تتشرف كلية الدراسات العليا و كلية الهندسة بدعوتكم لحضور

مناقشة رسالة الماجستير

العنوان

المعلمات الحركية الحرارية التي تحكم تحلل الأحماض الأمينية: دراسة حسابية

للطالب

مبارك طالب الكوردي

المشرف

د. محمد نور الطراونة، قسم الهندسة الكيميائية

كلية الهندسة

المكان والزمان

29 نوفمبر 2023

10:00 صباحاً

F3-132

الملخص

تعد مركبات نموذج الأحماض الأمينية من الأنواع النيتروجينية المهمة الموجودة في فئات مختلفة من الكتلة الحيوية. تظهر هذه المركبات مسارات تجزئة فريدة بسبب مجموعات الأمينو والهيدروكسيل المجاورة لها. يعد فهم كيمياء تحلل الأحماض الأمينية أمرًا ضروريًا لتقليل انبعاثات النيتروجين الضارة أثناء المعالجة الحرارية للكتلة الحيوية. يورد هذا البحث الخصائص الحركية والديناميكية الحرارية للأحماض الأمينية، والأحماض الأمينية المحتوية على الكبريت، بناءً على حسابات نظرية وظيفية دقيقة للكثافة مقترنة بالنمذجة الحركية. يوفر الجزء الأول من الأطروحة معلمات كيميائية حرارية شاملة للمجموعة الكاملة من الأحماض الأمينية في الطور الغازي. تعرض الأشكال الهندسية المحسنة لمركبات الأحماض الأمينية أوجه التشابه والاختلافات الملحوظة، والتي تعتمد على الحمض الأميني الفردي والبيئة الذرية المحيطة به. عبر معظم الأحماض الأمينية، يحافظ العمود الفقري، والذي يتضمن المجموعة الأمينية (-NH2)، ومجموعة الكربوكسيل (-COOH)، والكربون ألفا، بشكل عام على هندسة متسقة. تم استخدام التفاعلات المتساوية لحساب المحتوى الحراري القياسي لتكوين الأحماض الأمينية في الطور الغازي؛ ΔfHo298 لجميع انشطارات السندات (BDHs) H-X (X = C) وO وN وS) المعقولة للمجموعة الكاملة من الأحماض الأمينية. لقد وجد أن انشطار روابط α C-H في هذه المركبات يستلزم بشكل منهجي قيمة BDH أقل مقارنة بالروابط الأخرى. تم التعامل مع الدورات الداخلية في هذه المركبات على أنها دوارات معاقة في حسابات الإنتروبيا القياسية والسعات الحرارية. تكشف مقارنة قيم ΔfHo298 مع قيم الأدبيات المحدودة المتوفرة عن وجود اتفاق معقول. يستتبع الجزء الثاني من الأطروحة توفير مجموعة بيانات شاملة من المعلمات الحركية لاستخراج H بواسطة الجذور المهمة من جميع المواقع المعقولة القابلة للتجريد في المجموعة الكاملة من الأحماض الأمينية. وتشمل الجذور النظر H، CH3، NH2، OH، HO2، وHS؛ الجذور الأكثر انتشارا تحت ظروف الانحلال الحراري والأكسدة. تصور معلمات Arrhenius المحسوبة ونسب التفرع المرسومة اتجاهًا مشابهًا فيما يتعلق بتفضيل التجريد من مواقع α CH بواسطة الجذور الستة. لهذا السبب، قمنا بحساب المعلمات الحركية لطرح H من α C-H في الأحماض الأمينية الأخرى (الجليسين، الليوسين، البرولين، الفينيل ألانين، التربتوفان، التيروزين، السيرين، الثريونين والأسباراجين). تدرس الدراسة أيضًا التأثيرات الفردية للبدائل المختلفة (COOH، NH2، H2S، وCH2) وتكشف عن رؤى مهمة. والجدير بالذكر أن وجود مجموعة COOH يقدم تأثيرات قطبية تعمل بشكل مضاد على إلغاء تنشيط مسار التجريد α المفضل للديناميكا الحرارية. الجزء الأخير من الأطروحة يستكشف بالتفصيل آليات التحلل الأمينية Serine (Ser) التي يتم حساب المعلمات الحركية الحرارية لمجموعة كبيرة من التفاعلات والأنواع المعنية في كل من الغاز والوسائط المكثفة. يتم التحكم في التحلل الأولي للسير فقط عن طريق قناة الجفاف التي تؤدي إلى تكوين جزيء ديهيدرولانين. من المحتمل أن تكون طرق نزع الكربوكسيل وإزالة الرطوبة ذات أهمية ضئيلة. تمتد نافذة السقوط لقناة الجفاف حتى الضغط الجوي. تحاكي التفاعلات الجزيئية بين مركبين من تفاعلات الارتباط المتبادل التي تمت مناقشتها على نطاق واسع والتي تسود في الوسط المكثف. لقد ثبت أن تكوين المنتجات الرئيسية التي تمت ملاحظتها تجريبيًا (NH3 وCO2 وCO) قد ينشأ من انشطارات الرابطة المباشرة في الطور الذائب لـ Ser قبل التبخر. يمثل النموذج الحركي المبني (الذي يحتوي على 24 تفاعلًا) الخطوات الأساسية في تحلل جزيء Ser في الطور الغازي. بشكل عام، يجب أن توفر النتائج المقدمة هنا نظرة ثاقبة ذرية لكيمياء تحويل النيتروجين المعقدة للغاية ذات الصلة بالأحماض الأمينية في التطبيقات الإستراتيجية ذات الصلة بالمجالات الحرارية والبيولوجية.

مفاهيم البحث الرئيسية: أحماض أمينية؛ الكتلة الحيوية؛ DFT؛ الكيمياء الحرارية؛ مؤشرات أرهينيوس؛ الآليات