**DFT Израчунавање, биолошка активност, проuчавањ­е детекције ањона и кристална структура (*E*)-4-хлоро-2-((пиридин-2-илимино)­метил)фенола**

НУреј илдирим1, НЕШЛиАН ДЕМИР2, ЏЕХАН АЛПАСЛАН3, Беадир БОЈАЧОГЛУ4, МУСТАФА ИЛДИЗ5,\* и ОСЕИН АНВАР6

*1Здравствена служба стручне школе, Чанакале Универзитет 18.Март, TR-17100 Чанакале, Турска*

*2Одсек за биологију, факултет уметности и наука, Чанакале Универзитет 18.Март, TR-17100 Чанакале, Турска*

*3Одсек медицинских служби и техника, Стручна школа здравствених услуга, Гиресун Универзитет, TR-28200 Гиресун, Турска*

*4Стручна школа здравствених служби, Анкара Универзитет, TR-06290 Кечорен-Анкара, Турска*

*5Одсек за хемију, Факултет уметности и наука, Чанакале Универзитет 18.Март, TR-17100 Чанакале, Турска*

*6Одсек за физику, Природно-математички факултет, Анкара Универзитет, 06100 Бешевлер-Анкара, Турска*

ИЗВОД

(*E*)-4-хлоро-2-((пиридин-2-илимино)метил)фенол је синтетисан реакцијом 2-амино­пиридина са 5-хлоросалицилалдхидом. Структура једињења је истраживана са FTIR, UV-VIS, 1H-NMR, 13C-NMR и X-ray методама. Карактеризација једињења је такође урађена коришћењем теоријских квантномеханичких израчунавања и експерименталних спектроскопских метода. Молекулска структура једињења је потврђена подацима X-ray монокристала, NMR, FTIR и UV-VIS, који су били у доброј сагласности са структуром претсказаном теоријским израчунавањем, коришћењем методе функционала густине (DFT). Надаље, истраживана је антимикробна активност једињења на културама бактерија и квасца тестом разблаживања хранљивог медијума. UV-Vis спектроскопске студије интеракција између Шифових база и ДНК говеђег тимуса (CT-DNA), показала су да једињење интерагује са CT-DNA путем електростатског везивања. Колориметријски одговор рецептора овог једињења истражен је пре и након додатка еквивалентне количине разних ањона како би се процениле особине препознавања ањона

*Кључне речи***:** UV-Vis спектроскопија; 2-аминопиридин; антимикробна активност; везивање ДНК; X-ray кристалографија.