

T.C.
KAFKAS ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
KİMYA ANABİLİM DALI

METAL 4-FORMİLBENZOATLARIN PİRAZİN KOMPLEKSLERİNİN
SENTEZİ, YAPISAL, SPEKTROSKOPİK VE ANTİBAKTERİYEL
ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fatih ÇELİK

DANIŞMAN

Dr. Öğr. Üyesi Mustafa SERTÇELİK

TEMMUZ 2019

KARS



T.C.
KAFKAS ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
KİMYA ANABİLİM DALI



**METAL 4-FORMİL BENZOATLARIN PİRAZİN KOMPLEKSLERİNİN
SENTEZİ, YAPISAL, SPEKTROSKOPİK VE ANTİBAKTERİYEL
ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fatih ÇELİK

DANIŞMAN




Dr. Öğr. Üyesi Mustafa SERTÇELİK

TEMMUZ 2019

KARS

T.C. Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalı Yüksek Lisans Öğrencisi Fatih ÇELİK'in Dr. Öğr. Üyesi Mustafa SERTÇELİK'in danışmanlığında yüksek lisans tezi olarak hazırladığı "Metal 4-Formilbenzoatların Pirazin Komplekslerinin Sentezi, Yapısal, Spektroskopik ve Antibakteriyel Özelliklerinin İncelenmesi" adlı bu çalışma yapılan tez savunması sınavı sonunda jüri tarafından Lisans Üstü Eğitim Öğretim Yönetmeliği uyarınca değerlendirilerek oy birliği.....ile kabul edilmiştir.

03/07/2019

| | Adı-Soyadı | İmza |
|--------|------------------------------------|--|
| Başkan | : Doç. Dr. Ceyran AHMEDOVA |  |
| Üye | : Dr. Öğr. Üyesi F. Elif ÖZBEK |  |
| Üye | : Dr. Öğr. Üyesi Mustafa SERTÇELİK |  |

Bu tezin kabulü, Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun/...../2019 gün ve/..... sayılı kararıyla onaylanmıştır.

Prof. Dr. Fikret AKDENİZ

Enstitü Müdürü

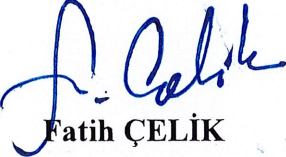
ETİK BEYAN

Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım Kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmada;

- Tez içinde sunduğum verileri, bilgileri ve dokümanları akademik ve etik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- Tüm bilgi, belge, değerlendirme ve sonuçları bilimsel etik ve ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
- Tez çalışmada yararlandığım eserlerin tümüne uygun atıfta bulunarak kaynak gösterdiğimi,
- Kullanılan verilerde herhangi bir değişiklik yapmadığımı,
- Bu tezde sunduğum çalışmanın özgün olduğunu,

bildirir, aksi bir durumda aleyhime doğabilecek tüm hak kayıplarını kabullendiğimi beyan ederim.

İmza


Fatih ÇELİK

03. 07. 2019

ÖZET

(Yüksek Lisans Tezi)

Metal 4-Formilbenzoatların Pirazin Komplekslerinin Sentezi, Yapısal, Spektroskopik ve Antibakteriyel Özelliklerinin İncelenmesi

Fatih ÇELİK

Kafkas Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Kimya Anabilim Dalı

Danışmanı: Dr. Öğrt. Üyesi Mustafa SERTÇELİK

Bu çalışmada Kobalt(II), Bakır(II), Nikel(II), Çinko(II) ve Kadmiyum(II) metallerinin 4-formilbenzoat ile pirazinin beş adet kompleksi sentezlenmiş ve çeşitli spektroskopik yöntemler ile yapıları aydınlatılmıştır.

| | |
|---|----------|
| $[\text{Co}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{H}_2\text{O})_2]_n$ | 1 |
| $[\text{Cu}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{H}_2\text{O})_2]_n$ | 2 |
| $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{H}_2\text{O})_2]_n$ | 3 |
| $[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{H}_2\text{O})]_n$ | 4 |
| $[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{H}_2\text{O})]_n$ | 5 |

Komplekslerin yapısı tek kristal x ışını difraksiyonu ile belirlenmiştir ve elemental analiz ve FT-IR spektroskopisi yöntemleri ile desteklenmiştir.

Yapısı aydınlatılan komplekslerin *Pseudomonas aeruginosa* (ATCC 27853), *Klebsiella pneumoniae* (ATCC 4352), ve *Escherichia coli* (ATCC 25922), gram pozitif *Staphylococcus aureus* (ATCC) 6538) bakterilerine karşı antimikrobiyal aktiviteleri tespit edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: 4-Formilbenzoat, Pirazin, Antibakteriyel

2019, 105 Sayfa

ABSTRACT

(M. Sc. Thesis)

Synthesis, Structural, Spectroscopic and Antibacterial Properties of Pyrazine
Complexes of Metal 4-Formylbenzoates

Fatih ÇELİK

Kafkas University

Graduate School of Applied and Natural Sciences

Department of Chemistry

Supervisor: Dr. Öğrt. Üyesi Mustafa SERTÇELİK

In this study, five complexes of 4-formylbenzoate and pyrazine of cobalt (II), copper (II), nickel (II), zinc (II) and cadmium (II) metals were synthesized and their structures were illuminated by various spectroscopic methods.

| | |
|---|----------|
| $[\text{Co}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{H}_2\text{O})_2]_n$ | 1 |
| $[\text{Cu}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{H}_2\text{O})_2]_n$ | 2 |
| $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{H}_2\text{O})_2]_n$ | 3 |
| $[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{H}_2\text{O})]_n$ | 4 |
| $[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{H}_2\text{O})]_n$ | 5 |

The structure of the complexes was determined by single crystal X-ray diffraction and supported by elemental analysis and FT-IR spectroscopy methods.

The antimicrobial activities of the complexes were investigated against *Pseudomonas aeruginosa* (ATCC 27853), *Klebsiella pneumonia* (ATCC 4352), and *Escherichia coli* (ATCC 25922), gram positive *Staphylococcus aureus* (ATCC) 6538.

Key Words: 4-Formylbenzoate, Pyrazine, Antimicrobial

2019, 105 Pages

ÖN SÖZ

Bu yüksek lisans tezi Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalı, Anorganik Kimya Bilim Dalı yüksek lisans programında yapılmıştır.

Kafkas Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü'nde yüksek lisans tezimin araştırmalarını yapabilmem için gerekli imkanları sağlayan ve çalışmalarımın bütün aşamalarında bana yol gösteren tez danışmanım sayın Dr. Öğr. Üyesi Mustafa SERÇELİK'e

Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü Anorganik Kimya Anabilim Dalı Başkanı sayın Prof. Dr. Hacali NECEFOĞLU'na

Komplekslerin yapı analizlerinin aydınlatılmasında desteğini esirgemeyen sayın Prof. Dr. Tuncer HÖKELEK'e

Hayatım boyunca bana her konuda güvenen ve her konuda bana destek olup bu günlere gelmemi sağlayan değerli anneme ve babama teşekkürü bir borç bilirim.

Fatih ÇELİK

İÇİNDEKİLER

| | Sayfa No |
|--|------------|
| ETİK BEYAN | iii |
| ÖZET | iv |
| ABSTRACT | v |
| ÖN SÖZ | vi |
| ŞEKİLLER DİZİNİ | ix |
| TABLolar DİZİNİ | xii |
| SEMBOLLER VE KISALTMALAR LİSTESİ | xiv |
| 1. GENEL BİLGİLER | 1 |
| 1.1. Giriş | 1 |
| 1.2. 4-Formilbenzoat Metal Kompleksleri | 1 |
| 1.3. Pirazin..... | 27 |
| 1.4. Pirazinin Metal Kompleksleri..... | 27 |
| 2. MATERYAL VE YÖNTEM | 31 |
| 2.1. Sentez | 31 |
| 2.2. Yöntem | 32 |
| 2.2.1. Elemental Analiz | 32 |
| 2.2.2. Infrared Spektrum..... | 32 |
| 2.2.3. X-Ray Yapı Analizi | 32 |
| 2.2.4. Komplekslerin Antimikrobiyal Aktivitenin Belirlenmesi | 33 |
| 3. BULGULAR | 34 |
| 3.1. Elemental Analiz | 34 |
| 3.2. Infrared Spektrum..... | 34 |
| 3.3. X-Işınları Kristallografisi | 38 |
| 3.4. Komplekslerin Antibakteriyel Etkileri | 72 |

| | |
|----------------------------------|-----------|
| 5. TARTIŞMA VE SONUÇ..... | 74 |
| KAYNAKLAR | 81 |
| ÖZGEÇMİŞ..... | 90 |



ŞEKİLLER DİZİNİ

Sayfa No

| | |
|---|----|
| Şekil 1. 1. $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ kompleksinin molekül yapısı. | 2 |
| Şekil 1. 2. $[\text{Co}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_4] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ kompleksinin molekül yapısı. | 2 |
| Şekil 1. 3. $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_4] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ kompleksinin molekül yapısı. | 3 |
| Şekil 1. 4. $[\text{Cu}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ kompleksinin molekül yapısı. | 3 |
| Şekil 1. 5. $[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin molekül yapısı. | 4 |
| Şekil 1. 6. $[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ kompleksinin molekül yapısı. | 4 |
| Şekil 1. 7. $[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_3] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ kompleksinin molekül yapısı. | 5 |
| Şekil 1. 8. $[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_3] \cdot 3.5\text{H}_2\text{O}$ kompleksinin molekül yapısı. | 5 |
| Şekil 1. 9. $[\text{Ba}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_7]$ kompleksinin molekül yapısı. | 6 |
| Şekil 1. 10. $[\text{Co}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_3\text{H}_4\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin molekül yapısı. | 7 |
| Şekil 1. 11. $[\text{Mn}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_3\text{H}_4\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin molekül yapısı. | 7 |
| Şekil 1. 12. $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_3\text{H}_4\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin molekül yapısı. | 7 |
| Şekil 1. 13. $[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_3\text{H}_4\text{N}_2)_2]$ kompleksinin molekül yapısı. | 8 |
| Şekil 1. 14. $[\text{Cd}_2(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_4(\text{C}_3\text{H}_4\text{N}_2)_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ kompleksinin molekül yapısı. | 9 |
| Şekil 1. 15. $[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_7\text{H}_6\text{N}_2)_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ kompleksinin yapısı. | 9 |
| Şekil 1. 16. $[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_7\text{H}_6\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ kompleksinin yapısı. | 10 |
| Şekil 1. 17. $[\text{MnCl}(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})] \cdot (\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ kompleksinin molekül yapısı. | 11 |
| Şekil 1. 18. $[\text{Cu}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)(\text{NO}_3)(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)(\text{H}_2\text{O})]$ kompleksinin molekül yapısı. | 12 |
| Şekil 1. 19. $[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)(\text{H}_2\text{O})]$ kompleksinin molekül yapısı. | 13 |
| Şekil 1. 20. $[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)(\text{H}_2\text{O})]$ kompleksinin molekül yapısı. | 14 |
| Şekil 1. 21. $[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)][\text{Cd}_2(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_4(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)_2]$ kompleksinin molekül yapısı. | 15 |
| Şekil 1. 22. $[\text{Co}_2(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N}_2)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2]$ kompleksinin molekül yapısı. | 16 |

