



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

جامعة قاصدي مرباح ورقلة

كلية الرياضيات وعلوم المادة

قسم الكيمياء

مذكرة تخرج لنيل شهادة ماستر أكاديمي في الكيمياء

التخصص: كيمياء تطبيقية

من إعداد: لوزي وسيلة

تحت عنوان:

تحليل نتائج كروماتوغرافيا (GC/MS) لمستخلص الكلوروفورم  
لنبتة الكينوا / Quinoa ونمذجة أهم المركبات

أمام لجنة المناقشة:

رئيسا	أستاذ محاضر (أ)	مخلفي طارق
مناقشا	أستاذ محاضر (أ)	مصطفى الطاهر سعيدات
مؤطرا	أستاذة محاضرة (أ)	علاوي مسعودة
مساعد المؤطر	أستاذة محاضرة (أ)	زاوي منال

الموسم الجامعي: 2022/2021

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ  
الْحَمْدُ لِلَّهِ الَّذِي  
خَلَقَ الْمَوَدَّعَةَ  
وَالْحَمْدُ لِلَّهِ الَّذِي  
خَلَقَ الْمَوَدَّعَةَ  
وَالْحَمْدُ لِلَّهِ الَّذِي  
خَلَقَ الْمَوَدَّعَةَ

## الإهداء

بسم الله وكفى و الصلاة و السلام على النبي المصطفى ، ثم الحمد لله الذي  
بنعمته تتم الصالحات أما بعد:

أهدي ثمرة جهدي إلى من أنارت دربي طول حياتي وضحت من أجلنا  
حتى نصل إلى أعلى المراتب إلى التي رعتني حق الرعاية وكانت سندي في الشدائد،  
وكانت دعواتها لي بالتوفيق تتبعني خطوة خطوة في عملي جزاها الله عني خير الجزاء  
في الدارين أمي الغالية.

إلى من نعتز بوجوده في حياتنا، وذلك لنا الصعاب وحثنا على العلم والعمل وضحي  
من أجلنا إليك أبي الغالي أطل الله في عمره.

إلى من حبهم في قلبي وبنير دربي وأختي وإخوتي كل باسمه، إلى من شجعني على  
مواصلة مسيرتي العلمية رفيق دربي زوجي.

إلى كل من علمونا حرفا من ذهب وكلمات من درر و صاغو لنا علمهم حروفا ومن  
فكرهم منارة تنير لنا سيرة العلم "أساتذتنا الكرام" حفظهم الله.

## شكر و عرفان

الحمد لله الذي هدانا سبيل الرشاد، وألهمنا من العلم والعمل ما يشد أزرنا في هذه الحياة، يقول المولى تعالى في محكم تنزيله بعد بسم الله الرحمن الرحيم (فوق كل ذي علم عليم) صدق الله العظيم "سورة يوسف الآية 76" والصلاة والسلام على الصادق الوعد الأمين نبينا محمد خاتم الأنبياء والمرسلين.

نتوجه بشكرنا الجزيل وبخالص الإحترام والتقدير إلى الأستاذة علاوي مسعودة و الأستاذة زاوي منال على تأطيرهما وتحمل كل ما بدر من أخطاء وتشجيعهما الدائم لنا، وأيضا على مجهوداتهما وكذا إرشاداتهما التي أنارت لنا الدرب لإتمام هذا العمل، كما أن الشكر موصول إلى الأستاذ مصطفى الطاهر سعيدات الذي بدوره ساهم في هذا العمل دون رد. نتشرف بحضور لجنة المناقشة، كما نخص بأسمى عبارات الشكر تقديرا واحتراما للأستاذة الأفاضل.

شكرنا موصول إلى كل من ساهم من قريب أو من بعيد في إتمام هذا العمل، نشكر جميع أصدقائنا الأعزاء وكل أساتذتنا الأفاضل على كل حرف أناروا به درب العلم، جعله الله في ميزان حسناتهم، كما نتقدم بأتمن عبارات الشكر والعرفان إلى كل القائمين على قسم الكيمياء، وكل طلبة الكيمياء التطبيقية و المنتجات الطبيعية. وختامنا شكرا لوالدينا الأعزاء أطال الله في أعمارهم.

## قائمة الأشكال:

- الشكل (1.1): صور فوتوغرافية لنبات الكينوا ..... 7
- الشكل (2.1): التوزيع الجغرافي لنبات الكينوا وطنيا. .... 10
- الشكل (3.1): خريطة التوزيع الجغرافي لنبات الكينوا دوليا. .... 11
- الشكل (4.1): صور توضح البذور، الإزهار، حقول لأصناف من الكينوا. .... 12
- الشكل (5.1): تفاعلات داخل الجزيئات بين الذرات المربوطة والغير مربوطة. .... 22
- الشكل (6.1): إستطالة الروابط. .... 23
- الشكل (7.1): تشوه زوايا التكافؤ. .... 23
- الشكل (8.1): طاقات التوائية. .... 23
- الشكل (9.1): عزم ثنائي القطب بين الذرات. .... 24
- الشكل (10.1): نموذج دراسة العلاقة بين البنية و الفعالية. .... 29
- الشكل (11.1): رسم للمدارات الجزيئية الحدودية HOMO و LUMO. .... 32
- الشكل (1.II): صورة لجهاز كروماتوغرافيا الغاز المرفقة بمطيافية الكتلة. .... 42
- الشكل (2.II): كروماتوغرام مستخلص الكلوروفورم المحصل عليه بواسطة الفصل ..... 42
- الشكل (3. II): واجهة برنامج Hyperchem. .... 47

## قائمة الجداول:

- 8..... الجدول(1-I): الأسماء الشائعة لنبات الكينوا
- 9..... الجدول(2-I) : التصنيف النظامي لنبات الكينوا
- 11..... الجدول(3-I): أصناف نبات الكينوا
- 14..... الجدول(4-I): القيمة الغذائية لبذور الكينوا
- 15..... الجدول(5-I): القيمة الغذائية للكينوا مقارنة مع بعض الأغذية الأخرى
- 21..... الجدول (6-I) : أهم الأشكال و المعادلات الرئيسية للطاقة التي تأخذها MM<sup>+</sup>
- 43..... الجدول (1-II) : بعض اقتراحات نتائج الفصل الكروماتوغرافي (GC-MS) لمستخلص الكلوروفورم
- 48 ..... الجدول (2-II) : نتائج أطوال الروابط للمركبات المدروسة
- 53..... الجدول(3-II) : نتائج أقياس الزوايا للمركبات المدروسة
- 60 ..... الجدول(4-II): نتائج عزم ثنائي القطب بالطريقتين PM<sub>3</sub> و MM<sup>+</sup>
- 61 ..... الجدول(5-II): يوضح أهم الخصائص الفيزيائية للمركبات المدروسة بطريقة PM<sub>3</sub>
- 62 ..... الجدول(6-II): نتائج الطاقة بالنسبة للطريقتين ب Kcal / mol
- 63..... الجدول(7-II): نتائج العلاقة بنية فاعلية QSAR بطريقة PM<sub>3</sub>
- 64..... الجدول(8-II): نتائج العلاقة بنية فاعلية QSAR بطريقة MM<sup>+</sup>
- 65 ..... الجدول(9-II): نتائج طاقة HOMO و LUMO والفرق بينهما بالطريقتين MM<sup>+</sup> و PM<sub>3</sub>

## قائمة الاختصارات:

الإختصار	المعنى
ADN	الحمض النووي الريبي منقوص الأكسجين
AMBER	بناء نموذج لمساعدة تحسين الطاقة
AM1	نموذج 1 لأوستن
ab-initio	طريقة الحل الشامل
CHARMM(Bio)	كيمياء هارفارد الجزيئية الميكانيكي
DFT	نظرية الكثافة الوظيفية
DM	الديناميكا الجزيئية
FAO	منظمة الأغذية الزراعية
IR	مطيافية تحت الحمراء
GROMOS	مجموعة البرامج المحاكية لجزيئية جرونينجن
GC-MS	كروماتوغرافيا الغاز المرفقة بمطيافية الكتلة
HOMO	أعلى مدار جزيئي مشغول
HE	طاقة التمييز
LUMO	أدنى مدار جزيئي غير مشغول
Log P	معامل التجزئة
MNDO	إهمال معدلة التداخل ثنائي الدرّة
MM4 و MM2,MM3	حقل القوة
MMFF94	حقل القوة الميكانيكا الجزيئية
MM <sup>+</sup>	الميكانيكا الجزيئية
MR	الإنكسارية المولية
NMR	الرنين المغناطيسي النووي
OPLS	إمكانات محسنة لمحاكاة الوسائل
PM3	معيار نموذج رقم 3
QSAR	العلاقة بين البنية الفراغية و الفعالية البيولوجية
QM	ميكانيكا الكم
RMN	طيف الرنين المغناطيسي النووي
Semi-empirique	الطريقة النص التجريبية
SPASIBA	الخوارزمية المحتملة الطيفية لمحاكاة القدرة على التكيف الجزيئي
SNDO	إهمال كامل لفرق التداخل
SAG	السطح الجزيئي
UV	الأشعة فوق البنفسجية
UFF	حقل القوة العالمي
V	الحجم الجزيئي

## قائمة الرموز:

الرمز	الشرح
E(L)	طاقة الاستطالة
E(Θ)	طاقة الانحناء
E(Ø)	طاقة الالتواء
$E_{vdw}$	طاقة فاندر فالس
$E_{electros}$	الطاقة الكهروستاتيكية
K	ثابت الاستطالة
$L_0$	طول الرابطة المرجعية
L	طول الرابطة في التمدد
Kf	ثابت المرونة
$\Theta_0$	زاوية التكافؤ المرجعية
$\Theta$	زاوية التكافؤ في الجزيء
$(Kf, \theta_0)$	الثنائية تمثل مجموعة فرعية لحقل القوة
<b>R</b>	المسافة بين أوساط الرابطتين
$1\mu_2 \mu$	عزوم ثنائي الأقطاب بين الرابطتين
X	الزاوية بين اتجاه عزمين
$b_2, a_1$	الزاوية المتشكلة على التوالي بين $\mu_1 - r_1$ , $\mu_2 - r_2$
E	طاقة النظام
$\Psi$	سرعة دوران المسرى
W	الكتلة الجزيئية
D	الكثافة
$K\theta$	ثابت المرونة
$\theta_0$	زاوية الرابطة المرجعية
$\Theta$	زاوية الرابطة
$K\theta$	ثابت القوة
N	(n: دورية (n=1,2,3,4,5,6))
B و A	ثوابت فاندر فالس
R	المسافة بين الدرتين غير المرتبطتين
$q_i, q_j$	الشحنات التي تحملها الدرات
$\epsilon_{i,j}$	ثابت العزل الكهربائي في وضع التوازن
$\Gamma_{i,j}$	المسافة بين الدرتين
$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 1}$	معامل التصحيح
octanol]C[	تركيز المادة المدابة في الطور العضوي (أوكتانول)



Eau]C[	تركيز المادة في الطور المائي
N	معامل الإنكسارية
NA	عدد أفوقادرو
Pol	الإستقطابية
P(e)	معامل الإستقطابية
$\epsilon$	ثابت العزل الكهربائي
A	معامل النقل
$\Pi$	الرابطة الإلكترونية

## الفهرس:

I	الإهداء
II	شكر و عرفان
III	قائمة الأشكال:
IV	قائمة الجداول:
V	قائمة الاختصارات:
VI	قائمة الرموز:
2	المقدمة
3	مراجع المقدمة
5	الجزء الأول:
6	1.1.I تمهيد:
6	2.1.I التعريف بالعائلة الرمامية (Chenopodiaceae)
6	3.1.I تعريف نبات الكينوا:
8	4.1.I الأسماء الشائعة لنبات الكينوا:
9	5.1.I التصنيف النظامي لنبات الكينوا:
9	6.1.I التوزيع الجغرافي لنبات الكينوا:
9	أ- وطنيا:
10	ب- دوليا:
11	7.1.I أصناف نبات الكينوا:
12	8.1.I الاستعمالات التقليدية و الطبية لنبات الكينوا:
13	9.1.I القيمة الغذائية:
15	10.1.I الدراسات السابقة للنبات:
18	الجزء الثاني:
19	1.2.I مقدمة
19	2.2.I تعريف النمذجة الجزيئية
20	3.2.I طرق النمذجة الجزيئية
20	4.2.I الميكانيكا الجزيئية $MM^+$
26	5.2.I الديناميكا الحرارية DM :
27	6.2.I ميكانيكا الكم (QM) :
29	7.2.I العلاقة بنية - فاعلية QSAR
32	9.2.I أنواع الحسابات
34	10.2.I تطبيقات الكيمياء الحسابية

35	11.2 البرامج المستعملة في النمذجة الجزيئية: ..
36	المصادر والمراجع
41	1.II التحليل الكروماتوغرافي : ..
41	1.1.II مدخل: ..
41	2.1.II الشروط العملية لتطبيق كروماتوغرافيا الغازية المرفقة بمطيافية الكتلة
42	3.1.II نتائج التحليل الكروماتوغرافي (GC/MS): ..
44	2.II النمذجة الجزيئية: ..
44	1.2.II الوسائل والبرامج المستعملة: ..
45	2.2.II طريقة العمل: ..
46	ب. برنامج Hyperchem
48	3.2.II النتائج والمناقشة: ..
53	ب. نتائج زوايا المركبات المدروسة: ..
60	4.2.II نتائج عزم ثنائي القطب للمركبات المدروسة ببرنامج: ..
61	5.2.II الخصائص الفيزيائية للمركبات المدروسة: ..
62	6.2.II نتائج ومناقشة طاقة المركبات المدروسة: ..
63	7.2. (QSAR). نتائج ومناقشة العلاقة بنية فاعلية II
65	8.2.II نتائج طاقة HOMO و LUMO والفرق بينهما للمركبات المدروسة: ..
66	9.2.II صور للمركبات المدروسة: HOMO و LUMO
69	خلاصة عامة: ..

# المقدمة

## المقدمة

للنباتات الطبية دوراً كبيراً ومهماً في حياة الإنسان منذ القدم، فهي تعد من الظواهر العريقة و تاريخ العرب يشهد على ذلك ما دَوّن في الموسوعات، فيعد طب الأعشاب فرع من فروع الطب البديل، وذلك لأن النباتات تؤذي دوراً مهماً في حماية صحة الإنسان وتحسين مسار حياته وما زالت العديد من الثقافات تثمن حالياً قيمة الوصفات الطبية النباتية وأهميتها الوقائية والعلاجية ومنافعها الأخرى [1].

وقد عرفت النباتات الطبية على أنها صيدلة كاملة لما تحويه من مئات بل آلاف من مواد فعالة توزعت بنسب دقيقة تناسب الجسم البشري، فمن المعلوم أن لبعض العقاقير النباتية قدرة علاجية أكبر من تلك التي تملكها الأدوية المصنعة في معالجة بعض الأمراض، ولهذا الغرض ظهر مؤخراً ميدان الانثوفارماكولوجيا، وهو ميدان جديد يهتم بتقييم النباتات الطبية المستعملة في الطب الشعبي، ودراستها بالوسائل المتطورة للصناعة الصيدلانية آخذاً بعين الاعتبار المعطيات العلمية منها: البيولوجية، الكيميائية، الاقتصادية [2].

ومواكبة لهذه التطورات اخترنا نبات الكينوا، لما يتميز به من خصائص علاجية وغذائية مهمة فهو يعد من أهم المحاصيل الزراعية المستقبلية الواعدة التي حظيت بأهمية كبيرة في السنوات الأخيرة واكتسبت شعبية متنامية في الوقت الراهن [3]، وتطرقنا إلى نمذجة أهم المركبات المقترحة من الدراسة التحليلية لکروماتوغرافيا الغازية المرفقة بمطيافية الكتلة بواسطة البرامج: Gaussian، ChemDraw، Hyperchem لتحديد مختلف الخصائص الفيزيوكيميائية و الهندسية وعليه قسمت المذكرة إلى مقدمة وجزء نظري يحتوي على فصلين:

الفصل الأول: يتضمن جزئين

الجزء الأول: الدراسة النظرية لنبات الكينوا.

الجزء الثاني: الدراسة النظرية حول النمذجة الجزيئية.

الفصل الثاني: نتائج الكروماتوغرافيا (GC/MS) لمستخلص الكلوروفورم و النمذجة الجزيئية لأهم المركبات

المقترحة.

## مراجع المقدمة

- [1] أحمد خالد يحيى الهدواني م2000 ماجستير علوم زراعة (بستنة) تأثير التسميد والرش ببعض العناصر الغذائية في الصفات الكمية والنوعية (Trigonellafoenum-graecum L.) لبعض المركبات الفعالة طبيا في بذور صنفين من الحلبة.
- [2] عباس بن مرعاش - دراسة نواتج الأيض الثانوي الفلافونيدي والفعالية المضادة للأكسدة للنبنة Convolvulus supinusCoss .kral.(Convolvulaceac), جامعة منتوري- قسنطينة,2012.
- [3] بوزيد مسعودة, عطالي حليلة- دراسة كيميائية لبذور نبات الكينواChenopodium quinoa Willd جامعة الشهيد حمه لخضر-الوادي2020.

# الفصل الأول

الجزء الأول:  
الدراسة النظرية لنبات  
الكينوا



### 1.1.1 تمهيد:

*الكينوا* نبات عشبي من العائلة الرمرامية، وهي نباتات غذائية أصلية كانت تعتبر محصولا غذائيا مهما بالنسبة للإنكا، ولا زالت تمثل محصولا غذائيا مهما بالنسبة للكيشوا (جنوب كولومبيا و البيرو)، تعود أصول زراعتها إلى أكثر من 5000 عام في "جبال الأنديز" بأمريكا الجنوبية حول بحيرة تيتيكاكا مزرعة على ارتفاع 400 متر من مستوى سطح البحر، ولقد تم توزيعها على نطاق واسع في الأكوادور، البيرو، بوليفيا، تشيلي وشمال غرب الأرجنتين، نظرا لأهميتها الاقتصادية وتمتعها بجودة غذائية ممتازة وهذا هو سبب الإهتمام الكبير بها مؤخرا [1].

هي نوع شبيه بالحبوب، تعتبر من المحاصيل الصالحة للأكل كونها تنتمي إلى الفصيلة الرمرامية، حالها كحال بعض النباتات مثل: الشمندر، السبانخ وكوم العشب، كما أن أوراقها تؤكل كخضروات، ظلت غذاء أساسيا لمدة لا تقل عن 5000 سنة، وتدعى باللهجة المحلية "كيشوا" وبدأت تنتشر في أماكن أخرى من العالم، كونها تحتوي على جميع الأحماض الأمينية الضرورية وبالتالي تعد بروتينا كاملا، ولهذا تعتبر من حبوب الطاقة الغنية بالمغذيات، وفوائدها العديدة كانت تلقب بأهم جميع الحبوب في لغة قبائل الانكا لأنها شكلت مصدرهم الغذائي الأساسي كما أنه يبقى المحصول الغذائي الأهم لأحفادهم "لكيشوا و الايمارا" الذين يعيشون في المناطق الريفية، كما يشير إليه الباحثون والشعوب الأصلية بأنها حبوب ذهبية [2].

