

المحاكاة الجزيئية لأفضل نمط حوسبي مع التحقيق الإحصائي للأحماض الأمينية

بين الأئين والفينيل الأئين

ابوبكر مفتاح احسونه¹, محمد زيدان², فرج عبدالسيد³, طه علي³

Boubaker.M.Hosouna^{1*}, Mohammed Zidan^{2*}, Farag abdulsaid³, Taha ali³

Corresponding email: moh.zidan1@sebhau.edu.ly*

الملخص:

تم في هذا البحث دراسة المقارنة بين حمضين الأئين والفينيل أئين التي تستخدم كوحدات بنائية أساسية لجميع البروتينات وتقوم بعملية تنظيم نمو الخلية , بعد المقارنة العملية لقيم InK والدراسة الإحصائية في تحليل أهمية ارتباط النتائج للفئات الإحصائية ببعضها , واستنتجنا بأن لحمض الأئين ارتباط أكثر من حمض الفينيل أئين وهذا ما عزز ثقتنا بأن نطبق المحاكاة الحوسبية عليهما باستخدام Gaussian09 و HyperChem08 الأول كحاسب للطاقات الداخلية و العزم القطبي بقياسات مختلفة والثاني كمحسن هندسي للزوايا والفراغ الهندسي بين المركبات المدمجة, وتبين بأن الأئين هو الأفضل من ناحية الاستقرار وأعلى عزم قطبي بحيث أن له أقل طاقة ترابط وأكثر استقرارية وثبات في أي وسط بيئي من حوله مقارنة بحمض الفينيل أئين .

الكلمات المفتاحية: الأئين ، الفينيل الأئين، النمط الاهتزازي الحوسبي، الرنين النووي المغناطيسي

المقدمة:

الأحماض الأمينية Amino Acid

هي عبارة عن جزيئات حيوية مهمة التي تحتوي على مجموعتي الأمين (-NH₂) والكربوكسيل (-COOH) مشتبكة مع بعضها البعض فضلا عن سلسلة جانبية (R-group) تختلف تبعا للحامض الأميني . إذ أنها تعد الوحدات البنائية الأساسية لجميع البروتينات , وينتج التمثيل الغذائي في جسم الإنسان عددا كبيرا من الأحماض الأمينية المختلفة .

ولكي يقوم الجسم بإنتاج ما يحتاجه من هذه الأحماض فهو يقوم بهضم الغذاء (هضم البروتينات) فيحلل البروتين إلى أجزائه الأساسية وهي الأحماض الأمينية .

وتنقسم الأحماض الأمينية حسب أهميتها الغذائية إلى :-

- أحماض أمينية أساسية: وهي أحماض لا يمكن للجسم البشري أن يصنعها بنفسه ويجب تناولها في الأغذية . مثل : الفينيل الأئين والليوسين والليسين وغيرها .
- أحماض أمينية شبه أساسية : وهي أحماض يستطيع الجسم تخليقها ولكن ليس بكميات كافية خاصة في مرحلة النمو ويجب أن تتوفر في الغذاء . مثل : الأرجينين والهستيدين .
- أحماض أمينية غير أساسية : وهو أحماض متوفرة في الجسم السليم بكميات دائمة ولا يستلزم حضورها في الغذاء . مثل : الأئين والجليسين والبرولين

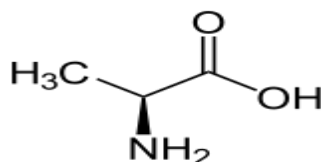
الأئين (Alanine)

الاسم النظامي :- 2-Aminopropanoic acid

الصيغة الكيميائية :- C₃H₇NO₂

الكتلة الجزيئية :- 89.09 g/mol

هو من الأحماض الأمينية الغير أساسية المشهورة المتواجدة في البروتينات والغير محبة للماء Hydrophobic , ويوجد أحيانا بشكل حر في البلازما , وتكون قيمة $pKa = 9.87$. أما شكله الفراغي فيمكن رسمه على الشكل رقم 1 :



شكل (1) الصيغة البنائية للأينين

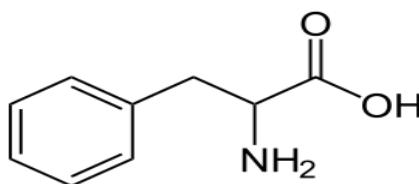
الفينيل اينين (phenylalanine)

الاسم النظامي :- 2-Amino-3-phenylpropanoic acid

الصيغة الكيميائية :- $C_9H_{11}NO_2$

الكتلة الجزيئية :- 165.19 g/mol

هو من الأحماض الأمينية الأساسية المتواجدة في البروتينات والمهمة لنمو الأطفال ولأبيض البروتين في الأطفال والكبار حيث يتواجد في الخضراوات والحليب والبيض . وهو من الأحماض التي تمتص الأشعة فوق البنفسجية بين (260-280) نانوميتر ومن الملاحظ إن معظم امتصاص البروتين للأشعة فوق البنفسجية يعزى إلى احتواء البروتين على هذا الحامض بالإضافة إلى التريتوفان , وقيمة $pKa = 9.24$, وشكله الفراغي فيمكن رسمه على الشكل رقم 2 :



شكل (2) الصيغة البنائية للفينيل الأينين

الحوسبة الكيميائية:

الكيمياء الحوسبية هي احد فروع الكيمياء النظرية التي تهدف إلى ابتكار تقريبات رياضية فعالة لحل مشاكل الكيمياء بأسرع وقت وأقل تكلفة ووضع خوارزميات وبرامج حوسبية تقوم بحساب خصائص الجزيئات مثل الطاقة الكلية والعزم ثنائي القطب والترددات الاهتزازية , وغيرها من الخصائص والمقاطع العرضية لتصادم الجزيئات مع جزيئات ذات مساقط درية وتحت درية مختلفة , من أهمية الحوسبة الكيميائية تقليص كمية المواد العملية المستخدمة داخل المعامل , تفادي الكثير من العقبات العلمية ومشكلات البحوث التطبيقية , أيضا تحديد طرق البحث العلمي بالاعتماد على موضوع البحث وانجاز البحث العلمي في وقت زمني جيد لينسخ الفرصة في التعمق أكثر في البحث واستكشاف نتائج علمية , تستخدم الحوسبة الكيميائية في دراسة الأحماض وتأثيراتها الحيوية , كما أنها تستطيع قياس طاقات الترابط لمركبات الأحماض وإخراج أعلى واقل طاقة ترابط .

التحليل الإحصائي :

التحليل الإحصائي للتجارب المعملية في مجال العلوم ولما كانت الدراسة المثمرة للإحصاء التطبيقي تتطلب حد أدنى من المعرفة بالنظرية الإحصائية وإغفال ذلك يؤدي إلى فهم سطحي تنجم عنه أخطاء جسمية في التطبيق العملي فقد عني الكتاب بإرساء

أساسات وركائز هذه النظرية . كما عني بالربط بين النظرية والتطبيق وتقديم الأصول العلمية لشروط ومحددات ما يستخدم من طرق واختبارات وعمليات الاستدلال .

الإنحدار الخطي والارتباط الخطي :

دراسة الإنحدار الخطي لمتغير حقيقي Y على متغير آخر X فرضنا إن العلاقة بينهما على صورة $y = \alpha + \beta x$ واستخرجنا من العينة أحسن تقديرين A.B للبارامتران المجهولين α و β في ضوء مبدأ المربعات الصغرى ومن ثم إيجاد معادلة $y = b_0 + b_1x$ تمكننا من التنبؤ بأحسن قيمة للمتغير y عند قيمة معطاة للمتغير x .

استخدمنا تحليل التباين لتفسير الإنحدار كما أخرجنا بعض الاستنتاجات الإحصائية في صورة اختبارات دلالة وفترات ثقة وهذا كله يدخل تحت الموضوع المسمى بتحليل الإنحدار، يقترن بهذا الموضوع موضوع آخر يسمى تحليل الارتباط وهو يهتم بالبحث عن عدد نقيس به درجة الاعتماد المتبادل بين المتغيرين ودقة العلاقة المفروضة بينهما فإذا فرضنا أن العلاقة بين المتغيرين خطية يكون اهتمامنا منهيًا على إيجاد عدد أو مقياس يعبر عن درجة جودة العلاقة الخطية في وصف العلاقة الحقيقية بين المتغيرين واختبار دلالة هذا المقياس .

