

**I. ULUSLARARASI
BİLİMSEL VE MESLEKİ
ÇALIŞMALAR SEMPOZYUMU (BILMES 2017)
ÖZET KİTABI**



**I. INTERNATIONAL
SCIENTIFIC AND VOCATIONAL
STUDIES CONGRESS (BILMES 2017)
ABSTRACT BOOK**

EKİM/OCTOBER 2017

Kitabın Adı: I. Uluslararası Bilimsel ve Mesleki Çalışmalar
Sempozyumu Özet Kitabı

ISBN: 978-605-82164-0-2

Hazırlayanlar: Tolga YÜCEHAN
e-mail: tolgayucehan@gmail.com

Umut SARAY
e-mail: umutsaray@gmail.com

Yayın Tarihi: 06.11.2017



N-(DİALKİL/ARİL-KARBAMOTİYOİL)-3-NİTROBENZAMİT BİLEŞİKLERİ VE BUNLARIN GEÇİŞ METALLERİ İLE KOMPLEKSLERİNİN SENTEZİ, YAPILARI VE ANTİBAKTERİYEL AKTİVİTELERİ

Gun Binzet ¹, Ilkay Gumus ², Aylin Dogen ³, Hakan Arslan ⁴

¹ Mersin University, Faculty of Education, Department of Science Education, Mersin

polatgun@gmail.com

² Mersin University, Faculty of Arts and Science, Department of Chemistry, Mersin

gumus.ilkay84@gmail.com

³ Mersin University, Faculty of Pharmacy, Department of Pharmaceutical Microbiology, Mersin

aylinats@yahoo.com

⁴ Mersin University, Faculty of Arts and Science, Department of Chemistry, Mersin

hakanaraslan@mersin.edu.tr

Özet

N-(Dialkil/arilkarbamotiyol)-3-nitrobenzamid (Alkil/aril: metil, etil, propil, bütül ve fenil) isimli yeni benzoil tiyoüre türevi bileşikler ve bunların geçiş metalleriyle yaptıkları (Metal: Ni(II) ve Cu(II)) kompleksler hazırlandı. Elde edilen bileşiklerin yapıları; elementel analiz, IR spektroskopisi ve NMR spektroskopisi yöntemleri ile karakterize edildi. Bunun yanısıra cis-bis[3-nitro-N-(di-n-propilkarbamotiyol)benzamido-κO,S]nikel(II) ve cis-bis[3-nitro-N-(di-n-propilkarbamotiyol)benzamido-κO,S]bakır(II) bileşiklerinin kristal yapıları X-ışınları Bruker APEX-II CCD model tek kristal difraktometresi ile aydınlatıldı. Veri toplama sırasında kristaller 100 K'de tutuldu. Yapılar, SHELXL-97 programı kullanılarak direk metot ile çözümlendi ve yapılarının arıtılmasında SHELXL-97 programı F 2 üzerinde en küçük karakter yöntemi kullanıldı. Kristal yapı analizi sonuçları, her iki kompleksin ortorombik sistemde Fdd2 uzay grubu ile kristallendiğini ortaya koydu. Benzoiltiyoüre türevi bileşikler koordinasyon bölgeleri olarak işlev görebilen bir C=O ve C=S grupları ihtiva ederler, bunlar metal iyonları ile reaksiyona girerek kompleks bileşikler oluştururlar. X-ışını tek kristal kırınım difraktometresinin analiz sonuçlarına göre, merkezdeki metal atomunun ligandın yapısında bulunan iki oksijen ve iki kükürt atomu üzerinden bağlanarak cis yapıda bozuk kare düzlem bir koordinasyona sahip bir kompleks oluşturduğu gözlenmiştir. Karbonil ve tiyokarbonil gruplarının bağ uzunlukları normal çift bağ uzunluğundan uzun ve normal tek bağ uzunluğundan kısa olması burada kuvvetli bir delokalizasyon olduğunu göstermektedir. Bu bileşiklerin, dört adet Gram pozitif bakteri (*S. aureus*, *S. pneumoniae*, *E. faecalis* ve *B. subtilis*), iki adet Gram-negatif bakteri (*E. coli* ve *P. aeruginosa*) ile üç maya suşuna karşı (*C. albicans*, *C. parapsilosis* ve *C. glabrata*) etkileri araştırılmıştır. Elde edilen antimikrobiyal aktivite deney sonuçlarına göre, sentezlenen bütün bileşiklerin Gram pozitif bakterilerine karşı daha etkili olduğu gözlenmiştir. Özellikle, N-(di-n-propilkarbamotiyol)-3-nitrobenzamid, N-(di-n-butilkarbamotiyol)-3-nitrobenzamid, cis-bis[3-nitro-N-(di-n-butilkarbamothioil)benzamido-κO,S]nikeli(II) ve cis-bis[3-nitro-N-(di-n-butilkarbamotiyol)benzamido-κO,S]bakır(II) bileşiklerinin referans olarak kullanılan ampisilin kadar etkili olduğu belirlenmiştir.

