**المستخلص عربي :**

احتوى الفصل الأول على مسح شامل للدراسات النظرية والعملية المتعلقة بتركيب مركبات الكاتيكول أمين التي نشرت في الدوريات والمراجع العلمية ، ويحتوي الفصل الثاني على الملخص للأساس النظري لطرق الحسابات الكمية التي استخدمها فريق البحث في دراسة هذه المركبات ، حيث تضمن هذا الفصل على شرح لطرق AMI, CI, MNDO, Mo يحتوي الفصل الثالث على شرح للجزء العلمي وكذلك على أهداف البحث والخطة العامة المستخدمة لإنجاز المشروع . أما الفصل الرابع فيحتوي على حسابات تبين الشكل الفراغي الأمثل لبعض مركبات الكاتيكول أمين وهي Apinephrine. Norpinephrine Dopa. بالإضافة إلى ذلك فإن الفصل الرابع يحتوي على التتبع النظري لتفاعل التحول الحيوي لمركبات الثيروسين إلى هرمونات الكاتيكول أمين ، وتم حساب وتحليل التغيرات المصاحبة في الطاقة ، كما احتوى هذا الفصل على دراسة تعيين قابلية اكتساب البروتون لأيونات هرمونات كاتيكول أمين . وقد تمت دراسة تأثير طاقة التيار الإلكتروني بإجراء حسابات مطولة ، كما حساب ودراسة إمكانية تكوين مزدوج Zwitterion أما الفصل الخامس فهو تسجيل طيف امتصاص وطيف الانبعاث للأشعة فوق البنفسدية لهذه المركبات في المحلول المائي . ويحتوي الفصل السادس على تسجيل طيف الأشعة تحت الحمراء لهذه المركبات في ظروف فصل عالية . ويحتوي الفصل السابع على النتائج المتحصل عليها لطيف الرنين النووي المغناطيسي لنواتي 13c,ih لهذه المركبات ، وقد تم استخدام تجربة تبادل الديوتيريم مع البوتون من أجل الحصول على تفسير واضح لخطوط مجموعات NH2.OH في هذه المركبات ، وفي الفصل الثمن تم ربط النتائج المتحصل عليها بالنشاط الحيوي لمركبات أمينات الكاتيكول .

في هذا البحث تم الحصول على جميع الخواص الاكترونية للحالة المستقرة لبعض مركبات الكاتيكول أمين ، كما تم تعيين الطاقة اللازمة لنزع بروتون من هذه المركبات ، كما تظهر مركب الدوبامين أقل ثبات ديناميكية حراري بين مركبات الأمين الأخرى .

**Abstract:**

Contains the first chapter to a comprehensive survey of theoretical studies and practical for the installation of compounds catechol Secretary, published in journals and scientific literature, and Chapter II contains a summary of the theoretical basis for the methods of the accounts the amount used by the research team to study these compounds, where this chapter included a description of the methods of AMI, CI , MNDO, Mo Chapter III contains an explanation of the scientific part as well as the research objectives and the general plan used to complete the project. The fourth chapter contains the accounts of the figure shows the spatial optimal for some compounds is catechol Secretary Apinephrine. Norpinephrine Dopa. In addition, Chapter IV contains the theoretical trace for the interaction of biological transformation of compounds catechol hormones Iiirosen to Amin, were calculated and analysis of the accompanying changes in energy, as this chapter contains a study determine the usability of the acquisition of proton ions Secretary of catechol hormones. Has been studied the impact of current energy-mail accounts to conduct lengthy, and calculate and study the possibility to configure a dual Zwitterion In the fifth chapter is a nice recording absorption and emission spectrum of UV Abannvsudaih of these compounds in aqueous solution. Chapter VI contains the registration of the infrared spectrum of these compounds in conditions of high season. Chapter VII contains the results obtained for the spectrum of nuclear magnetic resonance of the cores 13c, ih of these compounds, have been using the experience of sharing Aldiotiram with Alboton in order to obtain a clear explanation of the lines of groups NH2.OH in these compounds, and in Chapter price was linked to the results obtained by the activity vital compounds catechol amines.

In this research were obtained on all the electronic properties of the situation stable for some compounds catechol Amin, has been appointed as the energy required to remove the proton of these compounds, a compound of dopamine also appear less dynamic thermal stability of the Secretary of other vehicles.