دراسة طيفية وحيوية وتقييم نظري لمعقدات الفلافون مع فلزات الكروم الثلاثي والحديد الثلاثي

ايمان حسام محمد

جامعة الأنبار / كلية التربية للبنات/ قسم الكيمياء

الملخص:

تم تحضير معقدات جديدة لمركبات الكروم (III) والحديد (III)مع ليكند فلافون وتم تشخيصها بطرق التحليل الطيفي المختلفة والتحليل الدقيق للعناصر. وشخصت المعقدات المحضرة بالطرق الطيفية (الأشعة فوق البنفسجية – المرئية والاشعة تحت الحمراء) فضلا عن تحديد الشكل للمعقدات المحضرة من خلال القياسات المغناطيسية والتوصيلية الكهربائية في محلول داي مثيل سلفوكسايدDMSO. من هذه الدراسات والقياسات التي تشير إلى ان شكل المعقدات المحضرة هي ذات شكل ثماني السطوح.

تم دراسة المعالجة النظرية للمعقدات المحضرة في طور الغاز .وقد تم ذلك باستخدام برنامج الهايبركم Hyper Chem.-6وبرنامج الكيم اوفس Chem.-Officeللميكانيكا الجزيئية والحسابات شبه التجريبية.

تم اختبار فعالية المركبات المحضرة المضاده للبكتريا المرضية E. Coli,S. aurous.تشير النتائج إلى ان المعقدات الفلزية المحضرة ذات فعالية حيوية.

كلمات مفتاحية: فلافون، المعقدات الفلزية، تحضير, التحليل الطيفي، التقييم النظرية, فعالية حيوية.

المقدمة

الفلافونات موجودة بوفرة في الطبيعة من السرخسيات إلى النباتات العليا [1]. هي مركبات عطرية ذات سلسلة جانبية غير مشبعة وغالبا ما تكون سامة للخلايا في المختبر [3]. كما تم الإبلاغ عن الفلافونات لتكون مضادة للالتهابات، ومسكنا وخافضا للحرارة [11]. بعض الفلافونات تمتلك نشاطا مبيدا للجراثيم، ومضادا للفطريات والحشرات وبعض من مشتقاتها هي مضادات طبيعية[18]. الفلافونات وفيرة في النباتات الصالحة للأكل وتعد من الفلافونويد وإيسوفلافونويدس. تمثل الفلافونويدات واحدة من أكبر مجموعات المنتجات الطبيعية. فضلا عن الوظائف المختلفة للفلافونويدات في النباتات، فإن توزيعها على نطاق واسع في الطبيعة، وتقلبها الهيكلي، وسميتها المنخفضة نسبيا، وأنشطتها المضادة للأكسدة زادت من الدراسات للفلافونويدات المثيرة للاهتمام باعتبارها مفيدة لصحة الإنسان.

الفلافونيدات هي صبغة طبيعية مشتركة واحدة من وسيطة هامة في الحيوي من الفلافونويدات [14]. تم الإبلاغ عن العديد من الأنشطة البيولوجية المثيرة للاهتمام من الناحية العلاجية لبعض الفلافونيدات بما في ذلك مضاد للجراثيم [11]، والنشاط المضادة للالتهابات [20]، النشاط الكيميائي [19]، وأمراض القلب والأوعية الدموية [15]، والنشاط المضاد للسرطان [5]، والنشاط السام للخلايا [17]، [4] والنشاط المضاد للملاريا [13] والنشاط المضاد للفيروسات [8] والنشاط المضاد لفيروس العوز المناعي البشري [6] وما إلى ذلك. ويمكن تعديل النشاط البيولوجي للفلافونات عند تكوين المعقدات الفلزية.

الجزء العملي

الأجهزة والمواد الكيميائية

تم تسجيل أطياف الأشعة تحت الحمراءpye-unicam-3100.، تم قياس العينات الصلبة بشكل اقراص KBr. لقياس الأشعة فوق البنفسجية تم استخدام الميثانول المطلق والإيثانول كمذيبات. أطياف الامتصاص الذري كانت بجهاز Shimadzo-680. المبخر الدوار نوع Butche -120. لتحديد درجة الانصهار M.P. تم استخدام B-240perkinElmar.جهاز تحليل العناصر(C.H.N)Perkin Elmer 2400 /USA في وزارة العلوم والتكنولوجيا.

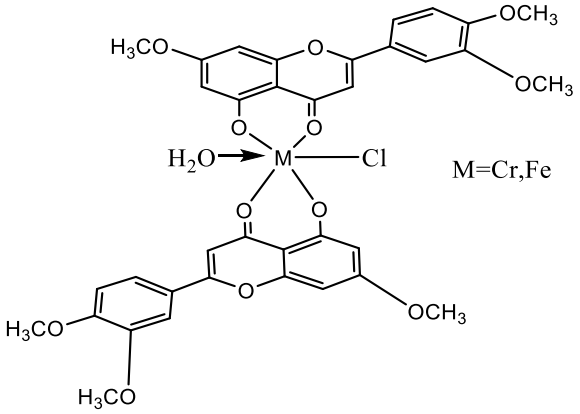
كل المواد الكيميائية المستخدمة من شركات BDH للمواد الكيميائية المحدودة –إنكلترا، FLUKA,Riedl Du Hain الالمانية لتوريد المواد الكيميائية.

