

تحضير ودراسة الاطياف ونمذجة جزيئية للتاثير البيولوجي لبعض معقدات الفلزات القائمة على مركبات دوائية

حليمه ذاكر احمد الزبيدي

د. مصطفى علي حسين عبدالعال

د. دلال احمد عبدالقادر العزي

تم الحصول على معقدات فلزات المنجنيز الثنائي والكوبلت الثنائي والنيكل الثنائي والنحاس الثنائي والزنك الثنائي بمفاعلة كلوريدات الفلزات الثنائية مع مستحضرين دوائيين مستخدمين في خفض الكرستول (بيتافاستاتين الكالسيوم و روزفاستاتين الكالسيوم). اتخذت جميع المعقدات هندسة ثماني السطوح وتم التأكد من التركيب الجزيئي لهذه المعقدات بواسطة الأساليب التحليلية والطيفية. تم دراسة هذه المركبات من ناحية بيولوجية حيث أثبتت أن لها خصائص بيولوجية من خلال قدرتها على الارتباط بالحمض النووي الريبوزي بكفاءة عالية، وقد تم اختبار هذه المركبات ومعقداتها المعدنية عملياً ضد خلايا سرطان الثدي وسرطان الرئة. ومن ثم تم التأكد من نشاطها البيولوجي من خلال برنامج النمذجة الجزيئية بواسطة ارتباطها ببروتين 1hk7 و بروتين 1s9j حيث أظهرت النتائج التوافق بين النتائج العملية والنظرية .

الكلمات المفتاحية: معقدات المعادن، أدوية الستاتين، ارتباط الحمض النووي، اختبار السمية، النمذجة الجزيئية.

Synthesis and Spectra Study, Molecular Modeling, for Biological Activity of Some Drug – Based Metal Complexes

Halimah Thakir Ahmed Alzubaidi

Dr. Mostafa Aly Hussien

Dr. Dalal Ahmad Al-Ezi

New drugs-based metal (II) complexes were prepared by the reaction of first row transition metals Mn(II), Co(II), Ni(II), Cu(II) and Zn(II) in the form of $MCl_2 \cdot nH_2O$ with Pitavastatin Calcium (PSC) and Rosuvastatin Calcium (RSC). The metal complexes were characterized using various spectroscopic techniques, including elemental analysis, molar conductance, magnetic moment, FT-IR, EPR spectroscopic techniques, thermographic analysis TGA, and kinetic study of metal complexes. The IR spectra suggested that the ligands were coordinated in a bidentate binding mode through the oxygen atoms of the carboxylate group in both ligands. Molar conductivities indicated that all the complexes were non-electrolytic in nature. The magnetic moment and EPR of the complexes suggested their octahedral geometries. Thermal studies were conducted to confirm the structures and analyze the thermal stabilities of the complexes. The thermodynamic parameters were determined using the Coats–Redfern and Horowitz–Metzger methods. The DNA binding study was investigated by spectrophotometric experiments and viscosity measurements, and the complexes were found to be groove binders to the DNA. The cytotoxic activity of the synthesized complexes exhibited good inhibition toward both breast carcinoma (MCF-7) and human lung cancer (A549) cell lines. The results of molecular docking displayed good correlations with experimental cytotoxicity findings. Therefore, these findings suggest that our synthesized complexes can be introduced as effective anticancer agents.

Key words: Metal-based complex, Statin drugs, DNA binding, Anticancer properties, Molecular docking.