| | |
|--|----|
| Şekil 1. 23. $[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N}_2)(\text{H}_2\text{O})] \cdot \text{H}_2\text{O}$ kompleksinin yapısı..... | 17 |
| Şekil 1. 24. $[\text{Co}_2(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N}_2)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2$ kompleksinin molekül yapısı. | 18 |
| Şekil 1. 25. $[\text{Cd}(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2$ kompleksinin molekül yapısı..... | 19 |
| Şekil 1. 26. $[\text{Co}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin molekül yapısı..... | 19 |
| Şekil 1. 27. $[\text{Co}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin molekül yapısı..... | 20 |
| Şekil 1. 28. $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin molekül yapısı..... | 21 |
| Şekil 1. 29. $[\text{Mn}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin molekül yapısı..... | 21 |
| Şekil 1. 30. $[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin molekül yapısı..... | 22 |
| Şekil 1. 31. $[\text{Co}(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ kompleksinin molekül yapısı..... | 23 |
| Şekil 1. 32. $[\text{Ni}(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ kompleksinin molekül yapısı..... | 23 |
| Şekil 1. 33. $[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})]_n$ kompleksinin molekül yapısı..... | 24 |
| Şekil 1. 34. $[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})]_n$ kompleksinin polimerik yapısı..... | 24 |
| Şekil 1. 35. $[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})] \cdot \text{H}_2\text{O}$ kompleksinin molekül yapısı..... | 25 |
| Şekil 1. 36. $[\text{Cu}_2(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_4]$ kompleksinin molekül yapısı..... | 26 |
| Şekil 1. 37. Pirazinin molekül yapısı..... | 27 |
| Şekil 1. 38. $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_3\text{NO}_4)(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{C}_2\text{H}_6\text{OS})]_n$ Kompleksinin Molekül Yapısı..... | 28 |
| Şekil 1. 39. $[\text{Cu}(\text{C}_6\text{F}_5\text{COO})_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)]_n$ Kompleksinin Molekül Yapısı..... | 28 |
| Şekil 1. 40. $[\text{Cu}(\text{C}_6\text{F}_5\text{COO})_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)]_n$ Kompleksinin Molekül Yapısı..... | 29 |
| Şekil 1. 41. $[\text{Co}(\text{NO}_3)_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{CH}_3\text{CN})_2(\text{H}_2\text{O})_2]_n$ Kompleksinin Molekül Yapısı..... | 29 |
| Şekil 1. 42. $[[\text{Ni}(\text{prz})(\text{H}_2\text{O})_4](\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]_n$ Kompleksinin Molekül Yapısı..... | 30 |
| Şekil 1. 43. $[\text{Os}_3(\text{CO})_9(\mu\text{-OH})(\mu\text{-OMeCO})(\text{prz})]$ Kompleksinin Molekül Yapısı..... | 30 |
| Şekil 3. 1. 1 kompleksinin FT-IR spektrumu..... | 36 |
| Şekil 3. 2. 2 kompleksinin FT-IR spektrumu..... | 36 |
| Şekil 3. 3. 3 kompleksinin FT-IR spektrumu..... | 37 |
| Şekil 3. 4. 4 kompleksinin FT-IR spektrumu..... | 37 |

| | |
|--|----|
| Şekil 3. 5. 5 kompleksinin FT-IR spektrumu | 38 |
| Şekil 3. 6. Komplekslerin Bakterilere karşı zon görüntüleri..... | 72 |
| Şekil 6. 1. 1 kompleksinin molekül yapısı | 75 |
| Şekil 6. 2. 2 kompleksinin molekül yapısı | 75 |
| Şekil 6. 3. 3 kompleksinin molekül yapısı | 76 |
| Şekil 6. 4. 4 kompleksinin molekül yapısı | 76 |
| Şekil 6. 5. 5 kompleksinin molekül yapısı | 77 |



TABLULAR DİZİNİ

Sayfa No

| | |
|---|----|
| Tablo 3. 1. Komplekslerin elemental analiz verileri..... | 34 |
| Tablo 3. 2. Sentezlenen komplekslerin FT-IR spektrumlar | 35 |
| Tablo 3. 3. 1 kompleksinin kristalografik verileri | 38 |
| Tablo 3. 4. 1 kompleksine ait atomik koordinatlar ve izotropik eşdeğer yer değiştirme parametreleri (Å^2) | 39 |
| Tablo 3. 5. 1 kompleksinin geometrik parametreler (Å , $^\circ$) | 40 |
| Tablo 3. 6. 1 kompleksine ait hidrojen bağ geometrisi (Å , $^\circ$) | 42 |
| Tablo 3. 7. 2 kompleksinin kristalografik verileri | 42 |
| Tablo 3. 8. 2 kompleksine ait atomik koordinatlar ve izotropik eşdeğer yer değiştirme parametreleri (Å^2) | 43 |
| Tablo 3. 9. 2 kompleksinin geometrik parametreler (Å , $^\circ$) | 44 |
| Tablo 3. 10. 2 kompleksine ait hidrojen bağ geometrisi (Å , $^\circ$) | 46 |
| Tablo 3. 11. 3 kompleksinin kristalografik verileri | 46 |
| Tablo 3. 12. 3 kompleksine ait atomik koordinatlar ve izotropik eşdeğer yer değiştirme parametreleri (Å^2) | 47 |
| Tablo 3. 13. 3 kompleksinin geometrik parametreler (Å , $^\circ$) | 48 |
| Tablo 3. 14. 3 kompleksine ait hidrojen bağ geometrisi (Å , $^\circ$) | 50 |
| Tablo 3. 15. 4 kompleksinin kristalografik verileri | 51 |
| Tablo 3. 16. 4 kompleksine ait atomik koordinatlar ve izotropik eşdeğer yer değiştirme parametreleri (Å^2) | 52 |
| Tablo 3. 17. 4 kompleksinin geometrik parametreler (Å , $^\circ$) | 56 |
| Tablo 3. 18. 4 kompleksine ait hidrojen bağ geometrisi (Å , $^\circ$) | 62 |
| Tablo 3. 19. 5 kompleksinin kristalografik verileri | 63 |

| | |
|---|----|
| Tablo 3. 20. 5 kompleksine ait atomik koordinatlar ve izotropik eşdeğer yer değiştirme parametreleri (\AA^2) | 64 |
| Tablo 3. 21. 5 kompleksinin geometrik parametreler (\AA , $^\circ$) | 66 |
| Tablo 3. 22. 5 kompleksine ait hidrojen bağ geometrisi (\AA , $^\circ$) | 71 |
| Tablo 3. 23. Komplekslere ait antibakteriyel zon çapları (mm) | 73 |



SEMBOLLER VE KISALTMALAR LİSTESİ

| | |
|--|--|
| FBA | : 4-Formilbenzoat |
| prz | : Pirazin |
| DENA | : Dietilnikotinamid |
| Me | : Metal |
| a, b, c, α, β, γ | : Birim Hücre Parametreleri |
| h, k, l | : Miller İndisleri |
| D_x | : Kristalin X-ışını yoğunluğu |
| Å | : Angström |
| ° | : Derece |
| K | : Kelvin |
| °C | : Santigrad Derece |
| K | : Skala Faktörü |
| Cm | : Santimetre |
| Mg | : Megagram |
| M | : Metre |
| MoK_{α} | : Molibden K-alfa (0.71069 Å) |
| l | : Dalga boyu |
| q | : (Bragg) gelme ve yansıma açısı |
| V | : Birim hücre hacmi |
| M_r | : Bileşiğin formül ağırlığı |
| Z | : Birim hücredeki asimetrik birim (molekül) sayısı |
| T_{mak} | : Maksimum geçirgenlik |
| T_{min} | : Minimum geçirgenlik |
| q_{mak} | : Maksimum (Bragg) yansıma açısı |
| R_{int} | : Toplanan verilerin kalitesini gösteren istatistiksel bir indis |

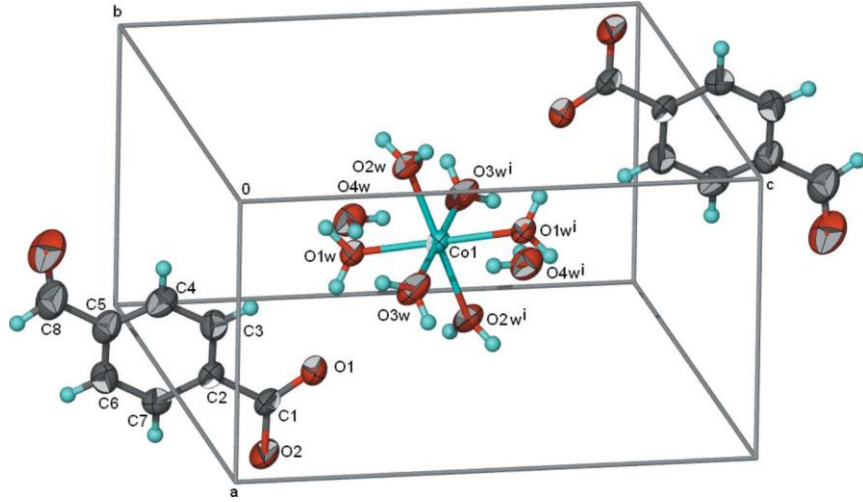
1. GENEL BİLGİLER

1.1. Giriş

Koordinasyon kimyasının temelini, 1913 yılında Nobel ödülünün sahibi olan Alfred Werner'in çalışmaları oluşturmaktadır [1]. Özellikle koordinasyon bileşiklerinin çok geniş kullanım alanlarına sahip olması bu alanda yapılan çalışmalara farklı bir boyut kazandırmıştır. Özellikle koordinasyon kimyasında ligant tasarımları önem kazanmaya başlamış ve kristal mühendisliği bilim dalının gelişimine yol açmıştır. Kristal mühendisliği ile istenilen özelliklerde komplekslerin tasarlanması ve sentezlenmesiyle hedeflenen kimyasal ve fiziksel özelliklere sahip koordinasyon bileşikleri elde edilmektedir [2, 3]. Hedef komplekslerin sentezi multidisipliner çalışmalara ışık tutmakta ve endüstride, tıpta, ilaç sanayisinde, polimer teknolojisinde, boya sanayisinde kullanımı sağlanmaktadır. Özellikle ilaç sanayisi artan bakteri dirençleri sebebiyle yeni ilaç tasarımları konusunda araştırmalara yönelmiştir. Benzoik asit ve tuzları, antimikrobiyal aktiviteleri, toksik olmamaları ve tatsızlıkları nedeniyle gıda ve farmasötik preparatlarda uzun yıllar koruyucu ajanlar olarak kullanılan en basit aromatik bileşiklerdir [4]. Bu çalışmada bir benzoik asit türevi olan formilbenzoik asit kullanılmıştır. Şekil 1.1.'de açık formülü verilen bileşiğin IUPAC ismi 4-formilbenzoik asit'tir, *4-karboksibenzaldehit* ve *benzaldehit-4-karboksilik asit* isimleriyle de bilinmektedir. Molekül ağırlığı 150,03, erime noktası 247 °C'dir. Kapalı formülü C₈H₆O₃'tür. 4-formilbenzoik asit bazlı tiyazollerin kuvvetli antibakteriyel özellik gösterdiği bilinmektedir.

