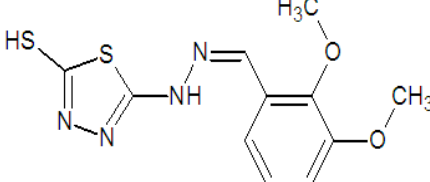
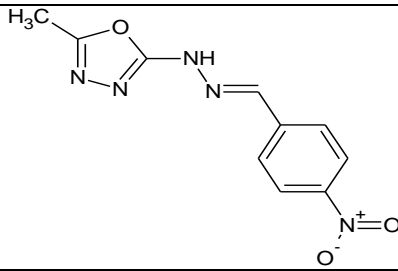
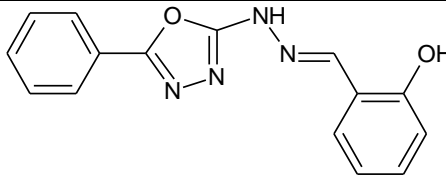
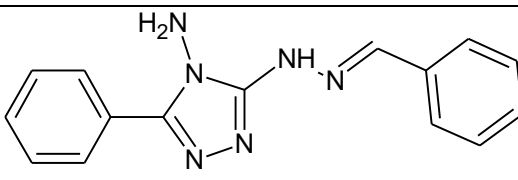


الخلاصة

تضمّنت هذه الدراسة تحضير وتشخيص لأربعة ليكاندات جديدة من مشتقات ١,٣,٤- ثيادايازول، ١,٣,٤- أوكسادايازول و ١,٢,٤- تريازول والموضحة صيغها التركيبية في أدناه :

L1	
L2	
L3	
L4	

حضّرت معقدات هذه الليكاندات الاربعة وذلك بتفاعلها مع بعض كلوريدات أيونات العناصر الانتقالية : ($\text{CrCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$). شُخصت الليكاندات المحضّرة باستخدام التحليل الدقيق للعناصر (CHNS) ، طيف الأشعة تحت الحمراء (IR) ، طيف الرنين النووي المغناطيسي للبروتون (^1H -NMR) و طيف الكتلة. أما المعقدات فقد شُخصت باستخدام طيف الكتلة وطيف الأشعة تحت الحمراء (IR). تمّ الاستعانة ببرنامج Hyperchem 7.5 وباستخدام طريقة PM_3 لرسم الشكل الفراغي الأمثل لليكاندات المحضّرة لغرض معرفة أي من الذرات مهيأة للتعقيد من خلال حساب توزيع الكثافة الالكترونية على الذرات وفي ما يتعلق بالمعقدات فقد تم استخدام نفس البرنامج لمعرفة المحتوى الطاقي للمعقدات والتي يمكن أن تزودنا بمعلومات عن الإشكال الفراغية المقترحة بعد مطابقتها مع النتائج العملية التي تم التوصل إليها وتم اقتراح الإشكال الفراغية التالية :

معقدات الليكاند الأول (L1) والثاني (L2) والثالث (L3) مع ايون الكروم الثلاثي هي ثمانية السطوح (Oh) أما معقداتها مع ايونات النحاس، النيكل والكوبلت الثنائية فكانت رباعية السطوح (Th)، معقدات الليكاند الربع (L4) كانت ثمانية السطوح مع ايون الكروم الثلاثي ومع الايونات الثلاثة الأخرى فكان الشكل مربع مستوي .