دراسات سابقة عن المركبين:

عام (2010) Bhimrao وجماعته نري أن الثوابت استقرارية عدد من المعقدات ذات مزيج من الليكندات المتكونة في من تفاعل ايون النحاس التنائي مع دواء الدابسون (Depson) كليكن داوي و عدد من الحوامض الأمينية كلايسين و ليسين وحامض الكلوتاميك ، الكلوتامين الفالين الميثيونين والفانيل انين) كليكندات ثانوية بواسطة التسحيح المجهرى وعند درجة حرارة 25 وشدة أيونية مكون من 80% (V:V) ايثانول – ماء كما تم حساب قيم ثوابت التكوين لمعقدات بروتون- ليكند وفلز ليكند عند درجة حرارة 30 وفي وسط مكون من 50% (V:V) ايثانول-ماء وعند شدة أيونية وقد أجريت الحسابات باعتماد تقنية تسحيح Calvin & Bjerrum وقد تضمنت تتبع تغير اللون عند الإضافات المتتالية ومراحل تكون المعقدات المختلفة عند التسحيح في المحلول الليكندات المنفصلة ومزيج الليكندات .

عام 2013 قامت رنا تحسين من تحضير دراسة استقرارية وفلورة عدد من المركبات الدوائية مع الايونات الفلزية المختارة مثل البراسيتامول والسيفالكسين مع بعض الفلزات كالنحاس والكوبالت والحديد ودراسة استقراريتهما بشكل معقد ثنائي ومع الأحماض الأمينية كالأنين والفينيل انين ودراسة استقراريتهما بشكل معقد ثلاثي حيث كانت النتيجة إن جميع المعقدات المكونة من تفاعل ايونات الفلزات قيد الدراسة مع الأدوية المنتخبة لهذه الدراسة تكون أكثر استقرارية في التركيز المخففة وهذا يساعد علي زيادة كفاءة التعقد واستقرار النواتج بسبب وجود هذه الايونات الفلزية بنسبة قليلة في داخل جسم الإنسان ، أن المعقدات الثلاثية لنظامي سلفانيلمايد - فلز- حامض أميني وسلفاسيتاميد – فلز- حامض أميني هي الأقل استقرارا من المعقدات الثنائية المحضرة منها.

و من هذا المنطلق و بالنظر لأهمية الأحماض الأمينية ودورها الرئيسي في الجسم للقيام بوظائفه الخاصة تم اختيار حمضين أمينيين وباستخدام طريقة الحوسبة الكيميائية رأينا ضرورة حساب و تحديد الأتي كأهداف لهذه الدراسة العلمية، محاكاة الأنين والفينيل أنين، حساب أعلى طاقة ترابط لأفضل اهتزاز، تحديد طيف الرنين النووي المغناطيسي NMR للمركبين حوسبيا، حساب أفضل طاقة ترابط داخلية ومقارنته مع الضبط الإحصائي للنتائج العملية، و أخيراً التحليل الإحصائي للحمضين و كل تلك الدراسة ستم مع مركبي نترات الحديد و الكوبالت لتتم عملية المقارنة العلمية بوجود الضبط الإحصائي للنتائج العملية و نتحصل علي رؤية و نتائج مفصلة لتبيان العمل علي هاذين الحمضين لتقنية البيئة من نترات الحديد و الكوبالت.

الطرق الحوسبية والتحليل الإحصائي:

هذا الجزء العملي يدرس أهمية الارتباط الإحصائي لثبات قيم $\ln K$ للأحماض الأمينية الثنائية للأنين والفانيل أنين عند درجات حرارة مختلفة ، من خلاله نقوم بحساب :

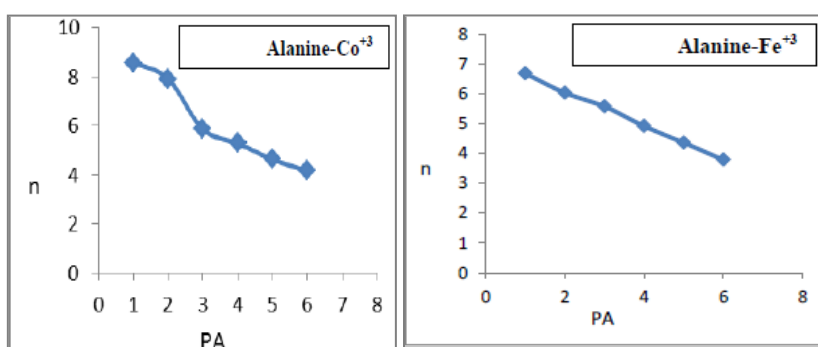
$$SSx = \text{مجموع الفئدة لدرجات الحرارة} , SSy = \text{مجموع الفئدة الثانية لقيم } \ln K$$

SP_{xy} = مجموع حاصل ضرب مجاميع الفئات الأولى والثانية من فوق الوسط الحسابي SS_{reside} = حاصل فوق مجموع الفئة من قسمة SS_x/SP_{xy} كما هو موضح في الجدول رقم (1).

أيضا سنقوم في هذا الجزء بدراسة الجانب الحوسبي بحساب أفضل طاقة ترابط للمركبين الأئين والفاينيل أئين ومحاكاة الأئين والفاينيل أئين بوجود الماء ومعرفة الأقل طاقة ترابط والأكثر استقرارية وحساب NMR والاهتزازية للحمضين - الأئين والفاينيل أئين ومقارنته بالضبط الإحصائي للنتائج العملية .
التحليل الإحصائي :

جدول (1) : دراسة أهمية الارتباط الإحصائي لفئات نتائج الأحماض العملية للجدول الآتية :

X	Y	(X-X ⁻)	(Y-Y ⁻)	(X-X ⁻)(Y-Y ⁻)	XY	$\hat{Y}=\dots+\dots$	Residual
---	---	---------------------	---------------------	--	----	-----------------------	----------

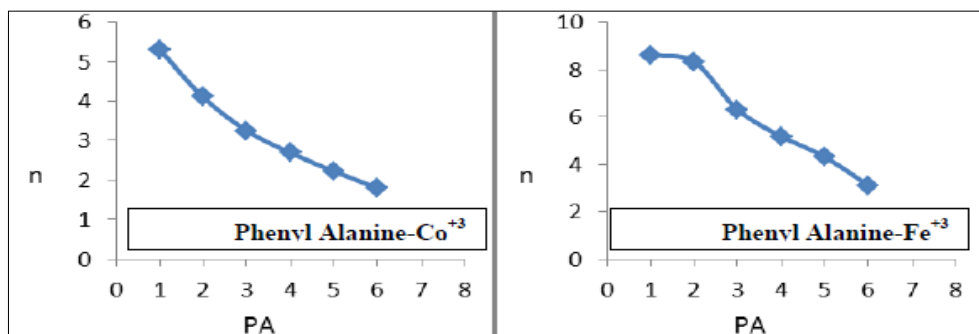


شكل (3) منحنيات التكوين لمعقد الأئين مع أملاح الفلزات عند تركيز (M0.002) للمتفاعلات وعند درجات حرارة مختلفة وقوة أيونية تساوي (0.1)

بعد أن تم رسم العلاقة بين دالة التكوين n ودالة التركيز [A] p, تم حساب قسم lnK عن طريق قانون Irving-rossoffi التي تعبر عن K $nL = PL$ كما هو في الجداول أدناه

جدول (2) قيم LnK للمعقدات الثنائية للأئين عند درجات حرارة مختلفة

Lnk	درجة الحرارة (Kelvin)	المعقد التنائي
1.215	293	نترات الكوبالت مع الأئين
1.251	301	
1.33	306	
2.30	310	
1.22	293	نترات الحديد مع الأئين
1.3	301	
1.32	306	
2.53	310	



شكل (4) منحنيات التكوين لمعقد الفينيل ألانين مع أملاح الفلزات عند تركيز (M0.002) للمتفاعلات وعند درجات حرارة مختلفة وقوة أيونية تساوي (0.1)

بعد أن تم رسم العلاقة بين دالة التكوين n ودالة التركيز p[A], تم حساب قسم lnK عن طريق قانون Irving-rossoffi التي تعبر عن K كما هو في الجداول أدناه

جدول (3) قيم LnK للمعقدات الثنائية للفينيل ألانين عند درجات حرارة مختلفة

Lnk	درجة الحرارة (Kelvin)	المعقد التنائي
0.745	293	الفاينيل أنين مع الكوبالت
0.87	301	
0.895	306	
2.10	310	
0.81	293	الفاينيل أنين مع الحديد
0.785	301	
0.887	306	
2.15	310	

حساب ميكانيكا الكم :

ميكانيكا الكم هي مجموعة من النظريات الفيزيائية ظهرت في القرن العشرين، وذلك لتفسير الظواهر على مستوى وقد دمجت بين الخاصية الجسمية والخاصية الموجية ليظهر مصطلح ازدواجية الموجة - الجسيم، وبهذا تصبح ميكانيكا الكم مسؤولة عن التفسير الفيزيائي على المستوى الذري كما أنها أيضاً تطبق على الميكانيكا الكلاسيكية ولكن لا تظهر تأثيرها على هذا المستوى، لذلك ميكانيكا الكم هي تعميم للفيزياء الكلاسيكية لإمكانية تطبيقها على المستويين الذري والعيادي .