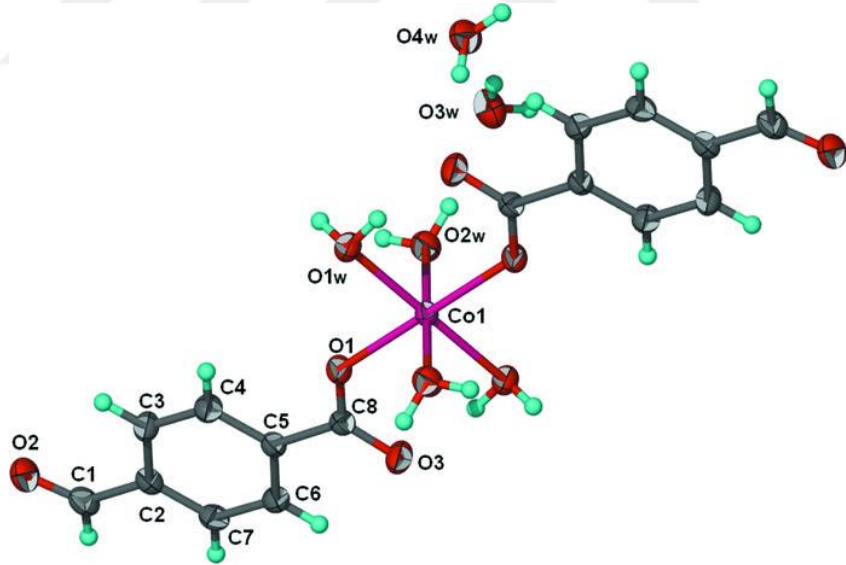
1.2. 4-Formilbenzoat Metal Kompleksleri

[Co(H₂O)₆](C₈H₅O₃)₂·2H₂O kompleksi hekzaakuakobalt katyonuna sahiptir molekülün yükü iki 4-formilbenzoat (FBA) anyonu ile dengelenir ve koordine olmamış iki su molekülünden ibarettir (Şekil 1. 1). Co(II) katyonu simetri merkezindedir [5].



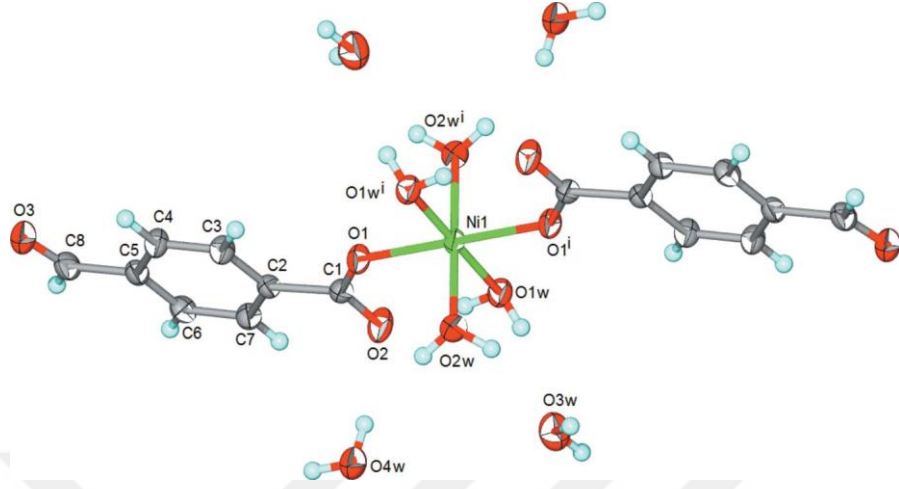
Şekil 1. 1. $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ kompleksinin molekül yapısı.

$[\text{Co}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_4] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ kompleksi dört su molekülünden gelen oksijen atomu ve 2 FBA anyonundan gelen O atomu ile oktahedral bir yapı oluşturmuştur. Ayrıca yapıda koordine olmayan dört su molekülü vardır. Koordinasyona katılan ve katılmayan su molekülleriyle hidrojen bağları oluşmaktadır (Şekil 1. 2). [6]



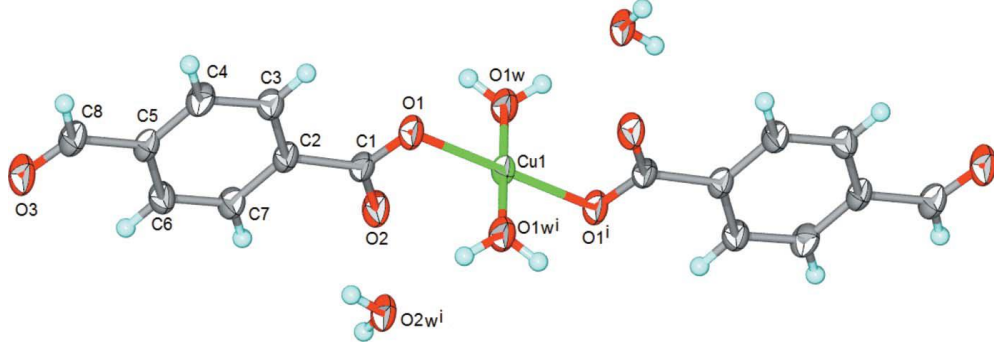
Şekil 1. 2. $[\text{Co}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_4] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ kompleksinin molekül yapısı.

$[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_4] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ kompleksinde Ni atomu çevresinde iki tane karboksilat grubunun oksijen atomuyla ve dört tane su molekülüyle koordine olarak oktahedral geometri oluşturmuştur (Şekil 1. 3). Koordine olmuş ve koordine olmamış su molekülleri üç boyutlu ağda hidrojen bağları oluştururlar [7].



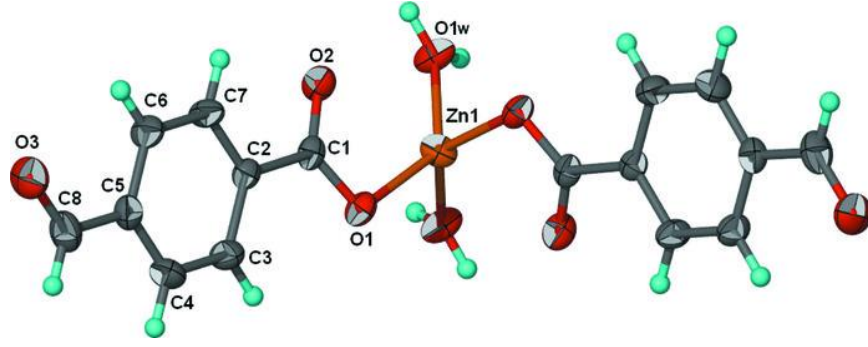
Şekil 1. 3. $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_4] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ kompleksinin molekül yapısı.

$[\text{Cu}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ kompleksinde Cu atomu, iki karboksilat grubunun oksijen atomuyla ve iki su molekülüyle kare düzlemsel geometri oluşturmuştur (Şekil 1. 4). Kompleks koordinat dışı su molekülleriyle de hidrojen bağları ile üç boyutlu bir ağ oluşturmuştur [8].



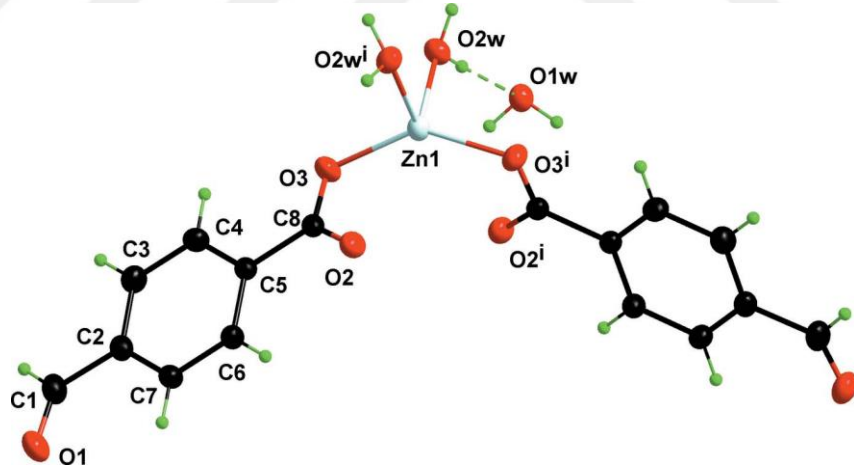
Şekil 1. 4. $[\text{Cu}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ kompleksinin molekül yapısı.

$[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin molekül yapısı Z-P Deng ve arkadaşları tarafından incelenmiş ve iki monodentat karboksilat grubu ve iki su molekülü ile tetrahedral geometriyi oluşturmaktadır (Şekil 1. 5). Üç boyutlu yapı üzerinde moleküller arası hidrojen bağları oluşmaktadır [9].



Şekil 1. 5. $[Zn(C_8H_5O_3)_2(H_2O)_2]$ kompleksinin molekül yapısı.

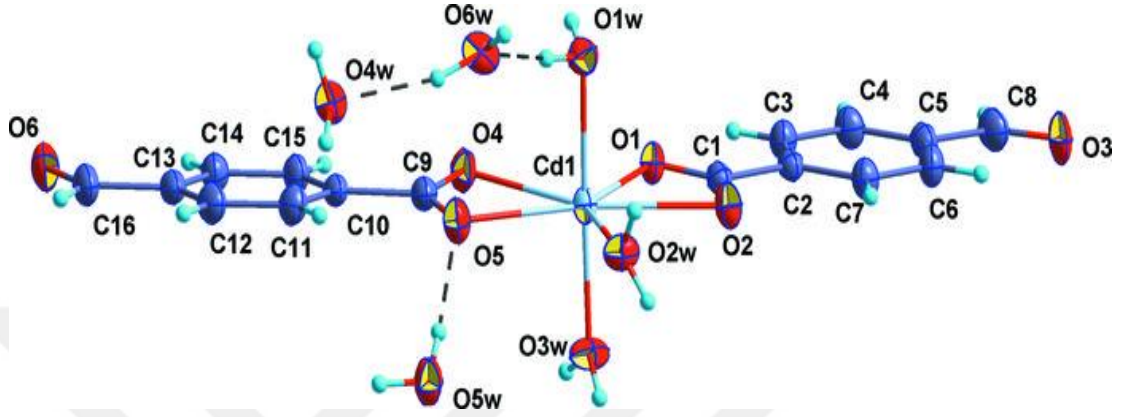
Z-P Deng ve arkadaşları tarafından incelenen Kapalı formülü $[Zn(C_8H_5O_3)_2(H_2O)_2] \cdot H_2O$ olan bir diğer komplekste ise Zn atomu iki karboksilat grubunun oksijen atomu ve iki su molekülü tarafından çarpıtılmış tetrahedral yapı oluşturmuştur (Şekil 1. 6). Koordinatlanmış ve koordinatlanmamış su molekülleri üç boyutlu bir ağda O-H...O hidrojen bağı oluşumuna katılırlar [10].



