استمارة مستخلصات رسائل وأطاريح الماجستير والدكتوراه في جامعة البصرة

الكلية: التربية للعلوم الصرفة — اسم الطالب: حاتم جميل مجيد

القسم: الكيمياء — اسم المشرف: **أ.م.د. فائزة عبدالكريم ناصر**

أ.م.د. عادل امعلا ضمد

التخصص: كيمياء عضوية – فيزياوية — الشهادة. ماجستير

عنوان الرسالة او الاطروحة:

تحضير وتشخيص ودراسة نظرية لبعض المركبات الحلقية

ملخص الرسالة او الاطروحة:

تضمنت هذه الدراسة استعمال تفاعل ديلز – الدر في تحضير امايدات حلقية جديدة مشتقة من مركبات السلفا ودراستها نظرياً باستعمال نظرية دالية الكثافة DFT والارساء الجزيئي Docking واثبات فعاليتها وتقييم التفاعل المتبادل للمركبات المحضرة مع انواع مختلفة من بروتينات سرطان الثدي من خلال تحديد مواقع الارتباط بينهما . اذ تم تحضير مركب ثنائي كيتون فيورانوانثراسين (AM) من تفاعل ديلز – الدر بين الانثراسين و الماليك انهيدريد ، ومن ثم مفاعلة الناتج مع اربعة من مركبات السلفا وهي السلفانيلاميد و السلفادايامیدين و السلفااسيتاميد و السلفاكوانيدين لتحضير الامايدات المقابلة لها وتمثل هذه المركبات السلسلة الاولى المحضرة. اما السلسلة الثانية من الاميدات الحلقية المحضرة فقد حضرت ايضا بتفاعل ديلز – الدر اولا بين الفيوران والماليك انهيدريد ومن ثم مفاعلة المركب الناتج مع نفس مركبات السلفا الاربعة المستعملة في تحضير السلسلة الاولى.
درست فعالية المركبات المحضرة كمضادات لسرطان الثدي نظرياً باستعمال برنامج الارساء الجزيئي Molecular docking وقد اعطت بعض المركبات نتائج جيدة من خلال ارتباطها ببروتينات سرطان الثدي مما يؤشر امكانية استعمالها كمضادات لهذا النوع من السرطان. قيست فعالية المركبات المحضرة ضد خلايا سرطان الثدي الحية وجاءت النتائج مطابقة للنتائج النظرية بينت نتائج القياسات العملية التي أجريت في باكستان ان المركبات AMS و AMS1 و AMS3 و FMS2 و FMS3 اعطت فعالية جيدة لتثبيط نمو وقتل خلايا سرطان الثدي الحية. بينما لم تعطي المركبات AMS2 و FMS و FMS1 فعالية قويه اتجاه خلايا سرطان الثدي الحية.

College: Education for Pure Sciences — Name of student: Hatem Jameel Mjeed

Dept: Chemistr — Name of supervisor: Dr.Faiza abdulkareem

Dr. Adil Muala Dhumad

Certificate: Organic- Physical Chemistry — Specialization: Master

Title of thesis:

Synthesis and Characterization and Theoretical study of Some Cyclic compounds

Abstract of thesis:

Diels-Alder reaction involved in this study to synthesis a new derivative cyclic amides from sulfa compounds. Theoretical investigation by DFT and molecular docking was used to evaluation of the mutual interaction between prepared compounds with different types of breast cancer proteins by identifying their binding sites. The 9,10-dihydro-9,10-[3,4]furanoanthracene-12,14-dione (AM) was synthesized by involved Diels-Alder reaction between anthracene and maliec anhydride, then the product reacts with four sulfa compounds: sulfanilamide, sulfadamidine, sulfacetamide and sulfaguanidine to prepare the corresponding cyclic amides.

The second series of cyclic amides was prepared also by Diels-Alder reaction as a first step between the furans and the maleic anhydride, then reacts the product's compound with the same four sulfa compounds which used in the preparation of the first series. molecular docking studies of prepared cyclic amide derivatives were also performed to see interactions between active compounds and binding sites with the receptor breast cancer.

Some compounds seen interaction with breast cancer proteins, indicated that they can be used as anti-cancer drugs.

م.د. محمد عبد الزهرة عريبي
المكتب الاستشاري