### 2.1.1 التعريف بالعائلة الرمرامية (Chenopodiaceae)

نباتات العائلة الرمرامية (Chenopodiaceae) تابعة للرتبة القرنفلية (Caryophyllales) تعرف باسم البنجر أو الشمندر وتسمى علميا الملحية، لنموها في الصحاري المالحة وقرب المستنقعات، كما تعتبر نباتات هذه العائلة من أهم النباتات الصحراوية التي تتحمل الجفاف وملوحة التربة وتعطي إنتاجية جيدة، ونادرا ما تكون شجيرات أو أشجار تضم حوالي 100 جنس و1400 نوع معظمها أعشاب حولية وبعضها ذو حولين والآخر معمر كما تنمو الأنواع التابعة للعائلة الرمرامية بالقرب من شواطئ البحار نظرا لمقاومة الكثير منها للملوحة [3].

### 3.1.1 تعريف نبات الكينوا :

*الكينوا* نبات عشبي حولي، وذاتي التلقيح، ثنائي النوات ذو توزيع جغرافي واسع، من المميزات الخاصة *للكينوا* شكله ولونه وسلوكه في مناطق زراعية بيئية مختلفة، وذلك بحسب نوع في تركيبها الوراثية والظروف البيئية المحلية وخصوبة التربة، إلا أن *الكينوا* تتحمل العوامل المناخية المعاكسة أو الضارة للغاية مثل: الجفاف الصقيع، ملوحة التربة وغيرها من العوامل التي تؤثر على المحصول [4].

يتراوح موسم النمو من 90 إلى 240 يوما وينمو مع هطول الأمطار من 200 إلى 280 مل في السنة و يتكيف مع التربة الحمضية، كما أنها تزدهر في التربة الرملية والطينية، بحيث تختلف النباتات أيضا مع الأنماط الجينية والمراحل الفينولوجية، من الأخضر إلى الأحمر إلى الأرجواني الداكن والأصفر والبرتقالي والرماني ونطاقات أخرى متميزة [4].



الشكل (I-1): صور فوتوغرافية لنبات الكينوا

- يكون الجذر محوري قوي يمكن أن يصل إلى عمق 180 سم وهي متفرعة بشكل جيد وليفية مما يمنحها مقاومة للجفاف والاستقرار [4].
- الأوراق متناوبة وتتكون من السويقات والصفائح الورقية وأعناق طويلة ورقيقة لها شكل معين، مثلثي أو متقلب، يمكن أن تكون مسطحة أو متموجة أو سميقة، ذات ألوان حمراء، أرجوانية حيث أن لون الورقة متغير للغاية من الأخضر إلى الأحمر بضلال مختلفة [4].
- الثمرة لها شكل أسطواناني عدسي، يتسع قليلا نحو المركز، وهو يتألف من الحضيض الذي يحيط بالبذرة تماما بحيث يحتوي على بذرة مفردة متغيرة الألوان [4].
- البذرة تكون صغيرة مسطحة ودائرية الشكل قطرها 2 مم مغطاة ولونها مرتبط بلون النبتة، تحتوي على طبقة من الصابونين الذي يمنح الطعم المر للكينوا، بالإضافة إلى أنها غنية بالأحماض الأمينية الأساسية، تأخذ بذور الكينوا عدة ألوان منها: الأصفر، الأحمر، البني، الأسود، البرتقالي و الوردية، ما يميز هذه البذور هو تأقلمها الشديد مع أنواع المناخ والتربة المختلفة [5].

4.1.I. الأسماء الشائعة لنبات الكينوا:

: الأسماء الشائعة لنبات الكينوا [6].(I-1)الجدول

الدول	الإسم الشائع
الكيشوا(منطقة)	Kiuna, quinua, Parca
الأيمارا(منطقة)	Supha, jopa, jupha, jauira, jiura, aara,ccallap, vocali
أزتيك(منطقة)	Huatzontle
تشيبشا(منطقة)	Suba, supha, pasca
مابوتشي (منطقة)	Quinua
اسبانيا	Quinua, quinoa, quingua, quiuna, kinoa, triguillo, trigo inca, arroccill, Dahui, juba, ubiquo, arrozdelPeru, ubate, juira, suba
الهند	Bathu
البرتغال	Arrozmiu'do do peru', espinafre do peru' quinoa
انجلترا	Quinoa, quinua, kinoa, sweet quinoa, Peruvianrice, Inca rice, pettyrice
فرنسا	Ansérine quinoa, riz de Pérou, petit riz de Pérou, quinoa
ايطاليا	Quinua, chinua
ألمانيا	Reisspinat, Peruanischerreisspina, reismelde, Reis-gerwacks, Inkaweizen

5.1.I. التصنيف النظامي لنبات الكينوا:

: التصنيف النظامي لنبات الكينوا [7].(I-2)الجدول

Plantae	المملكة
Tracheobionta	تحت المملكة
Magnoliophyta	الصف
Magnoliopsida	القسم
Caryophyllidae	تحت القسم
Caryophyllales	الترية
Amaranthaceae	العائلة
Chenopodium	الجنس
C.quinoa	النوع

6.1.I. التوزيع الجغرافي لنبات الكينوا:

أ- وطنيا:

تقوم الجزائر بزراعة نبات الكينوا في المحطات التجريبية التابعة لمعاهدة وزارة الفلاحة والتنمية الريفية في كل من الولايات التالية: بسكرة - سطيف - تيارت - جامعة (الوادي) - حاسي الرمل [8]



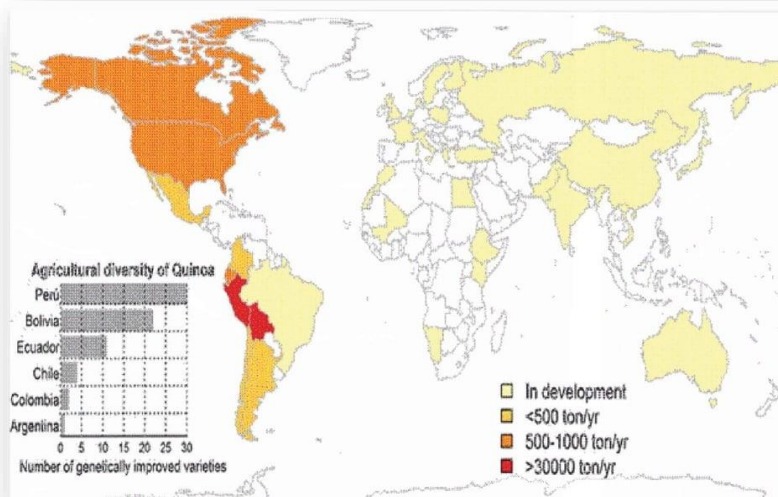
اللون الأزرق يوضح الولايات التي تتواجد فيها نبتة الكينوا على المستوى الوطني

الشكل (I-2): التوزيع الجغرافي لنبات الكينوا وطنياً.

ب- دولياً:

يختلف التوزيع الجغرافي للنبتة من منطقة إلى أخرى حيث تنمو الكينوا بشكل طبيعي في جميع بلدان الانديز، من كولومبيا مروراً بالأرجنتين إلى جنوب تشيلي، وتعتبر الدول الرئيسية المنتجة للكينوا على مستوى العالم هي: بوليفيا وبيرو وإكوادور، ويمتد إنتاجه من خط عرض 5 درجات شمالاً إلى خط عرض 43 درجة جنوباً، وتمتد نطاقات توزيعه على خطوط الارتفاع من مستوى سطح البحر إلى 400 متر فوق مستوى سطح البحر، حيث يوجد أكبر تنوع وراثي له في منطقة الألبانوس (الهضاب المرتفعة) في بوليفيا وبيرو الوثيقة (3)، وقدرة الأصناف المختلفة على النمو على إرتفاعات ومناطق مناخية مختلفة هي ما يمكنه أن يلعب دوراً كبيراً في تحسين الأمن الغذائي [9].

وقد أدت قدرة الأصناف المختلفة للكينوا على التكيف في مناطق متنوعة إلى إجراء تجارب في بلدان مختلفة في إفريقيا، وآسيا، وأوروبا، وأمريكا الشمالية، وقد نجحت زراعته حتى الآن في بلدان عديدة مثل: الولايات المتحدة، المغرب، كينيا و الهند. الوثيقة الموالية توضح مناطق التوزيع الجغرافي لنبتة الكينوا على المستوى الدولي [9].



الشكل (I-3): خريطة التوزيع الجغرافي لنبات الكينوا/دوليا.

### 7.1.I. أصناف نبات الكينوا:

أصناف الكينوا عديدة ويرجع ذلك إلى طبيعة منطقة هذا المحصول، حيث تمتد المنطقة التقليدية لزراعة الكينوا في أمريكا الجنوبية من كولومبيا في الشمال (2 درجة شمالا) إلى التشيلي في الجنوب (40 درجة شرقا)، ومن مستوى سطح البحر إلى 4000 متر فوق سطح البحر، وينتج عن هذا أكثر من 100 نوع من الكينوا ويمكن تقسيم هذه الأنواع والأصناف إلى خمسة مجموعات موضحة في الجدول التالي [10]:

### الجدول (I-3): أصناف نبات الكينوا [10].

المنطقة	أصناف نبات الكينوا
كاخاماركا	كينوا الوديان الجافة (جونين) والوديان الرطبة
حول بحيرة تيتيكاكا	الالتيبيلانو (بيضاء) وملونة في منطقة سوني الزراعية البيئية
جنوب بوليفيا	كينوا السهول المالحة
شيلي	كينوا مستوى سطح البحر
بوليفيا	كينوا منطقة يونغا الزراعية البيئية والمناطق شبه استوائية



الشكل (I-4): صور توضح البذور، الإزهار، حقول لأصناف من الكينوا.

### 8.1.1. الاستعمالات التقليدية و الطبية لنبات الكينوا:

#### أ- الإستعمال الطبي:

تستخدم أوراق الكينوا والسيقان والحبوب للأغراض الطبية: التئام الجروح وتقليل التورم ومهدئ لوجع الأسنان وتطهير المسالك البولية كما أنها تستخدم في تجبير العظام وإيقاف النزيف الداخلي وطارداً للحشرات، حيث أجريت دراسة من قبل حول الابتكار في القيمة الصحية وتطوير الأغذية الوظيفية للكينوا، حيث بينت أن مكونات الكينوا لها تأثير إيجابي كبير على التمثيل الغذائي والقلب والأوعية الدموية والجهاز الهضمي [11]. كما أن لديها خصائص مضادة للكوليسترول، مضادة للأكسدة، مضادة للسرطان وبدورها تعالج عدة أمراض وبشكل خاص مرض السكري وأمراض القلب [12].

#### ب- الاستعمال الغذائي:

تتمتع نبتت الكينوا بخصائص جيدة تم استغلالها في صناعة الأغذية والأعلاف نظراً لكونها خالية من الغلوتين وذات قيمة غذائية عالية، إلى جانب أنها محصول ينمو في البيئات الهامشية [13]. وقد تبين أنها جيدة الهضم ومعظم بروتيناتها تنتمي إلى مجموعة الألبومينات القابلة للذوبان في الماء و الجلوبيولينات القابلة للذوبان في المحاليل الملحية المخففة وهي ذات قيمة غذائية عالية وصحية ومناسبة لمرضى السكر والأشخاص الذين يعانون من مرض الاضطرابات الهضمية (السيلياك) والحساسية من بروتين الحليب الكازين، كما أنها خالية من الجلوتين و تعتبر سهلة الهضم [14]

#### ج- الاستخدام الصناعي:

لنشاء الكينوا قدرة كبيرة على الثبات في ظروف التجمد والذوبان، ويمكن أن يوفر كبديلاً لنشويات المعدلة كيميائياً [13]. من بين أهم أسباب استخدام نشاء الكينوا في المجال الصناعي هو صغر حبوبه، فيمكن على

سبيل المثال: استخدامه في صنع الرذاذ(الايروسول)، وعجائن وورق النسخ والحلوى و السواغات في صناعة البلاستيك وأنواع التالك والمساحيق المستخدمة في الطباعة [15]. كما يستخدم دقيق الكينوا مع دقيق القمح أو الذرة فيصنع البسكويت والخبز و الأغذية المصنعة، ويمكن لصبونيئات المستخرجة من قشرة الكينوا أن تستخدم بأشكال مختلفة مفيدة مثل استعمالها في المنظفات أو معجون.

#### د- أعلاف الحيوانات:

تستخدم النبتة كلها كعلف اخضر كما يتم استخدام مخلفات الحصاد لتغذية الأبقار والضأن والخيول والطيور والدواجن [11].

#### 9.1.I القيمة الغذائية:

تعد بذور الكينوا مصدرا غذائيا هاما لاحتوائها على نسبة عالية من البروتينات والألياف والمعادن، حيث أكدت منظمة الأغذية والزراعة للأمم المتحدة (FAO) أن بروتينات الكينوا كبروتين الكازيين مكافئة في جودتها إلى حد بعيد لتلك الموجودة في الحليب بفضل الأحماض الأمينية الأساسية التي تحتوي عليها [16]. أيضا تحتوي الكينوا على وجه الخصوص على نسبة عالية من اللايسين حيث أن الأحماض الأمينية غالبا ما تكون مفقودة فيالحبوب [17].

إلا أن بذور الكينوا لا تحتوي على الغلوتين، ويعد هذا من أبرز أسباب الاهتمام بهذا النبات على وجه الخصوص للأشخاص الذين يعانون من حساسية اتجاه الغلوتين كما تعد مصدرا لأهم المعادن منها الحديد، النحاس، الفوسفور، المغنيزيوم، الزنك بنسبة اكبر منها عند الذرة و الشعير [18]. حيث أجريت أبحاث مقارنة بين محتوى المغذيات، بين كل من الكينوا والقمح والأرز، حيث بينت أن محتوى الكينوا من المغذيات الأساسية يفوق ذلك الموجود في الحبوب الثلاثة الأخرى، فيما يتعلق بالبروتين، محتوى الدهون بالأخص الأحماض الدهنية المشبعة وغير المشبعة وكذا المحتوى من المعادن [19].



الجدول(4-I): القيمة الغذائية لبذور الكينوا [20].

المادة	الكمية الموجودة في كل 100g
الماء	g13.28
الطاقة	368Kcal
الكربوهيدرات الكلية	64.16g
ألياف غذائية	7.0g
الدهون الكلية	g6.07
<b>البروتين</b>	<b>14.12g</b>
Tryptophan	0.167g
Threonine	0.421g
Isoleucine	0.504g
Leucine	0.840g
Lysine	0.766g
<b>الفيتامينات</b>	<b>185.2g</b>
Thiamine	0.360mg
Niacin	1520mg
Vitamin B6	0.487mg
(total ascorbic acid vitamin c)	22.39mg
Betaine	630.4mg
<b>المعادن</b>	<b>1.3g</b>
الكالسيوم	47mg
الحديد	4.57mg
الماغنيزيوم	197mg

الجدول (5-I): القيمة الغذائية للكينوا مقارنة مع بعض الأغذية الأخرى [20،21].

المادة (%)	الكينوا	الذرة	الأرز	الشعير	القمح	فول الصويا
البروتين	16.5	10.22	7.6	18.00	14.3	36.1
الدهون	6.3	4.7	2.2	1.9	2.3	18.1
الكربوهيدرات	64.16	81.1	80.4	80.7	78.4	34.1
الألياف	3.8	2.3	6.4	4.4	2.8	5.3
سعات حرارية في كل 100 g	399	408	372	383	392	451

### 10.1.I الدراسات السابقة للنبتة:

تعتبر بذور الكينوا مصدر غني بالمعادن مثلًا: البوتاسيوم، الصوديوم، الكالسيوم، الحديد [22]

أما أوراق أشجارها فهي غنية ب: البروتين، الكاروتين، حمض الأسكوربيك، الفيتامينات خاصة فيتامين B و C والأحماض الأمينية [23]. كما تتوفر على المواد الكيميائية كالفلافونويدات، الأحماض الفينولية، الصابونينات [24].

## المصادر والمراجع:

### المراجع باللغة العربية:

- [1]. الدكتور عبد العزيز حيريش المركز الدولي للزراعة المحلية الإمارات العربية المتحدة، زراعة الكينوا (دليل الفلاح).
- [2]. المهندس ربيع قبلان والمهندسة جويل بريدي، الكينوا، لبنان 2016
- [3]. حليس ري (2007). الموسوعة النباتية لمنطقة سوف – مطبعة الوليد، الوادي، 9.
- [8]. سارة نوي، الكينوا الحبوب العجيبة للقضاء على الجوع في الجزائر، الفجر، 2014، 14.
- [10]. بلحاج عادل، سوالي شيماء- دراسة الشكل الداخلي و التشريحي لأربعة أنواع من نبات الكينوا، جامعة الشهيد حمه لخضر- الوادي 2020.
- [11]. أبو رييمان، الكينوا، الإستثمار في المستقبل، أفكار، 2010، 2.

### المراجع باللغة الأجنبية:

- [4] Inter nutritionnel et perspectives pharmaceutiques. Ed ; : . HERBILLO M .2015 . Le quinoa  
Université de Rouen- Normandie, Rouan. France P34.
- [5] . Sophie LEBONUALLET, Implentation du quinoa et simulation de se culture sur l'Altiplano  
Bolivien, these de doctorat, l'Institut des Sciences et Industries du Vivant et de l'Environnement –  
Paris, 2008, 121, 123
- [6] . Edif, Zona Sopocachi, Descripteurs pour le Quinoa et ses espèces sauvages apparentées, 2013, [6]  
4.
- [7]. Hachicha Mohamed, KahlaouiBasma, RjeibiWafa, Effet de L'irrigation avec des eaux Salées [7].  
sur une Culture de quinoa, éditionUnivesitairesEuropèennes, de cember 2015, 43.
- [9]. FAO., (2013). Des – ripteurs pour le Quinoa et Ses espèos sauvages apparantées.[9].
- [12]. Antonio Marcelo DA CUNHA VELOSO, Impacts de l'essor international du quinoa,[12].  
Haute école de gestion Genève, 2016, 13.
- [13] . Ahamed, N. T., Singhal, R. S., Kulkarni , P. R., Pal, (1998). A lessar – known grain,[13]  
Revie w of the chemicalcompositio of itsedible parts. Food and: Chenopodium quinoa  
Nutrition Bulletin, 19 (1), 61 - 70.
- [14]. Ruales, J., Nair, B.M. (1992). Nutritionalquality of the protien in quinoa[14].  
(chenopodium quinoa, willd) seeds . plantfoods for thuman Nutrition, 42 (1), 1-11.
- [15]. Montoya, L., Martinez, L., Paralta, J. (2005). Analisis de las Variablsestrategicas[15].  
para la Conformacion de Une Cadenaproductiva de la quinua en Colombia. Journal Innovar. Edit.  
V 25, 103 – 119.:unibiblos
- [16]. Aubrecht, E., Biacs, P.A. (2001). Characterization of buckweat grain protens and[16].

