(البحث رقم 9 في القائمة الرئيسية)

عنوان البحث : (باللغة الأنجليزية)	تخليق، و توصيف و خصائص NLO ، مضادات الميكروبات ، ربط الحمض النووي الريبوزيمنقوص الأكسجين (CT-DNA)، و نمذجة DFT لمتراكبات Ni(II), Pd(II), Pt(II), Mo(IV), and Ru(I) مع قاعدة شيف NOS		
المؤلفون: (باللغة الأنجليزية)	**Rania G. Mohamed**, Fatma M. Elantabli, Ayman A. Abdel Aziz, H. Moustafa, Samir M. El-Medani		
عدد المؤلفين: 5	ترتيب المتقدم علي البحث: الأول	عدد المؤلفين من خارج تخصص المتقدم: واحد تخصص: كيمياء فيزيائية	
المجلة العلمية:	Journal of Molecular Structure		العدد: 1176
أرقام الصفحات: 501-514		سنة النشر: 2019	
معامل التأثير (IF): 2.463		الناشر:Elsevier	Q3

ملخص موجز للبحث :

أدى التفاعل الحراري للمركبات $Ni(NO_3)_2.6H_2O$، $PdCl_2$، $PtCl_2$، $Mo(CO)_6$ و$Ru_3(CO)_{12}$ مع ليجاند قاعدة شيف المُعد مسبقًا N-(2-hydroxy-1-naphthylidene)-2-aminothiophenol (H_2L) إلى تكوين المتراكبات الخمس الآتية؛ $[Ni(HL)_2]$, 1; $[Pt(H_2L)Cl_2]$, 2; $[Pd_2(HL)_2Cl_2]$, 3; $[Mo(O_2)(H_2L)]$, 4; و$[Ru(CO)_3(HL)]$, 5. تم تشخيص المركبات المدروسة باستخدام التقنيات الطيفية المختلفة (IR, ^{1}H NMR, mass)، والتحليل العنصري، والقياس المغناطيسي، والتوصيل المولاري، والتحليل الحراري. تم حساب العوامل الحركية والحرارية الديناميكية للمتراكبات. تم فحص الشكل الهندسي للمتراكبات المدروسة Pt(II)- 1:1، Pd(II)- Mo(IV)- و Ru(I)- والمتراكب Ni(II)- 1:2 بناءًا على مستوى نظرية B3LYP/GENECP. إن الأشكال الهندسية للمتراكبات المدروسة غير مستوية كما يتبين من الزاوية الثنائية السطح بين أيون المعدن المركزي وذرات الليجاند المنسقة. تم أيضًا إجراء حسابات DFT لحساب الخصائص العامة؛ كالصلابة (η)، والليونة الشاملة (S)، والسالبية الكهربائية (χ). تم حساب متوسط فرط الاستقطاب من الدرجة الأولى (<β>) ومقارنته باليوريا كمادة مرجعية. أظهرت نتائج فرط الاستقطاب من الدرجة الأولى (<β>) أن الليجاند والمتراكبات المدروسة مرشحات ممتازة لمواد NLO. كما أظهر تفاعل المتراكبات المذكورة مع الحمض النووي للغدة الزعترية لعجل (CT-DNA) بواسطة تقنيات مختلفة أن المتراكبات يمكن أن ترتبط ب CT-DNA عن طريق الوضع التداخلي. وقد تم دراسة ارتباط المتراكبات المذكورة بالحمض النووي للغدة الزعترية للعجل باستخدام أطياف الامتصاص الفلورية والأشعة فوق البنفسجية والمرئية. أشارت النتائج إلى أن قدرة الليجاند على الارتباط أقل بكثير من قدرة المتراكبات. كما قد دُرست الأنشطة البيولوجية للمركبات.