البحث الخامس

تفاعلات مجموعة الكربونيل المعدنية VIB مع اثنين من قاعدة شيف الحلقية الكبيرة الصلبة الجديدة المتضمنة مجموعة أكريدين.

2023/6/28

الملخص العربي:

فى هذا البحث تم تحضير اثنين من روابط قاعدة شيف الصلبة الحلقية الكبيرة التي تتضمن مجموعة أكريدين. تم تحضير ليجاند 1 من تفاعل 3,6-ثنائي أمينو أكريدين و 2-هيدروكسي نفثالدهيد، بينما ليجاند 2 تم تحضيره من تفاعل 3,6-ثنائي أمينو أكريدين مع كينولين-2-كربوكسالدهيد. تم تحضير متراكبات مختلفة من تفاعل L1, L2 مع مجموعة الكربونيل المعدنية VIB (Cr, Mo, W). تم توصيف الموانح والمتراكبات باستخدام: التحليل العنصريCHN ،و مطياف الكتلة، والرنين النووي المغناطيسي ^{1}HNMR، وقياس المغناطيسية، والتحليل الحراري (TGA, DTG)، وطيف الأشعة تحت الحمراء FTIR.

تم اثبات الشكل الفراغي لليجاند 1 باستخدام الأشعة السينية أحادية البلورة (X-ray single crystal). اثبتت الأشعة السينية وجود خمسة جزيئات ماء في بلورة الليجاند. ومن المثير للاهتمام أن L1 تواجد على شكل زويتيرأيون مزدوج، حيث انتقل هيدروجين مجموعة الهيدروكسيل من الهيدروكسي نفثالين إلى نيتروجين الآزوميثين لتكوين شقوق NH^+ وO^- مع وجود روابط هيدروجينية بينهما.

وكشفت التحاليل الطيفية أن المتراكبات تشكلت على شكل مشتقات أوكسو ذات سمات هيكلية فريدة. اثبت التحليل الحراري الوزني وجود ثنائي ميثيل الفورماميد (DMF) كجزئ رابط لتصبح الصيغة العامة لمتراكبات المولبيدنم والتنجستن [M(L)(O)$_3$DMF]، بينما الصيغة العامة لمتراكب الكروم [Cr(L)(O)$_2$DMF].

ايضا قمنا بدراسة هيرشفيلد السطحية على بلورة ليجاند 1. تم فحص قدرة هذه المركبات على الربط مع الحمض النووي باستخدام المعايرة الطيفية (UV-Vis) ، مطيافية الانبعاث (Fluorescence quenching)، وقياسات اللزوجة. تم التوصل إلى أن طريقة ارتباط المتراكبات مع الحمض النووي هو الربط الكهروستاتيكي وليس الربط الداخلي. تم دراسة خصائص المركبات كمضاد للميكروبات ومضادات الأكسدة. وقد وجد أن متراكبات الكروم والمولبيدنم مع ليجاند L1 لها خصائص مضادة للأكسدة قوية وأقل قيم IC_{50} مقارنة ببقية المتراكبات (17.75 و 13.81 ميكرومتر، على التوالي). تمت دراسة حساب تحليل الإرساء (Docking) لـ L1 ومتراكباته على ثلاثة مستقبلات جزيئية كبيرة (PDB: 4BJP, 1BQB1, 1BNA) . اثبتت الدراسات النظرية أن مشتق المولبيدنم مع ليجاند 1 أظهر أعلى درجة ربط تجاه الحمض النووي بقيمة -8.40 كيلو كالوري/مول. تتوافق هذه النتيجة مع الدراسات البيولوجية المذكورة أعلاه، مثل ربط الحمض النووي، ومطيافية الانبعاث ، واختبارات اللزوجة.