- itsproducts. Acta Alimentaria, 28, 261 – 268.
- . Vega – Galvez, A., Miranda, M., Vergara, J., Uribe, E., Puente, L., Martine Z ,E .A[17]  
(2010). Nutrition Facts and functional potential of quinoa (Chenopodium quinoa Willd) .  
a review . J. Sci. Food Agric . 90 (15), 2541 – 2542.: an ancient Andean grain  
Singhal, R.S., Kulkarni, P.R. (1988). Amaranths – an Underutilized resource Int. J[18].  
Food Sci Tech, 23, 3 – 125.
- . Repo – Carrasco, R., Espinoza, C., Jacobsen, S. t. (2003). Nutritional Value and use [19]  
Of the Andean crops quinoa (Chenopodium quinoa) and Kaniwa (Chenopodium  
pallidicaule) . Food reviews international, 19 (1-2), 179 – 189.
- . Bazile, D., Bertero, H.D., Nieto, C. (2015). State of the art report on quinoa around [20]  
The world in 2013, 287 – 290.
- Jancuva, M., Minarovicova, L., Dandar, A. (2009). Quinoa – a review . Czech Journal [21].  
Of Food sciences, 27 (2), 71 – 73.
- . A. Karkanis, D. Bilalis, D. Hela and E. Tsiplakou, G. Zervas, I. Kakabouk, Effects of [22]  
Fertilization and tillage System on growth and crude protein content of quinoa  
(Chenopodium)
- . Hans – Werner Koyro . Sayed Said Eisa, Effect of salinity on composition, viability [23]  
and germination of seeds of Chenopodium quinoa, plant soil, 2008, 80.
- . S A Valencia-Chamorro, QUINOA, American Journal of plant sciences, 2004, 3.[24]

**الجزء الثاني:**

**الكيمياء الحاسوبية و النمذجة  
الجزئية**

## 1.2.1 مقدمة

في فترة الستينات من القرن التاسع عشر، تم التأسيس لنظرية البنية الجزيئية، التي وصفت بنية المركبات العضوية واعتبرتها نظام مكون من الذرات والروابط، كما وصفت التفاعل بين الذرات والعلاقة بين بنية مركب وخصائصه الفيزيائية والكيميائية، فكان هذا التمثيل للبنى الكيميائية هو أول أشكال النمذجة الجزيئية، وفي عام 1865 كان الاستخدام المادي الأول للنمذجة الجزيئية المادية في الكيمياء العضوية من قبلهوفمان Wilhelm hofmann، حيث استخدم كرات متصلة بعصي لوصف كل من الكلوروفورم ومركبات كربونية أخرى، وفي عام 1874 تم التأسيس أكثر لمفهوم البنية الجزيئية ثلاثية الأبعاد عبر إقترح هوف VantHoff جوزيف Joseph Lebe بأن للكربون شكل هندسي رباعي السطوح، حتى عام 1953 تم تنفيذ بنية ال DNA من قبل Watson و كريك Crik فيما بعد قام جون كيندرو عام 1962 بتحديد أول بنية ذرية لبروتين الميوغلوبين باستخدام علم البلورات والأشعة السينية X-ray Crstallography، بعد ثلاث سنوات من تحديد أول بنية ذرية لبروتين، تم تطوير تقنية Space-Filing Model، وهي طريقة جزيئية ثلاثية الأبعاد حيث يتم تمثيل الذرات بمجال كروي، ويكون نصف قطر الكرات متناسب مع نصف قطر الذرات، كما تتناسب المسافات بين مراكز الكرات مع المسافات بين نوى الذرات، أما الانطلاقة الفعلية فكانت منذ عام 1970 لاستخدام النمذجة الجزيئية الحاسوبية [1].

في الأغلب ما يرتبط البحث والتركيب للمركبات الكيميائي و البيوكيميائية الجديدة بدراسة النمذجة الجزيئية، بحيث أنها تعتبر منهجية شائعة الاستخدام لأكثر من ثلاثين سنة وأصبحت تدريجياً أداة تجريبية لاكتشاف وتصميم الجزيئات النشطة الجديدة، حيث تساعد النمذجة الجزيئية على فهم ما يجري من تحول فيزيائي أو كيميائي أو بيولوجي للمركبات الكيميائية، ومن الممكن أيضاً تصور هذه التحولات لأنها تسهل الفهم و التنبؤ بشكل كبير ويمكن أيضاً تصور الهياكل من خلال وصف الجزيء: هندسته، خصائصه الديناميكية الحرارية.....)[2,3].

ومن سهولة طرق الكيمياء الحاسوبية يتم استخدامها للوصول إلى مكتسبات إضافية حول المركبات التي تتم معالجتها في المختبر بطرق حسابية بدلاً من الوسائل التجريبية من خلال تحديد التغيرات التي تطرأ على مختلف المركبات الكيميائية والوصول إلى نتائج جديدة أكثر دقة [4].

## 2.2.1 تعريف النمذجة الجزيئية

تعرف النمذجة الجزيئية بأنها محاكاة حاسوبية للعمليات والبنى الكيميائية من خلال برامج خاصة تعرض صور ثلاثية الأبعاد للبنى الجزيئية، فهي تظهر المسافات و الزوايا الخاصة بالروابط الكيميائية والتعديلات التي تنتج عند استبدال أو ادخال ذرات أو مجموعة من الذرات لهذه البنية، تعد هذه التقنية إحدى تقنيات أجهزة الحاسوب المعتمدة على الكيمياء النظرية والمعلومات التجريبية بهدف تحليل وتعديل الجزيئات، أو التنبؤ

بالخواص الكيميائية والحيوية للجزيئات، حيث تسمح تلك التقنيات بدراسة طاقة وبنية الجزيئات اعتمادا على حركة ونوع النوى [5]. حيث تتضمن كل الأساليب النظرية والطرق الحسابية التي يتم استخدامها في النمذجة لحل المشكلات التي لها علاقة بالتفاعل الكيميائي والبنية الجزيئية، بحيث تكون هذه الطرق بسيطة نسبيا وقابلة للاستعمال بسرعة أو على العكس، تستخدم هذه الطرق وسائل رسومية متطورة جداً تسهل إلى حد كبير تحويل أعداد هائلة من الأرقام إلى بعض التماثلات البينانية بسهولة [2]. وتنقسم طرق النمذجة الجزيئية إلى ثلاثة أنواع رئيسية وهي:

• طرق ميكانيك الكم.

• طرق الميكانيكا الجزيئية.

• الديناميكية الجزيئية.

### 3.2.I طرق النمذجة الجزيئية

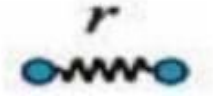



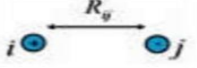
#### 4.2.I الميكانيكا الجزيئية $MM^+$

تعتبر هذه الطريقة من أبسط الطرق المستخدمة وأسرعها، حيث يتم فيها حساب طاقات الذرات وليس الإلكترونات، و تكمن أهميتها في سرعتها و استخدامها للمركبات ذات البنية الكبيرة نسبيا مثل البروتينات و الستيرويدات وغيرها، ففي هذه الطريق يتم النظر إلى الجزيئات على أنها مجموعة من الكرات المتصلة مع بعضها البعض بواسطة النوابض، فيمكن حساب طاقة هذه المجموعة من النوابض والكرات عند معرفة الطول الطبيعي (المستقر) بين ذرتين وقيمة الزاوية و الطاقة اللازمة للشد أو الحني لهذه الرابطة (الناضب). بمعنى آخر، يتم تغيير البنية الفراغية للجزيء حتى الحصول على أقل طاقة ممكنة (أي تهيئة البنية الفراغية وتحسينها [6].

يتم حساب الطاقة عند كل انحراف أو تغير مثل طول الرابطة أو زاوية التكافؤ عن قيمته القياسية، حيث تشكل مجموعة هذه الشروط التي تهدف إلى وصف كل نوع من أنواع الذرة وتحسب الطاقة الفراغية الدنيا من مجموع الإسهامات المتمثلة على التوالي في: طاقة الإستطالة  $E(L)$ ، طاقة المرونة  $E(\theta)$ ، طاقة الفتل  $E(O)$ ، طاقة فاندرفال ( $E_{vw}$ ) وطاقة الكهرباء الساكنة  $E(e)$ ، الموضحة في المعادلة الكلية للطاقة [2،3]:

$$Estériq = Estetch + Ebending + Etorsion + E van der Waals + Eelectro.....(1.2.I)$$

الجدول (6-I): أهم الأشكال و المعادلات الرئيسية للطاقة التي تأخذها MM<sup>+</sup>

الأشكال	المعادلات	اسم الطاقة	نوع الطاقة
	$E(L) = \frac{1}{2} [K_r(L-L_0)^2]$	طاقة الإستطالة	E (L)
	$]K_\theta (\Theta - \Theta_0)^2 [E(\Theta) = \frac{1}{2}$	طاقة الإنحناء	E (Θ)
	$n\theta)oscK_\theta(1 + \sum E(\Theta) =$	طاقة الإلتواء	E (Ø)
	$E_{vdw} = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}$	طاقة فاندر فالس	E <sub>vdw</sub>
	$E_{electros} = \sum_{i,j} \frac{q_i q_j}{\epsilon_{ij} r_{ij}^2}$	الطاقة الكهروستاتيكية	E <sub>electros</sub>

#### ❖ استخدامات الميكانيكا الجزيئية [7]

- تحسب الطاقات بواسطة الصيغ المشتقة من الميكانيكا الكلاسيكية.
- تعتبر الذرة كروية الشكل صلبة ذات نصف قطر وشحنة محددتين.
- بالتقريب كل ذرة تشكل جسيما.

#### ❖ تطبيقات الميكانيكا الجزيئية

إن طريقة (MM<sup>+</sup>) يمكنها تحسين الجزيء وتغيير الإحداثيات الذرية إلى الحد الأدنى من الطاقة.

#### ❖ الطاقات في الميكانيكا الجزيئية [7]

بالظواهر المولية: MM<sup>+</sup> ترتبط الأشكال الرئيسية للطاقة التي تأخذها

- إهتزازات الارتباط.
- الدوران حول الرابطة (التقلبات).
- تفاعلات فاندر فالس.
- تفاعلات الكترول ستاتيكية.



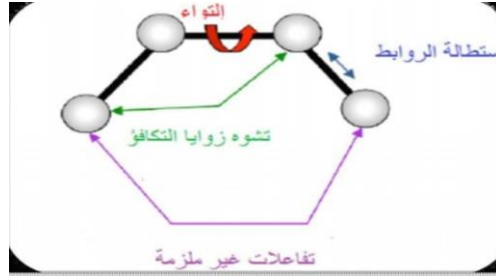
❖ إمكانيات الميكانيكا الجزيئية [8]

- توصف الطاقة كدالة للإحداثيات الذرية (المحتوى الحراري).
- تسمح بالبحث عن الحد الأدنى لطاقة الجزيئات.
- لا توصف الطاقة كدالة للوقت ودرجة الحرارة (الإنتروبيا، الطاقة الحرارية).

❖ حقول القوى

عبارة عن نموذج رياضي يمثل اختلافات الطاقة المحتملة مع الهندسة الجزيئية، وتعتبر الأداة الأساسية للميكانيكا الجزيئية، حيث يمكن من خلالها التنبؤ بالحركات الاهتزازية أو القوى بين إحداثيات الديكارتية لكل دالة، فعلى سبيل المثال: (بروتين من 1000 ذرة = 3000 إحداثية ديكارتية)، لذا يتعين العثور على الحد الأدنى من الطاقة في مساحة بضعة آلاف من المتغيرات.

إن حقل الطاقة يتكون من عدة وضائف للطاقة المحتملة التي تستمد التفاعلات داخل الجزيئات بين الذرات المربوطة وغير المربوطة.



الشكل (5-1): تفاعلات داخل الجزيئات بين الذرات المربوطة وغير مربوطة.

❖ طاقة التفاعل بين الذرات المربوطة

يوصف التشوه الهيكلي فيها من خلال إستطالة الروابط وتشوه زوايا التكافؤ، وتمثل هذه التشوهات في الروابط والزوايا بواسطة مذبذب توافقي مع تجميع لكل الروابط التساهمية أو تجميع الزوايا بين الذرات المرتبطة بواسطة روابط تساهمية [2،7].

- طاقة الاستطالة (Energie d'elongation): في الأغلب تخضع الروابط بين الذرات في بناء الجزيء للتشوه (التمدد والتقلص) [3].

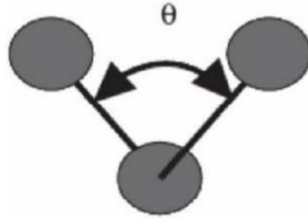
$$E(L) = 1/2[k_1(L-L_0)^2] \dots\dots\dots(2.2.I)$$



الشكل(6-I):إستطالة الروابط.

- طاقة المرونة (Energie de flexion): تنشأ طاقة المرونة عن تموج الذرات حول موضع التوازن وينتج عن هذا تشوه في زوايا التكافؤ ويمكن تفسيرها من خلال العبارة التالية [9].

$$E(\theta) = \frac{1}{2} [K_f (\theta - \theta_0)^2] \dots \dots \dots (3.2.I) \quad [10]$$

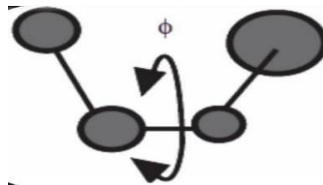


الشكل(7-I): تشوه زوايا التكافؤ.

- طاقة الفتل (Energie de Torsion): تتعلق هذه الطاقة بالزاوية الزوجية المشكلة للذرات الأربعة المتجاورة و حساب هذه الطاقة يكون عن طريقة دالة مبسطة لسلسلة فورييه [9]:

$$E(\theta) = \frac{1}{2} [V_1(1+\cos\theta) + V_2(1-\cos2\theta) + V_3(1+\cos3\theta)] \dots \dots \dots (4.2.I) \quad [11]$$

هي ثوابت إمكانات الطاقة الإلتوائية  $V_2, V_1, V_3$



الشكل(8-I): طاقات إلتوائية.

- طاقة التفاعل بين الذرات غير المربوبة: وتشمل الطاقات التالية:

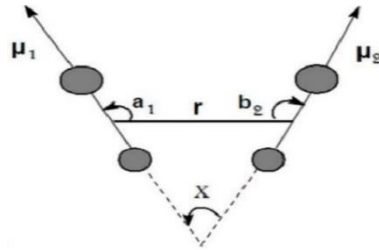
#### أ- طاقة فاندرفالس Van der Waals

هي طاقة تتعلق بالذرات الغير مرتبطة فيما بينها وغير مرتبطة بالذرة المشتركة، و تتركب من جزئين، واحد جاذب والآخر دافع [3].

ب- طاقة الكهرباء الساكنة **Energie électrostatique**: في بعض الحالات تأخذ تداخلات الكهرباء الساكنة أهمية معتبرة خصوصا في حالة الجزيئات التي تحتوي على ذرتين أو أكثر مختلفة عن الكربون (hétéroatome) واقترحت كذلك من أجل فهم الهيدروكربونات، حيث يمكن وصفها انطلاقا من الشحنات الذرية التي يصفها قانون كولوم أو ثنائية القطب لكل رابطة.

- معادلة طاقة الكهرباء الساكنة

$$[12]E(e) = \mu_1\mu_2(\cos X - 3\cos a_1 \cdot \cos b_2) / D.r^{12^3} \dots\dots\dots(5.2.I)$$



الشكل(9-I): عزم ثنائي القطب بين الذرات.

#### ج- طاقة الرابطة الهيدروجينية

تتشكل طاقة الروابط الهيدروجينية نتيجة للتفاعل الكهروستاتيكي (70%) و فاندرفالس (30%) بين ذرة كهروستاتيكية تحمل زوج الكتروني حر وذرة هيدروجين، البعد بين حوالي 3 Å، ويمكن للكربوهيدرات القطبية أن تشكل روابط هيدروجينية مع بعضها أو مع جزيئات الماء [2].

تختلف حقول القوة عن بعضها حسب شروط تحسين كل جزيء ومنه يعتمد اختيار حق القوة على خصائص وتطبيق النظام المراد دراسته:

- نوع المركب: كربوهيدرات، معقد معدني..

- البيئة: الغاز، محلول.

• نوع التفاعل للدراسة: الرابطة الهيدروجينية.

❖ مجالات القوة الأكثر شيوعا:

**AMBER**: (بناء نموذج بمساعدة تحسين الطاقة) هو مجال قوة يستخدم من أجل البروتينات و الأحماض النووية و يستخدم أيضا للبوليميرات و الجزيئات الصغيرة الأخرى [7].

**MM2، MM3 و MM4**: طور من قبل Allinger عام 1976 و هو حقل القوة الأكثر استخداما من قبل الكيميائيين العضويين [13]، حيث يسمح بمعالجة الجزيئات العضوية أكثر وأكثر تعقيدا [2].

**MM+**: عبارة عن امتداد لحقل القوة MM2 مع إضافة بعض البارامترات إضافية [2].

و هو حقل قوة قوي ويمكن تطبيقه عن الجزيئات غير العضوية [14].

**OPLS**: (إمكانات محسنة لمحاكاة السوائل) مصمم لتحسين الإمكانات التي تسمح بوصف الخصائص الذوبانية [7].

**GROMOS**: (مجموعة البرامج المحاكية لجزيئات جرونينجن) مصمم خصيصا للجزيئات الحيوية في الوسائط المائية لدراسة التفاعلات بين جزيئات الماء و المجموعات القطبية و البروتينات [2].

**CHARMM (Bio)**: (كيمياء هارفارد الجزيئية الميكانيكية ) مشابهة لمفهوم دالة AMBER وتستخدم كطاقة تجريبية للأنظمة الجزيئية و الجزيئات البيولوجية [2].

**MMFF94**: هو أحد حقول القوة الميكانيكا الجزيئية، وقد تم تطويره من قبل توم هالغرين [15].

**SPASIBA**: (الخوارزمية المحتملة الطيفية لمحاكاة القدرة على التكيف الجزيئي) وضعه جيرارد فيرغوتن عام 1995 فهو يجمع بين مزايا الحقل Urey – Bradley – Shimanouchi و المعدل و المجال الطيفي [2].

**Sybyl (Tripos)**: للجزيئات العضوية .

**BIOSYM (MSI)**: تم تصميمه في الأصل للبروتينات و الجزيئات العضوية [7].

**UFF**: (حقل القوة العالمي) حاول A. K. Rappé و C.J. Casewit و المتعاونون لتصميم حقل قوة عالمي [16] قادر على محاكاة الجزيئات التي تحتوي مجموعة من الذرات في الجدول الدوري [2].

