جامعة الموصل

كلية التربية للعلوم الصرفة

تحضير وتشخيص معقدات جديدة للمنغنيز (II) Mn و الخارصين (II) Zn الفضة (I) Ag مع ليكاندات قواعد شف المشتقة من البنزوين و تقييم فعاليتها الحيوية

حسين احمد اسماعيل الكيكاني

رسالة ماجستير

الكيمياء

بإشراف

الاستاذ المساعد

الدكتورة رنا رمزي عبد زيدان

1445هـ

2023 م

الخلاصة:

تتضمن هذه الرسالة تحضير وتشخيص عشرون معقدا جديدا لبعض ايونات العناصر الانتقالية من السلسلتين الاولى و الثانية المنغنيز (II) Mn و الخارصين (II) Zn و الفضة (I) Ag مع ليكندات قواعد شف المشتقة من البنزوين مع 4-امينوبيريدين و الميلامين و 5-امينوحامض الساليسلك و 4- امينوحامض الساليسلك بطريقتين الاولى في الوسط المتعادل او الحامضي قليلا و الثانية في الوسط القاعدي ، اذ تم الحصول على معقدات احادية النواة والتي حضرت بنسبة مولية (2:1) فلز: ليكند في الوسط المتعادل او الحامضي قليلا وذلك من خلال التفاعل المباشر بين قاعدة شف وأملاح خلات او نترات الفلز (M)حيث تناسقت الليكندات مع الايونات الفلزية الخارصين (II)Zn و المنغنيز (II)Mn بشكل ثلاثي السن فتكونت معقدات سداسية التناسق ذات اشكال ثمانية السطوح ذوات الصيغة $[M(LnH)_2](OAc)_2$ اما مع عنصر الفضة تناسقت الليكندات بشكل ثنائي السن (I) Ag فكونت معقدات ايونية رباعية التناسق متعادلة الشحنة ذوات الصيغة $[Ag (LnH)_2] NO_3$ اما في الوسط القاعدي تم الحصول على معقدات احادية النواة والتي حضرت بنسبة مولية (2:1) فلز: ليكند حيث تناسقت الليكندات مع الايونات الفلزية الخارصين (II)Zn والمنغنيز(II)Mn بشكل ثلاثي السن فتكونت معقدات سداسية التناسق سالبة الشحنة ذوات الصيغة $[M(Ln)_2]$ حيث :

Ln = L1= ليكند بنزوين 4-امينوبيريدين , L2 = ليكند بنزوين ميلامين ,

L3 = ليكند بنزوين5-امينو حامض الساليسلك ,

L4 = ليكند بنزوين 4-امينو حامض الساليسلك

M = Ag (I) , Zn (II) , Mn (II)

شُخَصت الليكندات و الُمعقدات بعدد من التقنيات الفيزيائية كقياس درجات الانصهار او التفكك و التوصيلية الكهربائية المولارية و بتقنية التحليل الدقيق للعناصر (C.H.N) والتقدير الكمي للعناصر باستعمال طيف الامتصاص الذري ، و القياسات الُمغناطيسية و الطيفية مثل طيف الأشعة تحت الحمراء والأطياف الإلكترونية وطيف الرنين النووي المغناطيسي للبروتون ^{1}H-NMR وطيف كروماتوغرافيا الغاز- طيف الكتلة GC-MASS

دلت نتائج قياسات التوصيلية الكهربائية المولارية للمعقدات والاطياف الالكترونية وقياسات الحساسية المغناطيسية على اقتراح بان معقدات المنغنيز عالية البرم والخارصين المحضرة في كلا الوسطين المتعادل او الحامضي قليلا والوسط القاعدي هيئة سداسية التناسق ذات اشكالا هندسية ثمانية السطوح ، بينما اتخذت معقدات الفضة المحضرة في الوسط المتعادل او الحامضي قليلا هيئة رباعية التناسق ذوات شكلا هندسيا رباعي السطوح.