Şekil 1. 6. $[Zn(C_8H_5O_3)_2(H_2O)_2] \cdot H_2O$ kompleksinin molekül yapısı.

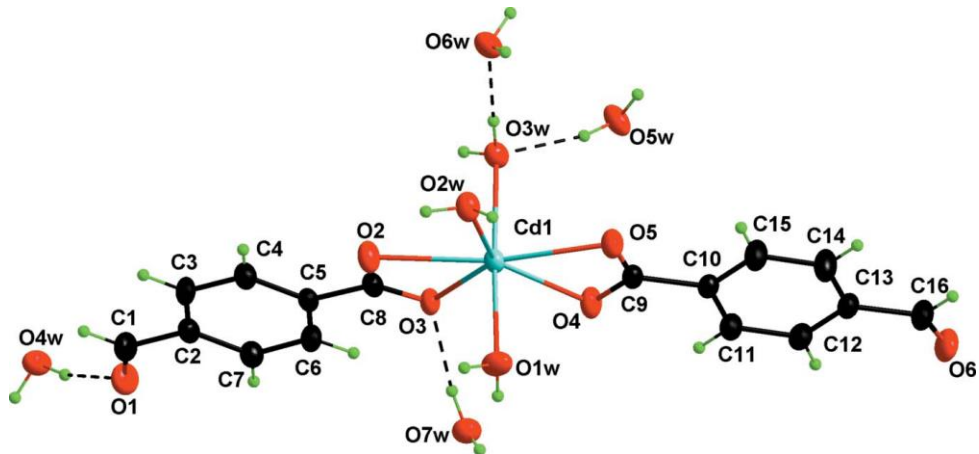
$[Cd(C_8H_5O_3)_2(H_2O)_3] \cdot 3H_2O$ kompleksinin molekül yapısı Zhao-Peng Deng, Shan Gao, Li-Hua Huo ve Hui Zhao tarafından incelenmiştir. Komplekste Cd atomu iki FBA ligantiyla şelatlanmıştır ve üç su molekülüyle pentagonal-bipiramit bir yapı olmuştur (Şekil 1. 7) [11]. Kadmium atomu çevresinde iki FBA karboksilat oksijen atomları

bidentat bağlanarak şelat oluşturmakta ve üç su molekülünden gelen oksijen atomları ile pentagonal bipiramid geometri tanımlanmaktadır.



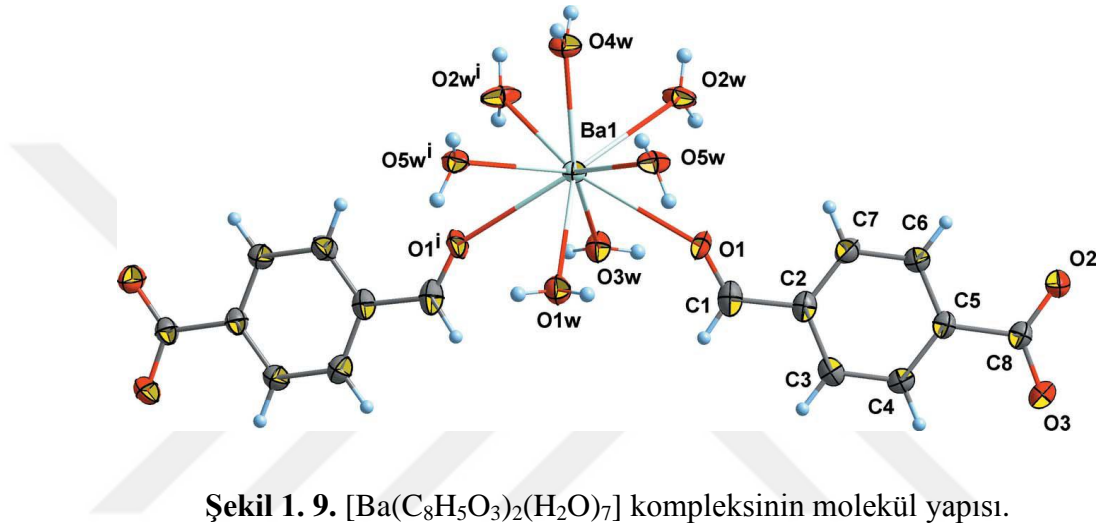
Şekil 1. 7. $[Cd(C_8H_5O_3)_2(H_2O)_3] \cdot 3H_2O$ kompleksinin molekül yapısı.

$[Cd(C_8H_5O_3)_2(H_2O)_3] \cdot 3.5H_2O$ kompleksinde Cd atomu, iki 4-formilbenzoik asit ligandı ve koordinasyona katılmış üç su molekülü ile birlikte koordinasyona katılmayan üç buçuk su molekülüyle tek çekirdekli yapıyı oluşturmuştur. Cd atomu iki farklı 4-formilbenzoat grubunun dört tane karboksilat oksijen atomuyla ve üç tane su molekülüyle pentagonal bipiramidal bir yapı oluşturmuştur (Şekil 1. 8). Üç boyutlu ağda moleküller arası hidrojen bağları oluşmaktadır [12].



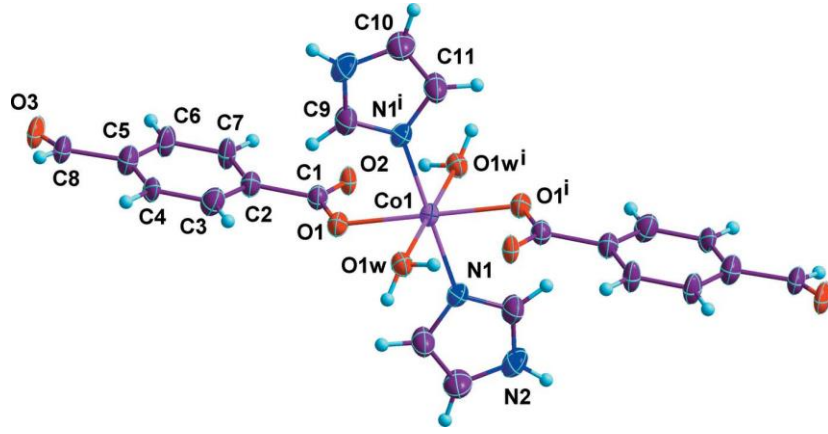
Şekil 1. 8. $[Cd(C_8H_5O_3)_2(H_2O)_3] \cdot 3.5H_2O$ kompleksinin molekül yapısı.

[Ba(C₈H₅O₃)₂(H₂O)₇] kompleksi monodentat bağlanan iki formilbenzoat ligandından gelen iki oksijen atomu ve yedi su molekülünün oksijen atomu olmak üzere toplam dokuz oksijen atomu ile koordine olmuştur (Şekil 1. 9). Bir ayna düzleminde düzlem boyunca uzanan üç su oksijen atomu ve baryumla molekül iki eşit parçaya bölünmüştür. O-H...O hidrojen bağları üç boyutlu bir ağda molekülleri bağlar [13].

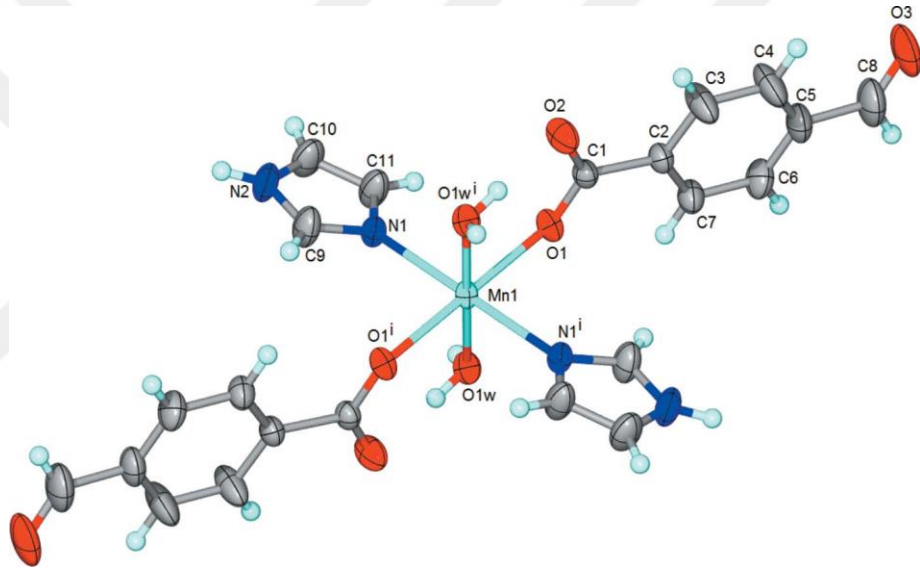


Şekil 1. 9. [Ba(C₈H₅O₃)₂(H₂O)₇] kompleksinin molekül yapısı.

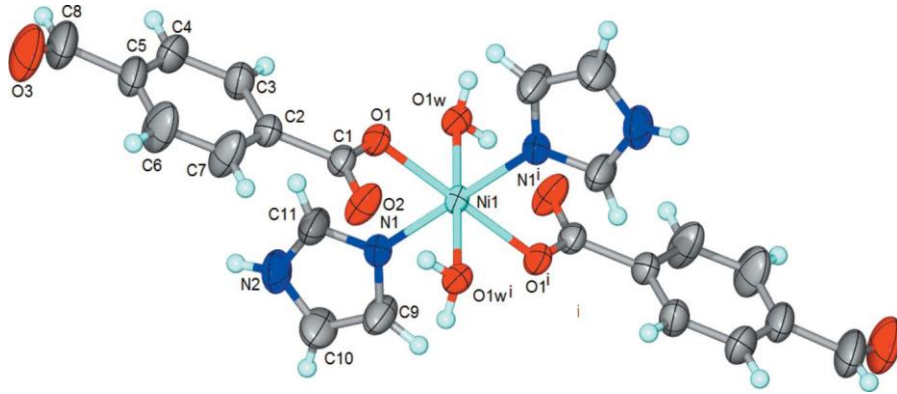
[Co(C₈H₅O₃)₂(C₃H₄N₂)₂(H₂O)₂], [Mn(C₈H₅O₃)₂(C₃H₄N₂)₂(H₂O)₂] ve [Ni(C₈H₅O₃)₂(C₃H₄N₂)₂(H₂O)₂] kompleksleri eş yapıdır (Şekil 1. 10, 1.11, 1.12). Üç komplekste de su molekülleri ve heterosiklik imidazoller koordine kovalent bağ oluştururken, tüm trans oktahedral geometrilerde substitue olmuş benzoat gruplarına kovalent olarak bağlıdır. Kobalt, mangan ve nikel atomları simetri merkezine yerleşmiştir [14–16]



Şekil 1. 10. $[\text{Co}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_3\text{H}_4\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin molekül yapısı.

