

<p>(١١) رقم البراءة : ٨٢٧٣</p> <p>(٥١) التصنيف الدولي: C07C29/151</p> <p>(٥٢) التصنيف المحلي : ٦</p>	<p>(١٩) الجهاز المركزي للتقييس والسيطرة النوعية رئاسة الجهاز مديرية براءات الاختراع والنماذج الصناعية القسم: الاداري – شعبة التوثيق والاستثمار</p> <p>(١٢) براءة اختراع</p>
<p>(٢١) رقم طلب البراءة : IQ/00230518</p> <p>(٢٢) تاريخ التقديم : ٢٠٢٣/٩/٣</p> <p>(٤٥) تاريخ المنح : ٢٠٢٤/٥/١٢</p>	<p>(٧٢) اسم المخترع وعنوانه: د. أياد وجيه رؤوف جامعة بغداد / كلية العلوم / قسم علوم الحياة م.م. نوره عبد الكريم محمد سعيد جامعة بغداد / كلية العلوم للبنات / قسم علوم الحياة الصيدلاني اختصاص صباح جواد صالح محافظة بغداد / حي الخليج / م ٧١١ / ز ١ / د ٣١/٢ ا.م. مصطفى عبد الخالق محمد الطائي جامعة بغداد / كلية العلوم / قسم علوم الحياة</p>
<p>(٣٠) الاسبقية : الرقم : - التاريخ : - البلد : -</p>	<p>(٧٣) اسم صاحب البراءة وعنوانه : الذوات اعلاه</p> <p>(٧٤) اسم الوكيل وعنوانه :</p>
<p>(٥٤) عنوان الاختراع: تحضير مركب جديد لتثبيط COVID-19 عن طريق الارتباط بمستقبل ACE2 (In silico).</p>	
<p>(٥٧) الملخص :</p> <p>نظرًا للمخاطر الكبيرة المحتملة لـ COVID 19 ، تم إجراء العديد من الأبحاث في السنوات الأخيرة لاكتشاف وتقديم COVID 19 الأدوية المضادة للفيروسات. وقد أثبتت دراسات عديدة أن مثبطات الأنزيم البروتيني يمكن أن تكون فعالة بشكل خاص في منع العدوى التي يسببها الفيروس. علىية فقد كانت الفكرة الجديدة هي زيادة فعالية مركب الثيمول بتركيز ٢٢,٨٢ mmol من خلال دمج جزيئتين منه بواسطة مركب استر للحصول على مركب جديد $C_{25}H_{33}NO_4$ يعمل على الارتباط بمستقبل ACE2 الموجود على السطح الخارجي للفايروس COVID 19 . لقد تم استخدام تقنية HPLC لتأكيد نقاوة وفي وتوصيف المركب الجديد ، وقد تم دراسة السمية الحادة للمنتج الجديد (مشتق الثيمول) (LD50) . كما تمت دراسة الفعالية البايولوجية للمركب الجيد ضد الفايروس COVID 19 النظرية والحاسوبية من خلال برنامج الـ Docking و Molinspiration . ونتيجة لذلك، فقد كانت المركب الجديد (مشتقات الثيمول) فعال جدا مقارنة بـ Favipiravir (وهو عقار مضاد للفيروسات معروف جيدًا يستخدم ضد كوفيد -١٩). لقد اظهرت نتيجة تحليل البيانات باستخدام Molinspiration ان المركب الجديد له إمكانيه أكبر للارتباط بمستقبلات البروتين والتي تؤدي الى تثبيط فعالية الفايروس، والتي كانت حوالي ٠,٠٧ وقد اكد الدراسات التي أجريت باستخدام برنامج الـ Docking أن المركب الجديد لديه ألفة ارتباط أكبر مع مستقبل المضيف ACE2 وكانت نسبة الارتباط -٩,٠٠ اما نسبة ارتباطه مع مستقبل مثبط البروتين حوالي -١٠,٧ وان قيمة الجرعة المميتة (LD50) الثيمول الجديد كانت ١٠٠٠ مجم / كجم مقارنة مع الثيمول النقي التي كانت حوالي ٦٤٠ مجم / كجم, مما يدل على قلة سمية.</p>	