الطريقة العامة لتحضير ليكند الفلافون (L):-2-(3,4)-dimethoxyphenyl-5-hydroxy-7-methoxy-4H-chromen-4-one

إلى خليط من$C_{10}H_{12}O_3$1-(3,4-dimethoxyphenyl)ethan-1-one 1,80 غم، 0,1 مول، والكحول 50 مل و$C_8H_8O_3$–hydroxy-4-methoxybenzaldehyde 1,522 غم، 0,1 مول، تمت إضافة ببطء هيدروكسيد الصوديوم 40٪، 19 مل مع التحريك بقوة 2–3 ساعات، حتى تم الحصول على كتلة صلبة بلون برتقالي وتركها حتى الصباح في درجة الحرارة الغرفة. تم سكب 42 مل حامض الهيدروكلوريك المركز البارد،على ذلك مع التحريك المستمر. تم ترشيح المادة الصلبة الصفراء، وغسلها بالماء، وتجفيفها واعادة بلورتها من الكحول. الناتج 80٪،مسحوق أحمر بني، M.P. >240 ºC، قياسات الاشعة تحت الحمراء كما في شكل (1–2) بقرص KBrيظهر امتصاص في 3409 سم ^{1-}OH، 1650 سم ^{1-}O = C.الأشعة فوق البنفسجية يظهر اعلى امتصاص λmax 293 نانومتر، 351 نانومتر كما في شكل (1–4) .كما اظهرت قياسات التحليل الدقيق للعناصرC, 65.85; H, 4.91; O,29.24

الطريقة العامة لتحضير المعقدات

تم اذابة 0.2 مول من$LC_{18}H_{16}O_6$في الميثانول 30 ملثم تم إضافة 0.1 كلوريد الفلز .تم تصعيد الخليط الناتج لمدة 30 دقيقة .وتم تقليل حجم المزيج النهائيبالمبخر الدوار.تم تنقية المعقدات الناتجة عن طريق إعادة التبلور من الميثانول لإعطاء مسحوق، ونسبة الناتج 82٪ . وتلاحظ المعقدات الناتجة في الجداول 1، 2 والشكل(1−1).



الشكل(1−1) الشكل المقترح للمعقدات المحضرة

النشاط المضاد للبكتيريا

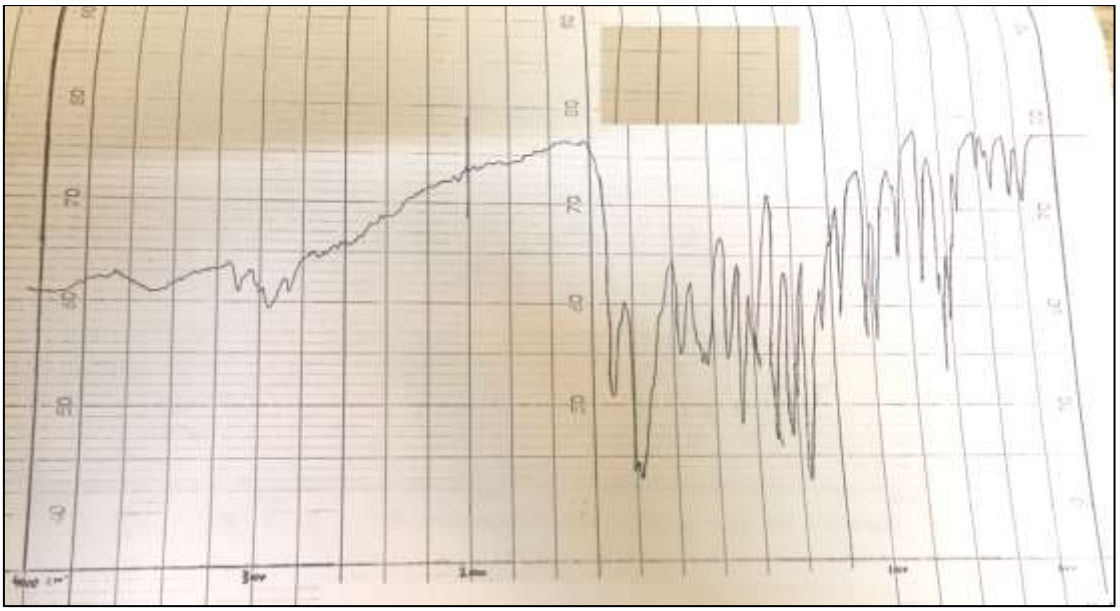
تم العمل بطريقة نشر آغار باستخدام طريقة كيربي باور [2] في قياس حساسية البكتيريا المستخدمة في هذا البحث لتراكيزمختلفة من المعقدات المحضرة، تم الحصول على بكتريا إشريكية كولي وبكتريا ستافيلوكوكوس,*S. aurous*,E. *Coli* (معزولة ومشخصة في مختبر مستشفى الأطفال في الرمادي). كما استخدمنا مولر هينتون أكر لاختبار حساسية البكتيريا للمركبات، تم وضع الأطباق المغطاة في الحاضنة عند 37درجة مئوية لمدة 24ساعة وتم قياس قطر التثبيط (منطقة التثبيط) في كل حفرة مقارنه بالسيطرة وتسجيل النتائج.

النتائج والمناقشة

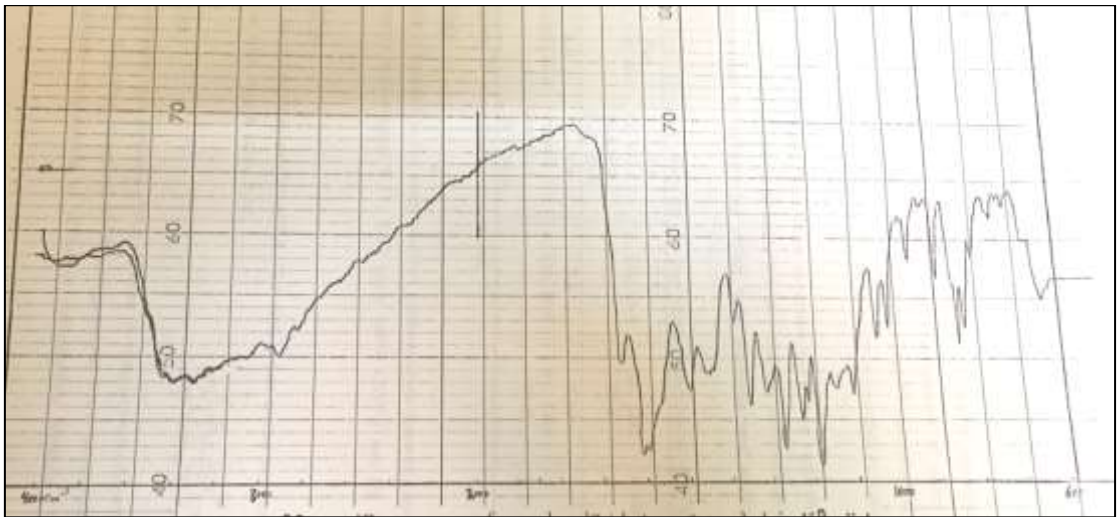
تم تحضير ليكند الفلافون 2- (3,4) - dimethoxyphenyl-5- hydroxy-7- methoxy-4 H-chromen-4- one. من خلال تفاعل مشتقات الاسيتوفينون-1(3,4- dimethoxyphenyl) ethan-1- one والبنزالديهايد 4-hydroxy-2−methoxybenzaldehyde في الإيثانول والذي تم استخدامه في تحضير المعقدات بنسبة 1: 2 الفلز: ليكند.الجدول 1.تم تشخيص الليكند المحضر بالطرق الطيفية (الأشعة فوق البنفسجية− المرئية، الأشعة تحت الحمراء) والتحليل الدقيق للعناصر.