### 5.2.I. الديناميكا الحرارية DM :

وفيها تطبق قوانين الحركة على الجزيئات، ومن ثم يمكن محاكاة حركة الجزيء حيث يتغير شكله مع مرور الزمن، ويمكن أيضا محاكاة حركة عددٍ من جزيئات الماء مثلاً حول الجزيء المذاب لمعرفة طبيعة التفاعل بين المذيب والمذاب، أي أنها تدرس الجزيئات وهي تتحرك [17]. ولهذا فإن كل ذرة تعامل وكأنها جسيمة تخضع لقانون فعل الكتلة لنيوتن.

#### ❖ المبدأ الأساسي للديناميكا الجزيئية DM:

حقل القوة في الديناميكا الجزيئية هي نفسها المستعملة في الطرق الأخرى، وتحسب من الطاقة الكامنة ويعتمد مبدأ هذه الطريقة على تطبيق قوانين الميكانيكا الكلاسيكية النيوتونية لمحاكاة الحركة الذرية، وهي تتوافق مع الإهتزازات للوصول إلى الحد الأدنى للطاقة أو المرور من خلاله إلى أقل طاقة أخرى.

في سنة 1990 ظهرت إمكانيات معلوماتية، أكثر فعالية تسمح بتوسيع طرق الحساب في الديناميكا الجزيئية [2].

#### ❖ تطبيق حساب الديناميكا الجزيئية :

قبل أن نبدأ في النمذجة بواسطة الديناميكا الجزيئية من المهم أن يكون نموذج البدء قريب من البنية الفعلية.

- التقليل إلى الحد الأدنى بواسطة الميكانيكا الجزيئية: حيث يبدأ بصفة عامة بالتشكيل الأمثل بواسطة MM.

- الديناميكا الجزيئية: بشكل عام قسيم حساب DM إلى ثلاث مراحل:

- الحرارة: من أجل تسخين النظام لإحضاره إلى درجة الحرارة المرغوبة (بشكل عام 300K).

- الإتزان: هي مرحلة مهمة من أجل استقرار درجة حرارة النظام، ثم هناك تبادل بين الطاقة الكامنة والطاقة الحركية.

- الديناميكية أو الإنتاج: وهي المرحلة القابلة للاستغلال.

### 6.2.I. ميكانيكا الكم (QM) :

يعتمد على حساب المدارات الجزيئية بحيث يزيد تعقيدها مع عدد الإلكترونات، ومن بين طرق الكم الرئيسية طريقة هوكل (HUCKEL) فهي تعتبر من أبسط الطرق جميعا حيث تأخذ بعين الاعتبار الإلكترونات فقط وتستخدم تقريبا دقيقا، وعلى الرغم من ذلك فإنها تسمح بتفسير جزء كبير من التفاعل الكيميائي. يعتمد تطبيق تفاعل ميكانيكا الكم على الأنظمة والجزيئات لمحاولة حل معادلة شرودنغر، حيث يمكن وصف السلوك الإلكتروني والنووي للجزيئات، كونها مسؤولة عن الخصائص الكيميائية، بشكل واقعي من هذه المعادلة، ومع التطور المتزايد لموارد الكمبيوتر تطورت هذه الأساليب حيث أصبحت سهلة وأقل تعقيدا [2،7] ونميز ثلاثة طرق [2].

**أ- طريقة الحل الشامل (ab - initio):** وتهدف إلى حل المعادلة الإلكترونية لشرودنغر لتحديد الدالة الموجية التقريبية للنظام المدروس، وتستغرق هذه الطريقة وقتا طويلا للحساب.

**ب- نظرية الكثافة الوظيفية (DFT):** تبحث هذه النظرية الأقرب كثافة الكترونية ممكنة بافتراض أن كثافة الإلكترون في نظامه الإلكتروني تحدد جميع خصائص هذا النظام حيث تعتمد هذه النظرية على مقولة توماس وفيرمي على أنه يمكن وصف خصائص الإلكترونية من حيث وظائف الكثافة الإلكترونية من خلال العلاقة الملائمة لنظام الكروني متجانس [18]. تناول هوهنبرغ وكوهن في عام 1964 [19،20] نظرية توماس فيرمي وأظهر أن هناك طاقة وظيفية  $[P(r)]$  مما سمح بوضع أساس لنظرية الكثافة الوظيفية وتعتمد هذه الأخيرة على نظرية هوهنبرغ، كون [20] التي تثبت أن طاقة النظام في حالته الأرضية هي دالة للكثافة الإلكترونية لهذا النظام  $p(r)$ ، لا تهتم نظرية الكثافة الوظيفية في البحث عن وظيفة موجة معقدة  $\Psi$  مع أبعاد التي تصف النظام المراد دراسته، بل دالة ثلاثية الأبعاد بسيطة [21].

تستخدم هذه النظرية تعبيراً عن الطاقة الإلكترونية  $E$  كدالة لكثافة الإلكترون  $P$ ، هي دالة على الموضع  $r$  للإلكترون موضحة في معادلة الطاقة الوظيفية التالية:

$$E = G [P(r)] \quad [22]$$

حيث تحسب هذه الطريقة طاقة النظام من الكثافة وتتطلب حساباً أقل لنتائج مماثلة.

**ج- الطريقة النصف التجريبية (semi-empirique):** يتم فيها تقدير شروط الطاقة الأكثر صعوبة في الحساب من البيانات التجريبية، وتستغرق وقتاً أقل للحساب وتستخدم أساساً للأنظمة الجزيئية الكبيرة جداً حيث نظم هذه الطريقة عدة حقول ومن بينها:

**PM3:** يمكننا من حساب الخصائص البنيوية، الطاقة الكلية، حرارة التشكل، وتعتبر من أدق الطرق النصف التجريبية التي يتضمنها برنامج ال Hyperchem [3].

**CNDO:** طورت من قبل Pople في سبيل دراسة البنية الإلكترونية والفراغية للجزيء حيث لا تؤخذ بعين الاعتبار إلا الكترونات التكافؤ [3].

**MNDO:** يعتمد على إهمال الجزيئات ثنائية الذرة، أي إهمال الفارق بين المدارات الذرية المختلفة [2].

**AM1:** المقترح من قبل Dewar عام 1985، حيث حاول من خلالها تصحيح عيوب MNDO [2].

**SAM1:** أحدثت طريقة إقتراحها Dewar عام 1933 وهي تشمل الارتباط الإلكتروني.

#### ❖ المبدأ الأساسي لميكانيكا الكم

يصف المادة على أنها مجموعة من الأنوية الذرية حولها إلكترونات تدور حول نفسها واحتمال وجودها عند نقطة، ومن خلال تطبيق قوانين الميكانيكا فإن موجة الإلكترونات تسمح بتحديد الحالة الإلكترونية للنظام الذري، والخصائص التي يمكن ملاحظتها في (الهيكليّة: الهندسة و الزوايا و الأطوال...، الطاقة: الإثارة،...، الطيفية: ترددات الإهتزاز، والأشعة فوق البنفسجية مرئية الأطياف IR، والمكرويف...).

تم وضع قواعد الحساب الكمومي في عام 1925 من قبل Heisenberg و Jordan ثم وضع اللمسات الأخيرة عليها سنة 1926 بواسطة شرودنغر بمعادلته الشهيرة، التي تجعل من الممكن وصف الطبيعة المجهرية للمادة بدقة [23].

$$\Psi\hat{H} = E\Psi \quad [23]$$

حيث تحسب هذه الطريقة طاقة النظام من الكثافة وتتطلب حساباً أقل لنتائج مماثلة.

يعرف إجمالي هاميلتون الذي يحتوي على جزيء يحتوي على N نوية و n إلكترون بمجموع خمس مصطلحات (المصطلح الحركي للإلكترونات، المصطلح الحركي للنواة، نوبات إلكترون، مدة النواة الأساسية، ومدة الإلكترونات، نواة الجذب). في الحالة العامة للأنظمة ذات الأهمية الكيميائية، والتي غالباً ما تكون متعددة الأبعاد ومتعددة الإلكترونات، لا يمكن حل هذه المعادلة تحليلياً، وبالتالي تم اقتراح تقريب بورن – أوبنهايمر [10]، أن الفرق الكبير في الكتلة والسرعة بين النوى والإلكترونات في الجزيء بافتراض أن النوى تحتل مواقع ثابتة في الفضاء، والنتيجة هي معادلة شرودنغر الإلكترونية:

$$\hat{H}^{eLec}\Psi^{eLec} = E^{eLec}\Psi^{eLec}$$

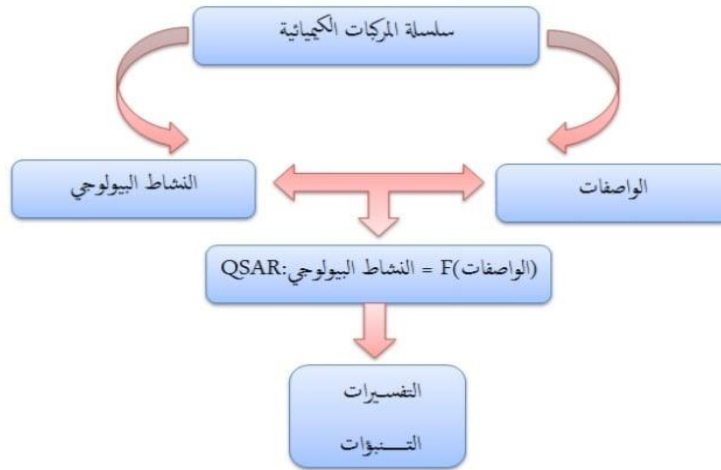
### 7.2.I. العلاقة بنية - فاعلية QSAR

تعتمد طرق QSAR على افتراض أن النشاط أو خاصية المركب الكيميائي مرتبطة بهيكله وبشكل أكثر تحديداً يؤكد أن هذا النهج أن نشاط وتركيب المركب الكيميائي مرتبطان بخوارزمية رياضية معينة [24]، إذا فإن QSAR نموذج رياضي يربط بين النشاط البيولوجي ومجموعة من الخصائص الفيزيائية والكيميائية تسمى الوصفات لأنها تصف التركيب الجزيئي للمركبات التي تم فحصها [25]، ويمكن التعبير عن المصطلح العام QSAR على النحو التالي:

$$\text{(الوصفات)} = F \text{ النشاط البيولوجي}$$

#### ❖ مبدأ QSAR

يمثل مبدأ دراسة QSAR الشكل (10-I) في إيجاد علاقة رياضية تربط نشاطاً بيولوجياً كميًا بمجموعة من الوصفات الجزيئية التي تقاس لسلسلة من المركبات المتماثلة في نفس الظروف التجريبية، والهدف من هذه الدراسات هو تحليل البيانات الهيكلية من أجل الكشف عن العوامل المحددة للنشاط أو الخاصية المدروسة، للقيام بذلك يمكن استخدام أنواع مختلفة من الأساليب الإحصائية، ويمكن بعد ذلك استخدام التعبير الرياضي الذي تم الحصول عليه كوسيلة تنبؤ للنشاط المدروس للجزيئات أو الجزيئات الجديدة التي لا تتوفر لها بيانات تجريبية.



الشكل(10-I): نموذج دراسة العلاقة بين البنية و الفعالية.



### ❖ خصائص QSAR

تتواجد في نمذجة QSAR مجموعة متنوعة من الخصائص حيث تشمل هذه الأخيرة خصائص فيزيائية و كيميائية ومن بين هذه الخصائص نذكر ما يلي:

#### • السطح الجزيئي (SAG)

هو غلاف يحيط بالذرات الموجودة في المحيط وهو ما يفسر سطح اتصال Ligand-Receptor، أي تقارب ربط L-R [26،27] حيث يسمح برنامج HyperChem بحساب سطح الشبكة (SAG) مهما كانت المساحة التي يمكن الوصول إليها من المذيب أو سطح Van der Waals [27].

#### • الحجم الجزيئي (V)

هو حجم يشغله الجسم في درجة الحرارة و الضغط العاديين، حسابه مشابه جداً لحساب السطح، يتم تعريف الحجم بالعلاقة التالية [7]:

$$V = w / d$$

#### • معامل التجزئة (log):

هي خاصية لها تأثير مهم على قابلية الذوبان و الامتصاص و التوزيع و التمثيل الغذائي و إفراز أدوية، وهو عبارة عن بيانات تجريبية تصف المادة، وتقرب الوسط إلى جسم الكائن الحي ونشاطه البيولوجي فقد تكون المواد منخفضة الدهون للغاية أقل قدرة على تمرير الأغشية الدهنية و المواد التي تتراكم بدرجة عالية في الأنسجة الدهنية وبالتالي قد لا تحرر الاستجابة البيولوجية، إن أفضل طريقة لتقدير قدرة المركب على الذوبان في الوسط المائي والوسط العضوي هو قياس قابلية الذوبان ويقدر ذلك بحساب توزيع الدواء بين وسط مائي وعضوي مكون من مذيب الاكتانول [26].

$$\text{LogP} = \frac{[\text{C}]_{\text{octanol}}}{[\text{C}]_{\text{Eau}}}$$

#### • الإنكسارية المولية (MR)

الانكسارية هي حالة خاصة من الحجم الجزيئي، وهي انكسارية مختزلة إلى كمية من المادة، وكذلك هي نوعية انكسار الجسم، وتستخدم في الكهرباء الإشعاعية، وفي علم الأحياء [7].

في الكيمياء تعتبر الانكسارية الجزيئية معياراً مهماً لقياس التعامل الفراغي، وهي مهمة في الحالة التي يكون فيها البديل يحتوي على  $\pi$  الكترونات أو أزواج حرة. تعرف الانكسارية الجزيئية بالعلاقة التالية:

$$MR = V \frac{n^2 - 1}{n^2 + 1} = \frac{4}{3} \pi N A P o l$$

• الاستقطاب:

الاستقطاب في الجزيء هو السهولة التي تنتشوه بها السحابة الإلكترونية من خلال حقل كهربائي خارجي، يمكن أن تؤدي قابلية الإستقطاب لجزئ ما إلى تحسين قابليته للذوبان في الماء تلعب هذه الخاصية دوراً مهماً جداً في نمذجة العديد من الخصائص الجزيئية يتم تعريف الاستقطاب الجزيئي بالعلاقة التالية [28].

$$P_{(e)} = \epsilon_0 \alpha E$$

• الكتلة الجزيئية (W)

هي النسبة بين كتلة الجزيء ووحدة كتلة الذرات "uma" (ما يعادل 1/12 من كتلة ذرة الكربون 12) وبالتالي فهي بلا وحدة، يتم الحصول عليها عن طريق إضافة الكتلة الذرية لكل ذرة من الجزيء مضروبة في مؤشرها العددي في الصيغة الخام أو تقاس تجريبياً بمطياف الكتلة [28].

• طاقة التمييه (HE):

التمييه هو تكوين المحلول الذي يتضمن تفاعل المذاب مع جزيئات المذيبات، ويمكن استخدام الوسائل المختلفة كمذيبات، لكن الماء هو المذيب الأكثر استخداماً عندما يتم استخدام الماء كمذيب، فإن عملية الذوبان تسمى التمييه [29]. في الوسط لا تحيط الجزيئات القطبية نفسها بجزيئات الماء، مما يتسبب في ظهور روابط هيدروجينية بينها، حيث تتفاعل المواقع المانحة للبروتون مع ذرة الأكسجين في الماء ومواقع مستقبل البروتون مع ذرة الهيدروجين [30]. تعتبر طاقة الإماهة عانلاً يحدد ثبات التوافقات الجزيئية المختلفة في المحاليل المائية [28]. ويعتمد حساب طاقة الماء على المنطقة المكشوفة التي تعتمد على نوع ذرة المجموعات الجزيئية التي يمكن أن تكون مانحة لروابط هيدروجينية مثل: OH، NH، PH... أو غيرها من المجموعات المستقبلية التي تحمل أزواجاً حرة مثل: O، P، S، N...

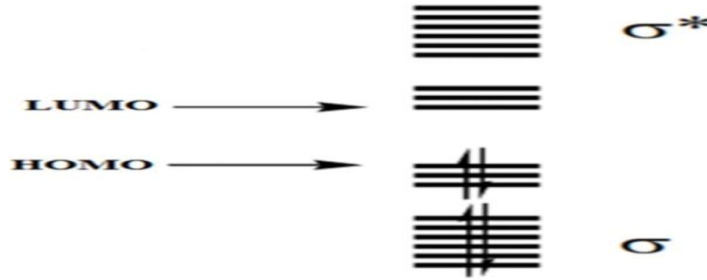
• الطاقة الكلية:

بالنسبة للجزيء المعزول في الحالة الدنيا (الأكثر استقراراً)، يمكن استخدام الطاقة الإجمالية المحسوبة والملاحظة و المقاسة بوحدة eV كواصف جزيئي كمي، تم حساب هذه الطاقة التقريبية للوصول إلى الشكل الهندسي الأكثر استقراراً مع الحد الأدنى من بنية الطاقة [31].

### 8.2.I طاقة المدارات الجزيئية الحدودية HOMO و LUMO

عبارة عن مصطلح يستخدم للإشارة إلى وضع المدارات الجزيئية من حيث شغلها بالإلكترونات، حيث يرمز لأعلى مدار جزيئي مشغول باسم HOMO، في حين أن أدنى مدار جزيئي غير مشغول يرمز له LUMO وتدعى هذه المدارات باسم المدارات الحدودية.

يستخدم الفرق الطاقوي بين هذين المدارين الحدوديين في معرفة استقرارية معقدات الفلزات الانتقالية، بالإضافة إلى الألوان التي تظهر في المحاليل، والشكل المولي يوضح المدارات الجزيئية الحدودية:



### الشكل (I-11): رسم للمدارات الجزيئية الحدودية HOMO و LUMO .

بالإضافة إلى ما ذكر، فإن هناك مفهوم إضافي وهو المدار الجزيئي المشغول فردياً، والذي يرمز له SOMO وهو يمثل حالة خاصة من HOMO، ويستخدم للإشارة إلى المدارات الجزيئية نصف المشغولة في حالة الجذور الحرة [32].

### 9.2.I أنواع الحسابات

الكيمياء الحاسوبية (النمذجة الجزيئية) هي مجموعة من التقنيات التي تعطي حلول سريعة و عاجلة لبعض القضايا التي تواجه الكيمياء بواسطة الحساب، وتتمثل في:

#### ❖ الهندسة الجزيئية

الهندسة الجزيئية هي ترتيب ثلاثي الأبعاد للذرات التي تشكل الجزيء، وتحدد العديد من خصائص المادة بما في ذلك التفاعلات، والاستقطاب، طور المادة، اللون، المغناطيسية، والنشاط البيولوجي.