ظهرت أهمية الحوسبة الكمومية من عجز الفيزياء الكلاسيكية عن تفسير الظواهر مثل ظاهرة الجسم الأسود وظاهرة التأثير الكهروضوئي وتأثير كيمبتون وغيرها من الظواهر ثم بناء الهيكل الهندسية المجمعات علي أساس الهيكل التي ثم إنشائها من المعلومات البلورية التي قدمتها Cambridge structural و تم تحسينها بشكل منفصل باستخدام طريقة Semiepirical, PM3 باستخدام حزمة البرامج Gaussian03 ثم بناء هندسيات البدء المجمعات المدمجة باستخدام Hyperchem الإصدار 8.0, Hypercube . ثم استخدام برامج تعتمد معادلات ميكانيكا الكم وتقريبها في هذه الدراسة والبرامج هي :

HyperChem Professional 08

هو برنامج حوسبي يقوم بتحسين المركبات الكيميائية شاملة وإمكانية وجودها في الفراغ الهندسي، وله القدرة على دمج المركبات مع بعضها، أيضاً نستطيع إجراء حساب الطاقة الدورانية واهتزاز الروابط ورؤية كيفية تحريكها .

Gaussian 09

هو برنامج عبارة عن حزمة بنية إلكترونية قادرة على التنبؤ بالكثير من خصائص الذرات والجزيئات والأنظمة التفاعلية ورسم المركبات وإمكانية حساب أطوال الروابط والزوايا وحساب طاقات الترابط للمركبات مثلاً الاستفادة من أساسها، نظرية الكثافة الوظيفية ، شبه التجريبية ، الميكانيكا الجزيئية ، والطرق الهجينة.

الأساليب البرمجية :

Geometry Optimization

مجال الكيمياء الحاسوبية ، يكون التقليل إلى أدنى حد من الطاقة هو عملية العثور على ترتيب في الفضاء لمجموعة من الذرات ، حيث يكون صافي القوة بين الذرية على كل ذرة ، وفقاً لبعض النماذج الحسابية للارتباط الكيميائي ، قريباً من الصفر ، الموقف على سطح الطاقة المحتملة هو نقطة ثابتة.

DFT و هي طريقة جداً شائعة الاستخدام و تخصص في حساب الكثافة الإلكترونية حول جميع المركبات المراد حساب طاقتها، بحيث تجعل الكثير من التقديرات والحصول على بعض المعلومات من البيانات إنها مهمة جداً في الكيمياء الحاسوبية لعلاج الجزيئات الكبيرة حيث تكون طريقة Hartree-Fock الكاملة دون التقريب مكلفة للغاية. وهي إحدى أساليب الكيمياء الكمومية التي تعتمد في أساسها على معادلة شرودنجر .

(B3LYP)

هي أكثر الطرق انتشاراً وتحظى بشعبية كبيرة في جميع الأنظمة الكيميائية وهي أكثر دقة من بقية الأدوات الأخرى في تحديد الصورة النهائية للمركب و الصيغة البنائية التقريبية و الطاقة النهائية و هي الأهم أيضاً أطوال الروابط الداخلية و الزوايا ككل .

طرق العملية

التفاصيل التقنية :

خصائص الحاسوب المستخدم :

- الشركة المصنعة hp
- الذاكرة المتبنة (RAM) 8 غيغا بيت
- نوع نظام التشغيل Windows 10
- المعالج Intel CORE i7

طريقة العمل :

بناء مع Gauss View :

- بدلاً من كتابة جميع الإحداثيات النظرية و أساس المجموعة، وما إلى ذلك يمكننا استخدام Gauss View.
- يتم تحديد الحساب عن طريق الإشارة والنقر لبناء الجزيء، واستخدام القوائم المنسدلة لتحديد نوع الحساب ومستوى النظرية والأساس.
- Gauss View يولد ملف الإدخال Gaussian ، ويمكن تشغيل الجاوس دون العودة إلى يونيكس مستعجل.
- Gauss View يمكننا من أن نستخدم لقراءة Gaussian و إخراج الملفات النهائية وتصوير النتائج.

النتائج الإحصائية والحوسبية

هي هذا الجزء سنعرض النتائج الإحصائية لأهمية الارتباط بين قيم $\ln K$ مقابل درجات الحرارة ومقارنة قيمة (SS_{reside}) من جدول الفئات والمحسوبة من المعادلات للحمضين الأنين والفينيل انين مع نترات الحديد (III) و نترات الكوبالت (III) ، ومن ثم سنعرض نتائج الحوسبة الكمومية للأحماض والتي ستؤكد لنا أي الحمضين أفضل من ناحية الاستقرار والطاقة التكوينية والثبات .

1.3 حساب أهمية الارتباط

عملية حساب أهمية الارتباط في هذا الفصل ستؤكد لنا أي الحمضين الأفضل من ناحية الاستقرار للمعقدات المدرجة عمليا , كما هو موضح في الجداول

جدول (4) : قيم نتائج إحصائية لمركب نترات الكوبالت (III) مع الأنين

X	Y	(x-x̄)	(y-ȳ)	(x-x̄)(y-ȳ)	XY	$\hat{y} = -14.418 - 0.0527x$	Residual
293	1.215	-9.5	-0.309	2.9355	355.99	1.0231	0.1919
301	1.251	-1.5	-0.273	0.4095	376.55	1.4447	-0.1937
306	1.33	3.5	-0.194	-0.679	406.98	1.7082	-0.3782
310	2.30	7.5	0.776	5.82	713	1.9190	0.381
							0.362

$$\bar{x} = 302.5, \bar{y} = 1.524$$

$$SS_x = \sum (\bar{x} - x)^2 = 161$$

$$SS_y = \sum (y - \bar{y})^2 = 0.8098$$

$$SP_{xy} = \sum (\bar{x} - x)(y - \bar{y}) = 8.486$$

$$y = b_0 + b_1 x$$

$$b_1 = \frac{SP_{xy}}{SS_x} = \frac{8.486}{161} = 0.0527$$

$$b_0 = \bar{y} - b_1 \bar{x} = (1.524) - (0.0527)(302.5) = -14.418$$

$$y = -14.418 - 0.0527x$$

لحساب $SS_{(reside)}$:-

$$SS_{(reside)} = SS_y - \frac{(SP_{xy})^2}{SS_x}$$

$$SS_{(reside)} = 0.8098 - \frac{(8.486)^2}{161} = 0.363$$

من الملاحظ إن قيمة $SS_{(reside)}$ من الجدول (1.3) متقاربة مع تلك المحسوبة بالمعادلات , حيث الأولي من الجدول = 0.362

والمحسوبة من خلال المعادلات = 0.363 وهذا يوضح تباعد في القيم , بهذا نؤكد تناسب هذا الحمض الاميني (الأنين) مع نترات الكوبالت (III) إحصائياً .