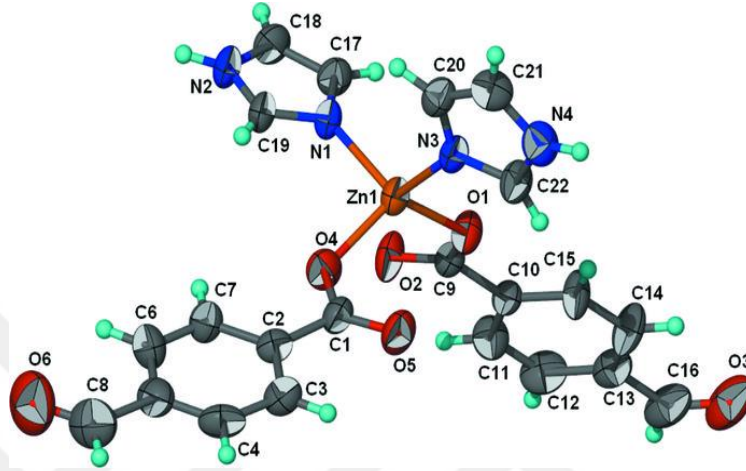


Şekil 1. 11. $[\text{Mn}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_3\text{H}_4\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin molekül yapısı.



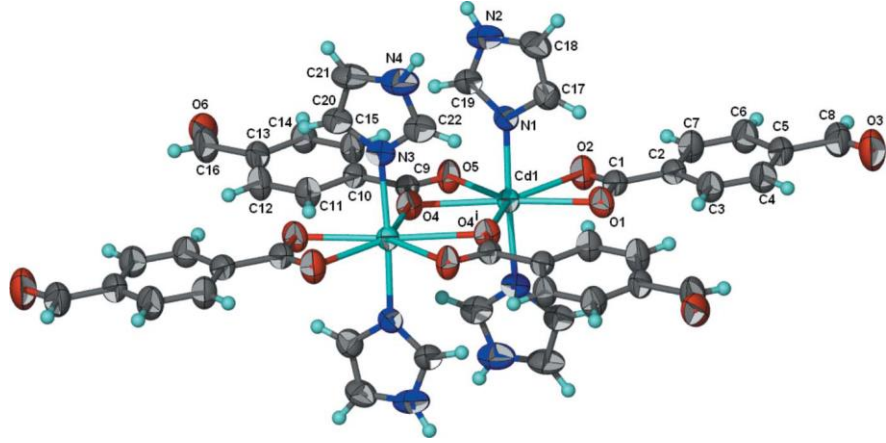
Şekil 1. 12. $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_3\text{H}_4\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin molekül yapısı.

[Zn(C₈H₅O₃)₂(C₃H₄N₂)₂] kompleksi FBA ligandından gelen iki oksijen atomu ve imidazol ligandından gelen iki azot atomuyla bağlanarak tetrahedral bir yapı oluşturmuştur (Şekil 1. 13) ve komşu moleküllerle N-H...O şeklinde hidrojen bağları oluştururlar [17].



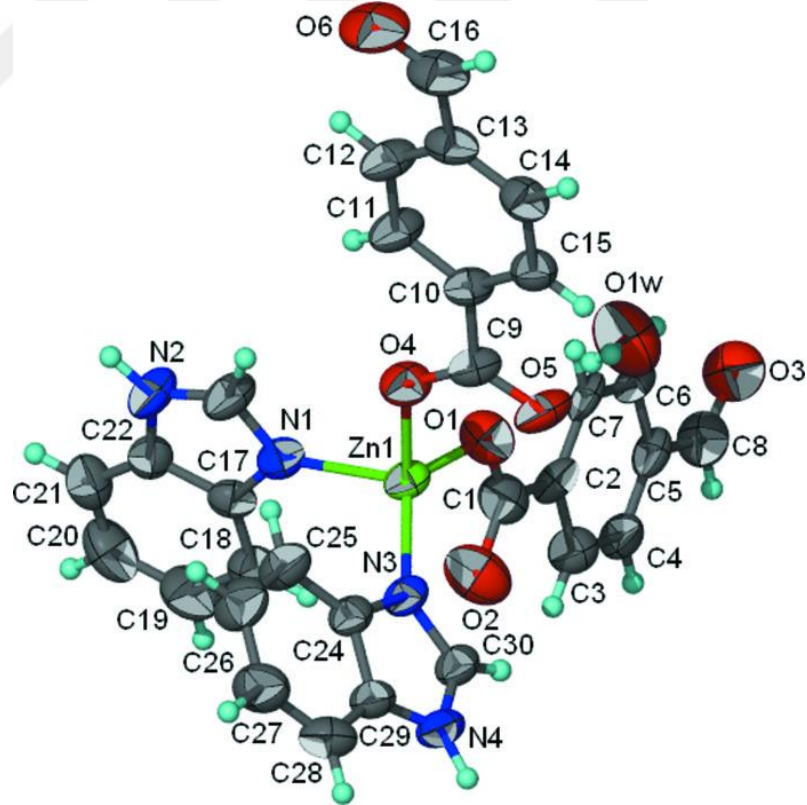
Şekil 1. 13. [Zn(C₈H₅O₃)₂(C₃H₄N₂)₂] kompleksinin molekül yapısı .

[Cd₂(C₈H₅O₃)₄(C₃H₄N₂)₄]·2H₂O kompleksinde iki karboksilat grubu Cd atomuyla şelatlanmıştır. Ek olarak karboksil grubunun biri köprü ligand gibi işlev görerek simetri merkezli iki çekirdekli kompleks oluşturmaktadır. Cd atomlarının her biri şelat oluşturan bir FBA ligandından gelen iki, monodentat bağlanan iki FBA ligandından gelen iki, koordine olan bir su molekülünden gelen bir olmak üzere toplam beş oksijen atomu ve iki imidazol ligandının N atomuyla yedi koordinasyonlu pentagonal bipiramidal yapı oluşturmuştur. (Şekil 1. 14). Kristalde moleküller arası hidrojen bağları vasıtasıyla katmanlı yapı oluşur [18].



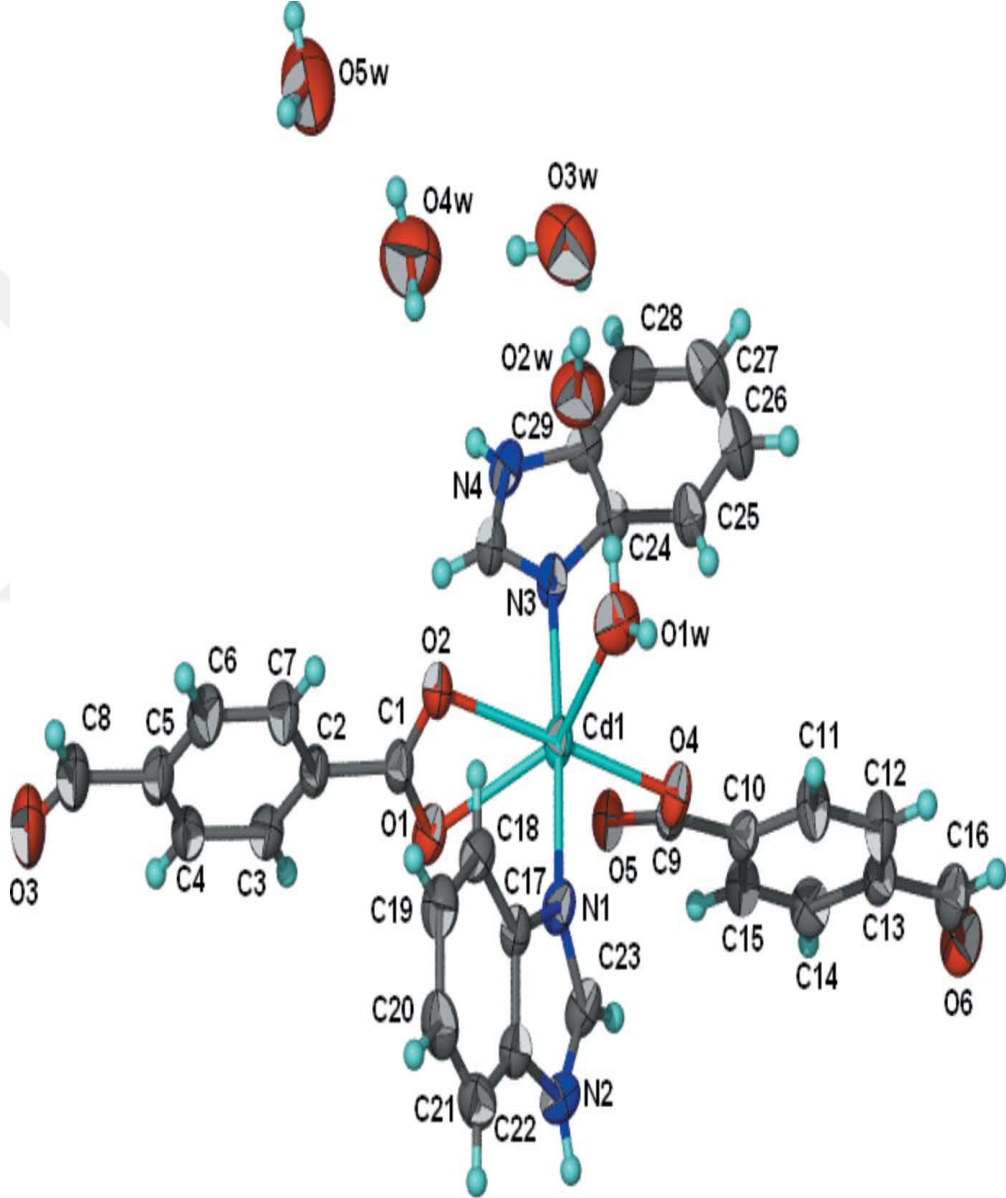
Şekil 1. 14. $[\text{Cd}_2(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_4(\text{C}_3\text{H}_4\text{N}_2)_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ kompleksinin molekül yapısı.

