

### چکیده

در تلاش برای کشف ترکیبات فعال زیستی بالقوه جدید، پنج کمپلکس تک هسته‌ای پالادیوم (II) (A:  $[\text{Pd}(\text{phen})(\text{acac})]\text{NO}_3$ , B:  $[\text{Pd}(\text{bpy})(\text{acac})]\text{NO}_3$ , C:  $[\text{Pd}(\text{phen})(\text{proli-dtc})]\text{NO}_3$ , D:  $[\text{Pd}(\text{bpy})(\text{proli-dtc})]\text{NO}_3$  and E:  $[\text{Pd}(\text{mor-ac})_2]$ ) سنتز شد و ساختار آنها از طریق روش‌های تجربی و محاسباتی شناسایی شد. نظریه تابعی چگالی، هندسه مربع مسطح را برای این پنج کمپلکس پالادیوم فلزی پیشنهاد داد. مکان‌های الکترون دوست و هسته دوست این ترکیبات توسط نقشه پتانسیل الکترواستاتیک مولکولی (MEP) شناسایی شدند. همچنین پایداری کمپلکس‌های فلزی توسط تجزیه و تحلیل HOMO/LUMO بصورت محاسباتی و flask-shaking بصورت تجربی تعیین شد. فعالیت چربی دوستی و خواص ضدتوموری این ترکیبات موثرتر از سیس پلاتین بودند. همچنین شبیه‌سازی و پیش‌بینی سمیت توسط نرم افزار OSIRIS DataWarrior فراهمی زیستی خوراکی مناسب و امتیاز دارویی و دارورسانی خوبی را برای این ترکیبات نشان داد. برهم کنش تمامی کمپلکس‌ها با CT-DNA و BSA به طور کامل توسط روش‌های مختلف از جمله فلورسانس، UV-Vis، CD، ویسکوزیته، آزمایش‌های الکتروفورز ژل و شبیه‌سازی داکینگ مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که کمپلکس‌های A، B، C و D توسط برهم کنش هیدروفوبی یا آبگریز بصورت اینترکیلشن به DNA متصل می‌شوند اما کمپلکس E توسط نیروهای واندروالس و پیوند هیدروژنی بصورت شیاری به DNA متصل می‌شود. علاوه بر این، شبیه‌سازی داکینگ، نتایج تجربی را تایید کرده و نشان می‌دهد که تمامی پنج کمپلکس فلزی به محل (I) ساختار BSA متصل می‌شوند.

کلمات کلیدی: برهم کنش، پالادیوم (II)، داکینگ مولکولی، فلورسانس، BSA، DNA، DFT