لينتج بوليمر تم مفاعلته مع سلسلة من الأدوية التي تحتوي مجاميع كاربوكسيلية لينتج مجموعة من البوليمرات (A1-A10) والأدوية الكاربوكسيلية هي على التوالي :

((Ibuprofen , Diclofenac , Ciprofloxacin HCl , Captopril , Ampicillin , Cephalexin , Methyldopa , Folic Acid , Amoxicillin , Mefenamic Acid)).

والمسار الثاني تم تحضير بوليمرات دوائية جديدة من تفاعل ثنائي أمين الأثلين رباعي حامض الخليك مع **الجيلاتين** لينتج بوليمر يتم مفاعلته مع سلسلة من الادوية التي تحتوي على مجموعة الامينية والادويةهي على التوالي:(A11-A17)الامين لينتج مجموعة من البوليمرات

((Theophylline , Famotidine , Isoniazid , Carbamazepine , Sulfadiazine , 4-amino antipyrine , Ampicillin)).

والمسار الثالث تم تحضير بوليمرات دوائية جديدة من تفاعل ثنائي أمين الأثلين رباعي حامض الخليك مع **الالبومين** لينتج بوليمر يتم مفاعلته مع سلسلة من الادوية التي تحتوي على مجموعة الامين لينتج مجموعة من البوليمرات(A17-A24)والادوية الامينية هي على التوالي:

((Theophylline , Famotidine , Isoniazid , Carbamazepine , Sulfadiazine , 4-amino antipyrine , Ampicillin)).

وتم تشخيص المركبات بطيف الأشعة تحت الحمراء FT-IR وطيف الرنين المغناطيسي ^{1}H-NMR ودراسة بعض صفاتها الفيزيائية كاللون والذوبانية واللزوجة والانتفاخ والتحرر الدوائي وكذلك دراسة الفعالية البايلوجية لبعض البوليمرات من خلال مضادات البكتريا ومضادات السرطان.

