**چکیده**

تحیقات این رساله شامل دو موضوع اصلی است، اول: کمپلکس‌های جدیدی با یک جفت اسید آمینه ایزومر [Pd(daf)(Leu)]Cl (**I**) و (**II**) [Pd(daf)(Ile)]Cl (که در آن Leu و Ile آنیون های لوسین و ایزولوسین و daf مخفف 4و5-دیازافلورن-9-ان است) تهیه و شناسایی شد. جزئیات برهمکنش این کمپلکس‌های ضد توموری با DNA تیموس گوساله (CT-DNA) و آلبومین سرم گاوی (BSA) توسط تکنیک‌های فلورسانس، جذب الکترونیکی، دو رنگی حلقوی و ژل الکتروفورز در PH خون بررسی شد. هر دوی این ترکیبات در شرایط آزمایشگاهی فعالیت سمیت سلولی قابل توجهی بر علیه سلول‌های سرطانی MCF-7 و HCT-116 در مقایسه با داروی ضد سرطان شناخته شده‌ی کربوپلاتین نشان دادند. آنالیز مدل اتصال مولکولی کمپلکس‌های لوسین و ایزولوسین (**I** و **II**) با DNA و BSA به عنوان یک روش مکمل برای پیش‌بینی مکان‌های اتصال و جهت‌گیری در طول فرآیندهای برهمکنش استفاده شد. نتایج به‌دست‌آمده از همه این رویکردها، برهمکنش خوب این کمپلکس‌های فلزی با DNAبه صورت شیاری و با BSA از طریق پیوندهای هیدروژنی و نیروهای واندروالس را تایید می‌کنند. در مطالعات خاموش سازی نشر فلورسانس BSA، فرآیندهای جدیدی مشاهده شد که تاکنون در منابع گزارش نشده است. کمپلکس لوسین در ابتدا به صورت استاتیک در غلظت‌های پایین‌تر و به صورت ترکیبی از استاتیک و دینامیک در غلظت‌های بالاتر خاموش سازی می‌کند، در حالی که کمپلکس ایزولوسین در سه محدوده غلظتی به صورت مختلف تأثیر می‌گذارد: خاموش سازی با مکانیسم استاتیک و ترکیبی در غلظت‌های کمتر، افزایش نشر در غلظت‌های متوسط و دوباره خاموش سازی با مکانیسم استاتیک. در محدوده‌های غلظتی بالاتر.

دوم: سه کمپلکس فلزی حاوی لیگاند اسید پیکولینیک (dipic) با فرمول trans-[Pd(Hdipic)2].2H2O (**III**)، K[Pd(dipic)Cl].H2O (**VI**)) و(**V**) trans-Na2[Pd(dipic)2].2H2O به روش‌های گزارش شده سنتز شد. این کمپلکس‌ها در محلول به صورت گونه‌‌هایی با بارهای 00/0 برای کمپلکس **III**، 00/1- برای کمپلکس **VI** و 00/2- برای کمپلکس **V** یونیزه می‌شود. فعالیت سمیت سلولی آنها در مقایسه با کربوپلاتین به عنوان استاندارد، در مقابل رده سلولی سرطانی MCF-7، چشمگیر بود. در ادامه، تعیین توصیفگرهای مکانیک کوانتومی بر اساس محاسبات DFT صورت گرفت و جزئیات برهمکنش این کمپلکس‌ها با DNA تیموس گوساله از طریق اسپکتروفتومتری (جذب الکترونیکی و فلورسانس)، ضریب تقسیم، اندازه‌گیری ویسکومتری، ژل الکتروفورز و مطالعات داکینگ مولکولی بررسی شد. داده‌های حاصل نشان می‌دهد که کمپلکس با بار صفر (III) تمایل سمیت سلولی و برهمکنش با DNA بهتری نسبت به **VI** و **V** با بارهای 00/1- و 00/2- نشان می‌دهد که احتمالا" به دلیل دفع آنها توسط بارهای منفی موجود در فسفات دی استر موجود در اسکلت DNA باشد.

**کلمات کلیدی**: کمپلکس‌های پالادیوم(II)، دافون، آمینو اسید، دی‌پیکولینیک اسید (dipic)، سیتوتوکسیسیتی و برهمکنش با DNA/BSA