$[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_7\text{H}_6\text{N}_2)_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ kompleksinde iki FBA anyonu ve İki benzimidazol ligandından gelen iki N atomuyla Zn merkezli tetrahedral yapı oluşmuştur (Şekil 1. 15). Moleküller $\text{N}-\text{H} \cdots \text{O}$ ve $\text{O}-\text{H} \cdots \text{O}$ şeklinde hidrojen bağlarıyla bağlanırlar [19].



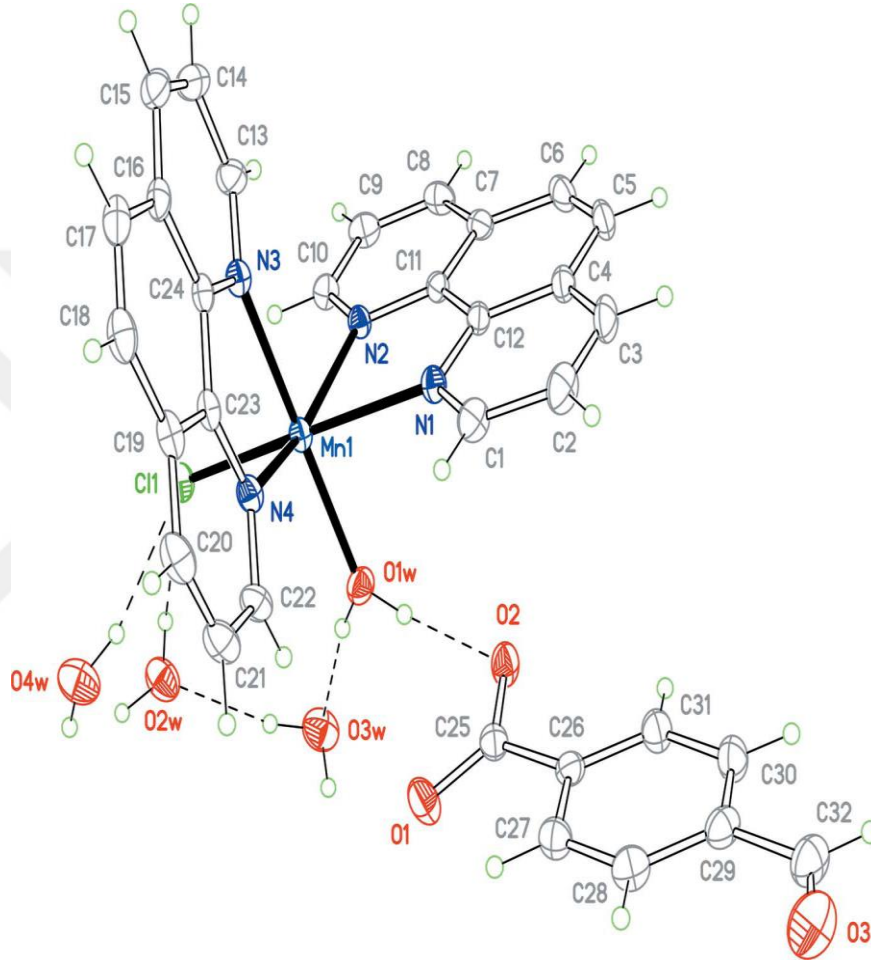
Şekil 1. 15. $[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_7\text{H}_6\text{N}_2)_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ kompleksinin yapısı.

[Cd(C₈H₅O₃)₂(C₇H₆N₂)₂(H₂O)]·4H₂O başlıklı komplekste Cd atomu ikisi karboksilat grubundan, biri tekdişli karboksilat grubundan ve biri de su molekülünden olmak üzere dört O atomu ve iki N-heterosiklik N atomları ile oktahedral yapıyı oluşturur (Şekil 1. 16). N atomları birbirine trans pozisyondadır. Kristal yapıda moleküller, moleküller arası hidrojen bağlarıyla üç boyutlu yapıya bağlanırlar [20].



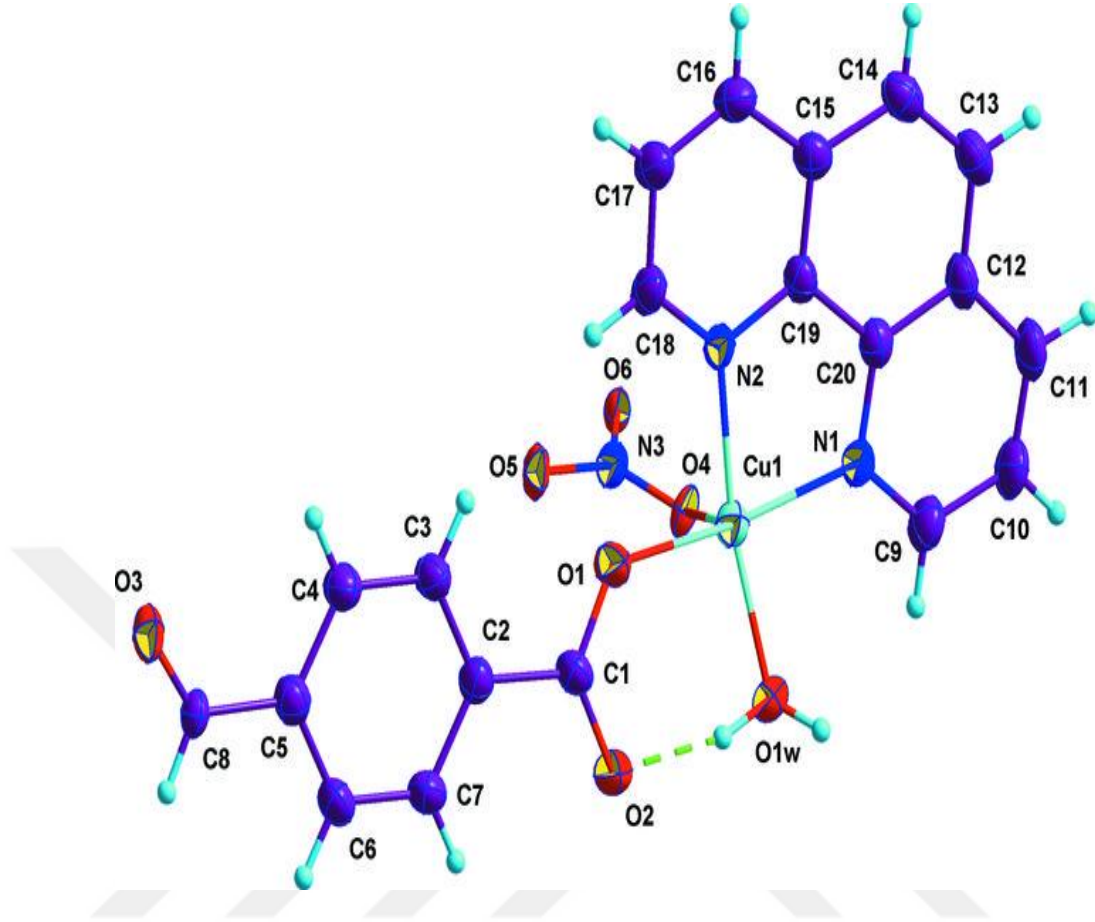
Şekil 1. 16. [Cd(C₈H₅O₃)₂(C₇H₆N₂)₂(H₂O)]·4H₂O kompleksinin yapısı.

$[\text{MnCl}(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})](\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3) \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ kompleksi Mn(II) atomu iki fenantrolin ligantının dört azot atomu, bir klor atomu ve bir su ligantıyla koordine olmuştur (Şekil 1. 17). Molekül çarpıtılmış bir oktahedral yapıya sahiptir [21].



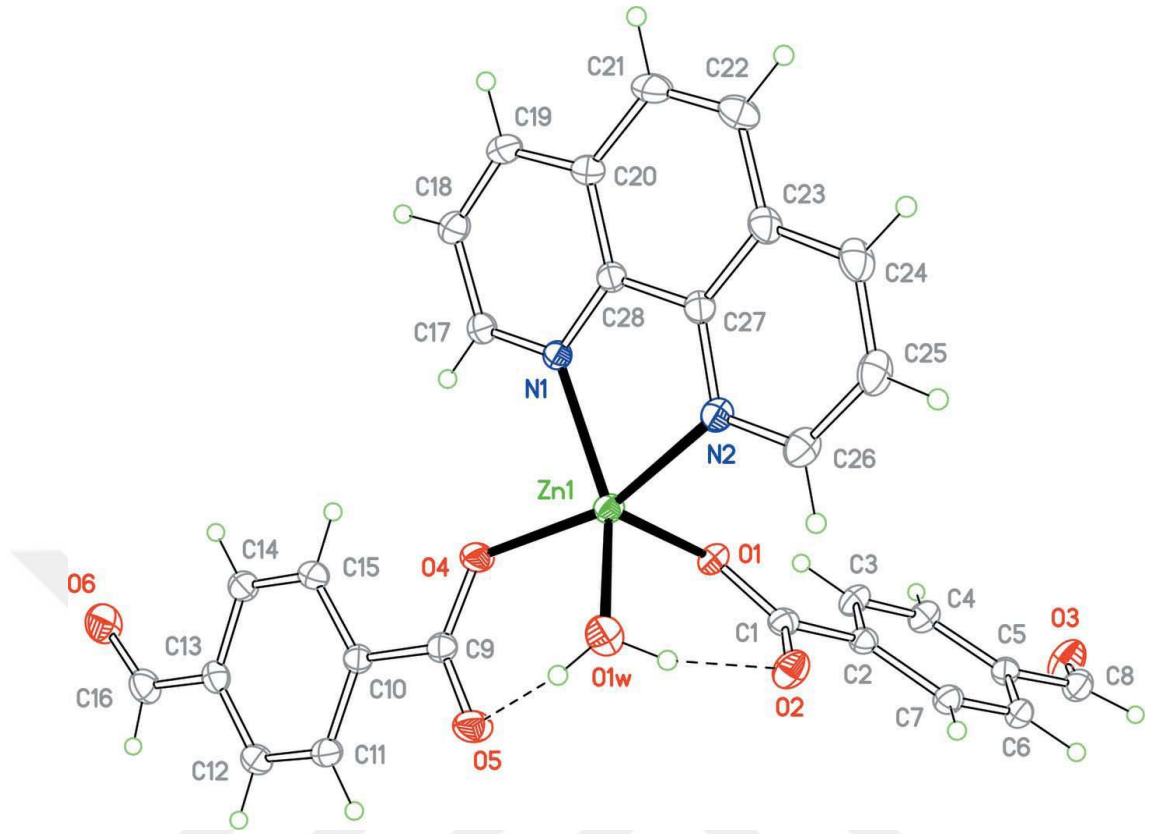
Şekil 1. 17. $[\text{MnCl}(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})](\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3) \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ kompleksinin molekül yapısı.

