1,2,4تريازين: التوليف، والتوصيف، والنشاط المضاد للسرطان، وDFT، ودراسات الالتحام الجزيئي باستخدام مستقبل بروتين كوفيد-19

2022/5/16

الملخص العربي:

فى هذا البحث تم تحضير ليجاند مشتق من تفاعل 5- (4-أيزوبوتيل فينيل) - [1،2،4] تريازين-3-يل هيدرازين مع البنزالديهايد ثم تكوين معقدات من عناصر الكوبلت، النيكل والنحاس. تم إثبات بنية هذه المعقدات من خلال التحليل الطيفي للأشعة تحت الحمراء والرنين النووي المغناطيسي للبروتون ^{1}HNMR، وتحليل العناصرCHN، وقياس العزم المغناطيسي، والتوصيلية الكهربية، وقياس الطيف الكتلي. اثبتت التوصيلية الكهربية أن المعقدات تتميز بطبيعة الكترولاتية حيث يتراوح قيم التوصيلية من 150-165 $\Omega^{-1}mol^{-1}cm^{-2}$. اثبتت التحاليل الطيفية أن الليجاند يرتبط بالعناصر من خلال ذرتي نيتروجين بنسبة (1عنصر:2ليجاند). اثبت التحليل الحراري (TGA-DTG) أن هناك جزيئين ماء مرتبطين بالعناصر المعدنية. تشير البيانات التي تم الحصول عليها أن الشكل الهندسي المتوقع للمعقدات هو ثماني الأوجه.

تم دراسة النشاط المضاد للسرطان للمركبات ضد خلايا سرطان الثدي (خلايا Mcf7). تم تقييم النشاط المضاد للميكروبات لليجاند ومعقداته ضد أنواع مختلفة من البكتيريا. تم دراسة حسابات تحليل الإرساء (Docking) لمعرفة طاقة ربط المركبات مع البروتينات التي تحتوي على مستقبلات إنزيم الأكسدة لسرطان الثدي (PDB:3HB5) وتلك الخاصة بفيروس كوفيد-19 (PDB ID: 6LU7)،و بروتين البكتريا الموجبة S. aureus (PDB ID: 3q8u) و بروتين البكتريا السالبةE. Coli (PDB ID: 1fj4). تم استخدام حسابات DFT لتأكيد الهندسة الجزيئية للمعقدات الجديدة. اثبتت الدراسات ان متراكب النحاس أكثرالمركبات فاعلية كمضادات للميكروبات . وقد لوحظ أن مركب النحاس له تأثير أقوى كمضاد للسرطان من بقية المتراكبات في الدراسة الحالية. لقد حقق قيمة IC_{50} مساوية 23 ملجم مل$^{-1}$ ضد سرطان خلايا الثدي مقارنة بالمعقدات الأخرى.