جدول (5) : قيم نتائج إحصائية لمركب نترات الحديد (III) مع الأنين

X	Y	(x-x̄)	(y-ȳ)	(x-x̄)(y-ȳ)	XY	$\bar{Y} = -17.313 - 0.0625x$	Residual
293	1.22	-9.5	-0.3725	3.5388	357.46	0.9995	0.2205
301	1.3	-1.5	-0.2925	0.4388	391.30	1.4995	-0.1995
306	1.32	3.5	-0.2725	-0.9538	403.92	1.812	-0.492
310	2.53	7.5	0.9375	7.0313	784.30	2.062	0.468
							0.549

$$\bar{x} = 302.5, \bar{y} = 1.5925$$

$$SSx = 2 = 161 \sum (x - \bar{x})$$

$$SSy = 2 = 1.178 \sum (y - \bar{y})$$

$$SP_{xy} = \sum (x - \bar{x})(y - \bar{y}) = 10.056$$

$$y = b_0 + b_1 x$$

$$b_1 = \frac{SP_{xy}}{SSx} = \frac{10.056}{161} = 0.0625$$

$$b_0 = \bar{y} - b_1 \bar{x} = (1.593) - (0.0625)(302.5) = -17.313$$

$$y = -17.313 - 0.0625x$$

لحساب $SS_{(reside)}$:-

$$SS_{(reside)} = SSy - \frac{(SP_{xy})^2}{SSx}$$

$$SS_{(reside)} = 1.178 - \frac{(10.055)^2}{161} = \mathbf{0.550}$$

من الملاحظ إن قيمة $SS_{(reside)}$ من الجدول (2.3) متقاربة مع تلك المحسوبة بالمعادلات , حيث الأولى من الجدول = **0.549**

والمحسوبة من خلال المعادلات = **0.550** وهذا يوضح تباعد في القيم , بهذا نؤكد تناسب هذا الحمض الاميني (الأئين) مع نترات الحديد (III) إحصائياً .

جدول (6) : قيم نتائج إحصائية لمركب نترات الكوبالت (III) مع الفينيل الأئين

X	Y	(x- \bar{x})	(y- \bar{y})	(x- \bar{x})(y- \bar{y})	XY	$\bar{Y} = -18.57 - 0.0652x$	Residual
293	0.745	-9.5	-0.408	3.8760	218.29	0.5336	0.2114
301	0.87	-1.5	-0.283	0.4345	261.87	1.0552	-0.1852
306	0.895	3.5	-0.258	-0.9030	273.87	1.3812	-0.4862
310	2.10	7.5	0.947	7.1025	651	1.642	0.458
							0.525

$$\bar{x} = 302.5, \bar{y} = 1.153$$

$$SSx = 2 = 161 \sum (x - \bar{x})$$

$$SSy = 2 = 1.2099 \sum (y - \bar{y})$$

$$SP_{xy} = \sum (x - \bar{x})(y - \bar{y}) = 10.5$$

$$y = b_0 + b_1 x$$

$$b_1 = \frac{SP_{xy}}{SSx} = \frac{10.056}{161} = 0.0652$$

$$b_0 = \bar{y} - b_1 \bar{x} = (1.153) - (0.0652)(302.5) = -18.57$$

$$y = -18.57 - 0.0652x$$

لحساب $SS_{(reside)}$:-

$$SS_{(reside)} = SSy - \frac{(SP_{xy})^2}{SSx}$$

$$SS_{(reside)} = 1.178 - \frac{(10.5)^2}{161} = \mathbf{0.4682}$$

من الملاحظ إن قيمة $SS_{(reside)}$ من الجدول (3.3) غير متقاربة مع تلك المحسوبة بالمعادلات , حيث الأولى من الجدول = 0.525 والمحسوبة من خلال المعادلات = 0.4682 وهذا يوضح تباعد في القيم , بهذا نستبعد احتمال تناسب هذا الحمض الاميني (الفينيل الأنين) مع نترات الكوبالت (III) إحصائياً .

$$\bar{x} = 302.5 , \bar{y} = 1.158$$

$$SS_x = 2 = 161 \sum (x - \bar{x})$$

$$SS_y = 2 = 1.318 \sum (y - \bar{y})$$

$$SP_{xy} = \sum (x - \bar{x})(y - \bar{y}) = 10.357$$

جدول (7) : قيم نتائج إحصائية لمركب نترات الحديد (III) مع الفينيل الأنين

X	Y	(x- \bar{x})	(y- \bar{y})	(x- \bar{x})(y- \bar{y})	XY	$\bar{Y} = -18.20 - 0.0643x$	Residual
293	0.810	-9.5	-0.348	3.306	237.33	0.5499	0.2601
301	0.785	-1.5	-0.373	0.5595	236.29	1.0643	-0.2793
306	0.887	3.5	-0.271	-0.9485	271.42	1.3858	-0.4988
310	2.15	7.5	0.992	7.440	666.50	1.643	0.507
							0.6515

$$y = b_0 + b_1x$$

$$b_1 = \frac{SP_{xy}}{SS_x} = \frac{10.357}{161} = 0.0643$$

$$b_0 = \bar{y} - b_1 \bar{x} = (1.158) - (0.0643)(302.5) = -18.20$$

$$y = -18.20 - 0.0643x$$

لحساب $SS_{(reside)}$:-

$$SS_{(reside)} = SS_y - \frac{(SP_{xy})^2}{SS_x}$$

$$SS_{(reside)} = 1.318 - \frac{(10.357)^2}{161} = 0.6518$$

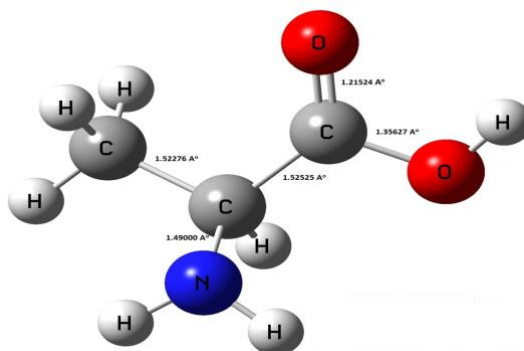
من الملاحظ إن قيمة $SS_{(reside)}$ من الجدول (4.3) غير متقاربة مع تلك المحسوبة بالمعادلات , حيث الأولى من الجدول = 0.6515 والمحسوبة من خلال المعادلات = 0.6518 وهذا يوضح تباعد في القيم , بهذا نستبعد احتمال تناسب هذا الحمض الاميني (الفينيل الأنين) مع نترات الحديد (III) إحصائياً .

النتائج الحوسبية :-

النتائج الحوسبية للأحماض الأمينية (الأنين , الفينيل انين) تؤكد ما تم حسابها من التطبيق الإحصائي على النتائج العملية بان الحمض الاميني (الأنين) هو الأفضل من ناحية الثبات الاستقرارية مقارنة بالحمض الاميني (الفينيل انين) , بحيث تم توضيح هذا الاختلاف في النتائج العملية لطاقة الترابط التكوينية لكل حمض على حدا وبوجود الماء كوسط ناقل للحمضين , كانت النتائج الأولية للحمضين باستخدام حساب الطاقة وحساب الرنين النووي المغناطيسي (NMR) تشير إلى إن نتيجة الطاقة الحوسبية للأنين تكون أقل في الحاليتين , بما يعني انه أكثر استقرار وثبات من الفينيل انين , والنتائج التالية توضح ذلك .