تم تصميم اليكندات اولا باستخدام برنامج (ChemDraw Ultra7) اعقبها اختبار الفعالية الافتراضية للمركبات المحضرة ضد انزيم مختزلة ثنائي هايروفولات Dihydrofolate reductase بطريقة النمذجة الجزيئية Molecular docking و ذلك باستخدام برنامج Mcule software ، إذ تم الحصول على تركيب ثلاثي الابعاد لانزيم مختزلة ثنائي هايدروفولات DHFR من بنك بيانات البروتين RCSB Protein Data Bank تحت الرقم التسلسلي PDB ID: 6DTC و تم عزله و تنقيته باستخدام برنامج USCF Chimera كما اعطت الليكندات قدرة تثبيطية لعدد من الاحياء المجهرية ، فتقرر تحضيرها وتطبيقها عمليا حيث تم دراسة التاثير الحيوي لليكندات والمعقدات على نمو انواع من البكتريا المرضية مثل ستافيلوكوكس أوريس *(Staphylococcus aureus)* وإشريشيا كولي *(Escherichia coli)* وسيدوموناس إروجينوزا *(Pseudomonas aeruginosa)* والسالمونيلا *(Salmonella)* و على انواع من الفطريات مثل فطر الاسباراجيلس نايجر*(Aspergillus niger)*وفطر الكانديدا البيكانس *(Candida albicans)* وفطر الفيوزاريوم*(Fusarium) .*

اثبتت الدراسة أنّ لليكندات و المُعقّدات المحضرة قُدرة تثبيطيّة جيدة ضد هذه الاصناف من البكتريا اكثر مما هو ملاحظ ضد اصناف الفطريات .

Abstract

This thesis includes the preparation and characterization of twenty new complexes of some transitional element ions of the first and second series, manganese Mn (II), zinc (II) Zn, and silver Ag (I) with Schiff-base ligands derived from benzoin with 4-aminopyridine, melamine, and 5-aminoacid Salicylic and 4-amino salicylic acid in two ways, the first in a neutral or slightly acidic medium, and the second in a basic medium, as mononuclear complexes were obtained, which were prepared in a molar ratio (2:1) metal: ligand in a neutral or slightly acidic medium, through direct interaction Between the base of Schiff and the salts of metal acetate or nitrate (M), where the ligands coordinated with the metal ions of zinc Zn (II) and manganese Mn (II) in a triangular form, so hexagonal complexes of symmetry with octahedral shapes were formed with the formula $[M(LnH)_2](OAc)_2$, Between the base of Schiff and the salts of metal acetate or nitrate (M), where the ligands coordinated with the metal ions of zinc Zn (II) and manganese Mn (II) in a triangular form, so hexagonal complexes of symmetry with octahedral shapes were formed with the formula $[M(Ln)_2]$.

L1 = ligand benzoin 4-aminopyridine , L2 = ligand benzoin melamine,
L3 = ligand benzoin 5-amino salicylic acid ,
L4 = ligand benzoin 4-amino salicylic acid

The ligands and complexes were identified using a number of physical techniques, such as measuring the degrees of melting or dissociation, the molar electrical conductivity, the elemental microanalysis technique (C.H.N), and quantitative estimation of the elements using atomic absorption spectrometry, and magnetic and spectral measurements such as infrared spectroscopy, electronic spectra, and proton nuclear magnetic resonance spectroscopy ^{1}H-NMR and gas chromatography-mass spectrometry GC-MASS .

The results of measurements of the molar electrical conductivity of the complexes, electronic spectra, and measurements of the magnetic sensitivity suggested that the complexes of highly fermented manganese and zinc prepared in both neutral or slightly acidic media and the basic medium were hexagonal in consistency with octahedral geometric shapes, while the silver complexes prepared in neutral or slightly acidic media took the form A tetrahedral body with a tetrahedral geometric shape.

The oligomers were designed first using (ChemDraw Ultra7) program, followed by testing the hypothetical activity of the prepared compounds against Dihydrofolate reductase by molecular docking method using Mcule software , A three-dimensional structure of the dihydrofolate reductase DHFR was obtained from the RCSB Protein Data Bank under the serial number PDB ID: 6DTC, and it was isolated and purified using the USCF Chimera program The biological effect of ligands and complexes on the growth of pathogenic bacteria such as , (Staphylococcus aureus) (Escherichia coli) (Pseudomonas aeruginosa) and (Salmonella) on types of fungi such as (Aspergillus niger), (Candida albicans) and (Fusarium) , The study showed that the prepared ligands and complexes had a good inhibitory ability against these types of bacteria, more than what was observed against the types of fungi .

University of Al Mosul

College of Education

and Pure Sciences

Preparation And identification of New Complexes Of Manganese Mn (II), zinc Zn (II), And Silver Ag (I), With Ligands Of Schiff Bases Derived From Benzoin And Evaluation Of Their Biological Activity

Hussein Ahmed Ismail Al-Kikani

M,Sc. Thesis

Chemistry

Supervised by

Assistant Professor

Dr. Rana Ramzi Abed Zedan

2023 A.D 1445 A.H