أطياف الاشعة تحت الحمراء

تم تشخيص الليكندL من خلال طيف الأشعة تحت الحمراء ومعقداتها المحضرة. في أطياف الاشعة تحت الحمراء لليكند شكل (1–2)، يتم تأكيد وجود مجاميع الفينول والكربونيل من خلال القمم في 3409 و 1650 سم $^{-1}$على التوالي[7]. مع ذلك، في أطياف المعقدات يبين شكل معقد الكروم شكل (1–3) اختفاء كاملا من الذروة في 3409 سم $^{-1}$ مما يدل على غياب مجموعة الهيدروكسيل الفينولية والذي يشير الى تناسقه مع الفلز المركزي في المعقدات المحضرة. تحول القيمة المخصصة لمجموعة الكاربونيل إلى قيمة تردد أدنى مقارنة بمجموعة الكاربونيل الحرة، مما يدل على تناسقها مع الفلز المركزي في المعقدات المحضرة.



الشكل (1–2) يبين طيف الأشعة تحت الحمراء لليكند



الشكل (1–3) يبين طيف الاشعه تحت الحمراء لمعقد الكروم

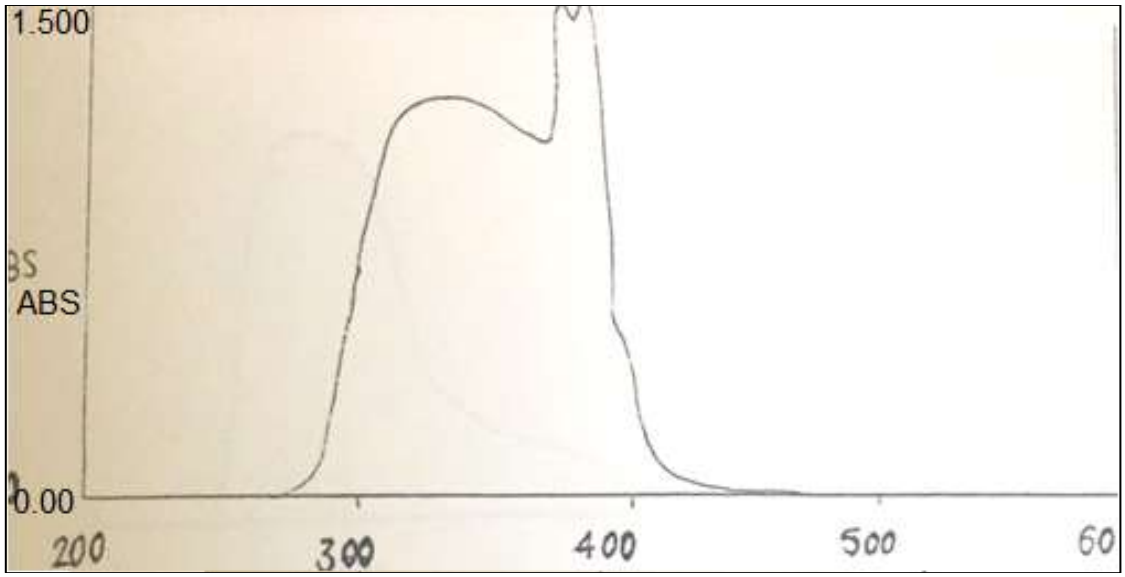
أطياف الأشعة فوق البنفسجية– المرئية

الأشعة فوق البنفسجية المرئية في أطياف المعقدات المحضرة والمتوقعة ان يكون هناك اختلافات في موقع امتصاص الحزم بين الليكند الحر والمعقدات المحضرة منها، والتي تعزى إلى التناسق بين الليكند والفلزات الانتقالية. يعد ظهور الامتصاص الاعظم الجديد بمثابة تلميح لتكون المعقدات. يرجع التحول الباثوكرومي pathochromic shift في المدى I عند التناسق يعود إلى الانتقال الإلكتروني $n\rightarrow\pi^*$ يعود الى الزوج الوحيد من الإلكترونات لمجموعة الهيدروكسيل في المعقد .