1.2.3 متراكب الأئين :

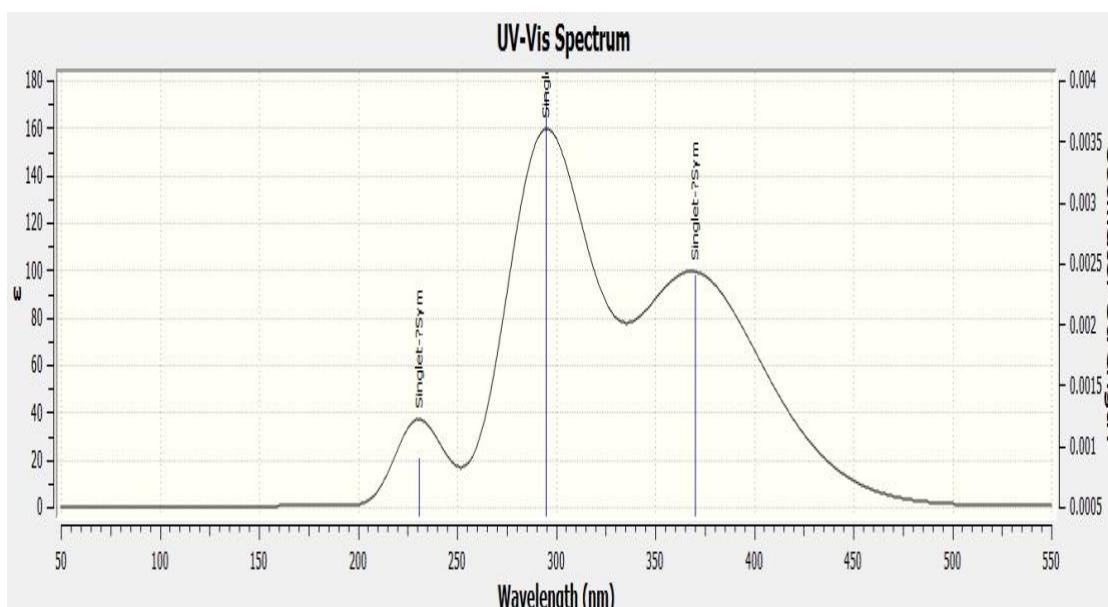
كانت نتيجة الطاقة الترابط الداخلية الكلية للحمض الاميني (الأئين = $-362.831872 \text{ Hartree}$), و عزم قطبي = Debye 3.851054 ، و بامتصاصية Uv-vis $\lambda_{\text{max}} = 294.89 \text{ nm}$



شكل (5) الصيغة الفراغية الحوسبية لمتراكب الأئين

متراكب الأئين مع نترات الكوبالت:

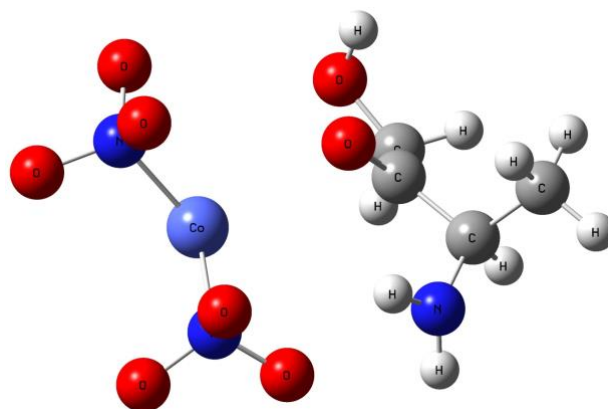
و كانت النتيجة من دمج الأئين مع نترات الكوبالت فكانت طاقتها التكوينية $\text{HF} = -1349.102760 \text{ Hartree}$, و عزم قطبي = Debye 13.781462 وهذا يوضح تداخل أقوى من الحالة المنفردة للأئين، و بامتصاصية Uv-vis $\lambda_{\text{max}} = 4080.79 \text{ nm}$



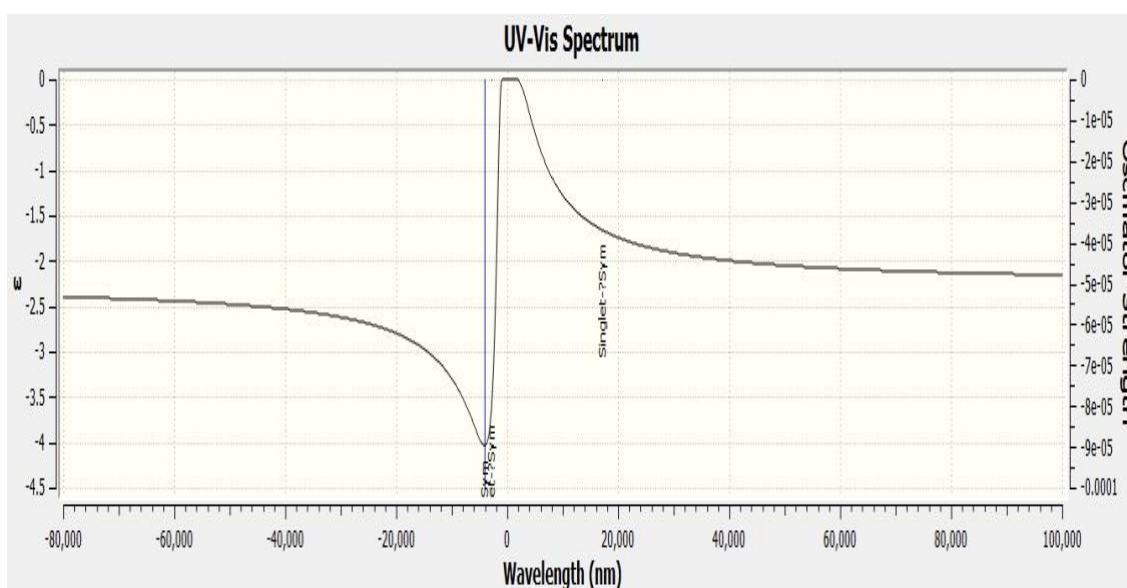
شكل (6) يوضح طيف الأشعة فوق بنفسجية لمركب الأئين منفرد، حيث كانت أعلى امتصاصية $\lambda_{\text{max}} = 294.89 \text{ nm}$

متراكب الأنين مع نتراث الكوبالت:

و كانت النتيجة من دمج الأنين مع نتراث الكوبالت فكانت طاقتها التكوينية $HF = -1349.102760$ Hartree , و عزم قطبي 13.781462 Debye = و $4080.79 \text{ nm} = \lambda_{\text{max}}$ Uv-vis بامتصاصية



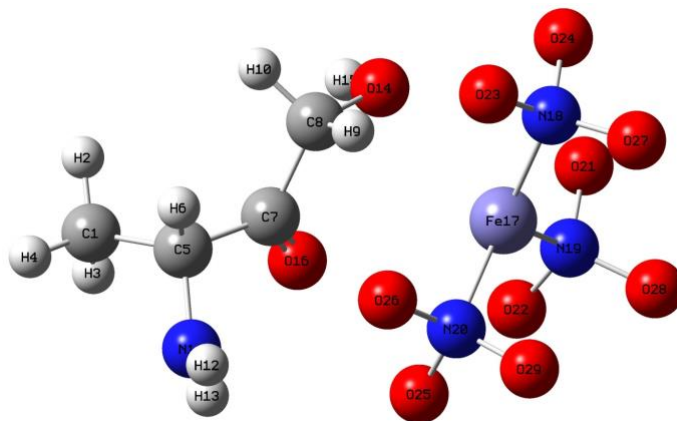
شكل (7) الصيغة الفراغية الحوسبية لمتراكب الأنين متداخل مع نتراث الكوبالت



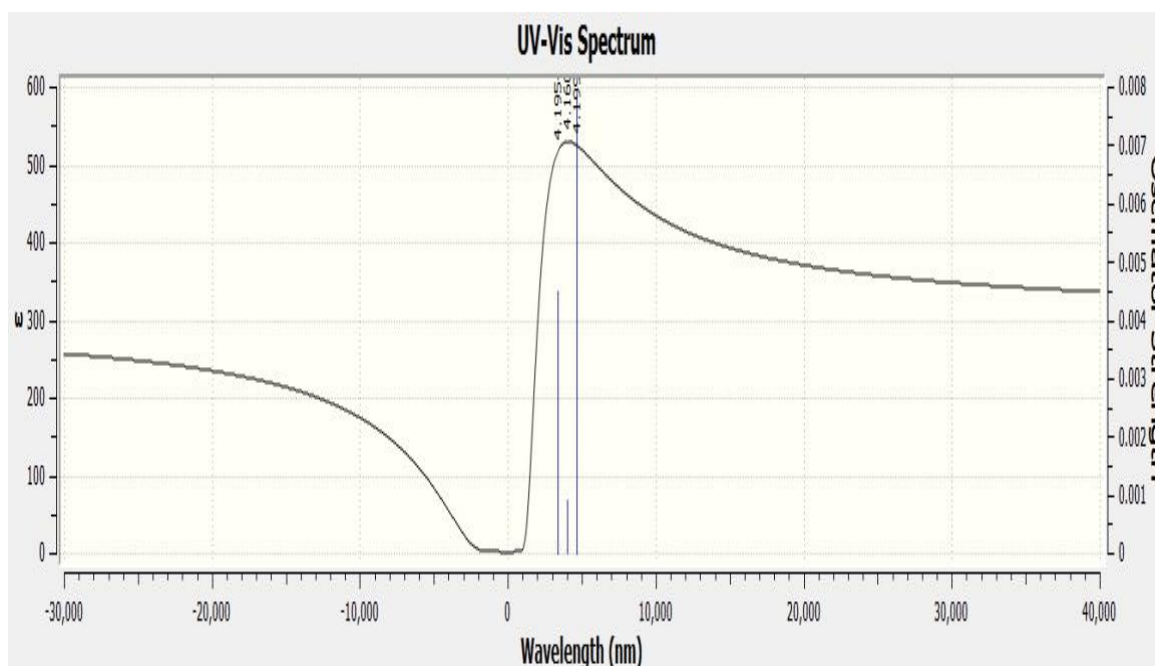
شكل (8) يوضح طيف الأشعة فوق بنفسجية لمركب الأنين مع نتراث الكوبالت ، حيث كانت أعلى امتصاصية $4080.79 \text{ nm} = \lambda_{\text{max}}$

