

## ÖZET

### **1H-İndol-2,3-Dion-3-(N-Substitue Tiyosemikarbazon) Türevlerinin ve Metal Komplekslerinin Sentezleri, Yapı Tayinleri ve Moleküler Modelleme Çalışmaları**

*AKKAYA, Yusuf; Niğde Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalı*

*Danışman: Prof. Dr. Fatma KANDEMİRLİ*

Semikarbazit bileşiklerinde oksijen atomunun yerine kükürt atomu varsa bu bileşiklere tiyosemikarbazit denir. Semikarbazonlar keton veya aldehitin ve semikarbazitin kondensasyon reaksiyonu ile oluşur. Bazı semikarbazonlar ve tiyosemikarbazonlar ve bunların metal komplekslerinin anti-viral ve anti-kanser etki gösterdiği bilinir. Bu çalışmada; isatin-3-(N-(2-florofenil)) tiyosemikarbazon [I2FPTH2] ve isatin-3-(N-(2- klorofenil)) tiyosemikarbazon [I2CPTH2] ligandları sentezlenerek ligandların yapıları FT-IR, UV-Visible, elementel analiz (CHNS), 1H-NMR, 13C-NMR yöntemleriyle; ligandların Zn(II) kompleksleri sentezlenerek komplekslerin yapıları FT-IR, UVVisible, 1H-NMR, 13C-NMR yöntemleriyle; Ni(II) kompleksleri sentezlenerek komplekslerin yapıları ise FT-IR, UV-Visible spektrumları yardımıyla aydınlatıldı. Ligandların reaksiyon mekanizması yarı deneysel metot AM1 ile çalışıldı. Ligandlar ile elde edilen Çinko(II) ve Nikel(II) komplekslerinin elektronik ve geometrik parametreleri RHF ve B3LYP metodu 3-21G(d,p), 3-21G\*(d,p), 6-31G(d,p), 6-311G(d,p), 6-311+G(d,p), 6-311++G(d,p), 6-311++G(2d,2p) temel setleri kullanılarak hesaplandı. Ligandların NBO (doğal bağ orbitali) analiz çalışması yapıldı. Ligandların ve Zn(II) ve Ni(II) komplekslerinin teorik ve deneysel FT-IR, UV, NMR çalışmaları yapıldı.

## ABSTRACT

### **Synthesis, Structure Determination and Molecular Modeling Studies of 1H-Indole-2,3-Dione-3-(N-Substituted Thiosemicarbazone) Derivatives and Metal Complexes**

*AKKAYA, Yusuf; Nigde University Graduate School of Natural and Applied Sciences Department of Chemistry*

*Supervisor: Prof. Dr. Fatma KANDEMİRLI*

A thiosemicarbazide is an analog with a sulfur atom in place of the oxygen atom, a semicarbazone is called formed by a condensation reaction between a ketone or aldehyde and semicarbazide. Some semicarbazones, and thiosemicarbazones are known to have anti-viral and anti-cancer activity. In this study, being synthesized isatin-3-N(2-fluorophenyl)thiosemicarbazone, isatin-3-N(2-chlorophenyl)thiosemicarbazone and their zinc(II) and nickel(II) complexes were synthesized and their structure were characterized by elemental analysis, infrared, ultraviolet, 1H-NMR and 13C-NMR. Reaction mechanism of ligands were studied by semi-empirical method-AM1. The electronic and geometric parameters of ligands and their metal complexes were calculated at the level of the RHF and B3LYP method by using 3-21G, 3-21G\*, 6-31G(d,p), 6-311G(d,p), 6-311+G(d,p), 6-311++G(d,p), 6-311++G(2d,2p) basis sets. NBO analysis of ligands were studied and theoretical and experimental FT-IR, UV and NMR studies for ligands and their Zinc(II) and Nickel(II) complexes were carried on.