سیویلیکا - ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:
سنتز و مطالعهی ساختاری ترکیب جدید تیوفسفرآمید به کمک بلورنگاری پراش پرتوی ایکس و ارزیابی توانایی بازدارندگی آن در مقابل ویروس کرونا با روش داکینگ مولکولی

محل انتشار:
پنجمین کنگره ملی شیمی و نانو شیمی از پژوهش تا توسعه ملی (سال: 1401)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسندگان:
سمانه پیشگو - *دانشجوی دکتری شیمی معدنی دانشگاه سمنان، سمنان، ایران*

عاتکه سادات ترحمی - *استادیاردانشکده شیمی، دانشگاه سمنان، سمنان، ایران*

آری وان درلی - *موسسه غشایی اروپا، دانشگاه مونپلیه، مونپلیه، فرانسه*

خلاصه مقاله:
در کار حاضر، سنتز و شناسایی یک ترکیب جدید تیوفسفرآمیدی [OC۴H۸N]۳P═S بررسی میشود. ساختاربلوری این ترکیب در دمای ۲۹۳ کلوین تعیین شده است و ترکیب مورد مطالعه در سیستم بلوری منوکلینیک با گروه فضایی P۲۱/n و پارامترهای سلول واحد Å a = ۸/۵۹۶۷ (۲) ، b = ۱۴/۸۶۷۵ (۳)، c = ۱۲/۳۴۰۷ (۳) و β = ۱۰۱/۵۳۴(۲)° متبلور شده است. واحد بی تقارن شامل یک مولکول تیوفسفرآمید کامل است. در این ساختار، اتم فسفر دارای آرایش چهاروجهی انحراف یافته در محیط P[S][N(۳)] است. مجموع زوایای پیوندیاطراف اتم های نیتروژن با مقدار میانگین حدود ° ۳۴۹ انحراف از حالت مسطح را برای اتمهای نیتروژن نشانمی دهند. حلقه های شش عضوی مورفولین فرم صندلی را اتخاذ کردهاند. در ساختار بلوری این ترکیب که فاقدگروه دهنده پیوند هیدروژنی N-H است، هیچ پیوند هیدروژنی نرمالی دیده نمیشود. همچنین، مطالعه داکینگ مولکولی نشان میدهد که این ترکیب با انرژی اتصال حدود ۵ کیلوکالری بر مول می تواند به عنوان بازدارندهی ویروس کرونا معرفی شود.

کلمات کلیدی:
ساختار بلوری، تیوفسفرآمید، واحد بیتقارن، داکینگ مولکولی، بازدارندهی ویروس کرونا

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/1496218