متراكب الأئين مع نترات الحديد:

و كانت النتيجة من دمج الأئين مع نترات الحديد فكانت طاقتها التكوينية HF = -1327.262468 Hartree , و عزم قطبي
 $4632.38 \text{ nm} = \lambda_{\text{max}}$ و هذا يوضح تداخل أقوى من الحالة المنفردة للأئين، و بامتصاصية UV-vis = 10.372062 Debye =



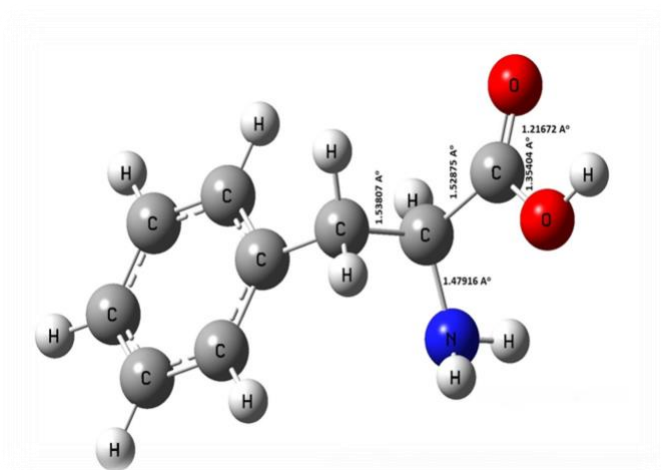
شكل (9) الصيغة الفراغية الحوسبية لمتراكب الأئين متداخل مع نترات الحديد



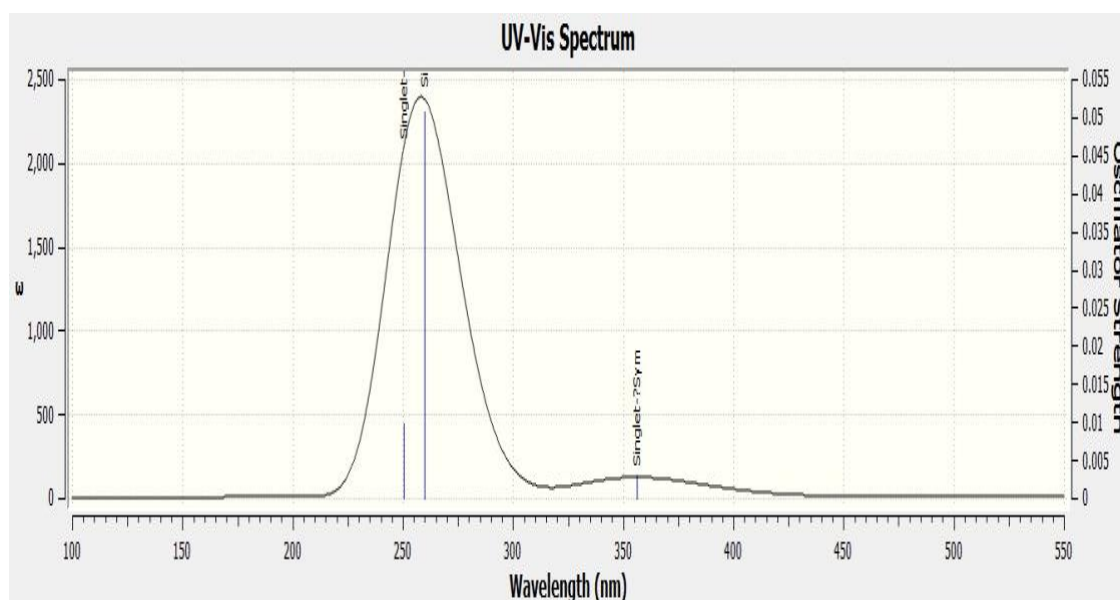
شكل (10) يوضح طيف الأشعة فوق بنفسجية لمركب الأئين مع نترات الحديد، حيث كانت أعلى امتصاصية $4632.38 \text{ nm} = \lambda_{\text{max}}$

متراكب الفينيل الأئين :-

كانت نتيجة الطاقة الترابط الداخلية الكلية للحمض الاميني (الفينيل الأئين HF = -593.834441 Hartree) و عزم قطبي Debye= 4.511294 ، و بامتصاصية UV-vis $\lambda_{max} = 259.67 \text{ nm}$



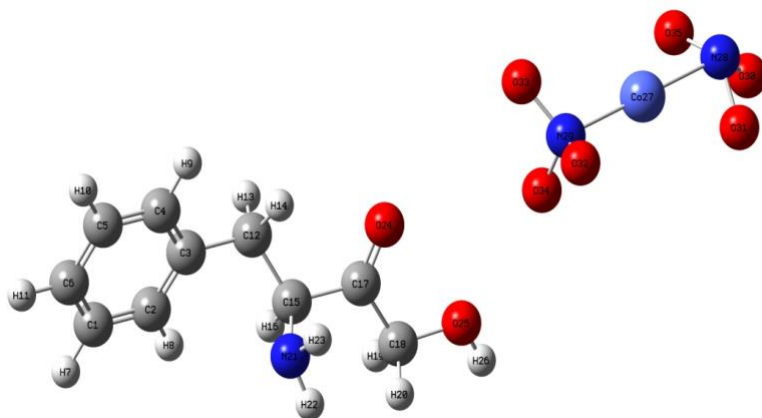
شكل (11) الصيغة الفراغية الحوسبية لمتراكب الفينيل الأئين



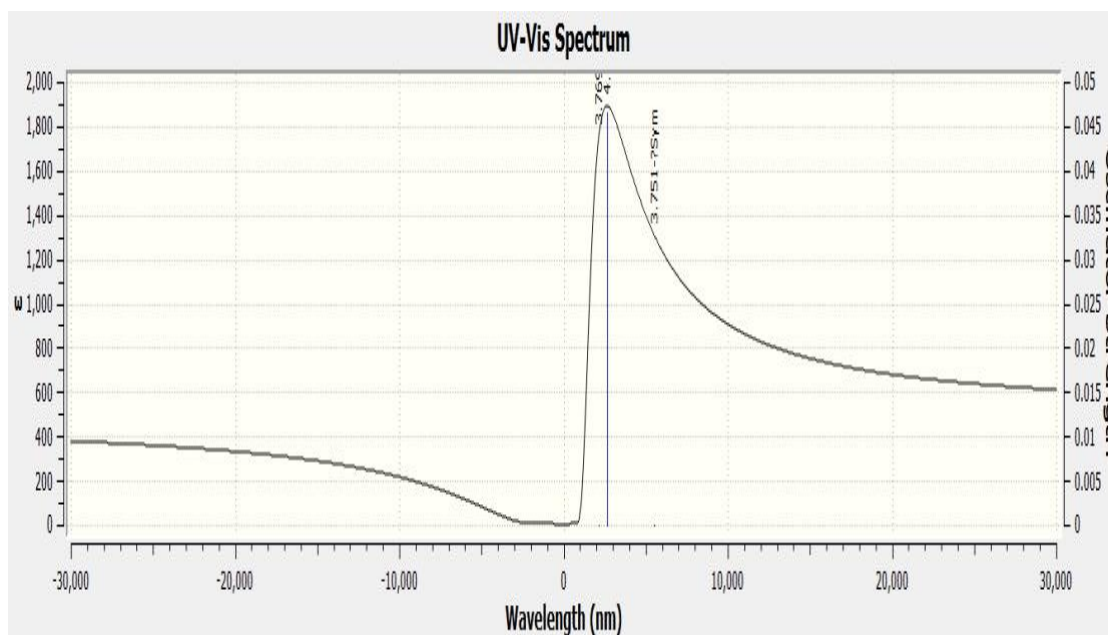
شكل (12) يوضح طيف الأشعة فوق بنفسجية لمركب الفينيل الأئين منفرد، حيث كانت أعلى امتصاصية $\lambda_{max} = 259.67 \text{ nm}$