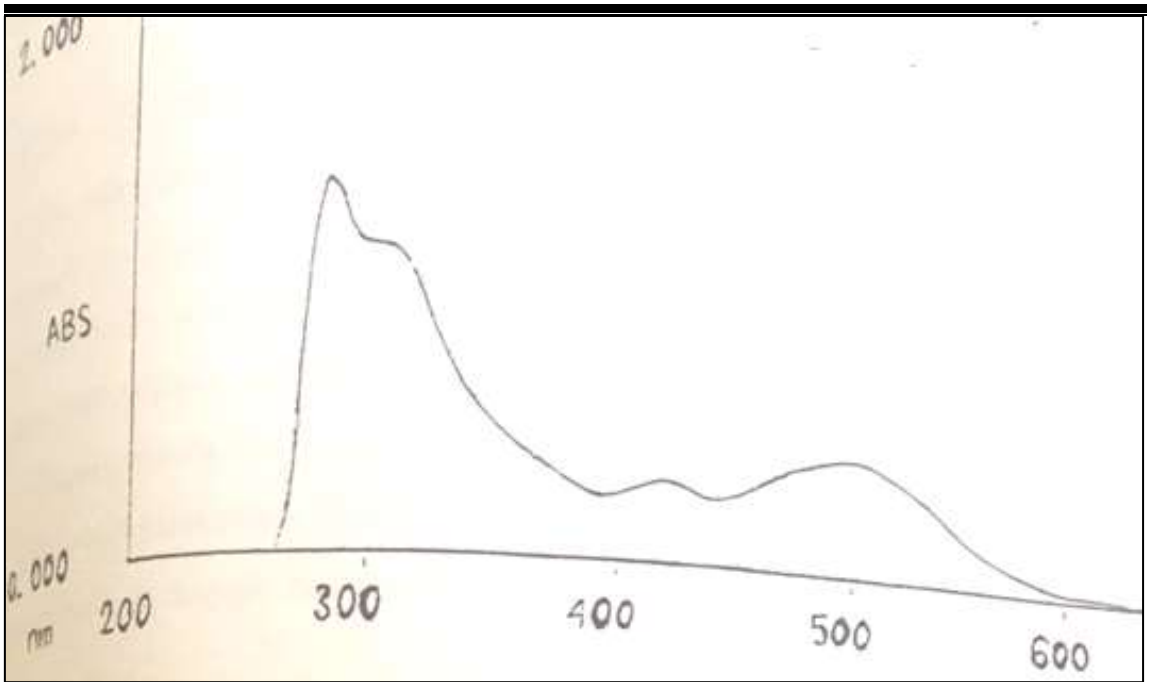
المجموعة الثانية، التي تظهر هو نتيجة الانتقال $\pi \rightarrow \pi^*$ الخاص بالحلقة الاروماتية ، امتصاص الاعظم يكون في 280 نانومتر. يعكس هذا الطول الموجي المقاس تأثير الاستبدال بواسطة أوكسوكروم Oxochrom (لمجموعة الهيدروكسيل) في تحول pathochromicshift في المديين I و E، من المعقدات المحضرة[2]. كما اظهر معقد ايون الكروم انتقالات اليكترونيه

$$, {}^4A2g \rightarrow {}^4T1g\ (p) \quad A_{2g} \rightarrow {}^4T1g\ (F)^4$$
$$T2g\ {}^4 \rightarrow {}^4A2g$$

وكذلك اظهر ايون الحديد انتقالات اليكترونيه $(G)\ T_2g \rightarrow A_1g,^6$ $^6A_1g \rightarrow {}^5T_1g$ وهذه الانتقالات تعزى الى تركيب ثماني السطوح، وهذه الانتقالات تتفق مع قيم الحساسية المغناطيسية للكروم 4.04 وللحديد 5.83 لاقتراح شكل المعقدات.



الشكل (1–4) طيف الأشعة فوق البنفسجية والمرئية لليكند



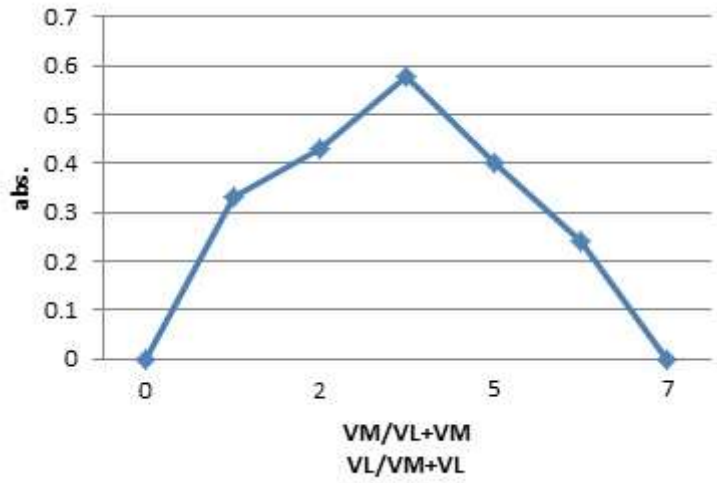
الشكل (1-5) طيف الأشعة فوق البنفسجية والمرئية لمعقد الكروم

قياسات الموصلية الكهربائية

أظهرت قياسات الموصلية الكهربائية المولارية للمعقدات المحضرة في مذيب ثنائي مثيل سلفوكساید DMSO.أن النتائج تظهر بوضوح قيم التوصيلية المولارية لمعقدات ثنائية التكافؤ هي غير موصلة للكهربائية.من النتائج الطيفية أعلاه الأشعة تحت الحمراء، الأشعة فوق البنفسجية والمرئية وقياس الموصلية الكهربائية يمكن اقتراح الشكل العام لمعقدات الفلافون كما في الجدول 1.

دراسة النسبة-المولية

النسبة المولية [9] هي واحدة من التقنيات الطيفية الأكثر شيوعا المستخدمة في دراسة المعقدات. بل هو أداة سهلة لتوضيح تكوين المعقدات في المحاليل. نسبة الامتصاص 2: 1من الليكند (L) الى الفلز Cr(III)يتم بواسطة الامتصاص بسبب التغير في الامتصاص للايون الفلزي من خلال الإحداثيات بين المعقدات والليكند الحر كما هو مبين في الشكل(1-6).عندما نرسم الامتصاصية مقابل الليكند. وكانت النتائج متسقة مع البيانات التي تم الحصول عليها باستخدام طريقة نسبة الانحدار.



