(البحث رقم 10 في القائمة)

عنوان البحث : (باللغة الأنجليزية)	دراسات هيكلية لمخلبيات قواعد شيف المعدنية الجديدة من فينيل أسيتوهيدرازيد ثلاثي المنح: حيود الأشعة السينية، تحليلات سطح هيرشفيلد ، حسابات DFT دراسات مضادات البكتيريا الالتحام الجزيئي (Docking)	
المؤلفون: (باللغة الأنجليزية)	Fatma M. Elantabli, **Rania G. Mohamed**, Samir M. El-Medani, Matti Haukka, Ramadan M. Ramadan, Manal A. Afifi	
عدد المؤلفين: 6	ترتيب المتقدم علي البحث: الثاني	عدد المؤلفين من خارج تخصص المتقدم: واحد تخصص: كيمياء فيزيائية
المجلة العلمية:	**Journal of Molecular Structure**	العدد: 1299
أرقام الصفحات: 137244- 137230	سنة النشر: 2023	
معامل التأثير (IF): 4	الناشر: **ELSEVIER**	Q2

ملخص موجز للبحث :

فى هذا البحث تم تحضير ليجاند من مشتقات فينيل اسيتو هيدرازيد (2-هيدروكسي بنزيليدين-2-فينيل اسيتوهيدرازيد،HL) ومن ثم متراكبات جديدة مع أيونات العناصر الانتقالية: حديد, وزنك , وبلاديوم , وفضة , وكادميوم. تم اثبات البنية الهيكلية للمركبات باستخدام التحليل الطيفي للأشعة تحت الحمراء والرنين النووي المغناطيسي للبروتون ^{1}HNMR، وتحليل العناصرCHN، وقياس العزم المغناطيسي، والتوصيلية الكهربية، وقياس الطيف الكتلي، و التحليل الحراري (Thermogravimetric analysis).

تم اثبات الشكل الفراغي لمتراكب الفضة باستخدام الأشعة السينية أحادية البلورة x-ray single crystal وأيضاً دراسة هيرشفيلد السطحية. كشفت تحاليل كل من الأشعة السينية وسطح هيرشفيلد عن بنية مثيرة للاهتمام وخصائص هندسية فريدة. وأثبتا ايضاً وجود روابط هيدروجينية داخل الجزئ وبين الجزيئات وأثبتا بنية ثماني الأوجه لمتراكب الفضة. اثبتت التحاليل الطيفية أن الليجاند يرتبط بأيونات المعادن من خلال ثلاثة مواقع. ترتبط جميع أيونات المعادن، باستثناء البلاديوم، بجزيئين من الليجاند ليعطي الشكل الفراغي ثماني الأوجه, بينما يرتبط أيون البلاديوم بجزئ ليجاند واحد بالإضافة الى جزئ ماء ليعطي شكلاً مربعاً مستوياً. تم استخدام عملية المحاكاة الحسابية باستخدام LANL2DZ لدراسة بعض خواص المواد المحضرة. تم إجراء دراسات الالتحام الجزيئي (Docking) ومضادات البكتيريا لفحص التطبيقات المحتملة للمتراكبات ككواشف علاجية. أظهر متراكب Ag(I) تثبيطًا اعلى مضادًا للبكتيريا تجاه البكتيريا التي تم اختبارها، مثل E. coli، وK. pneumonia، وS. aureus، وS. mutans، بقطر منطقة التثبيط = 21.7، 21.0، 19.3، و15.7 ملم، على التوالي. تم عمل محاكاة حاسوبية باستخدام برنامج MOE لدراسة قدرة ارتباط المركبات مع العديد من البروتينات (PDB: 1BNA, 1BQB and 5AEP). أشارت عمليات محاكاة الالتحام الجزيئي إلى أن المتراكبات لها ارتباطات مرتفعة مع الحمض النووي. أظهرت مشتقات الحديد والفضة أعلى ارتباط تجاه المستقبلات التي تم فحصها مع درجات ربط متساوية تقريبًا (S = -5.10 و S=- 5.01 سعر حراري / مول، على التوالي). أشارت النتائج العملية والنظرية النشاطية الملحوظة للمتراكبات ضد انواع البكتريا المختلفة. اثبت متراكب الفضة فاعليته الملحوظة كعامل مضاد للميكروبات مما يقرب من المضاد الحيوي المستخدم مما يأمل باستخدامه كدواء جديد بعد اجراء مزيد من البحث والتطوير السريري.