

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه زابل

مدیریت تحصیلات تکمیلی

دانشکده علوم

گروه شیمی

رساله جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد در رشته شیمی معدنی

سنتز، خواص آنتی‌اکسیدانی، مهار آنزیم و مطالعات الحاق مولکولی

کمپلکس‌های روی (II) از لیگاند شیف باز مبتنی بر استوهیدرازید

اساتید راهنما:

دکتر زیبا سوری نظامی

دکتر سمیه شهرکی

اساتید مشاور:

حجت ثمره دلارامی

تهیه و تدوین:

کبری شهرکی

زمستان ۱۴۰۱

چکیده:

لیگاند شیف باز جدید N^3-3 -(هیدروکسی ایمینو) بوتان- 2 -ایلیدن) استوهیدرازید، HIBYA، و کمپلکس‌های Zn(II) آن، [Zn(HIBYA)₂]Cl₂ (A)، [Zn(HIBYA)(bpy)]Cl₂ (B)، و [Zn(HIBYA)]Cl₂ (C) سنتز و شناسایی شدند. نتایج آنتی‌اکسیدانی نشان داد که توانایی ترکیبات در مهار DPPH به شرح زیر است: HIBYA > B > C > A. اثرات متقابل کمپلکس‌های A-C بر فعالیت و ساختار کاتالاز کبد گاو (BLC) با تکنیک‌های طیف‌سنجی و الحاق مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. همه کمپلکس‌ها قادر به تغییر عملکرد و ساختار BLC بودند. A تأثیر بیشتری بر فعالیت BLC دارد، به طوری که در غلظت $0/17$ میکرومولار، A، B و C فعالیت کاتالیستی اولیه BLC را به ترتیب 68% ، 23% و 56% بهبود می‌بخشند. قدرت اتصال کمپلکس‌های A-C با BLC تقریباً مشابه و با مرتبه $10^4 M^{-1}$ بود (برای C $12/58 \times 10^4 M^{-1}$ ، برای B $10/23 \times 10^4 M^{-1}$ ، برای A $11/74 \times 10^4 M^{-1}$). مکانیسم برهمکنش سه کمپلکس با BLC مشابه بود، کمپلکس‌های A-C بیشتر با برهمکنش‌های واندروالس و پیوندهای هیدروژنی با BLC برهم‌کنش داشتند. مطالعات الحاق مولکولی نتایج طیف‌سنجی را تایید و اسیدهای آمینه درگیر در برهمکنش را پیش‌بینی کرد. کلمات کلیدی: کمپلکس‌های شیف باز، کاتالاز، مکانیسم برهمکنش، آنتی‌اکسیدان

Abstract

New Schiff base ligand N'-3-(hydroxyimino)butan-2-ylidene)acetohydrazide, HIBYA, and its Zn(II) complexes, [Zn(HIBYA)₂]Cl₂ (A), [Zn(HIBYA)(bpy)]Cl₂ (B), and [Zn(HIBYA)(phen)]Cl₂ (C) (bpy = 2,2'-bipyridine and phen = 1,10-phenanthroline) were synthesized and characterized. Antioxidant results showed that the ability of compounds to inhibit DPPH• is as follows: A > C > B > HIBYA. The interaction effects of A-C complexes on the activity and structure of the bovine liver catalase (BLC) were investigated by spectroscopic and molecular docking techniques. All complexes were able to change the performance and structure of BLC; A has a greater effect on BLC activity, so that at concentration of 0.17 μM, A, B and C improve initial BLC activity by 68%, 23% and 56%, respectively. The binding strength of the A-C complexes with BLC was almost similar and with the order of 10⁴ M⁻¹ (K_b = 11.74 × 10⁴ M⁻¹ for A, 10.23 × 10⁴ M⁻¹ for B, and 12.58 × 10⁴ M⁻¹ for C). The interaction mechanism of three complexes with BLC was similar, A-C complexes interacted mostly with van der Waals interactions and hydrogen bonds. Docking studies confirmed the spectroscopic results and predicted the amino acids involved in the interaction.

Keywords: Schiff base complexes; Catalase; Interaction Mechanism, Antioxidant



The University of Zabol
Graduate School
Faculty of Science
Department of Chemistry

**The Thesis Submitted for The Degree of M. Sc
In The Field of Inorganic Chemistry**

**Synthesis, antioxidant properties, enzyme inhibitions and molecular
docking studies of Zn(II) complexes of acetohydrazide based Schiff
base ligand**

Supervisors:

Dr. Ziba Sourinezami

Dr. Somayeh Shahraki

Advisor:

Dr. Hojat Samaredeharami

By:

Kobra Shahraki

Winter 2023