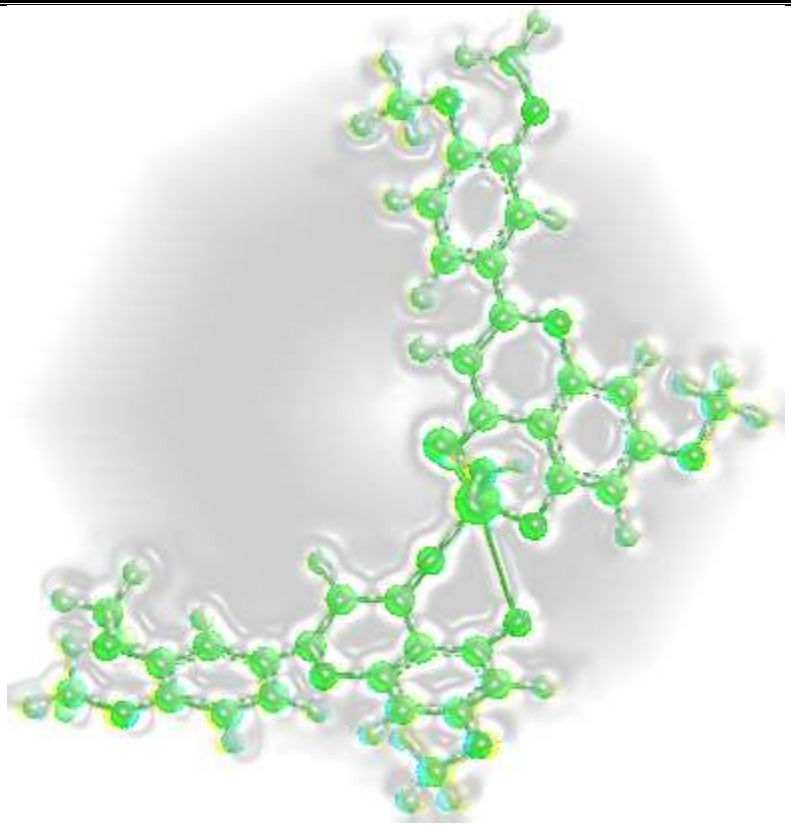
الشكل (1-6) مخطط تكوين معقدCr(III)

الدراسة المغناطيسية

العزم المغناطيسي للكروم والحديد في المعقدات المحضرة 4,04 و 5,83 B.Mعلى التوالي في درجة حرارة الغرفة وقريبة من القيمة المتوقعة للشكل الهندسي ثماني السطوح حول ذرة الفلز [12].

الدراسة النظرية

في الجدول 3، الشكل(1-7) المعقد المحضر بأسلوب الكرة والأسطوانة وبعض البيانات الهيكلية المختارة (طول الاواصر وزواياها)الهندسية المثالية. وكما هو مبين في هذا الشكل(1-7)، لا يوجد اتجاه واضح لتغير هذه الاشكال. قيم طول الاواصر والزوايا المثالية هي مشابهة تماما للنتائج التجريبية للمعقدات المقابلة.

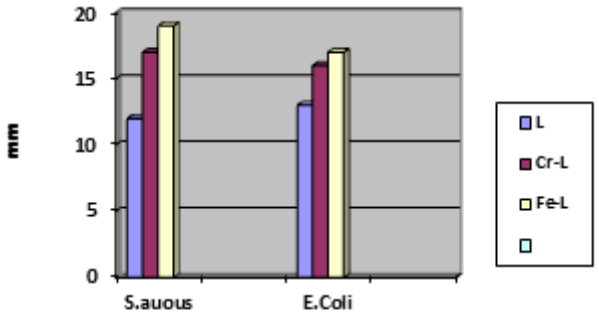


الشكل(1-7) التركيب المثالي الهندسي لمعقد الكروم(III)

اختبارات مضادات الميكروبات

قد تم دراسة الفعالية الحيوية للمعقدات، في تراكيز مختلفة واستخدام نوعين من البكتيريا المسببة للأمراض إشيريشيا كولي ,E. Coliوالمكورات العنقودية الشديدة .S. aurous منطقة التثبيط أكبر من 6ملم وتشير الى الفعالية المضادة للميكروبات. أظهرت المعقدات المحضرة حسب الشكل(1-8)كفاءة أفضل للمكورات العنقودية الذهبية والإشريكية كول.

مقارنة بين قيمة ليكند الفلافون مع هذه المعقدات تشير إلى أن المعقدات الفلزية المحضرة أظهرت فعالية حيوية مضادة للجراثيم أعلى منها لليكند. يمكن تفسير هذه الفعالية المتزايدة للمعقدات على أساس مفهوم أوفيرتونز [10]ونظرية تشيل التويد[16].علاوة على ذلك، كانت معقدات الحديد أكثر فعالية من معقد الكروم ضد الكائنات الحية الدقيقة التي تم اختبارها كما هو مبين في شكل(1-8).



شكل(1-8) مخطط تأثير الليكند والمعقدات المحضرة على النمو البكتيري

جدول 1التحليل الدقيق للعناصر وبعض الصفات الفيزياوية للمعقدات المحضرة

Compound	M.p. °C	color	%C Calc. (Found)	%H Calc. (Found)	%Metal Calc. (Found)
$[Cr(L)_2Cl H_2O]$ $C_{36}H_{30}ClCrO_{12}$	>240	Pale green	58.27 (58.37)	4.08 (4.15)	7.01 (7.21)
$[Fe(L)_2Cl H_2O]$ $C_{36}H_{30}ClFeO_{12}$	>240	brown	57.97 (57.89)	4.82 (4.73)	7.49 (7.61)

جدول 2 قيم طيف الأشعة تحت الحمراء، ألاطياف إلالكترونية، العزوم المغناطيسية للمعقدات المحضرة

Compound	IR, (cm^{-1})			λ_{max} (nm)	Assignment	$\mu_{eff.}$ BM	*ΔM (Ω^{-1} cm^2mol^{-1})
	$\upsilon^{(C=O)}$	$\upsilon^{(OH)}$	$\upsilon^{(M-O)}$				
L	1650(s)	3409 (m)	-	351,335 293	$n\rightarrow\pi^*$, $\pi\rightarrow\pi^*$	-	-
$[Cr(L)_2Cl H_2O]$	1635(s)	3265 (m)	510	295,335, 390,580	$^4A_{2g}\rightarrow {}^4T_{1g}$ (p) $^4A_{2g}\rightarrow {}^4T_{1g}$ (F) $^4A_{2g}\rightarrow {}^4T_{2g}$	4.04	9
$[Fe(L)_2Cl H_2O]$	1630(s)	3255 (br)	525	290,395	$^6A_1g\rightarrow T_2g$ (G) $^6A_1g\rightarrow {}^5T_1g$	5.83	5

br=broad, s=strong,and m=medium , *=molar conductance in 0.001M solutions in DMSO,C.T = charge transfer of L