يمكن تحديد الهندسة الجزيئية (بنية الجزيء) بواسطة مختلف وسائل وطرق الانعراج، الأشعة تحت الحمراء، والموجات الدقيقة و مطيافية رامان، يمكن أن تعطي معلومات حول هندسة الجزيء حسب تفاصيل الذبذبات و التناوب والامتصاصية، يمكن الكشف عنها بواسطة التقنيات، دراسة البلورات بالأشعة السينية، انعراج الإلكترونات يمكن أن تعطي التركيب الجزيئي للمواد الصلبة البلورية على أساس المسافة بين النوى

وتركيز كثافة الإلكترونات. ويمكن استخدام طرق الرنين النووي المغناطيسي لتحديد المعلومات التكميلية بما في ذلك المسافات النسبية، زاوية الالتواء و طول الزوايا و الروابط، ومن الأفضل تحديد هندسته الجزيئية في درجة حرارة منخفضة.

### ❖ تحسين الهندسة (البنية)

هو معيار للحساب في الكيمياء الحاسوبية للعثور على أقل طاقة أو شكل أكثر استقرار للجزيء، نفس الطريقة بالنسبة لجميع المستويات عند الحساب، التي تنطوي على عملية تكرارية "الهزة".

في كل خطوة، يتم تعديل الهندسة الجزيئية قليلا ومقارنة طاقة الجزيء مع طاقة جزيء الدورة السابقة، يقوم الكمبيوتر بتحريك الجزيء قليلا مع حساب طاقته، ويستمر على هذا الحال حتى يحد الجزيء أقل طاقة فيكون بذلك الهندسة الأفضل لهذا الجزيء[33].

### ❖ حساب النقطة الواحدة

غالبا ما تستخدم في المزج مع التحسين الهندسي (تحسين البنية) وذلك للبحث عن الإعاقة الفراغية، في هذه الحالة الطريقة تؤدي دورة حسابية واحدة لحساب طاقة الجزيء وتكون ثابتة في الديناميك الحرارية لمراقبة رد فعل (التفاعلات)، ومراقبة اختلاف النشاط (طاقة) بين متشككين والذي يكون أكثر استقرار[33].

### ❖ حسابات تحول الحالة(الحالة الانتقالية)

وهي معاكسة لتحسين الهندسة، في هذه الحالة يمكن البحث عن المركب الذي يكون لديه أعلى طاقة[33].

### ❖ الكثافة الإلكترونية – حسابات spin- نماذج رسومية وخرائط

يمكن تخيل الخصائص الإلكترونية مثل كثافة الإلكترون، الجهد الكهربائي، كثافة spin والأشكال ورموز المدارات الجزيئية، حيث يتم عرض قيم معينة في كل نقطة في الفضاء ثلاثية الأبعاد حول جزيء على شاشة الكمبيوتر ثنائية الأبعاد كسطح يمثل نقطة من قيمة عديدة ثابتة، وغالبا ما يسمى (isosurface) التي تمكن من تدوير الجزيء في أي اتجاه لدراسته بالتناوب، و الاختلافات العديدة لخاصية معينة (مثل كثافة الإلكترونات) على مسافة محددة من جزيء يمكن عرضها كخرائط باستخدام الألوان كمفتاح، تنفيذ المساحات السطحية وعرض البيانات الرسومية هي الأنشطة الرئيسية في الكيمياء الحاسوبية التي تمكن من التعرف على آليات التفاعلات العضوية[33].

❖ التفاعلات الكيميائية

من المعروف كيميائيا بأن المواقع التي تتركز بها الكثافة الإلكترونية بكثرة تكون مواقع نيكليوفيلية وهي تهاجم المواقع الإلكترونية التي تكون فقيرة من الإلكترونات، وهذا ينبئ عن نوع الكاشف المناسب الذي سيهاجم جزيء [34].

❖ الأشعة تحت الحمراء والأشعة فوق البنفسجية و أطياف الرنين النووي المغناطيسي

يمكن حسابها، و إذا كان الجزيء غير معروف، تمكن من البحث عنه ومعرفته [35].

10.2.I. تطبيقات الكيمياء الحاسوبية

تعتمد النمذجة الجزيئية على المعرفة الدقيقة للكيمياء الفراغية للروابط الذرية داخل الجزيئات: طول الروابط التساهمية وزوايا التكافؤ وزوايا ثنائية الأضلاع وأنصاف أقطار الذرات، كما أنه يقوم بحسابات القوة على الذرات، ويضع نماذج لتوزيع الإلكترونات والشحنات الجزيئية، والقوى الكهروستاتيكية.

إن حساب القوى المطبقة على ذرات الجزيء أو بين ذرات عدة جزيئات يجعل من الممكن تحديد المركبات المستقرة المقابلة للحد الأدنى من الطاقة، وهذا هو مجال الميكانيكا الجزيئية، وهذا يجعل من الممكن أيضا التنبؤ بالتفاعلات الإيجابية بين الجزيئات وتنفيذ التصميم العقلاني للأدوية، حيث تهتم النمذجة الجزيئية أخيرا بالعرض المرئي للجزيئات والمحاكاة ثلاثية الأبعاد، وهذا هو مجال الرسومات الجزيئية [36].

❖ البنية الجزيئية (Molecular Structure):

يمكن إيجاد البنية الجزيئية الفراغية عند نقاط الاتزان ويمكن من خلال معرفة الحالة الانتقالية وطاقة المواد الداخلة و الخارجة توقع سرعة التفاعل الحاصلة.

❖ الفعالية الكيميائية (Chemical Reactivity):

تكشف الكيمياء الحاسوبية عن فعالية التفاعل من خلال معرفة أماكن تموضع الإلكترونات في الجزيء يمكن إيجاد المواقع المحبة للنوى والمواقع المحبة للإلكترونات، كما يمكن حساب شحنات الذرات منفردة وحساب العزم ثنائي القطب (أو العزم متعدد الأقطاب)، بالإضافة إلى الخصائص الحرارية مثل طاقة جيبس و الانتالبية.

❖ المطيافيات:

وخاصة، NMR، UV، IR، RAMAN يمكن توقع وحساب مطيافيات مختلفة للمركبات المجهولة والجديدة [37،38].

\* المدارات الجزيئية الحدودية: HOMO و LUMO:

عبارة عن مصطلح يستخدم للإشارة إلى وضع المدارات الجزيئية من حيث شغلها بالإلكترونات.

I.2.11. البرامج المستعملة في النمذجة الجزيئية:

برنامج ChemDraw:

ChemDraw هي أداة لتمكين العلماء المحترفين وطلاب العلوم والمؤلفين العلميين من التوصل إلى الهياكل الكيميائية، حيث يستخدم هذا البرنامج لرسم المركبات الكيميائية في صورها ثنائية وثلاثية الأبعاد والصور الفراغية المختلفة، كما يشمل على خصائص أخرى مثل قياس أطوال الروابط الكيميائية والزوايا بين الروابط والكثافة الإلكترونية [39،40].

برنامج Hypercham:

هو أحد البرامج المتقدمة في مجال النمذجة الجزيئية ذو قدرات حسابية عالية تتعلق بالأنظمة الجزيئية البسيطة والمعقدة، وهو قادر على رسم الجزيء ببعدين وثلاثة أبعاد وبإحداثيات خطية وصولاً إلى أفضل شكل مستقر للجزيء [3].

برنامج Gaussian 09W:

هو برنامج كيميائي حسابي قوي يمكنه إجراء العديد من العمليات الحسابية على جزء معين [41]، ويعتبر من البرامج الشهيرة المستخدمة في الكيمياء الحاسوبية.

برنامج GaussView:

التابع لبرنامج Gaussian (إنتاج نفس الشركة) من خلال هذا البرنامج نستطيع إدخال بيانات الحسابية من معلومات عن الشكل الفراغي والشحنة وطريقة العمل المتبعة ونوع العمل المراد تنفيذه، ثم إختيار أي طريقة من طرق الحساب لتحسين الجزيئات وحساب مواصفاتها، بالإضافة إلى ذلك فإن مهمة هذه البرامج إظهار النتائج و الرسوم البيانية و الفراغية و حتى الحركية (في حالة الإهتزازات وآليات التفاعلات) وغيرها من النتائج [42].

## المصادر والمراجع

### المراجع باللغة العربية

- [3]. رشيدة زواري أحمد، "دراسة البرمترات المحبة للماء والكارهة للماء على السطح المشترك للمضادات الحيوية،" 2005.
- [7]. صبرينة كباس، راضية هبال، "دراسة بواسطة النمذجة الجزيئية للبنية والخصائص الفيزيوكيميائية لبعض الجزيئات النيكلوزيدية المضادة للفيروسات،" 2018.
- [17]. محمد صبري أحمد عبد المطلب – روعة حسابات كيمياء الكم وتطبيقاتها مؤسسة هنداوي عام 2020.
- [42] آمنة مأمون، خيرة خشاشة " دراسة نظرية للخصائص الفيزيائية –الكيميائية لمشتقات الإندولينون" مذكرة الماجستير في الكيمياء العضوية، جامعة الوادي، 2020 ص40.
- المراجع باللغة الأجنبية:

- [1] Ramachandran, I., Deepa, G. Computational Chemistry and Molecular Modeling principles and Applications. Computational Chemistry, 2008.
- [2]. "Remerciements." D. E. S. Sciences, D. E. L. A. Nature, and E. T. D. E. La, [2].
- [4]. apractical guide for applying techniques : Young, D. (2004). Computational chemistry To real world problems. John Wiley & Sons.
- [5] Principles and Applications. Molecular Modelling, 2001. : Leach, R. Molecular Modelling
- [6] introduction to the theory and: Lewars, E. G. (2016). Computational chemistry Applications of molecular and quantum mechanics. Springer.
- [8]. Introduction a la Modélisation Moléculaire. ' . Schurhammer, R., & Varnek, A. (2006).
- [9] . Albright. A., K. Burdett. H. Whangb, Orbital interactions in chemistry, John Wiley & Sons, (2013).
- [10] . Obame N. G. ; Synthèse et étude cinétique de l'homolyse de biomolécules utilisables comme agents thérapeutiques, Ecole doctorale université Aix-Marseille, 2013, pp, 15-32.
- [11] . Herdewijn, P. ; De Clercq, E. ; Balzarini, J. ; Vanderhaeghe, H. J. ; Med. Chem. ; 28, 1985, pp 550. Marquez, V. E. ; Lim, Med. Res. Rev ; Roberts, S. ; Biggadike, K. ;

- Borthwick, A. D. ; Kirk, B. ; In Topics in Medicinal Chemistry ; Leeming, P. R. Ed. ; Royal London ; 1988. Saundars, J. ; Cameron, J. M. ; Med. Res. Rev. ; 15, :Societ of Chemistry (1995), pp 497.
- Larive C., Ecole nationale des ponts et chaussees, (1997).[12].
- O f t h e ,, U. S. P. Office, M. M. A. Hydrocarbon, F. Field, and N. L. Allinger, [13] pp. 8127-8134, 1977.,,americanchemical society,
- vol. 17, ''An Evaluation of the MM+ Force Field.,'' A. Hocquet and M. Langgard, [14]. pp. 490-519, 1996.
- vol. 17, ''MerckMolecular Force Field.,'' M. Molecular, F. Field, and T. A. Halagren, [15] pp. 490-519, 1996.
- vol. 2, pp. 10024-10035, 1992.''UFF, a,''. M. D. Simulations, [16]
- . Andrews H., Physical Review. 36 (1930) 544. [18]
- . Bremner .I., The American journal of clinical nutrition. 67 (1998) 1069S.[19]
- V. Gold, D. Bethell (Eds.), Advances in Physical Organic:. Allinger .N.L., in[20] Chemistry, AcademicPress, (1976), P. 1.
- . Hocquet .A.Y.andR.F.Forrest, J.Am.Chem.Soc.(1981), 103, 4664.[21]
- . Daleçon S., Synthèse d'analogues de nucléosides a' quatre et six chainons et [22] incorporation d'analogues cyclobutyliques dans un motif oligonucléotidiqueantisens. Approche vers la synthèse de composés galactosyl-pyrrolo-pyridinones. Thèse de doctorat Université du Maine U.F.R des Sciences et Techniques. 2010,pp1
- . HARKATI D., Etude de la structure et des propriétés physico-chimiques associées, [23] de quelques molécules bioactives a' intérêt pharmaceutique, thèse de doctorat, université de Mohamed Khider Biskra,2013, pp1,28-29,35,37 ;40-41-42-43
- . C. Hansch and E.J. Lien, -Structure-activityrelationshipsinantifungal agents. A [24] survey,Journal of MedicinalChemistry, 14(18), 1971, 653-670.
- Application in Pharmaceutical, Chemical, .: Kunal Roy. Advances in QSAR Modeling[25] 57-58.:Food Agricultural and Environmental sciences. Pages
- . AbhilashThakur. MamtaThakur, Total QSAR study on Phenyl Acridine Derivatives[26]



- in Reference to DNA Binding Affinity, 3rd International conference on Medical, Biological and Pharmaceutical Sciences, 2013.
- . E.N.C.H.CHEM, HyperChem Computational Chemistry, in Practical Guide [27]  
CANADA. P. 366: Theory and Methods, I. Hypercube, Editor 1996
- . N. Melkemi and S. Belaid, Structure-Property Relationships and QSAR Modeling [28]  
of some 1,2-Dithiole-3-thione Derivatives, International journal of chemical  
research vol 4, pp, 2012, 134-139.
- Waterloo. Ca/science. Site internet [29]
- . S. Belaidi, A. Dibi, and M. Omari, A conformational exploration of [30]  
dissymmetric macrolides antibiotics, Turkish Journal of Chemistry, vol. 26, pp. 2002,  
491-500
- . P.W. Atkins and J. de Paula, -Atkins Physical Chemistry, 7th ed, Oxford [31]  
University PRESS, Oxford, 2002.
- I. G. Csizmadia, Theory and Practice of MO Calculations on Organic Molecules, [32].  
Elsevier, Amsterdam, 1976.
- . K.B. Wiberg, J. Am. Chem. Soc. 87, 107-1078 (1965). [33]
- . K. Williamson, K. Masters, Macroscale and Microscale Organic Experiment, [34]  
6th ed. Editeur Cengage Learning, USA (2010).
- Introduction to Theory and : E. G. Lewars, Computational Chemistry [35]  
Applications of Molecular and Quantum Mechanics, Springer Dordrecht Heidelberg  
London New York, (2011).
- CHARMM-GUI input generator for NAMD, GROMACS, ". Lee, Jumin, et al. [36]  
AMBER, OpenMM, and CHARMM/OpenMM simulations using the CHARMM36  
405-: Journal of chemical theory and computation 12.1 (2016) "additive force field.  
413.
- introduction to the theory and: Lewars, E. G. Computational Chemistry [37].  
applications of molecular and quantum mechanics. Springer. 2016.

. Kollman, P. A. Advances and continuing challenges in achieving realistic and [38]  
predictive simulations of the properties of organic and biological molecules.

Accounts of Chemical Research, 29(10), 461-469.

2010, PerkinElmer Informatics, ChemOffice [39]

] D. Young, Computational chemistry: a practical guide for applying techniques to real world 40 [39]  
(2004), problems

## الفصل الثاني:

نتائج الكروماتوغرافيا (GC/MS) لمستخلص  
الكلوروفورم و النمذجة الجزيئية لأهم  
المركبات المقترحة.

## 1.II. التحليل الكروماتوغرافي :

### 1.1.II. مدخل:

تعتبر الكروماتوغرافيا طريقة وتقنية لفصل مكونات خليط ما ومعناها باللغة اللاتينية الكتابة اللونية أو الرسم اللوني، نشأت هذه الفكرة على يد العالم Twest سنة 1903 و ذلك لفصل المواد الملونة للزهور والأوراق، ليتسع مجال استعمالها ويمتد حتى إلى المواد غير الملونة سواء الصلبة أو السائلة أو الغازية [1]، كما يمكن اعتبارها طريقة فيزيوكيميائية تعتمد على توزيع مكونات العينة بين طورين، أحدهما ثابت والآخر متحرك فالطور الثابت يمكن أن يكون صلب أو سائل محمول على دعامة ثابتة، أما الطور المتحرك يمكن أن يكون سائلا أو غاز أو مائع [2].

ومن أشهر الطرق الكروماتوغرافية المستعملة في فصل المواد الطبيعية أو المصنعة : كروماتوغرافيا الغازية (GC/MS).

هي تقنية تطبق على العينة الغازية أو العينة القابلة للتبخير يكون فيها الطور المتحرك غازا، عادة ما يكون غازا خاملا مثل : الهليوم أو النيتروجين، أما الطور الثابت فهو طبقة رقيقة من سائل مثبت على دعامة صلبة خاملة مرصوص داخل عمود طويل ذو أبعاد معينة موضوع داخل فرن يسمح بمراقبة وبرمجة درجة الحرارة خلال مدة التحليل، في أغلب الاحيان جهاز الكشف المستخدم مطياف الكتلة الذي يسمح بتحديد بنية المركبات المفصولة.

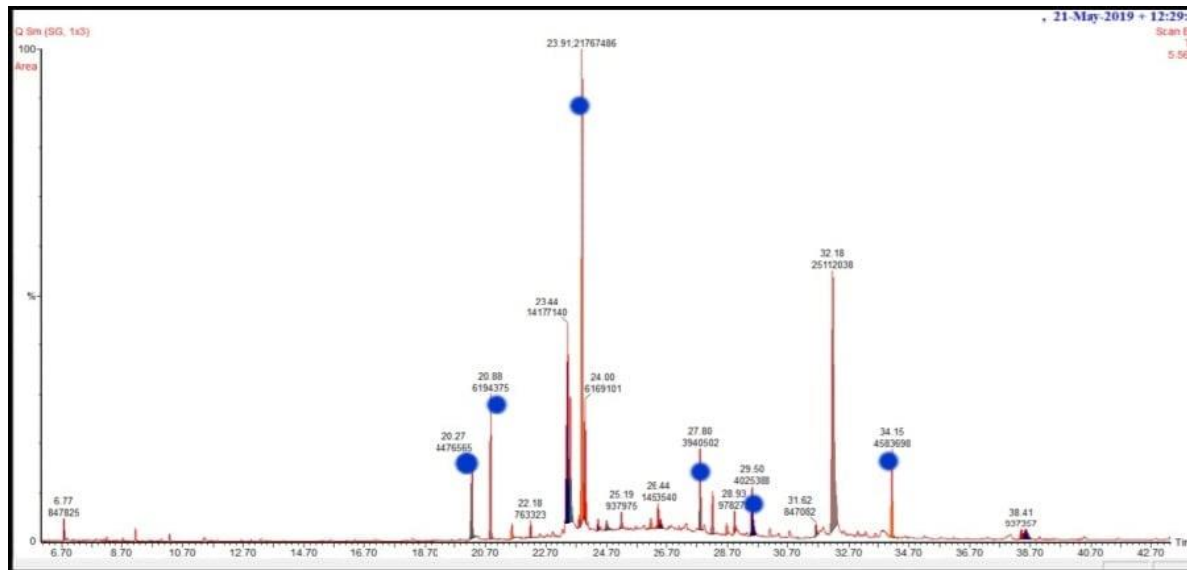
### 2.1.II. الشروط العملية لتطبيق كروماتوغرافيا الغازية المرفقة بمطيافية الكتلة

- نوع العمود الكروماتوغرافي: RYX-5ms
- الغاز الناقل: الهيليوم.
- معدل التدفق: 15 م<sup>3</sup> / دقيقة.
- تقنية الحقن: سبلاي.
- درجة الحرارة عند الحقن: 280 م<sup>3</sup>.
- طول العمود: 30 متر.
- الكمية المحقونة: 250 ميكرو متر.
- نوع الكاشف: مطيافية الكتلة.