$[\text{Cu}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)(\text{NO}_3)(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)(\text{H}_2\text{O})]$ kompleksinde Cu atomu piramidin en üst noktasında meydana gelen nitrat grubunun bir oksijen atomuyla hafif bozunmuş kare piramit koordinasyon geometrisine sahiptir (Şekil 1. 18). Kompleks moleküllerin nitro anyonu ve su molekülü hidrojen bağı aracılığıyla bir eksen boyunca şeritler halinde bağlanır [22].



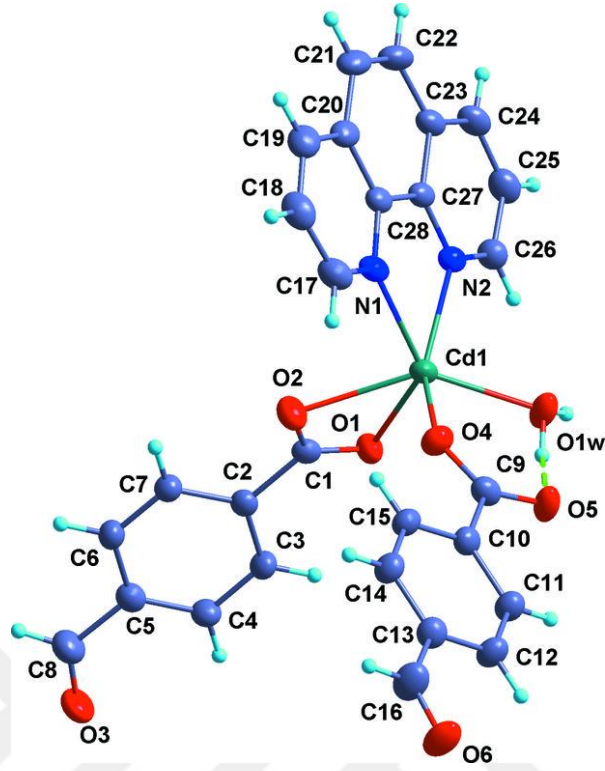
Şekil 1. 18. $[\text{Cu}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)(\text{NO}_3)(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)(\text{H}_2\text{O})]$ kompleksinin molekül yapısı.

$[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2) \cdot (\text{H}_2\text{O})]$ kompleksinde Zn atomu bir su molekülü iki tane formilbenzoat grubunun birer oksijen atomu ve 1,10- fenantrolinin iki azot atomuyla koordine olmuştur (Şekil 1. 19). Komşu kompleks molekülleri π - π etkileşimleri vasıtasıyla tek boyutlu zincir yapısında bağlanmışlardır [23].



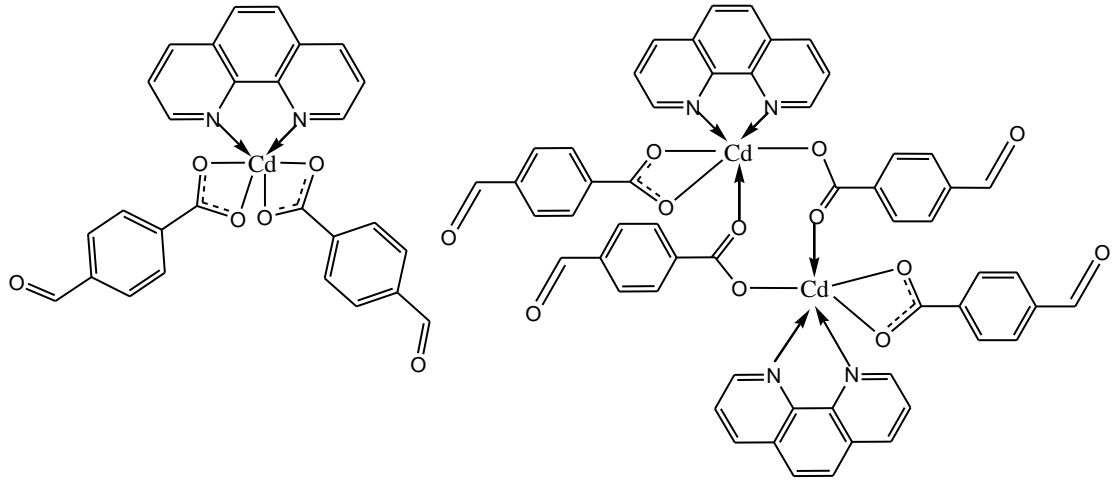
Şekil 1. 19. $[Zn(C_8H_5O_3)_2(C_{12}H_8N_2)(H_2O)]$ kompleksinin molekül yapısı.

$[Cd(C_8H_5O_3)_2(C_{12}H_8N_2)(H_2O)]$ kompleksinde Cd atomu iki tane formilbenzoat ligantının üç oksijen atomuyla, 1-10 fenantrolinin iki azot atomuyla ve bir su molekülüyle koordine olmuştur (Şekil 1. 20). Kompleks üçgen pirizma koordinasyon geometrisine sahiptir [24].



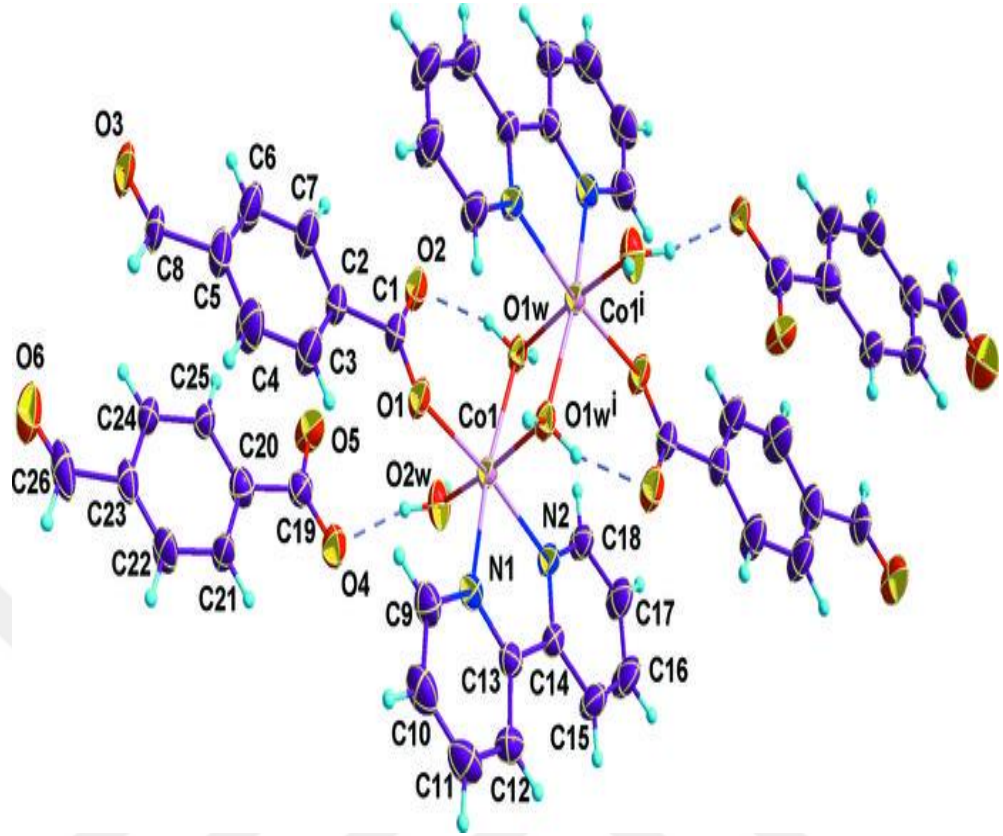
Şekil 1. 20. $[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)(\text{H}_2\text{O})]$ kompleksinin molekül yapısı.

$[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)][\text{Cd}_2(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_4(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)_2]$ kompleksi, tek çekirdekli ve çift çekirdekli birimlerden ibarettir (Şekil 1. 21). Tek çekirdekli komplekste Cd atomu şelat oluşturan iki FBA anyonundan gelen dört oksijen atomu ve 1-10 fenantrolinin iki azot atomuyla oktahedral yapıyı tamamlarken, çift çekirdekli komplekste her bir Cd atomu bidentat bağlanan FBA anyonunun karboksilat grubundan gelen iki oksijen atomu, Köprü görevi gören FBA anyonundan gelen bir oksijen atomu ve 1-10 fenantrolinden gelen iki azot atomuyla oktahedral geometri oluşturmaktadır [25].



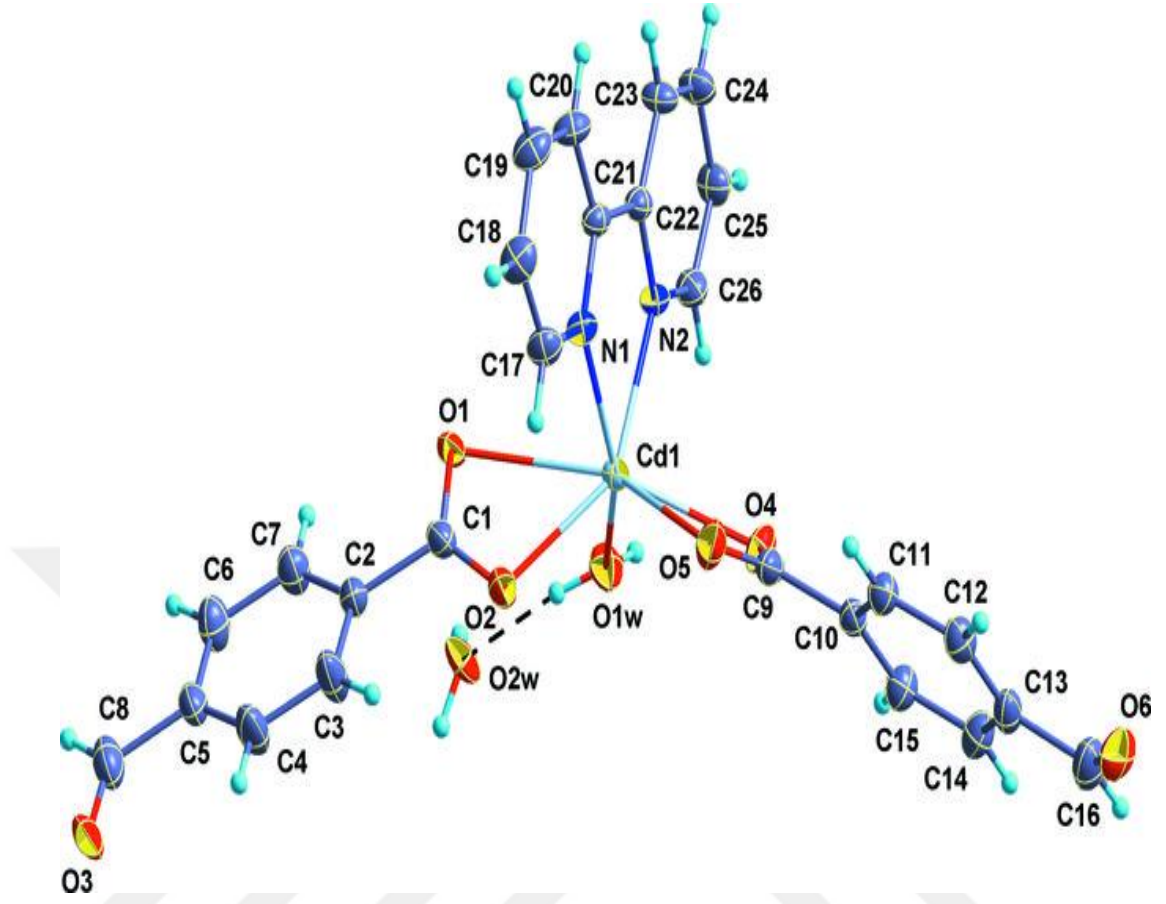
Şekil 1. 21. $[Cd(C_8H_5O_3)_2(C_{12}H_8N_2)][Cd_2(C_8H_5O_3)_4(C_{12}H_8N_2)_2]$ kompleksinin molekül yapısı.

