**چکیده**

در این پروژه کمپلکس های(1) و (2):

(1) [Cu(opd)2(H2O)( μ-SCN)Zn(opd)(SCN)3)]

(2) [Cu(opd)2(H2O)( μ-SCN)Ni(opd)(SCN)3)]

به سه روش رفلاکس و هیدروترمال و همرسوبی سنتز شدند. سپس با روش های مختلف اسپکتروسکوپی مانند طیف سنجی مادون قرمز(IR) و طیف سنجی الکترونی (UV-Vis) شناسایی شده و رفتار الکتروشیمی آن ها نیزمطالعه شد. نتایج حاصل از طیف IRنشان داد که لیگاند تیوسیانات به دو صورت پل و انتهایی قرار گرفته است. لیگاند 1-2-­­­ فنیلن دی آمین نیز از طریق جفت الکترون های ناپیوندی اتم های نیتروژن (آمین نوع اول) و به صورت دو دندانه به یون های فلزی متصل شده است و در ناحیه cm-1 1450-1620 ارتعاش دارد. هم چنین در طیف الکترونی این کمپلکس ها، باندهای جذبی مربوط به انتقالات درون لیگاندی ,n→π\*)\*(π→π و­­ نیز انتقالات d→dمشاهده می­شود. رفتار الکتروشیمی کمپلکس­ها نیز نشان دادند که یون Zn+2و لیگاند تیوسیانات در محدوده پتانسیل 1- تا 1 از نظر الکتروشیمی غیر فعال بوده ولی موج های اکسایش و کاهش مربوط به سایر یون های فلزی و لیگاندها رویت می شود. طیف های XRD حاصل از نمونه های هیدروترمال و همرسوبی، اندازه ذرات را کمتر از 100 نانومتر نشان داد که اثباتی بر تهیه نانوذرات می باشد. در ادامه شبیه سازی به وسیله نرم افزار شیمی MOE انجام شد. موقعیت های فعال در باکتری ها توسط نرم افزار GUASS VIEW 6 شناسایی شدند و داکینگ در همان موقعیت های فعال انجام شد و نهایتا بهترین موقعیت شناسایی شد. نتایج نشان داد که کمپلکس­های ساخته شده به دو روش رفلاکس و هیدروترمال، به دلیل خاصیت کی­لیت فلز درمقایسه با روش همرسوبی خاصیت ضد باکتری بیشتری نشان می­دهند. هم چنین فعالیت ضد میکروبی کمپلکس حاوی Ni2**+** بیشتر است که بیانگر وابستگی فعالیت ضدباکتری کمپلکس­ها به نوع یون­های فلزی موجود در ساختار کمپلکس­ها است و این موضوع توسط مطالعات تئوری حاصل از داکینگ مولکولی نیز نتیجه می شود به این صورت که کمپلکس حاوی Ni2+ با اسید آمینه های بیشتری درگیر است لذا خواص آنتی باکتریال بیشتری از خود نشان می دهد.

**کلمات کلیدی**: اورتو فنیلن دی آمین، لیگاند تیو سیانات، ولتامتری چرخه ای، آنتی باکتریال.