

ÖZET

BİYOLOJİK AKTİVİTEYE SAHİP BAZI N-SUBSTİTUE TİYOSEMİKARBAZON TÜREVLERİNİN VE METAL KOMPLEKSLERİNİN SENTEZLERİ, YAPILARININ AYDINLATILMASI VE TEORİK ÇALIŞMA

ULUDAĞ, Lokman
Niğde Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Kimya Ana Bilim Dalı

Danışman :Prof. Dr. Fatma KANDEMİRLİ

Aralık 2014, 194 sayfa

Tiyosemikarbazon türevleri kimyasal özelliğinden dolayı antitümör, antibakteriyel, ve antiviral gibi biyolojik aktiviteye sahip olduğu için ilgi çekicidir. İsatın türevleriyle geçiş metallere birçok koordinasyon bileşiği, liganttan daha fazla biyolojik aktivite özelliğine sahiptir.

Bu çalışmada; 1-(isatin)-4-(3'-metoksifenil)-3-tiyosemikarbazon, 1-(5'-floroisatin)-4-(3'-metoksifenil)-3-tiyosemikarbazon, 1-(5'-metoksiisatin)-4-(3'-metoksifenil)-3-tiyosemikarbazon ligandları ve bunların Zn(II) kompleksleride sentezlenerek yapıları FT-IR, UV-Visible, elementel analiz (CHNS), ¹H-NMR, ¹³C-NMR yöntemleriyle aydınlatıldı

Ligandların reaksiyon mekanizması, yarı deneysel metot AM1 ile çalışıldı. Ligandlar ile elde edilen Zn(II) komplekslerinin elektronik ve geometrik parametreleri teorik olarak B3LYP metodu 6-311G(d,p), 6-311G(2d,2p) ve 6-31G(2d,2p) temel setleri kullanılarak hesaplandı. Ligandların ve Zn(II) komplekslerinin NBO (doğal bağ orbitali) analiz çalışması yapıldı.

Anahtar sözcükler: Antiviral, İsatın tiyosemikarbazon, Zn(II) kompleksi, biyolojik aktivite, B3LYP

SUMMARY

SYNTHESIS, STRUCTURAL DETERMINATION, AND THEORETICAL STUDY OF SOME ISATIN THIOSEMICARBAZONES DERIVATIVES AND THEIR METAL COMPLEXES HAVING BIOLOGICAL ACTIVITY

ULUDAĞ, Lokman
Nigde University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Chemistry

Supervisor : Professor Dr. Fatma KANDEMİRLİ

December 2014, 194 pages

Thiosemicarbazone derivatives are of considerable interest because of their chemistry and potentially beneficial biological activities, such as antitumor, antibacterial, antiviral and antimalarial activities. Many coordination compounds of transition metals with isatin derivatives show greater activity than the ligands alone.

In this study, being synthesized 1-(isatin)-4-(3'-methoxyphenyl)-3-thiosemicarbazone, 1-(5'-floroisatin)-4-(3'- methoxyphenyl)-3-thiosemicarbazone, 1-(5'-methoxyisatin)-4-(3'-methoxyphenyl)-3- thiosemicarbazone and their Zn(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 B3LYP method by using 6-311G(d,p), 6-311G(2d,2p) ve 6-31G(2d,2p) basis sets. NBO analysis of ligands were studied and theoretical and experimental FT-IR, UV and NMR studies for ligands and their Zn(II) were carried on

Keywords : Antiviral, , Isatin thiosemicarbazone, Zn(II) complex, Biological activity, B3LYP