متراكب الفينيل الأنين مع نترات الكوبالت:

و كانت النتيجة من دمج الفينيل الأنين مع نترات الكوبالت فكانت طاقتها التكوينية $HF = -1299.935189$ Hartree , و عزم قطبي $2649.87 \text{ nm} = \lambda_{\text{max}}$ Uv-vis وبامتصاصية 4.876141 Debye =



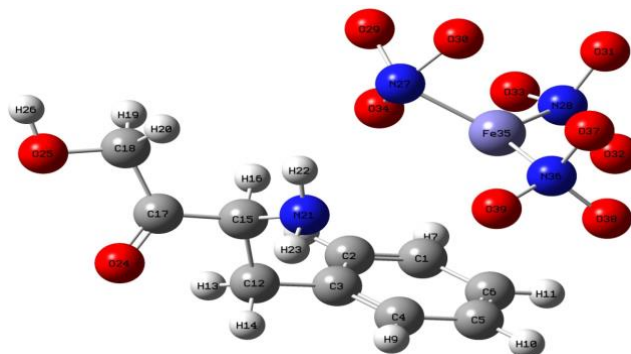
شكل (13) الصيغة الفراغية الحاسوبية لمتراكب الفينيل الأنين متداخل مع نترات الكوبالت



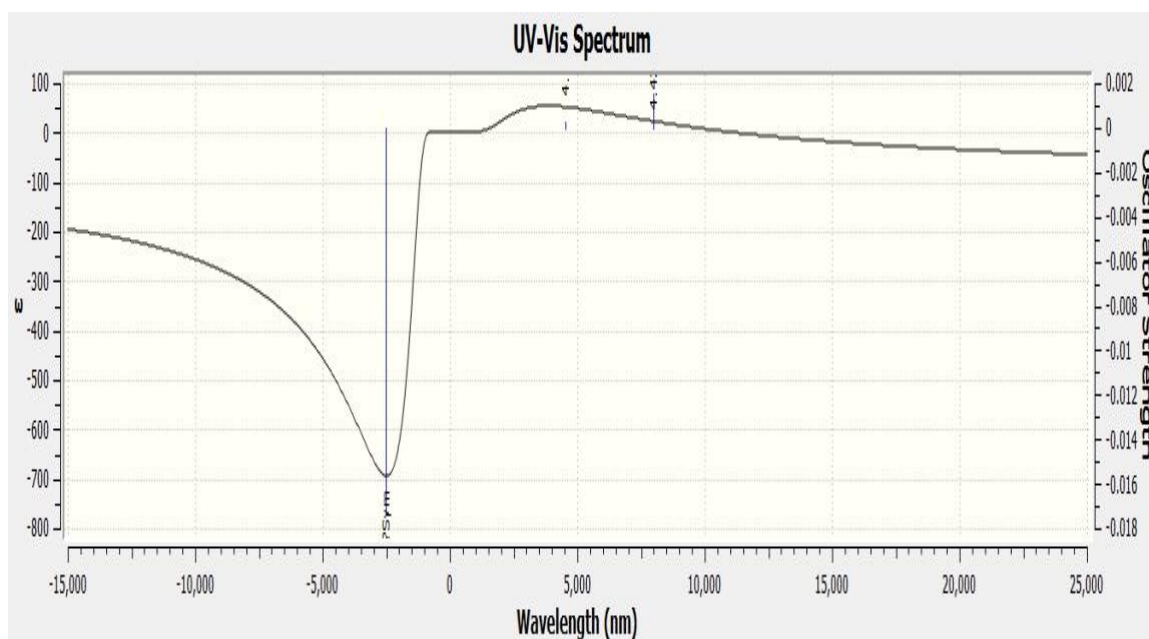
شكل (14) يوضح طيف الأشعة فوق بنفسجية لمركب الفينيل الأنين مع نترات الكوبالت، حيث كانت أعلى امتصاصية $\lambda_{\text{max}} = 2649.87 \text{ nm}$

متراكب الفينيل الأنين مع نترات الحديد:

و كانت النتيجة من دمج الفينيل الأنين مع نترات الحديد فكانت طاقتها التكوينية $HF = -1558.166039$ Hartree , و عزم قطبي 4.113103 Debye = و هذا يوضح تداخل أقوى من الحالة المنفردة للأنين، و بامتصاصية Uv-vis $\lambda_{max} = 2518.74$ nm



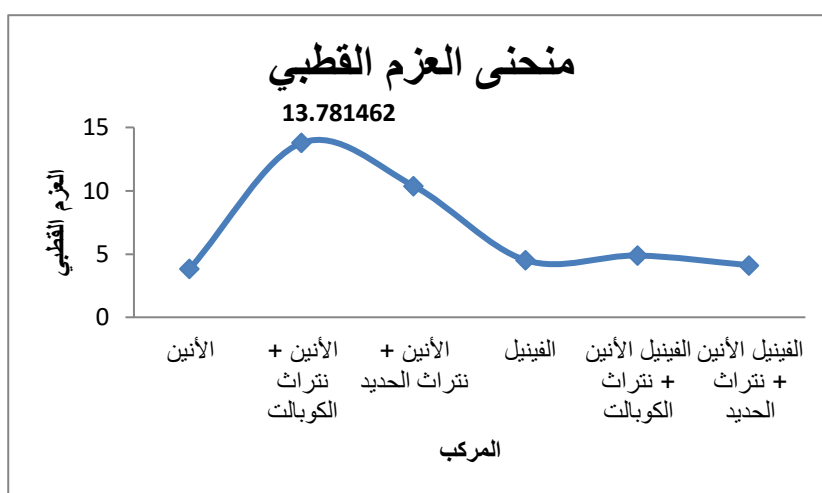
شكل (15) الصيغة الفراغية الحوسبية لمتراكب الفينيل الأنين متداخل مع نترات الحديد



شكل (16) يوضح طيف الأشعة فوق بنفسجية لمركب الفينيل الأنين مع نترات الحديد، حيث كانت أعلى امتصاصية $\lambda_{max} = 2518.74$ nm

جدول (8) يوضح قيم العزم القطبي للمركبات الأئين والفينيل الأئين منفردة ومجمعة بالتداخل مع نترات الكوبالت والحديد.

العزم القطبي Debye	المركب
3.851054	الأئين
13.781462	الأئين + نترات الكوبالت
10.372062	الأئين + نترات الحديد
4.511294	الفينيل
4.876141	الفينيل الأئين + نترات الكوبالت
4.113103	الفينيل الأئين + نترات الحديد



شكل (17): منحنى العزم القطبي للأحماض الأمينية

من المستنتج والواضح من النتائج في الجدول 8 والشكل رقم هو ان أعلى عزم قطبي بين هذه المركبات المتداخلة هو بتداخل الحمض الأميني الأئين مع نترات الكوبالت، وهذا حساباتنا الإحصائية التي أستظهرت أفضل تقارب إحصائي للنتائج العملية بين نترات الكوبالت و الحمض الأميني الأئين. وبهذا نستطيع أن نقول أن أفضل تداخل و أفضل طاقة كلية داخلية و أقوى عزم قطبي و أفضل تقارب إحصائي عملي هو للحمض الأميني الأئين متداخلاً مع نترات الكوبالت.