Anahtar Kelimeler: *Tiyoüre, Benzoyiltiyoüre, Sentez, X-ışınları Tek Kristal Difraktometresi, Antimikrobiyal Aktivite.*



SYNTHESIS, CRYSTAL STRUCTURE AND ANTIBACTERIAL ACTIVITY OF N-(DIALKYL/ARYL-CARBAMOTHIOYL)-3-NITROBENZAMIDE AND THEIR COMPLEXES WITH TRANSITION METALS

Abstract

The new compounds named as N-(dialkyl/aryl-carbamothioyl)-3-nitrobenzamide (Alkyl/aryl: methyl, ethyl, n-propyl, n-butyl, and phenyl) and their complexes with transition metals (Metal: Ni(II) and Cu(II)) have been prepared. Their structures have been characterized by elemental analysis, IR spectroscopy and NMR spectroscopy. Besides, the structure of cis-bis[3-nitro-N-(di-n-propylcarbamothioyl)benzamido- κ O,S]nickel(II) and cis-bis[3-nitro-N-(di-n-propylcarbamothioyl)benzamido- κ O,S]copper(II) complexes were illuminated by Bruker APEX-II CCD single crystal X-ray diffraction. The crystals were kept at 100 K during data collection. The structure of the metal complexes was solved by direct methods using SHELXS-97 and SHELXL-97 least squares on F². Crystal structure analysis reveals that the both complexes are crystallized in orthorhombic system with Fdd2 space group. The derivatives of benzoylthiourea compounds containing C=O and C=S groups which can serve as coordination sites upon reaction with metal ions. According to single crystal X-ray diffraction analysis, square-planar coordination geometry is formed around the metal atom by two sulphur atoms and two oxygen atoms of the ligands, which are cis configuration. The bond lengths of the carbonyl and thiocarbonyl group are shorter than the normal single bond and longer than normal double bond. These results are in agreement with expected delocalization in the molecule. The antibacterial activity properties of the prepared compounds against four Gram-positive (*S. aureus*, *S. pneumoniae*, *E. faecalis* and *B. subtilis*), two Gram-negative bacterial strains (*E. coli* and *P. aeruginosa*) and three fungal strains (*C. albicans*, *C. parapsilosis* and *C. glabrata*) were investigated. According to the results of the antimicrobial test, it was observed that all the synthesized compounds were more effective against Gram positive bacteria. In particular, it has been determined that N-(di-n-propylcarbamothioyl)-3-nitrobenzamide, N-(di-n-butylcarbamothioyl)-3-nitrobenzamide, cis-bis[3-nitro-N-(di-n-butylcarbamothioyl)benzamido- κ O,S]nickel(II) and cis-bis[3-nitro-N-(di-n-butylcarbamothioyl)benzamido- κ O,S]copper(II) compounds are as effective as the reference ampicillin.

Keywords: Thiourea, Benzoyl thiourea, Synthesis, X-ray single crystal diffraction, Antimicrobial activity

