جامعة الموصل

كلية العلوم

دراسة كهروكيميائية ونظرية لتحسين موجة عدد من الأحماض الأمينية مع حامض الأسيتايل ساليسيلك و الباراسيتامول وحساب ثوابت التأين لها نظرياً

خالص محمد شحاذه عطية الزبيدي

رسالة ماجستير

قسم الكيمياء / الكيمياء الفيزياوية

بإشراف

الإستاذ المساعد الدكتور عمار عبد الستار إبراهيم

1442هـ 2020م

الخلاصة

تضمنت الرسالة جزأين :

الجزء الأول: دراسة السلوك الكهروكيميائي للألانين و الكلايسين بالاضافة الى دراسة تحسين موجة الأكسدة مع الاسبرين N-(4-hydroxyphenyl) acetamide,N-4-hydroxyphenyl) ethanamide و الباراسيتامول 2-Acetoxy benzoicacid باستخدام تقنية فولتامتري الموجة المربعة (SWV) على قطب البلاتين الصلب(Pt.(s) ، هذا الجزء يتضمن :

دراسة السلوك الكهروكيميائي لكل من الأحماض الأمينية الألانين (Alanine) و الكلايسين (Glycine) وذلك باستخدام تقنية فولتامتري الموجة المربعة على قطب البلاتين الصلب Pt(s) وباستخدام محلول الفوسفات المنظم (PBS) كالكتروليت مساعد وعند دالة حامضية متعادلة (pH=7.0) إذ اعطى الألانين موجة أكسدة واحدة للجهد (Ep) عند (0.291 V) كذلك أعطى الكلايسين موجة اختزال واحده للجهد Ep_1 عند V (0.00717-) وموجة أكسدة ثانية للجهد Ep_2 عند V (0.362) على قطب البلاتين الصلب ضد قطب المرجع الفضة / كلوريد الفضة المغمور في محلول مشبع من كلوريد البوتاسيوم (Ag/AgCl/Sat.KCl) .

كما تم دراسة تحسين موجة الأكسدة ما بين كل من الأسبرين N-(4-hydroxyphenyl) acetamide,N-4-hydroxyphenyl) ethanamide و الباراسيتامول 2-Acetoxy benzoicacid، مع الألانين و الكلايسين باستخدام تقنية فولتامتري الموجة المربعة على قطب البلاتين الصلب ضمن مدى من الدرجات الحرارية (293–313) درجة مطلقة وحساب ثابت التجمع Binding constant (K_b) وكذلك حساب القيم الثرموداينميكية ($\Delta G°, \Delta H , \Delta S$) .

كما أجريت دراسة نظرية لمركب الألانين و الكلايسين مع الباراسيتامول والأسبرين كلاً على حدى وتداخلهما لحساب قيم عدد من الصفات الفيزياوية ($\Delta G, \Delta H , \Delta S, E ,CV, ZPE , \Delta E$) نظرياً ، باستخدام طريقة HF/STO-3G في برنامج (Gauss View) فضلاً عن حساب (E_{HOMO}) و (E_{LUMO}) .

الجزء الثاني:

دراسة مركبات الأحماض الامينية نظرياً باستخدام طريقة HF/STO-3G في كل من الحالة الغازية وحالة الاذابة والحالة الأيونية (Gas ، Solvation ، Ionic) ومن خلال إجراء الحسابات تم حساب عدد من الصفات الفيزياوية ($\Delta G, \Delta H , \Delta S, E ,CV, ZPE , \Delta E$) ، فضلا عن حساب ($E_{HOMO}$) و ($E_{LUMO}$) .

كذلك تم احتساب العديد من القيم الفيزيائية والكيميائية النظرية لمركبات الاحماض الامينية ومنها الجهد الألكتروني الكيميائي(μ) Electronic Chemical Potential ، الصلادة (η) Hardness ، النعومة (σ) softness، والألفة الإلكترونية (ω) electro-philicity .

تم التنبؤ عن القيم العملية لثابت التأين للأحماض الأمينية pKa بالاعتماد على الحسابات النظرية، كذلك تم تطبيق معامل الارتباط (correlation coefficient) بين القيم التجريبية والقيم النظرية لثابت التأين باستخدام طريقتي الإدخال (Enter) و التدريجية (Stepwise)، وبشكل عام وجد أنَّ طريقة الإدخال تعطي معامل ارتباط جيداٍ (R> 0.942) مقارنة بالطريقة التدريجية (R> 0.920) .

Abstract

This study is divided into two parts:

The first part studies the electrochemical behavior of alanine and glycine and their oxidation wave enhancement of the oxidation with aspirin N-(4-hydroxyphenyl) acetamide,N-4-hydroxyphenyl) ethanamide and paracetamol 2-Acetoxy benzoic acid using square wave voltammetry (SWV) on a solid platinum electrode Pt (s). This part includes:

The study of the electrochemical behavior of alanine and glycine using square wave voltammetry technique on the solid platinum electrode Pt (s) in phosphate buffer solution (PBS) at (pH = 7.0). Alanine gives an oxidation peak (Ep) at (0.291 V) vs. while glycine gives a reduction wave at (-0.00717 V) and oxidation wave at (0.362 V) at the solid platinum electrode against the silver / silver chloride reference electrode immersed in a saturated solution of potassium chloride (Ag/AgCl/Sat.KCl) .

This part also studied the enhancement of the oxidation between paracetamol and aspirin with alanine and glycine using square wave voltammetry at temperature range of (293-313 K). the binding constant (K_b) was determined to the thermodynamic values such as ($\Delta G°$, ΔH, ΔS).

A theoretical study of alanine and glycine with paracetamol and aspirin were also performed separately to calculate the values of the physical properties (ΔE ZPE, E, CV, ΔG, ΔH, ΔS). All the parameters were calculated using the HF/STO-3G method beside to (E_{HOMO}) and (E_{LUMO}) were evaluated

The second part involved the study of amino acid theoretically using the HF/STO-3G method in each of the following states: gas, solvation, and ionic states. Calculated of the physico-chemical values (ΔE ,ZPE, E, CV, ΔG, ΔH, ΔS) beside to E_{HOMO} and E_{LUMO}.

Many theoretical physical and chemical characteristics of the amino acid compounds were calculated, including electronic chemical potential (μ), hardness (η), softness (σ), and electro-philicity (ω).

The practical values of the ionization constant of the amino acids (pKa) were predicted by relying on theoretical calculations. The correlation coefficient between the experimental and the theoretical values were applied using the (Enter) and (stepwise) methods.. In general, it was found that the (Enter) method gives a good correlation coefficient ($R > 0.942$) compared with the (stepwise) method ($R > 0.920$).

University of Mosul
College of Science

Electrochemical and theoretical study of the wave enhancement for some amino acids with acetylsalicylic acid and paracetamol and calculate the ionization constants theoretically

Khalis Mohammed Shahadha Ateya AL-Zubaidy

M.Sc. Thesis

Department of Chemistry / Physical Chemistry

Supervised by

Assist. Prof. Dr. Ammar Abdulsattar Ibrahim

2020 A.D. 1442 A.H.