4 الخلاصة :

النتائج الحوسبية للأئين والفينيل الأئين تبين أن الأئين أفضل من ناحية الاستقرارية بحيث انه اقل طاقة ترابط أي أكثر استقرارية وتبات في أي وسط بيئي من حوله مقارنة بدواء الفينيل الأئين، و الضبط الإحصائي للنتائج العملية يوضح أن الأئين هو الأفضل من حيث إعطاء احتمالية أكبر للمعقدات المدرجة نترات الحديد (III) ونترات الكوبالت (III) مع الأئين من خلال توافق بين مجموع Result مع ناتج (SS) (reside) بذلك يؤكد لنا أن الأئين هو الأفضل من ناحية الاستقرارية كدواء و أعلى عزم قطبي.

5 التوصيات

1. نقل نتائج الدراسة للتطبيق المباشر.
2. دمج هذه المركبات لتكوين معقدات ذات تركيبات حيوية والاستفادة منها في مجالات بيولوجية.

3. مراسلة شركات الأحماض الأمينية بعد النشر العلمي لهذا البحث.

References

1. R. A. Harvey and D. R. Ferrier, "Lippincott's illustrated reviews: Biochemistry," 2011.
2. R. K. Murray, D. Granner, P. Mayes, and V. Rodwell, "Harper's illustrated biochemistry. A Lange medical book," Section, vol. 3, p. 254, 2003.
3. H.-D. B. W. G. P. Schieberle, Food Chemistry, 4th ed. berline: e-tex publishing services oHG, Leipzig, 2009.
4. P. Trumbo, S. Schlicker, A. A. Yates, and M. Poos, "Dietary reference intakes for energy, carbohydrate, fiber, fat, fatty acids, cholesterol, protein and amino acids," Journal of the Academy of Nutrition and Dietetics, vol. 102, p. 1621, 2002.
5. A. L. Lehninger, D. L. Nelson, M. M. Cox, and M. M. Cox, Lehninger principles of biochemistry: Macmillan, 2005.
6. R. F. Doolittle, "Redundancies in protein sequences," in prediction of protein structure and the principles of protein conformation, ed: Springer, 1989, pp. 599-623.
7. Tsuji M (2015) Homology Modeling Professional for HyperChem, revision G1, Institute of Molecular Function, Saitama, Japan.
8. Tsuji M (2015) Docking Study with HyperChem, revision G1, Institute of Molecular Function, Saitama, Japan.
9. HyperChem Professional, version 8.0.10, Hypercube, Inc., Gainesville, Florida, USA.
10. M. Tsuji, SEITAIKOUBUNNSI NIOKERU SOUGOSAYOUBUI NO YOSOKUHOHOU. 2006, Patent 2007-299125.
11. J. A. Pople, "Electron Interaction in Unsaturated Hydrocarbons," *Trans. Faraday Soc.* **49** (1953) 1375; J. A. Pople and A. Brick stock, "Resonance Energies and Charge Distributions of Unsaturated Hydrocarbon Radicals and Ions," *Trans. Faraday Soc.* **50** (1954) 901. The development of PPP was reviewed in J. A. Pople, "The Origin of PPP Theory," *Int. J. Quant. Chem.* **37** (1990) 349 and R. G. Parr, "Parr: On the Genesis of a Theory," *Int. J. Quant. Chem.* **37** (1990) 327.
12. J. A. Pople and G. A. Segal, "Approximate Self-consistent Molecular Orbital Theory III. CNDO Results for AB2 and AB3 systems," *J. Chem. Phys.* **44** (1966) 3289.
13. J. A. Pople, D. Beveridge, and P. Dobosh, "Approximate Self-consistent Molecular Orbital Theory V. Intermediate Neglect of Differential Overlap," *J. Chem. Phys.* **47** (1967) 2026.
14. J. A. Pople, D. P. Santry, and G. A. Segal. "Approximate Self-Consistent Molecular Orbital Theory .I. Invariant Procedures," *J. Chem. Phys.* **43** (1965) 129.
15. J. A. Pople, "Some Deficiencies of MINDO/3," *J. Am. Chem. Soc.* **97** (1975) 5306.
16. P. M. W. Gill, B. G. Johnson, J. A. Pople, and M. J. Frisch. "The Performance of the Becke-Lee-Yang-Parr (B-LYP) Density Functional Theory with Various Basis-Sets" *Chem. Phys. Letters* **197** (1992) 499; B. G. Johnson, P. M. W. Gill, and J. A. Pople. "The Performance of a Family of Density Functional Methods" *J. Chem. Physics* **98**(1993) 5612.

17. J. A. Pople, M. Head-Gordon, D. J. Fox, K. Raghavachari, and L. A. Curtiss. "Gaussian-1 Theory: A General Procedure for Prediction of Molecular-Energies" *J. Chem. Physics* **90** (1989) 5622.

الملحق للحوسبة الكمومية:

nprocshared=4%

.Will use up to 4 processors via shared memory

mem=1024MB%

chk=D:\Alanine_CoNO3.chk%

td b3lyp/sdd nosymm scf=qc geom=connectivity #

Title Card Required

:Symbolic Z-matrix

Charge = 0 Multiplicity = 1

C	-1.6818	-0.5571	0.5213
H	-1.7044	-0.4974	1.6099
H	-2.3403	0.2077	0.1068
H	-2.0372	-1.5414	0.2141
C	-0.2479	-0.3467	0.024
H	0.373	-1.1524	0.4176
C	0.3225	0.9908	0.502
C	1.334	0.946	1.6495
H	2.2747	0.5415	1.2773
H	0.9594	0.2823	2.4291
N	-0.2151	-0.4199	-1.4256
H	0.4272	-1.0738	-1.8493
H	-0.5134	0.3941	-1.9442
O	1.564	2.2236	2.2066
H	0.7328	2.5614	2.5481
O	-0.1335	2.0576	0.0868
N	4.7777	2.163	0.462
N	2.6785	4.5007	-0.4372
N	2.8335	1.6971	-2.1131
O	2.8042	4.9816	0.8305
O	1.3886	4.6427	-0.849
O	4.8944	0.8071	0.5047
O	4.7348	2.6549	1.7308
O	1.6064	2.0352	-2.5966

```

O      2.8801  0.3566 -1.8801
O      5.8486  2.6891 -0.1939
O      3.4996  5.197  -1.2705
O      3.7878  2.0321 -3.0247
Co     3.1725  2.6446 -0.4772
    
```

:Input orientation

```

-----
(Center Atomic Atomic Coordinates (Angstroms
 Number Number Type X Y Z
-----
0.521300 0.557100- 1.681800- 0 6 1
1.609900 0.497400- 1.704400- 0 1 2
0.106800 0.207700 2.340300- 0 1 3
0.214100 1.541400- 2.037200- 0 1 4
0.024000 0.346700- 0.247900- 0 6 5
0.417600 1.152400- 0.373000 0 1 6
0.502000 0.990800 0.322500 0 6 7
1.649500 0.946000 1.334000 0 6 8
1.277300 0.541500 2.274700 0 1 9
2.429100 0.282300 0.959400 0 1 10
1.425600- 0.419900- 0.215100- 0 7 11
1.849300- 1.073800- 0.427200 0 1 12
1.944200- 0.394100 0.513400- 0 1 13
2.206600 2.223600 1.564000 0 8 14
2.548100 2.561400 0.732800 0 1 15
0.086800 2.057600 0.133500- 0 8 16
0.462000 2.163000 4.777700 0 7 17
0.437200- 4.500700 2.678500 0 7 18
2.113100- 1.697100 2.833500 0 7 19
0.830500 4.981600 2.804200 0 8 20
0.849000- 4.642700 1.388600 0 8 21
0.504700 0.807100 4.894400 0 8 22
1.730800 2.654900 4.734800 0 8 23
2.596600- 2.035200 1.606400 0 8 24
1.880100- 0.356600 2.880100 0 8 25
0.193900- 2.689100 5.848600 0 8 26
1.270500- 5.197000 3.499600 0 8 27
    
```

3.024700- 2.032100 3.787800 0 8 28
0.477200- 2.644600 3.172500 0 27 29

td b3lyp/sdd nosymm scf=qc geom=connectivity||Title Card Req #||0|2022
-uired||0,1|C,0,-1.6818,-0.5571,0.5213|H,0,-1.7044,-0.4974,1.6099|H,0
||Version=IA32W-G
@||[(RevD.01|HF= -1349.086914|RMSD=0.000e+000|PG=C01 [X(C4H9Co1N4O1109