جدول 3 بيانات الشكل التركيبي, طول الاصرة (ºA) وقيم الزوايا (º) للمعقد $[Cr(L)_2Cl H_2O]$

Parameters					
Bond lengths (ºA)		Bond angles(º)		Bond angles(º)	
C(51)-H(83)	1.113	C(51)-H(83)	1.113		
C(51)-H(82)	1.113	C(51)-H(82)	1.113	H(79)-C(49)-O(48)	109.442
C(51)-H(81)	1.113	C(51)-H(81)	1.113	H(78)-C(49)-O(48)	109.500
O(50)-C(51)	1.402	O(50)-C(51)	1.402	H(77)-C(47)-H(76)	109.520
C(49)-H(80)	1.113	C(49)-H(80)	1.113	H(77)-C(47)-H(75)	109.461
C(49)-H(79)	1.113	C(49)-H(79)	1.113	H(77)-C(47)-O(46)	109.462
C(49)-H(78)	1.113	C(49)-H(78)	1.113	H(76)-C(47)-H(75)	109.442
O(48)-C(49)	1.402	O(48)-C(49)	1.402	H(76)-C(47)-O(46)	109.442
C(47)-H(77)	1.113	C(47)-H(77)	1.113	H(75)-C(47)-O(46)	109.500
C(47)-H(76)	1.113	C(47)-H(76)	1.113	H(74)-C(45)-H(73)	109.523
C(47)-H(75)	1.113	C(47)-H(75)	1.113	H(74)-C(45)-H(72)	109.463
O(46)-C(47)	1.402	O(46)-C(47)	1.402	H(74)-C(45)-O(44)	109.457
C(45)-H(74)	1.113	C(45)-H(74)	1.113	H(73)-C(45)-H(72)	109.444
C(45)-H(73)	1.113	C(45)-H(73)	1.113	H(73)-C(45)-O(44)	109.442
C(45)-H(72)	1.113	C(45)-H(72)	1.113	H(72)-C(45)-O(44)	109.498
O(44)-C(45)	1.402	O(44)-C(45)	1.402	H(71)-C(43)-H(70)	109.520
C(43)-H(71)	1.113	C(43)-H(71)	1.113	H(71)-C(43)-H(69)	109.462
C(43)-H(70)	1.113	C(43)-H(70)	1.113	H(71)-C(43)-O(42)	109.462
C(43)-H(69)	1.113	C(43)-H(69)	1.113	H(70)-C(43)-H(69)	109.441
O(42)-C(43)	1.402	O(42)-C(43)	1.402	H(70)-C(43)-O(42)	109.442
C(41)-H(68)	1.113	C(41)-H(68)	1.113	H(69)-C(43)-O(42)	109.500
C(41)-H(67)	1.113	C(41)-H(67)	1.113	H(68)-C(41)-H(67)	109.520
C(41)-H(66)	1.113	C(41)-H(66)	1.113	H(68)-C(41)-H(66)	109.463
O(40)-C(41)	1.402	O(40)-C(41)	1.402	H(68)-C(41)-O(40)	109.460
O(38)-H(65)	0.942	O(38)-H(65)	0.942	H(67)-C(41)-H(66)	109.442
O(38)-H(64)	0.942	O(38)-H(64)	0.942	H(67)-C(41)-O(40)	109.441
O(38)-Cr(37)	1.820	O(38)-Cr(37)	1.820	H(66)-C(41)-O(40)	109.502
Cr(37)-Cl(39)	2.170	Cr(37)-Cl(39)	2.170	C(47)-O(46)-C(34)	110.800
O(36)-Cr(37)	3.112	O(36)-Cr(37)	3.112	C(43)-O(42)-C(33)	110.800
C(35)-H(63)	1.100	C(35)-H(63)	1.100	C(35)-C(34)-O(46)	120.001
C(34)-C(35)	1.395	C(34)-C(35)	1.395	C(35)-C(34)-C(33)	119.997
C(34)-O(46)	1.355	C(34)-O(46)	1.355	O(46)-C(34)-C(33)	120.002
C(33)-C(34)	1.395	C(33)-C(34)	1.395	C(34)-C(33)-O(42)	119.998
C(33)-O(42)	1.355	C(33)-O(42)	1.355	C(34)-C(33)-C(32)	120.003
C(32)-H(62)	1.100	C(32)-H(62)	1.100	O(42)-C(33)-C(32)	119.998
C(32)-C(33)	1.395	C(32)-C(33)	1.395	H(62)-C(32)-C(33)	120.000
C(31)-H(61)	1.100	C(31)-H(61)	1.100	H(62)-C(32)-C(31)	120.000
C(31)-C(32)	1.395	C(31)-C(32)	1.395	C(33)-C(32)-C(31)	120.000
C(30)-C(35)	1.395	C(30)-C(35)	1.395	H(63)-C(35)-C(34)	120.000
C(30)-C(31)	1.395	C(30)-C(31)	1.395	H(63)-C(35)-C(30)	120.000
C(29)-C(30)	1.337	C(29)-C(30)	1.337	C(34)-C(35)-C(30)	119.999
C(28)-H(60)	1.100	C(28)-H(60)	1.100	H(61)-C(31)-C(32)	120.002
C(28)-C(29)	1.337	C(28)-C(29)	1.337	H(61)-C(31)-C(30)	120.001
C(27)-C(28)	1.351	C(27)-C(28)	1.351	C(32)-C(31)-C(30)	119.997

