چکیده

رباینده های شیمیایی بر پایه بتا سیکلودکسترین و مشتقات آن نتایج امیدوارکننده‌ای در سم‌زدایی عوامل عصبی از خود نشان داده اند. به دلیل سمیت بسیار بالای این عوامل و مهم تر از آن مقررات تحت کنوانسیون سلاح های شیمیایی (CWC)، روش های نظری به عنوان ابزاری قدرتمند برای درک مکانیسم رباییش، هیدرولیز و حذف سمیت اهمیت فوق العاده ای یافته است.

در این رساله، کمپلکس های درون گیر میزبان-میهمان بتا سیکلودکسترین (β-CD) و متیل بتا سیکلودکسترین (M-β-CD) با برخی عوامل عصبی ارگانوفسفات به وسیله ی محاسبات مکانیک کوانتومی (QM) و شبیه سازی های دینامیک مولکولی (MD) بررسی شده است. مکانیسم اتصال و برهمکنش های بین β-CD و M-β-CD میزبان و عوامل عصبی میهمان با روش های نظریه تابعی چگالی (DFT) در دو فاز گازی و حلال آب ارزیابی شده است. برای توصیف پارامترهای واکنش پذیری و ویژگی های الکترونی، اوربیتال های مولکولی مرزی (FMOs) و پتانسیل الکترواستاتیک مولکولی (MESP) آنالیز گردیده است. برای درک برهمکنش های غیرکووالانسی از روش اوربیتال پیوندی طبیعی (NBO) و نظریه کوانتومی اتم ها در مولکول ها (QTAIM) استفاده شده است. طیف سنجی های مادون قرمز و رامان برای تأیید تشکیل کمپلکس ها محاسبه و همچنین پارامترهای ترمودینامیکی با انجام محاسبات فرکانس در شرایط استاندارد مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج نشان می دهد که کمپلکس های پایداری در هر دو فاز مورد مطالعه تشکیل شده است و برهمکنش های واندروالس و پیوندهای هیدروژنی بین مولکولی با فراهم کردن موجبات استقرار ساختار عوامل عصبی در حفره مولکول میزبان بر خروج گروه ترک کننده و سم زدایی از ساختار میهمان تأثیر گذار است. علاوه براین، شبیه سازی های دینامیک مولکولی برای تعیین رفتار دینامیکی، ساختار مولکولی و میل اتصال در کمپلکس های میزبان-میهمان در سه مرحله ی پیش تعادل، تعادل و تولید انجام گرفته است. پارامترهای ساختاری و دینامیکی نشان می دهند که برهمکنش های اجزای میزبان با گروه ترک کننده عوامل اعصاب در هیدرولیز عوامل و در نتیجه در سم زدایی آنها مؤثر است.