البحث السادس (رقم 39 في قائمة البحوث الكلية)

Title	التصميم، والحسابات الكم الكيميائية، وتقييم ثنائي كربونيتيريل أحادي وثنائي بيريدين كعوامل مضادة للتكاثر
Authors	**Wael Abdelgayed Ahmed Arafa** and Modather F. Hussein
Journal (Year)	Chinese Journal of Chemistry (2020)
Pages, Volume(issue)	501— 508, 38(5)
Date of publication	04 February 2020
ISSN	Online ISSN:1614-7065
DOI	https://doi.org/10.1002/cjoc.201900494

من خلال هذا البحث تم التوصل الي طريقة بسيطة ذات كفاءة عالية لتحضير سلسلة جديدة من مشتقات البيريدين احادية و ثنائية النواة و ذلك من تفاعل العديد من الكيتونات و رباعي سيانيد الإيثيلين و في وجود بعض من مصادر حمض الهيدروكلوريك. تم هذا التفاعل بكل سلاسة و بحصيلة تفاعلية عالية تصل في بعض المشتقات الي 99% و ذلك عند تعرض المتفاعلات لاشعة الموجات فوق الصوتية عند حرارة 60 درجة مئوية. تم اختبار العديد مصادر حمض الهيدروكلوريك و كان افضلهم استعمال هو خليط من كلوريد الأوكزالويل و الميثانول. البروتوكول المقدم في هذا البحث تم تطبيقة لتحضير مجموعة واسعة و جديدة من مشتقات البيريدين و اعطي نتائج متميزة بالمقارنة مع الطرق الأخرى. تم دراسة تأثير بعض هذه المركبات الجديدة كامضاد لتكاثر بعض انواع الخلايا السرطانية مثل خلايا الثدي (MCF-7)، خلايا الرئة (A549) و خلايا القولون (HCT116). أظهرت معظم هذه المشتقات التي تم تقييمها نشاطًا معتدلاً الي ممتازًا ضد تكاثر هذه الخلايا السرطانية. تمت كذلك دراسة تأثير هذه المركبات علي بعض الخلايا غير السرطانية مثل خلايا الثدي الطبيعية (MCF-10A) و خلايا القولون الطبيعية (NCM460) ، و اضهرت هذه المركبات نشاطا متميزا مما يشير إلى إمكانية استخدامها للقضاء على الاورام السرطابية في المستقبل. كما تمت مقارنة نتائج النشاط البيولوجي بالنتائج التي تم الحصول عليها من بعض الحسابات الكيميائية (DFT) حيث وجد الي حد كبير توافق بين النتائج البيولوجية العملية و الحسابات الكيميائية النظرية.