O(26)-Cr(37)	1.820	O(26)-Cr(37)	1.820	C(35)-C(30)-C(31)	120.003
C(27)-O(26)	1.208	C(27)-O(26)	1.208	C(35)-C(30)-C(29)	119.998
O(25)-C(29)	1.326	O(25)-C(29)	1.326	C(31)-C(30)-C(29)	119.999
C(24)-H(59)	1.100	C(24)-H(59)	1.100	C(30)-C(29)-C(28)	118.547
C(23)-O(25)	1.355	C(23)-O(25)	1.355	C(30)-C(29)-O(25)	118.547
C(23)-C(24)	1.337	C(23)-C(24)	1.337	C(28)-C(29)-O(25)	122.906
C(22)-C(27)	1.351	C(22)-C(27)	1.351	C(51)-O(50)-C(19)	110.800
C(22)-C(23)	1.337	C(22)-C(23)	1.337	C(29)-O(25)-C(23)	108.794
C(21)-O(36)	1.355	C(21)-O(36)	1.355	H(59)-C(24)-C(23)	120.000
C(21)-C(22)	1.337	C(21)-C(22)	1.337	H(59)-C(24)-C(19)	120.000
C(20)-H(58)	1.100	C(20)-H(58)	1.100	C(23)-C(24)-C(19)	119.999
C(20)-C(21)	1.337	C(20)-C(21)	1.337	H(60)-C(28)-C(29)	121.200
C(19)-O(50)	1.355	C(19)-O(50)	1.355	H(60)-C(28)-C(27)	121.199
C(24)-C(19)	1.337	C(24)-C(19)	1.337	C(29)-C(28)-C(27)	117.601
C(19)-C(20)	1.337	C(19)-C(20)	1.337	C(28)-C(27)-O(26)	121.999
O(18)-Cr(37)	1.820	O(18)-Cr(37)	1.820	C(28)-C(27)-C(22)	114.999
C(17)-H(57)	1.100	C(17)-H(57)	1.100	O(26)-C(27)-C(22)	123.000
C(16)-H(56)	1.100	C(16)-H(56)	1.100	O(25)-C(23)-C(24)	115.698
C(16)-C(17)	1.395	C(16)-C(17)	1.395	O(25)-C(23)-C(22)	124.299
C(15)-C(16)	1.395	C(15)-C(16)	1.395	C(24)-C(23)-C(22)	120.000
C(15)-O(40)	1.355	C(15)-O(40)	1.355	O(50)-C(19)-C(24)	120.000
C(14)-C(15)	1.395	C(14)-C(15)	1.395	O(50)-C(19)-C(20)	120.000
C(14)-O(44)	1.355	C(14)-O(44)	1.355	C(24)-C(19)-C(20)	120.000
C(13)-H(55)	1.100	C(13)-H(55)	1.100	C(27)-C(22)-C(23)	117.600
C(13)-C(14)	1.395	C(13)-C(14)	1.395	C(27)-C(22)-C(21)	117.600
C(12)-C(17)	1.395	C(12)-C(17)	1.395	C(23)-C(22)-C(21)	120.000
C(12)-C(13)	1.395	C(12)-C(13)	1.395	H(58)-C(20)-C(21)	120.000
C(11)-C(12)	1.337	C(11)-C(12)	1.337	H(58)-C(20)-C(19)	120.000
C(10)-H(54)	1.100	C(10)-H(54)	1.100	C(21)-C(20)-C(19)	120.000
C(10)-C(11)	1.323	C(10)-C(11)	1.323	O(36)-C(21)-C(22)	124.298
C(9)-C(10)	1.351	C(9)-C(10)	1.351	O(36)-C(21)-C(20)	115.699
O(8)-Cr(37)	1.832	O(8)-Cr(37)	1.832	C(22)-C(21)-C(20)	120.000
C(9)-O(8)	1.208	C(9)-O(8)	1.208	C(41)-O(40)-C(15)	110.802
O(7)-C(11)	1.355	O(7)-C(11)	1.355	H(56)-C(16)-C(17)	120.002
C(6)-H(53)	1.100	C(6)-H(53)	1.100	H(56)-C(16)-C(15)	120.002
C(5)-O(7)	1.355	C(5)-O(7)	1.355	C(17)-C(16)-C(15)	119.996
C(5)-C(6)	1.337	C(5)-C(6)	1.337	C(45)-O(44)-C(14)	110.802
C(4)-C(9)	1.351	C(4)-C(9)	1.351	C(16)-C(15)-O(40)	119.997
C(4)-C(5)	1.337	C(4)-C(5)	1.337	C(16)-C(15)-C(14)	120.005
C(3)-O(18)	1.355	C(3)-O(18)	1.355	O(40)-C(15)-C(14)	119.998
C(3)-C(4)	1.337	C(3)-C(4)	1.337	C(15)-C(14)-O(44)	119.998
C(2)-H(52)	1.100	C(2)-H(52)	1.100	C(15)-C(14)-C(13)	119.999
C(2)-C(3)	1.337	C(2)-C(3)	1.337	O(44)-C(14)-C(13)	120.002
C(1)-O(48)	1.355	C(1)-O(48)	1.355	H(57)-C(17)-C(16)	120.001
C(6)-C(1)	1.337	C(6)-C(1)	1.337	H(57)-C(17)-C(12)	120.000
C(1)-C(2)	1.337	C(1)-C(2)	1.337	C(16)-C(17)-C(12)	119.999
		H(83)-C(51)-H(82=109.520		H(55)-C(13)-C(14)	120.001
		H(83)-C(51)-H(81) 109.462		H(55)-C(13)-C(12)	120.002
		H(83)-C(51)-O(50) 109.461		C(14)-C(13)-C(12)	119.997

