الخلاصـــة

تتضمن هذه الدراسة تخليق وتشخيص ودراسات صيدلية لبعض المركبات الحلقية غير المتجانسة النيتروجينية الجديدة وتشمل ثلاثة مسارات مختلفة كما موضحه في المخططات (1-3) .

1-[1,2,4]triazolo[4,3-b][1,2,4,5] tetrazine derivatives [4a-4i] .

2- 6-(alkylsulfanyl)-3-phenyl[1,2,4]triazolo [3,4-*b*] [1,3,4] thiadiazole [5a-5g].

3- 1,2-di(5-(alkylthio)-1,3,4-oxadiazol-2-yl)diazene [6a-6d].

جميع المركبات المحضرة تم تشخيصها بواسطة الاشعة تحت الحمراء وطيف الرنين النووي المغناطيسي وطيف الكتلة وتحديد الخواص الفيزيائية لهذه المركبات ومنها درجة الانصهار وغيرها .

بسبب فشل معظم المركبات المصنعة في المرحلة الثانية من اكتشاف الأدوية (مرحلة التجارب السريرية). وذلك لأن المركبات المصنعة لها خصائص حرائكية دوائية ضعيفة ، قد لا يتم امتصاصها أو توزيعها أو استقلابها أو استخلاصها أو تكون سامة ، تم تقييم نشاط المركبات المصنعة نظريا بواسطة برنامج SwissADME لتقييم السلامة والسمية والخواص الحركية.

اظهرت نتائج دراسات ADME أن معظم المركبات المخلقة لها امتصاص عالي من الجهاز الهضمي باستثناء المركبات (5f,5g,6a,6b,6c and 6d) التي أظهرت امتصاصًا منخفضًا من الجهاز الهضمي، وأظهرت المركبات (4c,4h and 4i) , لها امكانية لعبور حاجز الدم الدماغي (BBB). يشير هذا إلى أن هذه المركبات لديها احتمالية أعلى لعبور حاجز الدم الدماغي والوصول إلى الجهاز العصبي المركزي (CNS). قد يكون هذا مهمًا للأدوية المخصصة لاستهداف الدماغ أو الجهاز العصبي المركزي.

خضعت المركبات المصممة [4a-4i] قبل تحضيرها الى عملية الارساء الجزيئي Molecular docking حيث تم التحقق من ارتباط المركبات بمستقبل (C-Met tyrosin kinase) المسؤول عن نمو الخلايا السرطانية واظهرت نتائج الارساء الجزيئي بين ان المركبات [4a-4i] لها درجة عالية من الالتحام مع مستقبلات C-Met tyrosin kinase تصل الى Kcal/mol– 6.058- مقارنة مع العلاج كريزوتونيب المضاد السرطاني المعروف والذي اظهر قيمة – 3.211- Kcal/mol