ملخص:

يعد هذا العمل جزءًا من التوصيف الطيفي والتركيبي بواسطة حيود الأشعة السينية بالإضافة إلى الخصائص البصرية غير الخطية والبيولوجية للمركبات العضوية القائمة على التريازول، وكذلك الالتحام الجزيئي.

دفعتنا النتائج البيولوجية الواعدة التي تم الحصول عليها سابقًا داخل فريقنا إلى دراسة تأثير الاستبدال على النشاط البيولوجي، من أجل تحديد المجموعة (المجموعات) المسؤولة عن هذه الأنشطة، من ناحية، والمضي قدمًا في التحقيق و التحسين من خلال الالتحام الجزيئي، من ناحية أخرى.

كشفت دراسة الخصائص البيولوجية للقواعد الخمسة لـ Schiff عن نشاط مضاد للفطريات جيد ضد مسببات الأمراض النباتية. بينما أظهرت نتائج النشاط المضاد للبكتيريا أن مركباتنا غير نشطة ضد بعض السلالات المختبرة ونشطة بشكل معتدل ضد البعض الآخر.

يُظهر التحقيق في الخصائص البصرية غير الخطية، على قواعد شيف الثلاثة (L1) و (L2) و (L3)، استجابة جيدة للثاني (SHG) والثالث التوافقي (TH) تتجاوز حتى المرجع LiNbO3.

مكننا الالتحام الجزيئي من التنبؤ بألفة وأنماط التفاعل بين مختلف الروابط والبروتينات المسؤولة عن تنشيط الكائنات الحية الدقيقة الأربعة التي تم اختبارها سابقًا في المختبر.

سمح لنا هذا النهج بالربط بين الدراسة البيولوجية التي أجريت تجريبياً في المختبر ونهج المحاكاة النظرية في السيليكو.

الكلمات المفتاحية: قواعد شيف، 1 ، 2 ، 4-تريازول ، حيود الأشعة السينية ، الالتحام الجزيئي ، الخصائص البيولوجية ، البصريات اللاخطية.