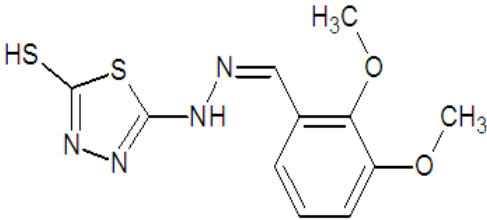
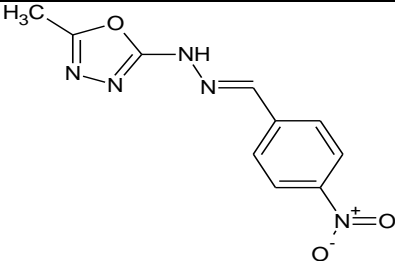
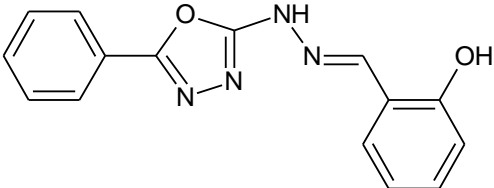
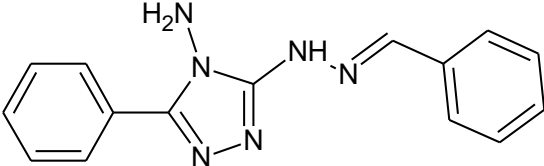
تمّت دراسة قابلية المركبات على تثبيط نمو أو قتل ثلاثة أجناس مختلفة من البكتريا المرضية *Staphylococcus aureus*، *Streptococcus pyogenes* و *Enterobacter aerogenes*. إذ حضّرت تراكيز (1.25,0.625,0.31,0.15 mg/ml) لكل من المركبات الكيميائية المحضّرة وتم قياس فعاليتها ضد البكتيريا وقد أظهرت بعض المركبات فعالية جيدة في تثبيط نمو هذه الاجناس البكتيرية وبعضها الآخر كان متوسط إلى قليل الفعالية .

و تمت دراسة السمية الخلوية ضد الخلايا السرطانية لاثنتين من الليكاندات (L1,L2) واثنين من المعقدات وهما [Ni(L3)Cl₂] و [Co(L4)Cl₂] على خلايا تدعى MCF-7 واعطت نتائج جيدة في قتل الخلايا السرطانية في المختبر.

ثم قيست نسبة التحلل الدموي لجميع المركبات المحضّرة وبتراكيز مختلفة (0.2,0.1,0.050.025mg/ml) حيث استخدمت هذه الطريقة لمعرفة إمكانية استخدام هذه المركبات في الاختبارات الحيوية داخل الجسم الحيّ in vivo test . وقد توصلنا إلى أن هذه المركبات تحلل كريات الدم الحمراء بنسب عالية وبذلك لا يمكن استخدامها داخل جسم الكائن الحيّ .

Abstract

The study include preparation and characterization of four new derivations of 1,3,4-thiadiazole , 1,3,4-Oxadiazole and 1,2,4-triazole as a ligand shown below:

L1	
L2	
L3	
L4	

These ligands reacted with some transition metal salts as ($\text{CrCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$).The prepared compounds were characterized by the elemental analysis (C,H,N,S), Infrared spectroscopy (IR) , Proton Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy (^1H -NMR), Mass spectra and molar conductivity. Hyperchem 7.5 was used using the PM3 method to draw the optimal spectral shape of the prepared ligands for the

purpose of knowing Any of the ligand atoms will be coordinate with the metal ion by calculating the distribution of the electronic density on the atoms. As for the complexes, the same program was used to know the energy content of the complex Which can help us in addition to the spectral results suggesting the coordinate geometries

The chromium(III) complexes with L1,L2 and L3 gave Octahedral geometry. While the three ligands showed a tetrahedral geometry with copper(II), nickel(II) and cobalt(II) ions . All the L4 complexes were square-planer geometry.. Antibacterial activity was carried out against three types of bacteria at four concentrations of (1.2,0.62,0.31,0.15mg/ml). Erythromycin and Nitrofurantion,were the standard drugs utilize. Some of these compounds showed good activity, while others ranged from medium to small.

The study of cytotoxicity effect for some prepared compounds showed a good effect anti breast cancer cell which called MCF-7.

The hemolysis activity of the compounds was tested at four concentrations (0.2,0.1,0.05,0.025mg/ml) and the results showed high percentage of hemolysis for all these compounds and these gave a conclusion about the contraindication use of these compounds in vivo .