	H(82)-C(51)-H(81) 109.442	C(17)-C(12)-C(13)	120.003
	H(82)-C(51)-O(50) 109.442	C(17)-C(12)-C(11)	119.998
	H(81)-C(51)-O(50) 109.500	C(13)-C(12)-C(11)	119.999
	H(80)-C(49)-H(79) 109.520	C(12)-C(11)-C(10)	119.149
	H(80)-C(49)-H(78) 109.462	C(12)-C(11)-O(7)	119.149
	H(80)-C(49)-O(48) 109.462	C(10)-C(11)-O(7)	121.702
	H(79)-C(49)-H(78) 109.442	H(65)-O(38)-H(64)	120.000
	C(9)-C(4)-C(5) 117.600	H(65)-O(38)-Cr(37)	120.000
	C(9)-C(4)-C(3) 117.600	H(64)-O(38)-Cr(37)	120.000
	C(5)-C(4)-C(3) 120.000	Cr(37)-O(36)-C(21)	113.868
	O(18)-C(3)-C(4) 124.298	Cr(37)-O(26)-C(27)	180.000
	O(18)-C(3)-C(2) 115.699	O(38)-Cr(37)-Cl(39)	116.551
	C(4)-C(3)-C(2) 120.000	O(38)-Cr(37)-O(36)	129.574
	H(52)-C(2)-C(3) 120.000	O(38)-Cr(37)-O(26)	126.705
	H(52)-C(2)-C(1) 120.000	O(38)-Cr(37)-O(18)	131.724
	C(3)-C(2)-C(1) 120.000	O(38)-Cr(37)-O(8)	118.719
	O(48)-C(1)-C(6) 120.000	Cl(39)-Cr(37)-O(36)	113.854
	O(48)-C(1)-C(2) 120.000	Cl(39)-Cr(37)-O(26)	90.000
	C(6)-C(1)-C(2) 120.000	Cl(39)-Cr(37)-O(18)	90.000

References

1.A.W. Star, and T.J. Marby, Phytochemistry, 10, 2812 (1971).

2.Chem. Office (2004) CHEM 3D ultra version 8.0. Cambridge Soft Corporation, Cambridge, USA.

3.Cazarolli, L.H.; Zanatta, L.; Jorge, A.P.; de Sousa, E.; Horst, H.; Woehl, V.M.; Pizzolatti, M.G.; Szpoganicz, B.; Silva, F.R.M.B. Follow-up studies on glycosylated flavonoids and their complexes with vanadium: Their anti- hyperglycemic potential role in diabetes. Chemico-Biol. Interact. 2006, 163, 177–191.

4.razul, M.; Budzisz, E. Biological activity of metal ions complexes of chromones coumarins and flavones. Coord. Chem. Rev. 2009, 253, 2588–2598

5.E. Francesco, G. Salvatore, M. Luigi and C. Massimo, Phytochem., 68, 939 (2007).

6. H. X. Xu, M. Wan, H. Dong, , P. But and L. Y. Foo, Biol. Pharm. Bull., 23, 1072 (2000).

7.Irving H. and Williams R.S.P., J. Chem. Soc., 3192 (1953).

8. Ferguson, P. J.; Kurowska, E. M.; Freeman, D. J. In vivo inhibition of growth of human tumor lines by flavonoid fractions from cranberry extract. Nutr.Cancer 2006, 56, 86-94.

9.Job, P. Recherches sur la formation de complexes mineraux en solution, et sur leur stability (in Paris). Ann. Chim. 1928, 9, pp 113-203

10.Y. Anjaneyalu, R. P. Rao, Synth. React. Inorg.-Org. chem. 16, 1986, pp. 257. And Maria M. Kasprzak, Andrea Erxleben and Justyn Ochocki, "Properties and applications of flavonoid metal complexes," Review Article 2015. DOI: 10.1039/C5RA05069C

11.Teixeira S.; Siquet, C.; Aloes, C.; Boal, I.; Marques, M. P.; Borges, F.; Lima, J. L. F. C.; Reis, S. Structure-property studies on the antioxidant activity of flavonoids present in diet. Free Radic. Biol. Med. 2005, 39, 1099-1108
12. Lever, A.B.P. *InorganicElectronic Spectroscopy;* Elsevier:Amsterdam,The Netherlands,1986;pp.385–392.
13.Cushnie, T.; Lamb, A. Antimicrobial activity of flavonoids. Int. J. Antimicrobial. Agents 2005, 26, 343-356.
14.M.L. Go, X.Wu and X. L. Liu, Current. Medicinal.Chemistry, 12, 483 (2005).
15.N. Liming, W. J. Kimberly, M. Weingarten and S. A. Janes, PCT Int. Appl., 411 (2003).
16.Perepichka DF, Bryce MR (2005) Molecules with exceptional small HOMO-LUMOgaps. Angew Chem Int Ed 44: 5370-5373.
17. S. Ducki, R. Forrest, J.A. Hadfield, A. Kendall, N. J. Lawrence, A. T. Mc Gown and D. Rennson, Bioorg. Med. Chem. Lett., 8, 1051 (1998).
18.T. Torigoo, M. Arisawa, S. IIoch, M. Fujiu and H.B. Mayuyama, Biochem. Biophys. Res. Commun., 112, 833
19.W. Shen Jeu, L. Cheng Tsung, T. Lo Ti, W. Jing Ru, K. Hrogn Huey, W. Jih Pyang and L.Chun Nan, Eur. J. Med. Chem., 40 , 103 (2005).
20.Young Hoon Kim, Jeongsoo Kim, Haeil Park, Hyun Pyo Kim, Biol. Pharm. Bull, 30 (80),Pp1450-1455, (2007).

Spectral, Biological Study and Theoretical Evaluation of flavonoids Complex with metals Cr^{III}, Fe^{III}

EmanHussam Mohamed
Chemistry department, **Education for women**, **AL-Anbar University**

Abstract

A new series of Cr (III) and Fe (III) complexes with the Flavone ligand were prepared. The spectroscopic method and elemental analysis was verified their structures. All the prepared complexes have been identified by available spectroscopic tools (UV-Visible and IR) in addition the structure of complexes was characterized by magnetic moments and molar conductance in DMSO solution .From the above of these studies and measurements suggest an Octahedral geometry around Cr(III) and Fe(III) complexes.

A theoretical treatment of the formation of complexes in the gas phase was studied; this was done using the HYPERCHEM-6 program for the Molecular mechanics and Semi-empirical calculations.

Thesynthesizedcompoundswere testedforantimicrobial activity against S. aurous and E. *Coli* bycup plate diffusion method. There sultsindicate the enhancedactivityof metal complexesovertheparent ligands.