جامعة بابل – كلية العلوم

قسم الكيمياء

تحضير وتشخيص ليكاندات ازو- شف جديدة ومعقداتها مع بعض ايونات العناصر الانتقالية

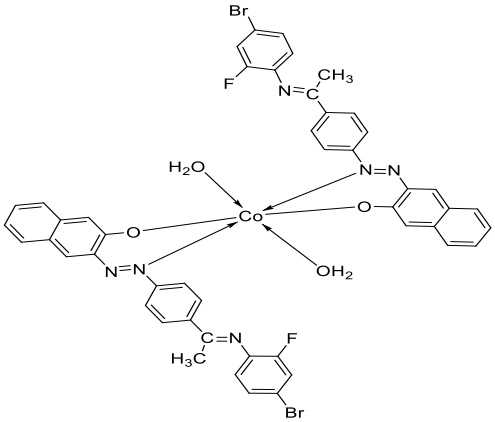
طالبة الماجستير سرور مزهر كاظم

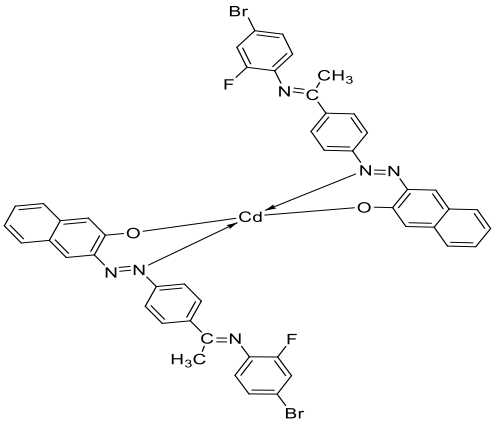
بأشراف أ.م. د. سعد مدلول مهدي

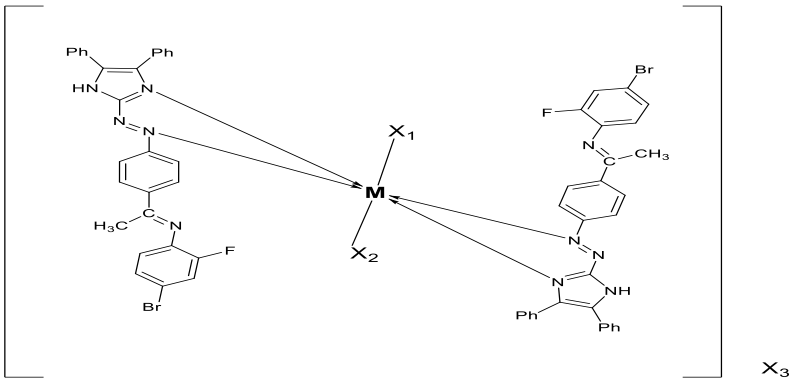
الخلاصة :-

حضرت اثنان من ليكاندات الازو – شف الهاليدية ، من خلال تحضير مركب اميني لقاعدة شف بوساطة تكاثف (٤-امينواسيتوفينون) مع (٢-فلورو-٤-برومو انيلين)، ومستعملا لذلك الامين المحضر كبادئ في تحضير ليكاندات الازو-شف، بطريقة ازوج ملح الديازونيوم للامين المحضر مع مكونة الازواج (٢-نفثول) لتحضير الليكاند الاول L_1(**HSBAN**) ، ومع مكونة الازواج (4,5-diphenylimidazole) لتحضير الليكاند الثاني L_2(**HSBAI**) . تم تشخيص الليكاندات الجديدة المحضرة باستخدام العديد من التقنيات الطيفية (كتقنية الاشعة تحت الحمراء وطيف تجزؤ الكتلة وطيف الرنين النووي المغناطيسي البروتوني ومطيافية الاشعة الفوق بنفسجية-المرئية اضافة الى التحليل العناصري الدقيق) للتأكد من صحة التحضير للمركبات. ولكل ليكاند تم تحضير خمسا من معقدات ايونات العناصر الانتقالية ثنائية الشحنة الموجبة (للكوبلت والنيكل والنحاس والكادميوم والزئبق) اضافة لتشخيصها في بعض من التقنيات المسبوقة الذكر ، حيث حضرت المعقدات الصلبة بعد معرفة الظروف المثلى للتحضير من تركيز ودالة حامضية pH ومعرفة النسبة المولية اللازمة لتحضير المعقدات والتي كانت (M:L) 1:2 ولجميع المعقدات المحضرة. فيما استخدمت تقنيات تكميلية لاقرار الصيغة البنائية الهندسية للمعقدات

(كالامتصاص الذري والتوصيلية المولارية والحساسية المغناطيسية والاطياف)، ومن خلال النتائج مجتمعة امكن اقتراح الشكل الهندسي ثماني السطوح لجميع المعقدات عدا معقدي (الكادميوم والزئبق) لليكاند الاول فقد كانت رباعية السطوح.







M = Co and Cu complexes , L_1=Cl, L_2 = H_2O, L_3
Ni complex X_1 = X_2 = H_2O, X_3 = 2Cl
Cd and Hg complexes , X_1 = Cl , X_2 = Cl, X_3 = 0

Estimation study of new derivatives from betamethasone drug

MS. C. Student: Ferdous Sami Abdulameer

Supervised by

Prof. Dr. Abbas A-Ali Drea

Summary

Structural and energetic properties of betamethasone drug have been studied using different calculation methods such as PM3- semiempirical method and Density function theory(B3LYP)at basis set(3-21G** and 6-31G**) that's implemented into Gaussian 09 program and Hyperchem 8.02 program. Total energy, bandgap energy, bond lengths and bond angles are investigated through vacuumed optimization configuration of betamethasone. Estimation of vibrational analysis spectra has been done and compared with practical spectra of betamethasone drug.

Geometry optimization structure of betamethasone has -1331.652 a. u. units as total energy come out from the relaxation process with bandgap energy equal to 0.07945 e.v. units. The bond of C16-C17 with a length equal to 2.7693A0 is more reactive bound than other chemical bonds to share in the important reaction. This bond is broken down at 0.77kCal/mol . The bond angle of C12-C17-C19 is equal to 133.5942 degree shows the lowest stability than others, which explain the effectiveness of betamethasone at these bond to share in the various reaction. Theoretical vibration transitions are identical with experimental FT-IR spectrum for main bonds of betamethasone as evidence about the reality of the theoretical calculation.

Transition states of Betamethasone formation have been performed using the Quantum computation Semi-empirical(PM_3) method. The optimized geometries and other parameters are computed for Betamethasone and its components. Eleventh transition states have been proposed and investigated respected structures to examine the most probable transition state of a chemical reaction depending on zero-point energy, the first imaginary frequency and total energy.

The transition state of steps eight and nine is the controlling transition step to modify new derivatives of Betamethasone drug is the most probable transition state to estimate the actual pathway of the betamethasone compound formation reaction according to energetic value 362.972 kCal/mol of zero-point energy. Thermodynamic values such as energy barrier and reaction enthalpy change(ΔH) have been calculated for all eleventh reaction steps of Betamethasone synthesis at kCal/mol.

Several derivatives have been suggested for Betamethasone by using different substituted functional groups. Compares have been don through the pathway of molecular formation, transition state of controlling step mechanism and by the global index factor for the suggested derivatives and original moiety.

Two new suggested models of anti-Covied-19 drugs are more chemical effectively AFHTDPO(Betamethasone.NH_2) and EFHTDPO(Betamethasone.$NHCH_2CH_3$) than the Betamethasone molecule while FHCPCC(Betamethasone. COOH) and FHACPC(Betamethasone.$CONH_2$) are less chemical effective.