الشكل (II-1): صورة لجهاز كروماتوغرافيا الغاز المرفقة بمطيافية الكتلة.

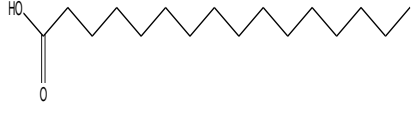

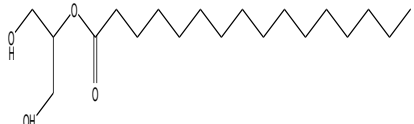
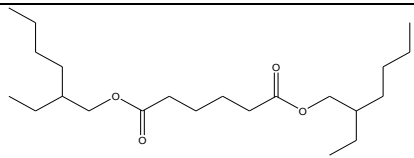
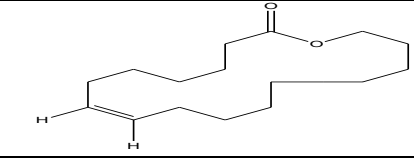
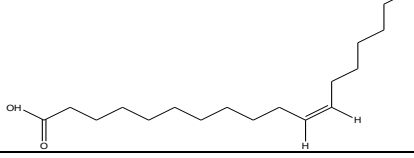
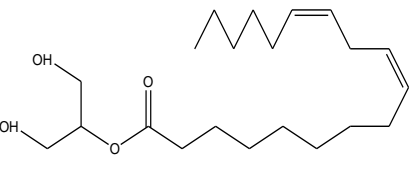
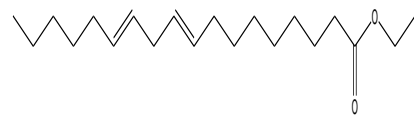
### 3.1.II. نتائج التحليل الكروماتوغرافي (GC/MS):

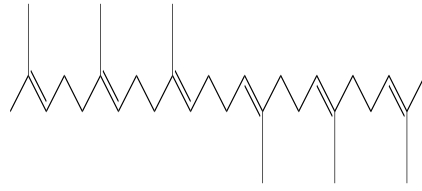
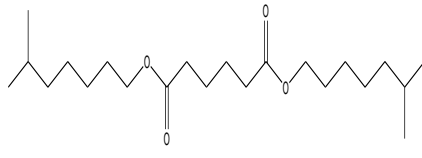


الشكل (II-2): كروماتوغرام مستخلص الكلوروفورم المحصل عليه بواسطة الفصل

الكروماتوغرافي (GC-MS)

لمستخلص الكلوروفورم. (GC-MS): بعض اقتراحات نتائج الفصل الكروماتوغرافي (1-II) الجدول

الصيغة الكيميائية المفصلة	نسبة الإحتمال %	الوزن الجزيئي g/mol	الصيغة المجملية	الإسم العلمي للمركب	ثابت الإحتجاز Rt	رقم المركب
	63.3	256	C <sub>16</sub> H <sub>32</sub> O <sub>2</sub>	n -Hexadecanoic acid	20.268	1
	60.8	284	C <sub>18</sub> H <sub>36</sub> O <sub>2</sub>	Ethyl hexadecanoate	20.879	2
			C <sub>19</sub> H <sub>38</sub> O <sub>4</sub>	2-hydroxy-1-(hydroxymethyl) ethyl hexadecanoate	29.501	3
			C <sub>22</sub> H <sub>42</sub> O <sub>4</sub>	Bis (2-ethyl hexyl) hexadecanoate	27.804	4
	252.39		C <sub>16</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>	(Z)- Oxacycloheptadec-8-en-2-one	23.436	5
	23.6	282.46	C <sub>18</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub>	(Z)-octadec-11-enoic acid	23.521	6
	13.8	52.354	C <sub>21</sub> H <sub>38</sub> O <sub>4</sub>	(8E,11E)-1,3-dihydroxypropan-2-yl octadeca-8,11-dienoate	32.173	7
	32.6		C <sub>20</sub> H <sub>36</sub> O <sub>2</sub>	Ethyl octadeca-9,12-dienoate -	23.911	8

	44.2		$C_{30}H_{50}$	(6E,10E,14E,18E)- 2,6,10,15,19,23 - Hexamethyltetracosane- 10,14,18,22- hexaene	34.149	9
	27.00	57.370	$C_{22}H_{42}O_4$	Bis (6-methyl heptyl) hexadecanoate	29.501	10

في هذا الجزء من العمل استعملنا النمذجة الجزيئية بواسطة برنامج الHyperchem إلى 10 مركبات السابقة المحصل عليها من نتائج الفصل الكروماتوغرافي (GC/MS) لمستخلص الكلوروفورم، والتي تتضمن طرق الحساب النظرية: الميكانيكا الجزيئية (MM+)، الميكانيكا الكمية النصف التجريبية (PM3) التي تسمح بتحديد هندسة الجزيء وتقدير الخصائص الفيزيوكيميائية المرافقة لها.

حيث قمنا بحساب طول الروابط والزوايا، الطاقات، خصائص QSAR، والخصائص الفيزيائية ثنائي العزم

القطب LUMO و HOMO لكل مركب.

## 2.II. النمذجة الجزيئية:

### 1.2.II. الوسائل والبرامج المستعملة:

أ. الوسائل:

جهاز كمبيوتر محمول Toshiba يحمل الخصائص التالية:

Intel (R) Core (TM) i3 CPU M 380 @ 2.53G

الذاكرة المثبتة (RAM): 4.00GO

ب. البرامج المستعملة:

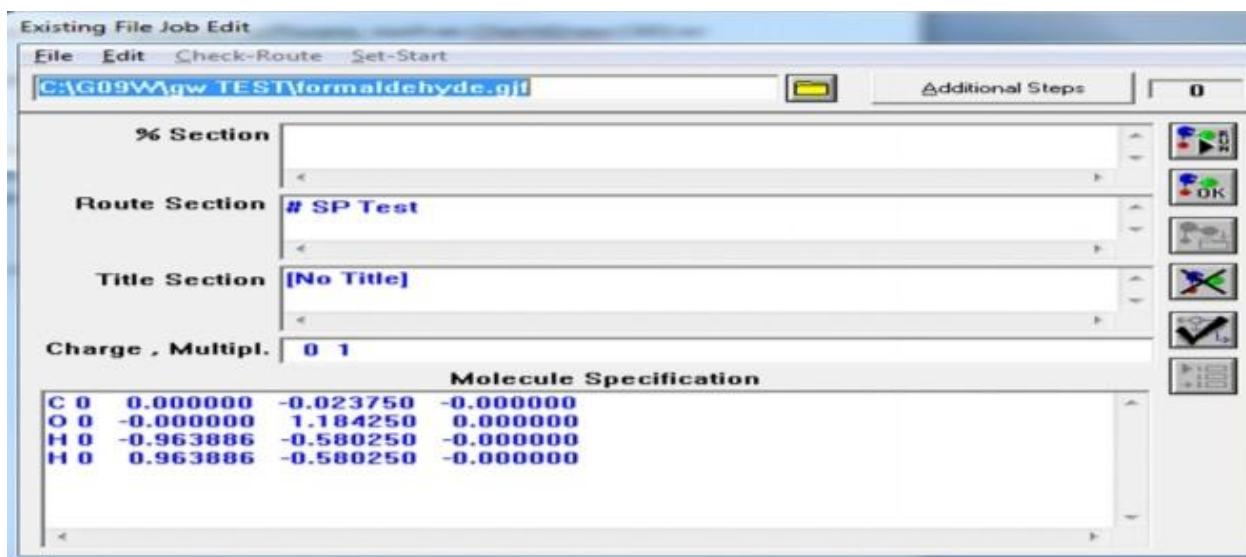
- برنامج: ChemDraw Pro 8.0
- برنامج: HyperChem Professionnelle
- برنامج: Gaussian 09W
- برنامج: GaussView

II.2.2. طريقة العمل:

أ. برنامج Gaussian :

- نقوم برسم جميع المركبات على نافذة برنامج ال Chem Draw Pro ونقوم بحفظها على شكل Gaussian Input File:log.
- نفتح برنامج GaussView وننقر على file ثم open وندرج المركب.
- ولإدخال طريقة الحساب ونوعيتها نتبع الآتي:
- لحساب طول الروابط والزوايا:
- نذهب إلى Builder ثم Inquire فتظهر الصورة الخاصة بالمركب، ثم ننقر على الرابطة فتظهر لنا القيمة أسفل الشاشة .
- لحساب عزم ثنائي القطب والخصائص الفيزيائية :
- في البداية نذهب إلى Calculate ونختار Gaussian Calculation Setup لتظهر أيقونة من خلالها نضغط على Jop Type (الأمر: Opt+Freq) ثم Method (من هنا نقوم بتغيير طرق النمذجة المراد استخدامها في دراستنا, PM3 , ثم يبدأ برنامج Gaussian 09 تلقائيا بالحساب ثم نضغط على Submit و تظهر النتائج.





الشكل (II-3): واجهة برنامج Gaussian09W

### ب. برنامج Hyperchem

- تم رسم جميع المركبات في برنامج ال Chem Draw Pro ثم قمنا بحفظها بصيغة (Mol Molfile mol).
  - ثم نفتحها في برنامج Hyperchem لإجراء الحسابات كحساب الطاقة وحساب واصفات QSAR وذلك باستعمال طريقة الميكانيكا الجزيئية حقل القوة (MM<sup>+</sup>) وطريقة ميكانيك الكم (نصف التجريبية ذو الحقل (PM3).
  - نختار تعليمة setup ونختار Molecular Mechanics أو Semi-empirical على حسب الطريقة المتبعة.
  - نذهب إلى تعليمة compute المتواجدة في نفس الشريط, ثم ننقر على Geometry optimization للحصول على مركب أكثر إستقرار أي أقل طاقة والتي تظهر أسفل شاشة العرض.
- ❖ بالنسبة لحساب الطاقة:

فقد استعملنا الطريقتين نصف التجريبية (PM3) و الميكانيكا الجزيئية (MM<sup>+</sup>) ثم لحساب الطاقة

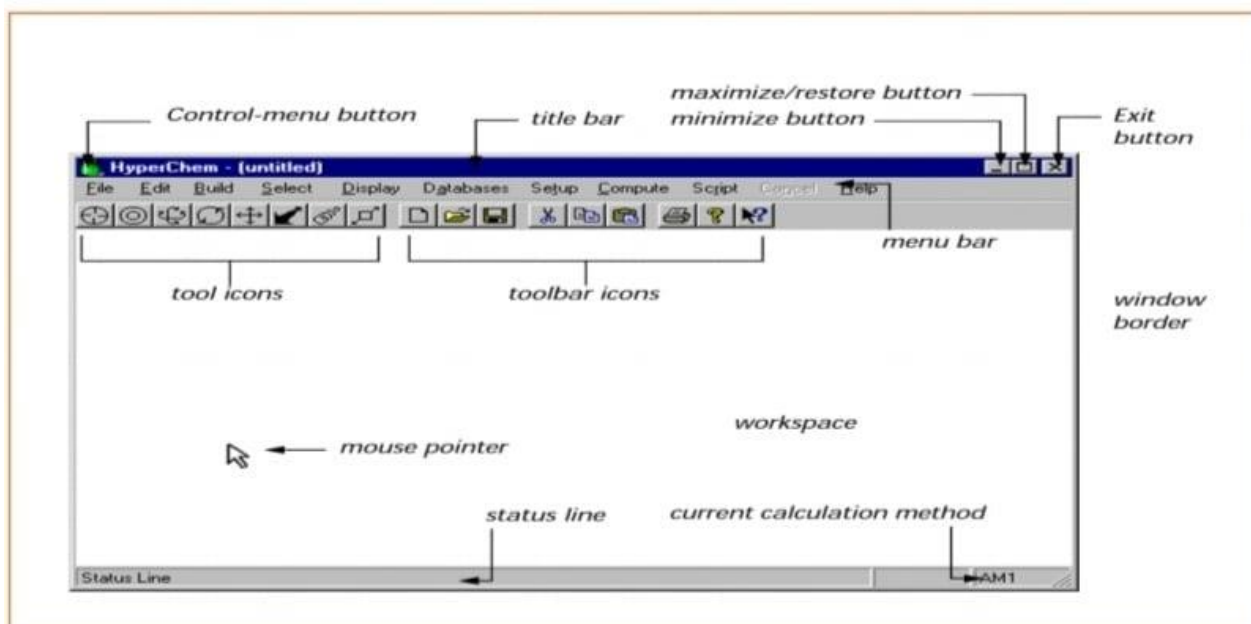
نقوم بالخطوات التالية :

- بعد فتح المركب في برنامج ال Hyperchem نذهب إلى Adb H&Model
- تحديد الطريقة أو الحقل المتبع وذلك بالذهاب إلى Setup والنقر على Molecule Mechanics أو Semi-empirical على حسب الطريقة المتبعة.

- الذهاب إلى compute ثم Geometry Optimization فيبدأ بحساب أدنى طاقة للمركب ثم يكتب في الشريط السفلي قيمة الطاقة.

لحساب خصائص QSAR نذهب إلى compute ثم إلى QSAR Properties

- أما بالنسبة للمدارات الجزيئية نختار تعليمة compute ثم Orbital صالحة فقط في طريقة Semi-empirical



الشكل (II - 4): واجهة برنامج Hyperchem .

3.2.II. النتائج والمناقشة:

أ. نتائج أطوال الروابط:

الجدول (2-II): نتائج أطوال الروابط للمركبات المدروسة.

10	9	8	7	6	5	3	2	1	المركبات الروابط
	1.4980								C(1)-C(7)
				1.3671				1.3834	O(1)-C(18)
							0.9999		O(1)-C(19)
			1.3564						O(1)-C(20)
						1.1652			O(1)-C(21)
					1.4957				O(1)-C(23)
0.9999									O(1)-C(25)
	1.5266								C(2)-C(6)
			1.2177			1.1202			O(2)-C(20)
				2.4696					O(2)-C(15)
		1.6550							O(2)-C(40)
			0.9999						O(2)-C(46)
						1.1554			O(3)-C(22)
				1.5200	1.5230		0.9999	1.5395	C(3)-C(5)
	1.5241			1.5193	1.5218		0.9999	1.5394	C(4)-C(3)
	1.4866								C(4)-C(10)
0.9999				1.5201	1.5201		1.1874	1.5394	C(5)-C(7)
	1.5243								C(5)-C(1)

0.9999										C(5)-C(9)
						1.4940				O(5)-C(27)
				1.5211	1.5215			1.0000	1.5395	C(6)-C(4)
							1.1905			C(6)-C(5)
						1.4812				O(6)-C(26)
	1.4861									C(6)-C(16)
0.9999		1.8844								C(6)-C(10)
								0.9999		C(7)-C(6)
	1.3386			1.5207	1.5197	1.9024		1.0000	1.5395	C(7)-C(9)
							1.1939			C(7)-C(10)
						1.6546				C(7)-C(17)
			0.9999							O(7)-C(49)
	1.4979									C(8)-C(2)
0.9999		1.8176		1.5222	1.5204		1.1923	0.9999	1.5394	C(8)-C(6)
					1.5271	1.9009				C(8)-C(14)
	1.4853									C(8)-C(20)
	1.4872									C(9)-C(3)
							1.1862			C(9)-C(8)
						1.5543	1.1941	0.9999	1.5395	C(9)-C(11)
1.0000										C(9)-C(13)
	1.3403			1.5231		1.7913		0.9999	1.5393	C(10)-C(8)
					1.5203					C(10)-C(11)
1.0000		1.8208								C(10)-C(14)
				1.4881						C(10)-C(15)
1.0000										C(11)-C(7)
			1.0000	1.5202						C(11)-C(12)

	1.4947			1.5215	1.5216		1.1861	0.9999	1.5394	C(11)-C(13)
	1.4873									C(11)-C(21)
0.9999		1.9008								C(12)-C(8)
					1.5217	1.5512	1.1856	0.9999	1.5393	C(12)-C(10)
1.0000	1.3391	1.7990	0.9999							C(12)-C(16)
	1.4847									C(12)-C(22)
							1.1918	0.9999	1.5398	C(13)-C(15)
0.9999	1.5238			1.4881	1.4819					C(13)-C(17)
					1.4267					C(14)-O(1)
			0.9999							C(14)-C(11)
	1.4986			1.5197			1.1938	1.0000	1.5385	C(14)-C(12)
0.9999	1.5255	1.8317	0.9999	1.5203						C(14)-C(18)
						1.5212				C(14)-C(20)
	1.4848									C(15)-C(5)
0.9999	1.3401					1.5584				C(15)-C(11)
					1.5205					C(15)-C(12)
				1.3345			1.1861	1.0000	1.5371	C(15)-C(17)
				1.5195	1.4867					C(16)-C(9)
							1.1897	0.9999	1.5339	C(16)-C(14)
0.9999										C(16)-C(24)
0.9999						1.4879				C(17)-O(1)
						1.3747				C(17)-O(3)
					1.3346					C(17)-(16)
								1.0000		C(18)-O(1)
0.9999					1.2145	1.5021		1.0000	1.2338	C(18)-O(2)
						1.3637				C(18)-O(4)

						1.6504				C(18)-C(8)
							1.1845	0.9999	1.5052	C(18)-C(16)
				1.5120						C(18)-C(19)
							1.1819			C(18)-C(20)
	1.4867									C(18)-C(24)
							1.1631			C(19)-C(17)
0.9999								0.9999		C(19)-C(20)
							1.1588			C(20)-O(1)
		1.7459	0.9999	1.5052						C(20)-C(16)
0.9999										C(20)-C(22)
		1.6044	0.9999							C(20)-C(24)
						1.5274				C(21)-C(15)
0.9999										C(21)-C(19)
							1.1554			C(21)-C(22)
	1.6736									C(22)-O(2)
	1.4167									C(22)-O(4)
		1.7511	0.9999							C(22)-C(18)
							1.1900			C(22)-C(23)
							1.1412			C(23)-O(4)
0.9999										C(23)-C(15)
	1.4861									C(23)-C(17)
	1.3396					1.5124				C(23)-C(25)
						1.4969				C(24)-O(2)
		1.7182	1.0000							C(24)-C(28)
1.0000										C(25)-O(3)
						1.4812				C(25)-O(5)

1.0000										C(25)-C(21)
	1.4877									C(25)-C(28)
0.9999										C(26)-O(2)
1.0000										C(26)-O(4)
1.0000			1.0000							C(26)-C(22)
	1.3396					1.5116				C(26)-C(24)
	1.4852									C(26)-C(29)
		1.8599								C(26)-C(32)
						1.5109				C(27)-C(28)
	1.4858									C(27)-C(25)
						1.4921				C(28)-O(6)
			0.9999							C(28)-C(32)
	1.4874	1.8599								C(30)-C(26)
			0.9999							C(32)-C(36)
		1.7410								C(32)-C(38)
		1.8749								C(34)-C(30)
			0.9999							C(36)-C(40)
		1.7167								C(36)-C(28)
		1.6156								C(38)-C(36)
		1.7038	1.0000							C(40)-C(44)
		1.7611								C(42)-C(30)
			1.0000							C(44)-O(4)
			0.9999							C(44)-O(2)
			0.9999							C(46)-C(49)
			1.0000							C(49)-C(50)
			0.9999							C(50)-O(8)

- من خلال النتائج التي تم الحصول عليها في الجدول (2-II) يمكننا ملاحظة وجود تقارب في القيم المحسوبة

لأطوال الروابط، بحيث نلاحظ أن الرابطة C8 - C12 الخاصة بالمركب رقم (08) تحمل أكبر قيمة

( $1.908 \text{ \AA}$ ) و بالتالي تعتبر أطول رابطة، أما بالنسبة لأقصر رابطة فهي من الشكل C - O ذات القيمة

( $0.9999 \text{ \AA}$ ) وذلك ناتج عن الفرق في الكهروسالبية بين الذرتين .

