

**GÖZENEKLİ KOORDİNASYON POLİMERLERİNİN SENTEZİ,
KARAKTERİZASYONU, ANTİMİKROBİYAL ÖZELLİKLERİNİN
ARAŞTIRILMASI VE KUANTUM MEKANİKSEL YÖNTEMLERLE
KONFORMASYONU**

Gözenekli koordinasyon polimerlerinin kataliz, gaz depolama, optik madde, moleküler mıknatıs gibi çok sayıda uygulama alanı bulması nedeniyle bu maddelerin sentezi ile ilgili çalışmalar son yıllarda artmaktadır. Metal atomlarının organik köprü ligantları ile oluşturdukları kovalent bağlı gözenekli koordinasyon polimerleri (MOFs = metal organik iskeletler), bir, iki veya üç boyutlu olabilmektedir. H-bağları, C-H \cdots π ve $\pi\cdots\pi$ etkileşimleri gibi zayıf moleküller arası etkileşimlerle de supramolekül özellik gösteren, bir boyutlu (1D, zikzak veya düz zincirli), iki boyutlu ağ (2D) ve üç boyutlu iskelet (3D, tabakalı) yapılar da oluşturabilmektedir. Bu nedenle koordinasyon polimerlerinin sentezi ve karakterizasyonu, olağanüstü yapısal çeşitlilik göstermesi ve yeni uygulama alanları bulması açısından önemlidir. Bu amaçla MOFs'ların sentezinde, pirazin, pirazol, piridin, imidazol ve tiyofen gibi hetero halkalı karboksilik asitler kullanılacaktır. Karboksilik asitler, karboksil grubundaki oksijen ve halkadaki azot atomları ile kolaylıkla metal atomlarına koordine olabilen, köprü ligandı olarak davranabilen ve farklı koordinasyon özellikleri sergileyen çok yönlü ligantlardır. Yapılarında bulunan karboksil grubunun halka etrafında dönebilmesi nedeniyle çok farklı yapısal özelliklere sahip polimerik kompleksler elde edilebilmektedir.

Gözenek büyüklüklerinin kontrolü için farklı büyüklüklere sahip nötral köprü ligantları kullanılacak ve bu gözeneklere uygun büyüklükte bazı moleküllerin hapsedilmesi sağlanacaktır. Geçiş metalleri kullanılarak sentezlenecek komplekslerin yapıları, FT-IR ve UV/Vis. Spektroskopisi, elementel analiz, iletkenlik, manyetik moment çalışmaları ile belirlenecektir. Tek kristali elde edilen komplekslerin kesin yapıları, X-ışınları tek kristal çalışmaları ile aydınlatılacaktır. Komplekslerin termik özellikleri ve termik bozunma mekanizmaları, termik analiz yöntemleri (TG, DTG, DTA) ve kütle spektroskopisi ile eş zamanlı olarak incelenecek, bozunma basamaklarına ilişkin entalpi değerleri DSC ile hesaplanacaktır. Ayrıca termokromik özellikleri (ısı ile renk değişimi) ve fotoluminesans özellikleri araştırılacaktır.

Biyolojik açıdan oldukça önemli olan halkalı dikarboksilik asitler ile sentezlenecek komplekslerin biyolojik aktiflikleri, belirlenen mikroorganizmalardan gram – ve + bakteriler, maya, klinik izolatlar üzerine antimikrobiyal etkileri, MİC ve Antibiyogram yöntemleri (Disk Difüzyon) ile araştırılacaktır.