



تتشرف كلية الدراسات العليا و كلية العلوم بدعوتكم لحضور

**مناقشة رسالة الماجستير**

العنوان

المؤشرات الطوبولوجية وتطبيقاتها في تصميم الأدوية

للطالبة

فداء اسماعيل ابو نوى

المشرف

د. محمد عمران، قسم علوم الرياضيات

كلية العلوم

المكان والزمان

11:00 صباحاً

الأربعاء، 5 يونيو 2024

F1-2022

Zoom link

<https://uae-u.ac-ae.zoom.us/j/89351402328?pwd=OsX62EEGesojrGXxMjaDdYWnLo74au.1>

الملخص

يبحث هذا البحث في استخدام المؤشرات في مجال تصميم الأدوية مع التركيز بشكل خاص على الأدوية المضادة للسرطان. المؤشرات الطوبولوجية، وهي قيم مستمدة من تمثيلات الهياكل الكيميائية، توفر روابط ذات مغزى للخصائص الفيزيائية والكيميائية للجزيئات. تعمل هذه المؤشرات كأدوات لتوقع السلوك، وتلعب دوراً حيوياً في صياغة الأدوية العلاجية. تتناول الدراسة بشكل أساسي المؤشرات الطوبولوجية مثل مؤشر سومبور، مؤشر رانديك، ومؤشر اتصال الذرة والرابطة. يتم حساب هذه المؤشرات للهياكل ويتم استكشاف علاقاتها مع الخصائص الفيزيائية مثل الحجم الجزيئي، معامل الانكسار، ونقطة الوميض باستخدام طرق إحصائية مثل الانحدار الخطي وتحليل الارتباط. تكشف الاكتشافات البارزة من هذا التحقيق أن المؤشرات الطوبولوجية يمكنها التنبؤ بدقة بخصائص الأدوية المضادة للسرطان، مما يساعد في تحسين هياكلها لزيادة الفعالية العلاجية.

لا تؤكد هذه الرسالة فقط على جوانب هذه المؤشرات، بل تعرض أيضاً فائدتها العملية في العلوم الصيدلانية من خلال تقديم رؤى جديدة في تصميم وتحليل جزيئات الأدوية. باختصار، يضيف هذا البحث إلى مجال الكيمياء من خلال تقديم دراسة متعمقة لكيفية استخدام المؤشرات الطوبولوجية للتنبؤ والتحكم في الصفات الفيزيائية والكيميائية للمركبات الكيميائية لتطوير الأدوية المستهدفة.

**كلمات البحث الرئيسية:** المؤشر الطوبولوجي، مؤشر سومبور؛ تصميم الأدوية