ب. نتائج زوايا المركبات المدروسة:

الجدول (3-II): نتائج أقياس الزوايا للمركبات المدروسة.

10	9	8	7	6	5	4	3	2	1	المركبات الزوايا الثلاثية
					119.21				121.75	)2-O(18O(1)-C(
									111.38	O(1)-C(18)-C(16)
								9119.9		O(1)-C(19)-C(20)
				115.20						)-O(2)20O(1)-C(
							118.77			)21)-C (22O(1)-C(
						118.98				3)-C (25)2O(1)-C(
120.00										5)-O(3)2O(1)-C(
120.00										)-C(21)20O(1)-C(
	120.80									C(1)-C(7)-C(9)
	115.45									C(1)-C(7)-C(19)
					92.17					O(2)-C(15)-C(12)
						118.78				O(2)-C(18)-O(4)
									126.86	O(2)-C(18)-C(16)
									119.99	O(2)-C(18)-O(1)
119.99										O(2)-C(18)-C(14)
							120.33			O(2)-C(20)-O(1)
				130.38						O(2)-C(20)-C(16)
		105.00								O(2)-C(40)-C(44)
			119.99							O(2)-C(46)-C(49)
	112.11									C(2)-C(6)-C(16)



									113.46	C(3)-C(5)-C(7)
				111.55	111.47			120.00		C(3)-C(4)-C(6)
	111.38									C(3)-C(4)-C(10)
						118.19				O(3)-C(17)-O(1)
							123.34			O(3)-C(22)-C(23)
								119.99		C(5)-C(3)-C(4)
									113.43	C(4)-C(3)-C(5)
				111.98	112.16			120.00		C(4)-C(6)-C(8)
	124.74									C(4)-C(10)-C(8)
						117.60				O(4)-C(18)-C(8)
		123.23								O(4)-C(22)-O(22)
120.00										6)-O(2)2O(4)-C(
			120.00							O(4)-C(44)-O(2)
	110.58									C(5)-C(1)-C(7)
				111.19	111.14					C(5)-C(3)-C(4)
									113.44	C(5)-C(7)-C(9)
							0120.9			C(5)-C(7)-C(10)
120.00										)3)-C(19C(5)-C(
						119.08				O(5)-C(27)-C(28)
							121.02			C(6)-C(5)-C(7)
									113.45	C(6)-C(4)-C(3)
				112.53				119.99		C(6)-C(8)-C(10)
119.99										C(6)-C(8)-C(12)
					112.78					C(6)-C(8)-C(14)
		117.54								C(6)-C(10)-C(14)
	125.05									C(6)-C(16)-C(12)
						119.34				O(6)-C(26)-C(24)
				4111.3	2111.1			9119.9		C(7)-C(5)-C(3)
119.99										)9C(7)-C(5)-C(
	124.79									C(7)-C(9)-C(3)

									113.46	C(7)-C(9)-C(11)
							120.96			C(7)-C(10)-C(12)
						156.86				C(7)-C(13)-C(19)
						123.71				C(7)-C(17)-O(3)
						118.09				C(7)-C(17)-O(1)
			119.99							O(7)-C(49)-C(50)
	112.03									C(8)-C(2)-C(6)
									113.41	C(8)-C(6)-C(4)
							120.83			C(8)-C(6)-C(5)
		115.14								C(8)-C(6)-C(10)
						153.81		119.99		C(8)-C(10)-C(12)
				112.19						C(8)-C(10)-C(15)
120.00										C(8)-C(12)-C(16)
						154.87				C(8)-C(14)-C(20)
					111.11					C(8)-C(14)-O(1)
	111.86									C(9)-C(3)-C(4)
							121.01			C(9)-C(8)-C(6)
				110.99	111.93			120.00		C(9)-C(7)-C(5)
						163.11				C(9)-C(7)-C(13)
									113.45	C(9)-C(11)-C(13)
						0104.9				C(9)-C(7)-C(17)
0120.0										)-C(7)13C(9)-C(
119.99										C(10)-C(6)-C(8)
	120.35									C(10)-C(8)-C(2)
									113.40	C(10)-C(8)-C(6)
	123.59									C(10)-C(8)-C(20)
					112.72					C(10)-C(11)-C(13)
							121.00	120.00		C(10)-C(12)-C(14)
						124.20				C(10)-C(12)-C(16)
		115.15								C(10)-C(14)-C(18)

				1124.6						C(10)-C(15)-C(17)
120.00										)-C(5)7C(11)-C(
									113.48	C(11)-C(13)-C(15)
						151.16		120.00		C(11)-C(9)-C(7)
								120.93		C(11)-C(9)-C(8)
				111.25						C(11)-C(12)-C(14)
			120.00							C(11)-C(12)-C(16)
					113.55					C(11)-C(13)-C(17)
	124.14									C(11)-C(15)-C(5)
		117.55								C(12)-C(8)-C(6)
					112.22					C(12)-C(10)-C(11)
									113.35	C(12)-C(10)-C(18)
							120.87	120.00		C(12)-C(14)-C(16)
	110.60			111.42						C(12)-C(14)-C(18)
			119.99							C(12)-C(16)-C(20)
						122.3				C(12)-C(16)-C(22)
120.00										C(12)-C(16)-C(24)
119.99										)-O(1)7C(13)-C(1
							120.93	119.99		C(13)-C(11)-C(9)
				111.16						C(13)-C(11)-C(12)
	115.93									C(13)-C(11)-C(21)
									113.11	C(13)-C(15)-C(17)
					125.66					C(13)-C(17)-C(16)
						164.06				C(14)-C(8)-C(10)
120.00										C(14)-C(10)-C(6)
			120.00							C(14)-C(11)-C(12)
									113.05	C(14)-C(12)-C(10)
							120.97	119.99		C(14)-C(16)-C(18)
				111.38						C(14)-C(18)-C(19)
		121.54								C(14)-C(18)-C(22)

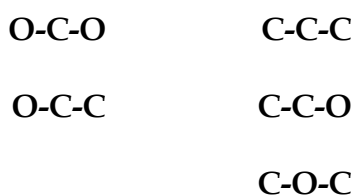
	111.03									C(14)-C(18)-C(24)
	111.81									C(15)-C(5)-C(1)
120.00										C(15)-C(11)-C(7)
						124.16				C(15)-C(11)-C(9)
					113.12					C(15)-C(12)-C(10)
							121.00	119.99		C(15)-C(13)-C(11)
					124.60					C(15)-C(17)-C(13)
					110.86	111.51				C(16)-C(9)-C(7)
		115.45								C(16)-C(12)-C(8)
	123.82									C(16)-C(12)-C(22)
									112.42	C(16)-C(14)-C(12)
								120.00		C(16)-C(18)-O(1)
								120.00		C(16)-C(18)-O(2)
								121.42		C(16)-C(18)-C(20)
			119.99							C(16)-C(20)-C(24)
	111.24				110.77					C(17)-C(13)-C(11)
						124.82				C(17)-C(16)-C(9)
							120.93	120.00		C(17)-C(15)-C(13)
							143.75			C(17)-O(1)-C(23)
119.99										C(17)-O(1)-C(25)
							105.69			C(18)-C(8)-C(14)
120.00										C(18)-C(14)-C(10)
			119.99							C(18)-C(14)-C(11)
									113.31	C(18)-C(16)-C(14)
								120.00		C(18)-O(1)-C(19)
						28.14				C(18)-O(2)-C(15)
							120.72			C(18)-C(20)-O(2)
								118.93		C(18)-C(20)-O(1)
		108.45								C(18)-C(22)-O(2)
		128.30								C(18)-C(20)-O(4)

	124.48									C(18)-C(24)-C(26)
						120.74				C(19)-C(17)-C(15)
119.99										C(19)-C(20)-C(22)
	116.04									C(20)-C(8)-C(2)
				112.57						C(20)-C(16)-C(9)
		115.24								C(20)-C(16)-C(12)
120.00										C(20)-C(22)-C(26)
			120.00							C(20)-C(24)-C(28)
	121.16									C(21)-C(11)-C(15)
						122.33				C(21)-C(15)-C(11)
119.99										C(21)-C(19)-C(20)
							117.14			C(21)-C(22)-O(3)
	115.89									C(22)-C(12)-C(14)
										C(22)-C(18)-C(14)
							120.57			C(22)-C(23)-O(4)
		139.44								C(22)-O(2)-C(40)
120.00										C(22)-C(26)-O(2)
119.99										C(22)-C(26)-O(4)
119.99										C(23)-C(15)-C(11)
	111.01									C(23)-C(17)-C(13)
						119.37				C(23)-C(25)-O(5)
						143.71				C(24)-O(2)-C(18)
		123.77								C(24)-C(20)-C(16)
	123.41									C(24)-C(26)-C(29)
	121.21									C(24)-C(26)-C(30)
			120.00							C(24)-C(28)-C(3)2
30.00										C(25)-O(3)-C(21)
						141.11				C(25)-O(5)-C(27)
120.00										C(25)-C(21)-C(19)
	124.46									C(25)-C(23)-C(17)

119.99										C(26)-O(2)-C(18)
						118.96				C(26)-C(24)-O(2)
			120.00							C(26)-C(22)-C(18)
		114.57								C(26)-C(32)-C(38)
	115.37									C(27)-C(25)-C(28)
						119.12				C(27)-C(28)-O(6)
						141.12				C(28)-O(6)-C(26)
	121.13	126.71								C(28)-C(25)-C(23)
										C(28)-C(24)-C(20)
			119.99							C(28)-C(32)-C(36)
	115.36									C(29)-C(26)-C(30)
			120.00							C(30)-C(26)-C(22)
		115.84								C(30)-C(26)-C(32)
			119.99							C(32)-C(36)-C(40)
			124.37							C(32)-C(38)-C(36)
		117.12	119.99							C(34)-C(30)-C(26)
		112.33								C(36)-C(28)-C(24)
			120.00							C(36)-C(40)-C(44)
			119.99							C(38)-C(34)-C(30)
		125.78								C(38)-C(36)-C(28)
			119.99							C(40)-C(44)-O(4)
			120.00							C(40)-C(44)-O(2)
		113.02								C(42)-C(34)-C(30)
			120.00							C(42)-C(38)-C(34)
			119.99							C(44)-O(2)-C(46)
			120.00							C(46)-C(49)-O(7)
			120.00							C(46)-C(49)-C(50)
			120.00							C(49)-C(50)-O(8)

- من خلال نتائج الجدول (3-II) نجد أن المركبات المدروسة لها خمسة أشكال من الزوايا الثلاثية مختلفة عن بعضها البعض كما أن هذه الأقياس متقاربة مع جميع المركبات.

والزوايا الثلاثية هي:



حيث سجلت أقل قيمة عند الزوايا الثلاثية C(18)-O(2)-C(15) بقيمة  $28.14^\circ$  وأكبر قيمة للزوايا الثلاثية C(7)-C(13)-C(19) بقيمة  $156.86^\circ$

#### 4.2.II. نتائج عزم ثنائي القطب للمركبات المدروسة ببرنامج:

الجدول (4-II): نتائج عزم ثنائي القطب بالطريقتين PM3 و MM<sup>+</sup>

MM <sup>+</sup>	PM3	الحقل المركبات
/	1.7417	1
/	1.6951	2
/	3.4340	3
/	0.2673	4
/	1.9094	5
/	1.9688	6
		7
/	1.7691	8
/	0.9931	9
		10

يوضح الجدول (4-II) نتائج عزم ثنائي القطب بالطريقتين PM3 و MM<sup>+</sup>، حيث نلاحظ أنه في طريقة MM<sup>+</sup> لم يسجل أي قيمة لعزم ثنائي القطب باعتبارها طريقة ميكانيكية جزيئية، بينما في طريقة PM3 سجلت أكبر قيمة لعزم ثنائي القطب عند المركب رقم (3) بقيمة 3.4340 بينما سجلت أقل قيمة عند المركب رقم (4)

5.2.II. الخصائص الفيزيائية للمركبات المدروسة:

الجدول (5-II): يوضح أهم الخصائص الفيزيائية للمركبات المدروسة بطريقة PM3:

Electronic Energy (EE)	$\Delta E$	LUMO	HOMO	الخصائص المركبات
-0.2816	0.7166	0.3046	-0.4120	1
-0.2777	0.4447	0.0389	-0.4058	2
-0.4100	0.4405	0.0362	-0.4043	3
-0.4158	0.4411	0.0365	-0.4046	4
-0.1994	0.3971	0.3881	-0.3620	5
-2.2564	0.3907	0.0351	-0.3556	6
				7
-0.2085	0.3814	0.0374	-0.3440	8
-0.0646	0.3745	0.0328	-0.3417	9
				10

من خلال الجدول (5-II) نلاحظ أن أكبر قيمة لطاقة ال HOMO هي -0.3417 الخاصة بالمركب رقم (9)، بينما أقل قيمة للطاقة سجلت عند المركب رقم (1) بقيمة -0.4120، أما بالنسبة لطاقة LUMO فقد سجلت أكبر قيمة عند المركب رقم (5) بقيمة 0.3881، بينما أقل قيمة سجلت عند المركب رقم (9) بقيمة 0.0328، أما بالنسبة للفرق في الطاقة فقد سجلت أقل فرق في الطاقة عند المركب رقم (9) بقيمة 0.3745، بينما أكبر قيمة فقد سجلت عند المركب رقم (1) بقيمة 0.7166، مما يدل على أنه مركب ذو فعالية كيميائي ضعيفة نظراً لصعوبة إنتقال الإلكترونات بين المدارين HOMO و LUMO.



6.2.II نتائج ومناقشة طاقة المركبات المدروسة:

الجدول(6-II): نتائج الطاقة بالنسبة للطريقتين ب Kcal / mol

MM <sup>+</sup>	PM3	الطريقة المركبات
طاقة الاستقرار (Kcal / mol)	طاقة الاستقرار (Kcal / mol)	
3.659547	-4698.0313	1
10.118882	-5245.0222	2
10.771640	-5721.7058	3
17.639829	-6445.9815	4
19.385445	-4713.4555	5
6.888796	-5128.0433	6
10.749641	-6020.6223	7
16.177724	-5543.9459	8
44.700069	-7753.6756	9
12.953109	-6450.4657	10

- يحتوي الجدول (6-II) على نتائج قيم الطاقة للبنية الأكثر استقراراً والتي تم حسابها بواسطة طريقتين MM<sup>+</sup>، PM3 حيث سجلت في كل من الطريقتين قيم الطاقة للبنية الأكثر استقراراً للمركبات المدروسة، حيث نلاحظ من

خلال الجدول أن أكبر قيمة طاقة في طريقة MM<sup>+</sup> هي القيمة 44.700069 Kcal / mol خاصة بالمركب

(09)، أما المركب (01) سجل أقل قيمة وهي 3.659547 Kcal / mol

4698.0313 Kcal/mol سجلت أكبر قيمة عند المركب (01) وهي PM3 أما بالنسبة للطريقة

-7753.6756 Kcal/mol للمركب (09) وأقل قيمة هي

و منه أكثر مركب مستقر هو الذي يملك أقل طاقة استقرارا مما يعني أن المركب (9) هو الأكثر استقرارا.

## 7.2.II. نتائج ومناقشة العلاقة بنية فاعلية (QSAR) للمركبات المدروسة:

الجدول (7-II): نتائج العلاقة بنية فاعلية QSAR بطريقة PM3

الكتلة Amu	الإستقطاب A <sup>o3</sup>	الإنكسار المولي A <sup>o3</sup>	معامل التجزئة Log P	طاقة التمييه Kcal/mol	الحجم المولي A <sup>o3</sup>	المساحة السطحية A <sup>o2</sup>	الخصائص المركبات
224.17	20.45	66.83	3.42	-2.66	510.96	327.56	1
248.20	21.80	70.19	2.11	-1.65	571.97	362.98	2
292.21	25.58	78.04	5.27	-2.95	598.42	372.61	3
328.24	25.78	71.88	1.80	-1.56	654.42	395.62	4
238.20	24.00	76.23	2.49	-0.86	402.36	243.85	5
250.21	23.93	77.15	3.95	-2.84	559.03	353.77	6
316.23	28.14	86.60	5.57	-1.84	505.34	290.34	7
272.22	24.37	78.75	2.41	-1.65	620.36	388.89	8
360.33	28.64	92.14	1.05	-0.01	777.46	451.39	9
328.24	25.78	71.88	1.80	-2.32	683.67	424.36	10

الجدول (8-II): نتائج العلاقة بنية فاعلية QSAR بطريقة MM<sup>+</sup>

الخصائص المركبات	المساحة السطحية A <sup>o2</sup>	الحجم المولي A <sup>o3</sup>	طاقة التمييه Kcal/mol	معامل التجزئة Log P	الإنكسار المولي A <sup>o3</sup>	الإستقطاب A <sup>o3</sup>	الكتلة Amu
1	327.56	510.96	-2.66	3.42	66.83	20.45	224.17
2	362.98	571.97	-1.65	2.11	70.19	21.80	248.20
3	372.61	598.42	-2.95	5.27	78.04	25.58	292.21
4	395.62	654.42	-1.56	1.80	71.88	25.78	328.24
5	243.85	402.36	-0.86	2.49	76.23	24.00	238.20
6	353.77	559.03	-2.84	3.95	77.15	23.93	250.21
7	290.34	505.34	-1.84	5.57	86.60	28.14	316.23
8	388.89	620.36	-1.65	2.41	78.75	24.37	272.22
9	451.39	777.46	-0.01	1.05	92.14	28.64	360.33
10	424.36	683.67	-2.32	1.80	71.88	25.78	328.24

بحيث نلاحظ PM3 و MM<sup>+</sup> في الطريقتين QSAR توضح العلاقة بنية - فاعلية - (8-II) (7-II) الجداول

أن كل من الطريقتين أعطت نفس القيم بالنسبة للخصائص المدروسة، أما بالنسبة للقيم فهي كالتالي:

243.85 للمركب A<sup>o2</sup> وأقل قيمة هي A<sup>o2</sup>451.39 أكبر قيمة للمساحة السطحية كانت للمركب رقم (9) بقيمة رقم (5).

