البحث الثالث

متراكبات معدنية انتقالية جديدة من 1-فينيل-2-((كينولين- 2-يلميثيلين) أمينو)إيثانول ، تحليل سطح هيرشفيلد، دراسات DFTقاعدة شيف: تحليل طيفي، أشعة سينية، الالتحام البيولوجي والجزيئي

2022/6/9

الملخص العربي:

تعتبر قواعد شيف من المركبات العضوية الحيوية التي لها القدرة على تكوين متراكبات مستقرة مع العناصر الانتقالية التي بدورها لها نشلطية حيوية عالية ضد العديد من البكتريا. أيضا متراكبات العناصر الانتقالية لها دوراً حيوياً في الارتباط بالحمض النووي مما يقلل من انتشار الخلايا السرطانية. لذلك في هذا البحث تم تحضير قاعدة شيف جديدة مكونة من فينايل ايثانول امين و كينولين-2-كربوكسالدهيد ثم تكوين متراكبات مع عناصر المنجنيز، الكوبلت، النيكل، النحاس، الزنك، البلاديوم. تم دراسة البنية الهيكلية لهذه المتراكبات باستخدام عدة تحاليل مثل: التحليل العنصري CHN، و طيف الاشعة تحت الحمراء FTIR، و الرنين النووي المغناطيسي للبروتون ^{1}HNMR، ومطياف الكتلةMass spectrometry ،و التوصيلية الكهربية والمغناطيسية، و الرنين البارامغناطيسي للإلكترونEPR, و التحليل الحراري (TGA, DTG). تمت دراسة مفصلة للبنية الهيكلية لليجاند ومتراكب الكوبلت باستخدام الأشعة السينية للبلورة الواحدة (single crystal x-ray). اظهرت النتائج ان الليجاند يعمل كرابط ثلاثي العطاء في جميع المتراكبات ليعطي شكلاً ثماني الأوجه ما عدا متراكب البلاديوم الذي ارتبط بالليجاند من خلال ذرتي النيتروجين والاكسجين وايضاً ذرتي كلور ليعطي شكلاً مربعاً مستوياً. أثبتت الدراسة ان الصيغة العامة للمتراكبات هي $[M(HL)_2]X_2$ حيث أن:

(M= Mn, Co, Ni, Cu, Zn; X= ClO_4, CF_3SO_3 or NO_3)

, بينما الصيغة العامة لمتراكب البلاديوم هي $[Pd(HL)Cl_2]$.

تم دراسة النشاطية البيولوجية ضد انواع مختلفة من البكتريا الموجبة والسالبة وايضا الفطريات. أيضاً تم دراسة ترابط هذه المتراكبات مع الحمض النووي باستخدام المعايرة الطيفية (UV-Vis)، قياسات اللزوجة والتحليل الكهربائي لجل الأجاروز الذي اثبت تفاعل المتراكبات مع DNA من نوع الربط الداخلي.

اجريت دراسة نظرية دالة الكثافة DFT وذلك لحساب خصائص الشكل الهيكلي و الخواص التفاعلية للمركبات. تم استخدام دراسة هيرشفيلد السطحية على كريستالات الليجاند ومتراكب الكوبلت لحساب خصائص سطح المركبات. اظهرت حسابات تحليل الإرساء (Docking) باستخدام (PDB ID: 1BNA) تناسقاً مع النتائج التجريبية. وبشكل عام اثبتت النمذجة الحسابية مع دراسة النشاط البيولوجي ان هذه المركبات لها نشاط بيولوجي ملحوظ ضد انواع مختلفة من البكتريا والتي بدورها يمكن استخدامها كعوامل علاجية وبالأخص متراكب الكوبلت الذي تفوق على الأمبيسيلين كمضاد للبكتريا والنيستاتين كمضاد للفطريات.