جامعـة الموصـل

كلية العلوم

دراسة كهروكيميائية ونظرية لتداخل دواء الدابسون وايون الكادميوم (II) مع عدد من الاحماض الامينية

أسوان نجاح الدين عبد حسين علي الطائي

رسالة ماجستير

علوم الكيمياء / الكيمياء الفيزياوية

بإشراف

الأستـــاذ المساعد الدكتـور

عمار عبد الستار إبراهيم

١٤٣٥هـ

٢٠٢١ م

الخلاصة

تضمنت الرسالة جزئين :

الجزء الاول : دراسة السلوك الكهروكيميائي للآلانين والفالين فضلاً عن تحسين موجة الأكسدة لهذين الحامضين الأمينيين مع عقار الدابسون وأسمه العلمي "diaminodiphenyl sulfone" باستخدام تقنية فولتامتري الموجة المربعة (SWV) على قطب البلاتين الصلب واستعمال محلول الفوسفات المنظم (Phosphate Buffer Solution) كالكتروليت مساعد وعند دالة حامضية متعادلة (pH=7) وتضمن هذا الجزء :

- ❖ دراسة السلوك الكهروكيميائي للحامضين الامينيين الآلانين (Ala) والفالين (Val) فأعطى كل منهما موجة اكسدة واحدة للجهد عند (Ep=0.393V) و (0.351 V) على التوالي على سطح قطب البلاتين مقابل القطب المرجع (Ag/AgCl/ sat KCl) وتم تحديد الظروف المثلى لقياس كل حامض أميني. بعد ذلك تمت دراسة تداخل موجة جهد الاكسدة بين الدابسون مع الالانين والفالين الناتجة ودراسة هذا التداخل عن طريق حسابات طاقات الأوربيتالات الجزيئية HOMO و LUMO واثبات حدوث التداخل.
- ❖ دراسة السلوك الكهروكيميائي لمحلول أيون الكادميوم الثنائي : فأعطى الكادميوم موجة اختزال واحدة للجهد عند (Ep= − 0.75V) على سطح قطب البلاتين مقابل القطب المرجع (Ag/AgCl/ sat KCl) بعد اختيار الظروف المثلى لقياس محلول أيون الكادميوم الثنائي. بعد ذلك تمت دراسة تداخل موجة جهد الاختزال بين الكادميوم مع الآلانين والتايروسين وضمن مدى من الدرجات الحرارية (٢٩٣-٣١٣) كلفن وحساب ثابت الترابط والدوال الثرموداينميكية $\Delta H,\Delta G,\Delta S$ ودراسة هذا التداخل عن طريق حسابات الاوربيتالات الجزيئية HOMO و LUMO واثبات حدوث التداخل.

الجزء الثاني : وتضمنت دراسة نظرية لتداخل الأحماض الأمينية مع عقار الدابسون واحتساب الدوال الثرموداينميكية $\Delta H,\Delta G,\Delta S$ اضافة الى حسابات طاقات الأوربيتالات الجزيئية HOMO و LUMO واثبات حدوث التداخل وكذلك دراسة نظرية الالتحام الجزيئي لدواء الدابسون مع عدد من البروتينات المهمة الموجودة في الجسم .

Abstract

The study contained two parts:

The First Part:

The electrochemical behavior of alanine and valine where studied in addition to improve the oxidation wave of the two amino acids with dapson. Its scientific name is“diaminodiphenyl sulfone” using square wave voltammetric (SWV) technique, A solid platinum electrode has been used as a working electrode and phosphate buffered solution (PBS) as supporting electrolyte (pH = 7), This part includes:

- The electrochemical behavior of the amino acids alanine (Ala) and valine (Val), Alanine gives one oxidation peak at (Ep=0.393V) and valine gives also one oxidation peak at (0.351 V). The optimum conditions for measuring each amino acid were examined. After that, the enhancement of the oxidation potential peak between dapson with alanine and valine were studied, and this interference was proved by means of HOMO & LUMO molecular orbitals.
- The electrochemical behavior of the cadmium(II) . The cadmium (II)gives one reduce peak at (Ep=-0.75V) under the measurement optimum condition. The interference of the reduction between cadmiumpeak with alanine and tyrosine were studied within a range of temperatures (293-313) K and the correlation constant and thermodynamic values were calculated, ΔH, ΔG, ΔS. This interference was proved by means of HOMO & LUMO molecular orbitals .

The second part:

This part involved a theoretical study for the amino acids with dapsone interaction. Thermodynamic values ΔH, ΔG, ΔS were calculated and the HOMO & LUMO molecular orbitals were evaluated , The result shows that the interference was happened, and finally it Included a theoretical study of the Docking of the drug dapsone with a number of important and essential proteins by studying the interaction between the drug and a number of amino acids in the chemical structure of the protein.

University of Mosul

College of Science

Electrochemical and Theoretical Study of Dapson and Cadimum ion (II)Interaction with different amino acids

M.Sc. Thesis submitted by

Aswan Najah Al-deen Abed Hussain Ali Al-Taee

MSc. Thesis

Department of Chemistry / Physical Chemistry

Supervised by

Assist. Prof. Dr.Ammar Abdulsattar Ibrahim

2021 A.D **1443 A.H**