777.46 للمركب رقم (9) وأقل قيمة هي A<sup>o2</sup> وكذلك الأمر بالنسبة لخاصية الحجم المولي أكبر قيمة هي

402.36 للمركب رقم (5). A<sup>o2</sup>

Kcal/mol -0.01 أما خاصية التمييه للمركبات فسجلت أكبر قيمة للطاقة عند المركب (9) بقيمة

-2.95 ومنه المركب رقم (3) يملك أحسن Kcal/mol وأقل قيمة للطاقة سجلت عند المركب رقم (3) بقيمة

نوبانية في الماء مقارنة بالمركبات المدروسة الأخرى،

بينما المركب رقم (9) يملك أشح نوبانية .

أما بالنسبة لقيم معامل التجزئة LogP فسجلت أكبر قيمة عند المركب رقم (7) بقيمة 5.57 بينما أقل قيمة سجلت

عند المركب رقم (9) بقيمة 1.05

أما بالنسبة لقيم الانكسارية المولية، الإستقطاب، الكتلة فسجلت أكبر القيم عند المركب رقم (9) وهي على الترتيب

وأقل القيم سجلت عند المركب رقم (1) وهي على الترتيب 92.14 A<sup>°3</sup>، 28.64A<sup>°3</sup>، 360.33Amu

66.83 A<sup>°3</sup>، A<sup>°3</sup>20.45، 224.17 Amu

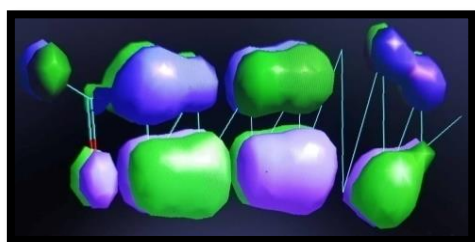
## 8.2.II. نتائج طاقة HOMO و LUMO والفرق بينهما للمركبات المدروسة:

الجدول (9-II): نتائج طاقة HOMO و LUMO والفرق بينهما بالطريقتين MM<sup>+</sup> و PM3

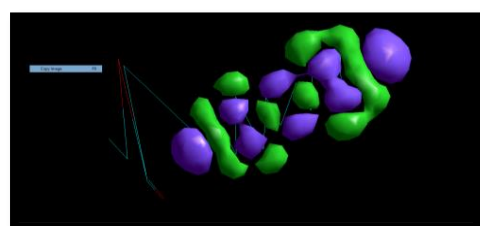
MM <sup>+</sup>		PM3			الحقل
LUMO	HOMO	Δ E	LUMO	HOMO	الخصائص المركبات
/	/	6.306	-2.627	-8.933	1
/	/	6.103	-3.443	-9.546	2
/	/	4.815	-3.438	-8.253	3
/	/	7.251	-2.176	-9.427	4
/	/	6.821	-2.773	-8.594	5
/	/	6.835	-2.083	-8.918	6
/	/	6.401	-3.139	-9.540	7
/	/	6.638	-2.713	-9.351	8
/	/	4.924	-3.054	-7.978	9
/	/	6.939	-2.872	-9.811	10

9-2-II. صور HOMO و LUMO للمركبات المدروسة:

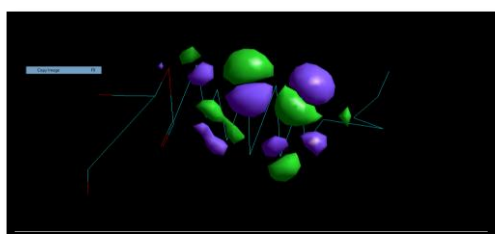
HOMO



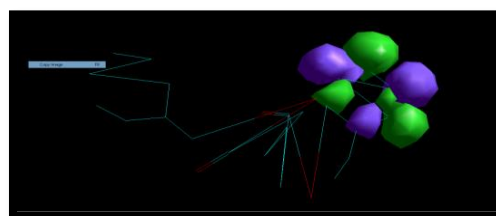
المركب (1)



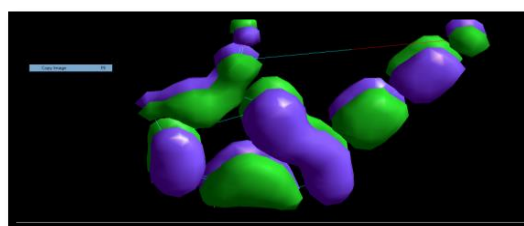
المركب (2)



المركب (3)

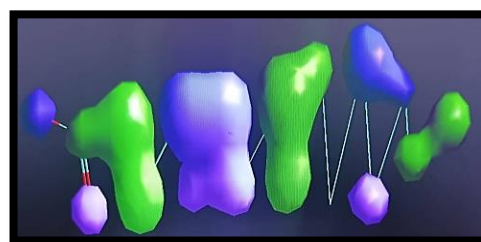


المركب (4)

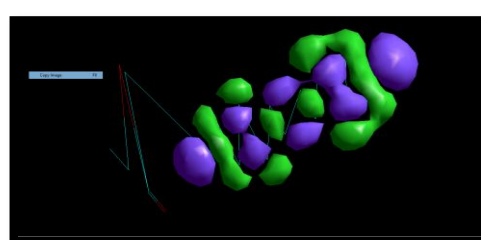


المركب (5)

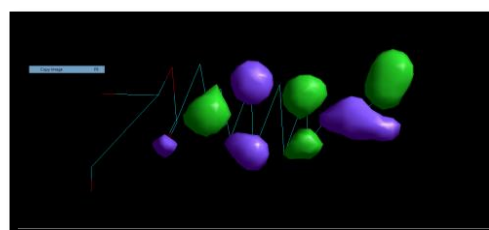
LUMO



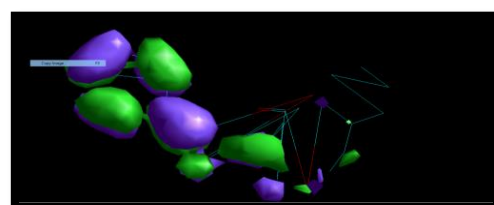
المركب (1)



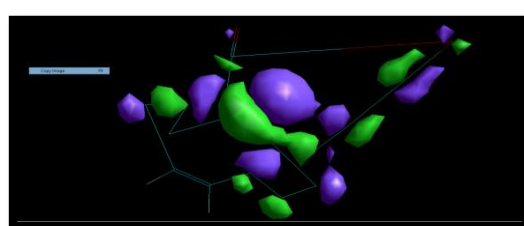
المركب (2)



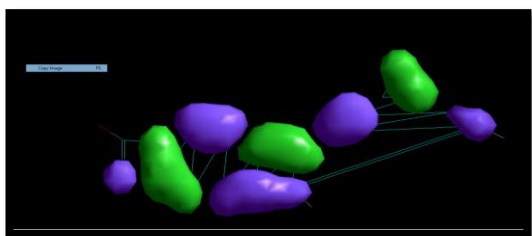
المركب (3)



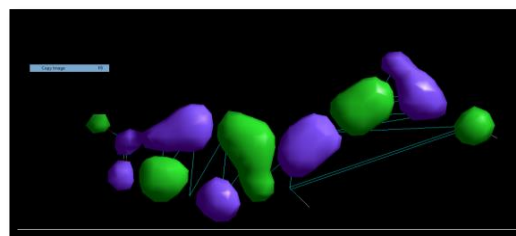
المركب (4)



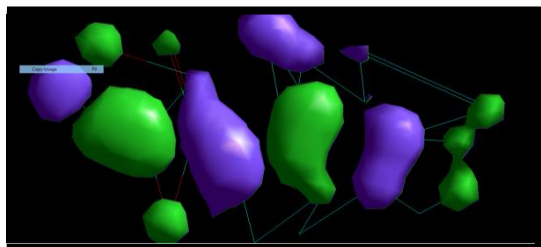
المركب (5)



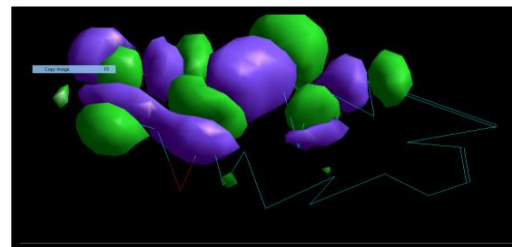
المركب (6)



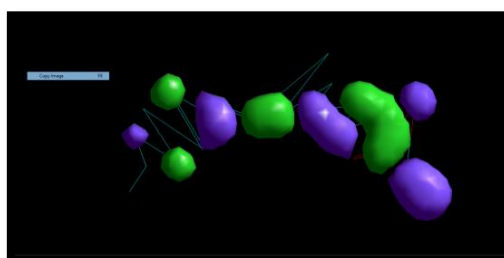
المركب (6)



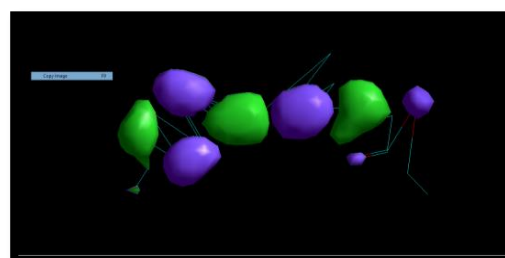
المركب (7)



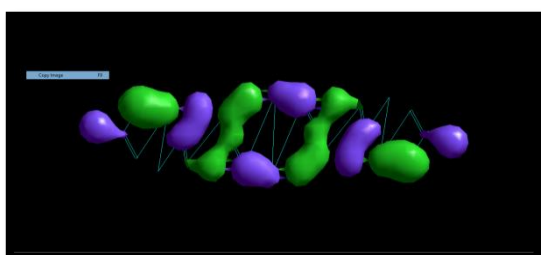
المركب (7)



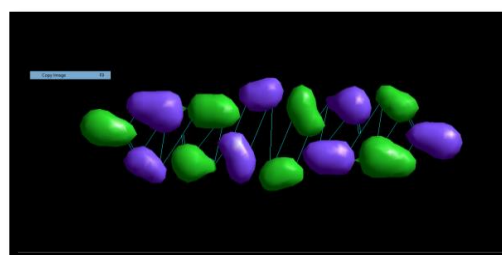
المركب (8)



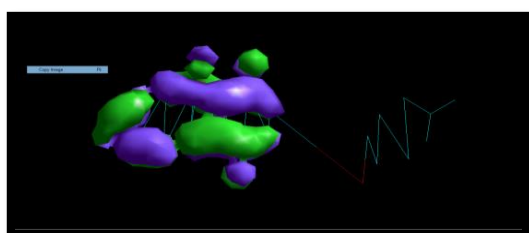
المركب (8)



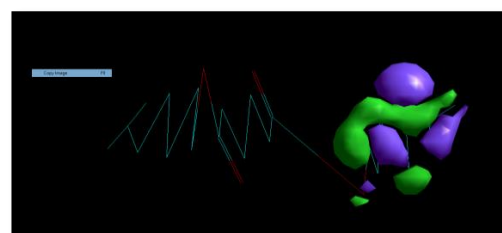
المركب (9)



المركب (9)



المركب (10)



المركب (10)

بحيث نلاحظ أنه بالنسبة للطريقة  $MM^+$  لم يسجل أي قيمة لطاقة الHOMO وLUMO باعتبارها طريقة ميكانيكا جزيئية، بينما PM3 فقد سجلت أكبر طاقة HOMO عند القيمة -7.978 الخاصة بالمركب رقم (9) وأقل قيمة طاقة له كانت -9.811 الخاصة بالمركب رقم (10).

فقد سجل أكبر قيمة لها عند -2.083 و الخاصة بالمركب رقم (6) وأقل قيمة له هي LUMO أما بالنسبة لطاقة الخاصة بالمركب -3.4437.341 و الخاصة بالمركب رقم (2) أما أكبر فرق في الطاقة بينهما كانت قيمته و الخاصة بالمركب رقم (3) 4.815. رقم (4) وأقل فرق في الطاقة قيمته

لمركب ما يدل على القابلية الشديدة للتفاعل، ومنه فإنه HOMO و LUMO - إن قلة قيمة الفارق في طاقة فإنه المركب رقم (3) هو الأكثر فعالية. PM3 حسب حسابات طريقة

للمركبات المدروسة نلاحظ في صورة المركب (3) وجود فرق في HOMO و LUMO فمن خلال صور ال التوزيع شمل تقريبا كل ذرات المركب باستثناء أحد ذرات HOMO التوزيع الإلكتروني للمدارين، ففي مدار ال فقد شمل عددا أقل من ذرات الكربون، وهذا ما يدل على LUMO الاكسجين والكربون، بينما في مدار ال وجود حركة انتقال للإلكترونات داخل المركب.

خلاصة عامة:

تم في هذا العمل دراسة نظرية لنبات الكينوا التي تنتمي إلى العائلة الرمرامية (Chenopodiaceae)، حيث تطرقنا إلى دراسة التصنيف النظامي للنبات والتوزيع الجغرافي لها واستعمالاتها والدراسات السابقة لها. تم كذلك ذكر معلومات تخص النمذجة الجزيئية، من تعريفها، طرقها، مجالات تطبيقها وكذلك البرامج المستخدمة فيها، وقد تم في هذا العمل استعمال ثلاثة برامج ChemDraw و Hypercham و Gaussian. تم في هذا العمل التطبيقي دراسة تفصيلية لعشرة مركبات التي تم اقتراحها من نتائج الفصل الكروماتوغرافي (GC/MS) المطبق على مستخلص الكلوروفورم، والمتمثلة في الطاقة وأطوال الروابط والزوايا، وكذلك قمنا بحساب خصائص QSAR كالمساحة السطحية والحجم المولي، طاقة التمييه، الإنكسارية المولية، الإستقطاب، معامل التجزئة Log P و حساب مستويات الطاقة HOMO و LUMO، وذلك باستعمال طريقتي الميكانيكا الجزيئية (MM+) والميكانيكا الكمية النصف التجريبية (PM3) وهذا في برنامج الHypercham. فاستنتجنا أن طريقة الميكانيكا النصف التجريبية PM3 أفضل في حساب الخصائص الهيكلية للمركبات المدروسة، فقد أعطت أفضل النتائج في حساب الطاقة الدنيا لاستقرار المركبات المدروسة، حيث لوحظ أن المركب (9) هو الأكثر استقرار بطاقة قدرة ب-7753.6756Kcal/mol، أما بالنسبة لدراسة العلاقة بنية-فاعلية QSAR فقد أعطت جميع الطرق المدروسة نفس النتائج من حيث:

المساحة السطحية والحجم المولي سجل المركب (5) أقل قيمة.

أما بالنسبة لطاقة التمييه فقد سجل المركب (9) أكبر قيمة أي أن المركب أشح ذوبانية في الماء بالمقارنة مع المركبات الأخرى.

و معامل التجزئة سجل المركب (7) أكبر قيمة وهذا يعني أن المركب (7) قابل للذوبان في الطور العضوي.

أما بالنسبة لنتائج طاقة HOMO و LUMO فقد سجل المركب (3) أقل قيمة في فارق الطاقة مما يدل على القابلية الشديدة للتفاعل ومنه فإن المركب (3) هو الأكثر فعالية مقارنة مع المركبات المدروسة.

أما في Gaussian فقد استعملنا طريقة الميكانيكية النصف التجريبية PM3 لحساب عزم ثنائي القطب وأهم الخصائص الفيزيائية HOMO و LUMO فقد سجل المركب (1) أكبر قيمة مما يدل على أنه مركب ذو فعالية كيميائية ضعيفة لصعوبة انتقال الإلكترونات بين المدارين HOMO و LUMO.

أما فيما يخص الطاقة الإلكترونية فقد أعطت نتائج سالبة بالنسبة للمركبات المدروسة.



## الملخص

يهدف هذا العمل إلى الدراسة النظرية لنبات الكينوا التي تمتلك قيمة غذائية كبيرة ولها رواج كبير في مداواة العديد من الأمراض المختلفة، حيث أن الفصل الكروماتوغرافي (GC/MS) المطبق على مستخلص الكلوروفورم سمح باقتراح عشرة صيغ لمركبات مختلفة منها: كحولات أليفاتية، مركبات أروماتية، أسترات، أحماض عضوية..... فقمنا بتحديد بعض الخصائص الفيزيوكيميائية لأهم المركبات المقترحة من نتائج الفصل الكروماتوغرافي وذلك عن طريق نمذجتها الجزيئية بواسطة برنامج Gaussian و Hypercham، ففي برنامج Hypercham حيث استعملنا طرق حساب مختلفة لنمذجتها منها: الميكانيكا الجزيئية (MM+)، والميكانيكا الكمية النصف التجريبية (PM3) التي تسمح بتحديد هندسة الجزيء، فتمكنا عن طريق هذا البرنامج من التعرف على واصفات QSAR وبعض الخصائص الفيزيائية، أما بالنسبة لبرنامج Gaussian فاستعملنا طريقة الميكانيكا الكمية النصف التجريبية PM3 من أجل الحسابات النظرية لعزم ثنائي القطب وخصائص الجزيئات المكونة للمركب.

الكلمات المفتاحية: كينوا، مستخلص الكلوروفورم، الخصائص الفيزيوكيميائية، النمذجة الجزيئية Gaussian، Hypercham.

This work aims at the theoretical study of the quinoa plant, which has a great nutritional value and is very popular in the treatment of many of different diseases, as chromatographic separation (GC/MS) applied to chloroform extract allowed Proposing ten formulas for different compounds, including: aliphatic alcohols, aromatic compounds, esters, organic acids.....

We determined some of the physicochemical properties of the most important proposed compounds from the results of chromatographic separation, and that is By molecular modeling by Hypercham and Gaussian software, in Hypercham where We used different calculation methods to model it, including: molecular mechanics (MM+), and semi-empirical quantum mechanics.

(PM3) that allows determining the geometry of the molecule, so we were able, through this program, to identify the QSAR descriptors and some physical properties. As for the Gaussian program, we used the semi-empirical quantum mechanics method PM3 for theoretical calculations of dipole moments and properties of compound molecules.

Keywords: quinoa, chloroform extract, physicochemical properties, molecular modeling

Gaussian, Hype