Çift çekirdekli $[Co_2(C_8H_5O_3)_2(C_{10}H_8N_2)_2 \cdot (H_2O)_4](C_8H_5O_3)_2]$ komplekste her bir Co atomu bir FBA anyonu, bir 2,2'-bipridin ligantı ve üç su molekülüyle oktahedral geometriyi oluşturmuştur (Şekil 1. 22). Co atomları arasında iki su molekülü köprü görevi görmektedir. Yapıda koordine olmamış iki FBA anyonu bulunmaktadır. Katyon ve anyonlar arasında hidrojen bağları oluşmaktadır [26].



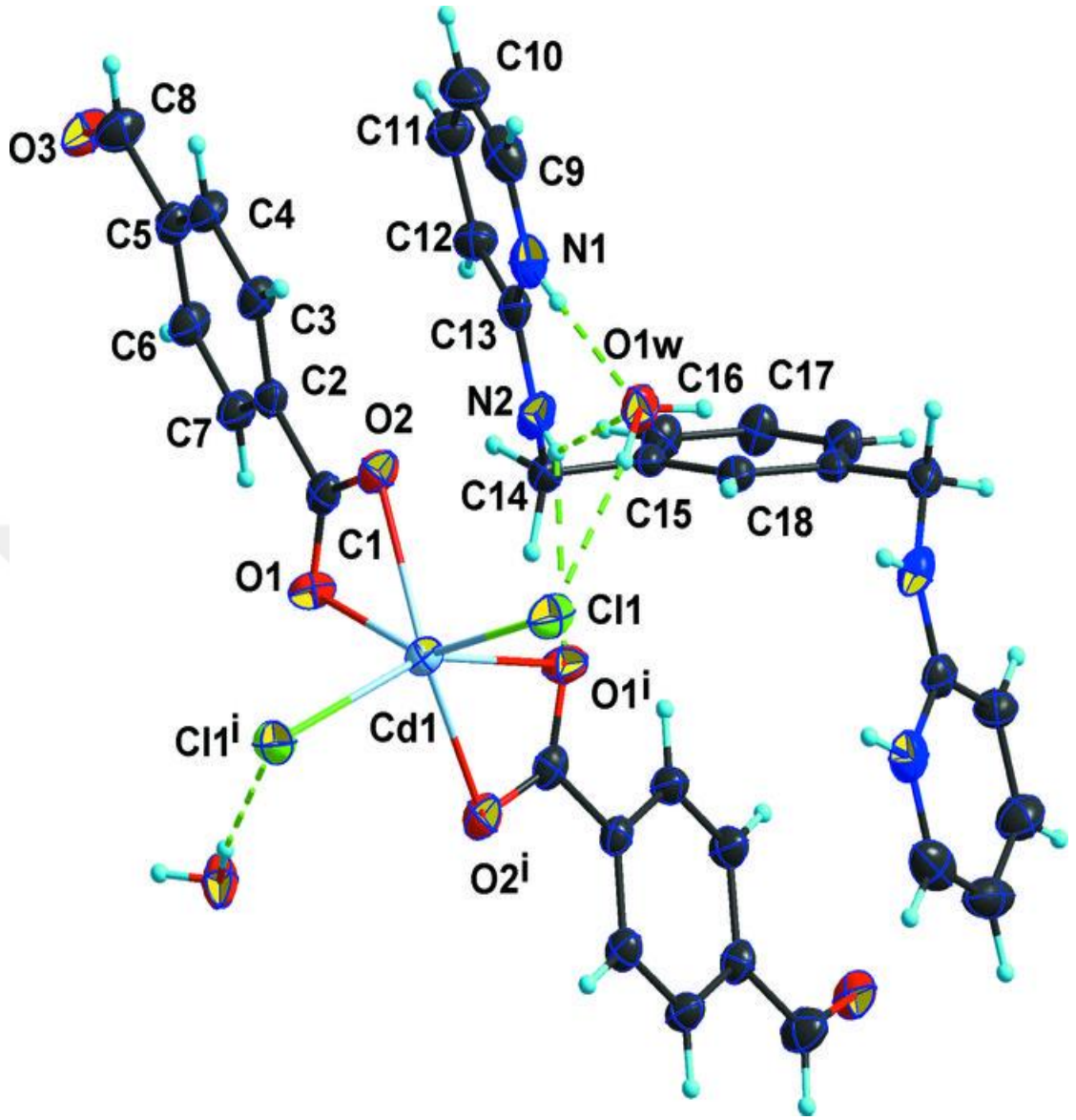
Şekil 1. 22. $[\text{Co}_2(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{-(H}_2\text{O)}_4](\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2$ kompleksinin molekül yapısı.

$[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N}_2)(\text{H}_2\text{O})]\cdot\text{H}_2\text{O}$ tek çekirdekli komplekste Cd atomu şelatlanmış iki 4-formilbenzoat, şelatlanmış 2,2'-bipridin ve bir su molekülüyle koordine olmuştur. Yapıda koordine olmamış bir su molekülü bulunmaktadır (Şekil 1. 23). Koordinasyon ve hidrat su molekülleri ve FBA oksijen atomu arasında hidrojen bağları mevcuttur [27].

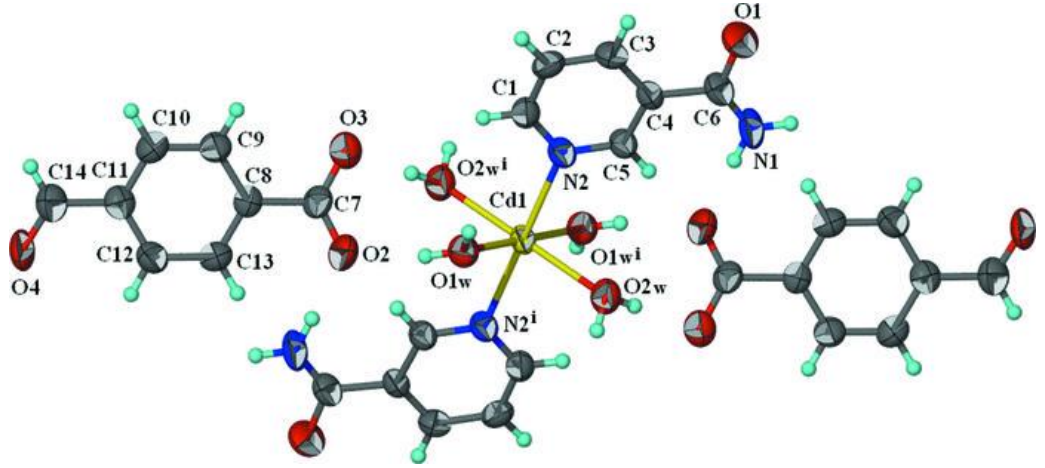


Şekil 1. 23. $[Cd(C_8H_5O_3)_2(C_{10}H_8N_2)(H_2O)] \cdot H_2O$ kompleksinin yapısı.

$Cd(C_{18}H_{20}N_4)[CdCl_2(C_8H_5O_3)_2] \cdot 2H_2O$ kompleksinde Cd atomu dönme eksenine yerleşmiştir. Cd atomu iki tane karboksilat grubunun şelatlanmasıyla ve cis pozisyonundaki iki klor atomuyla oktahedral geometriyi oluşturmuştur (Şekil 1. 24). Katyon ve anyonlar koordinasyon dışı su molekülleriyle etkileşerek hidrojen bağları oluşturmaktadır [28].

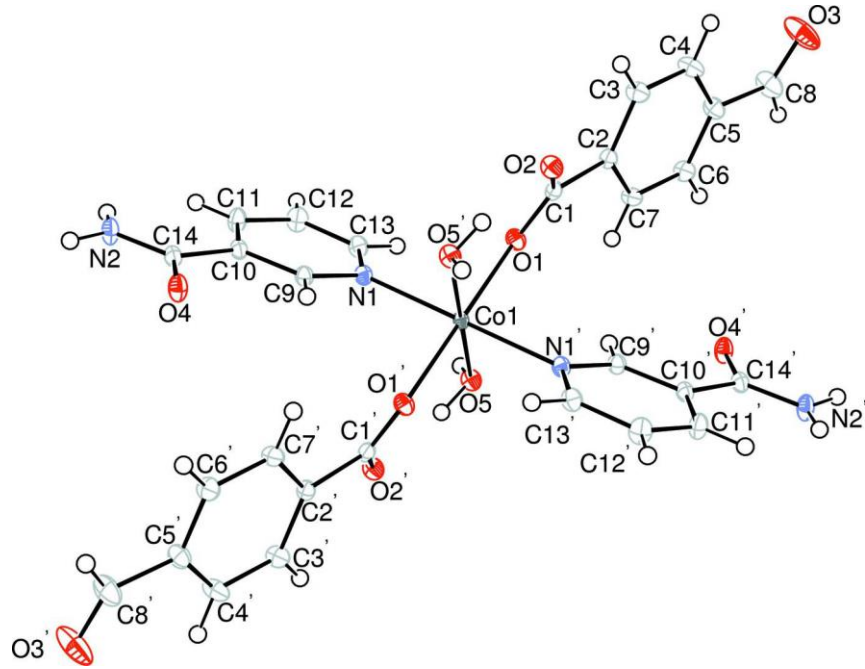


Şekil 1. 24. $[\text{Co}_2(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2$ kompleksinin molekül yapısı. $[\text{Cd}(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2$ kompleksinde Cd^{+2} iyonu simetri merkezine yerleşerek kısmen hafif bozunmuş oktahedral yapıyı oluşturur (Şekil 1. 25). Kristal yapıda katyonlar ve anyonlar etkileşerek hidrojen bağlarıyla üç boyutlu ağı oluştururlar [29].



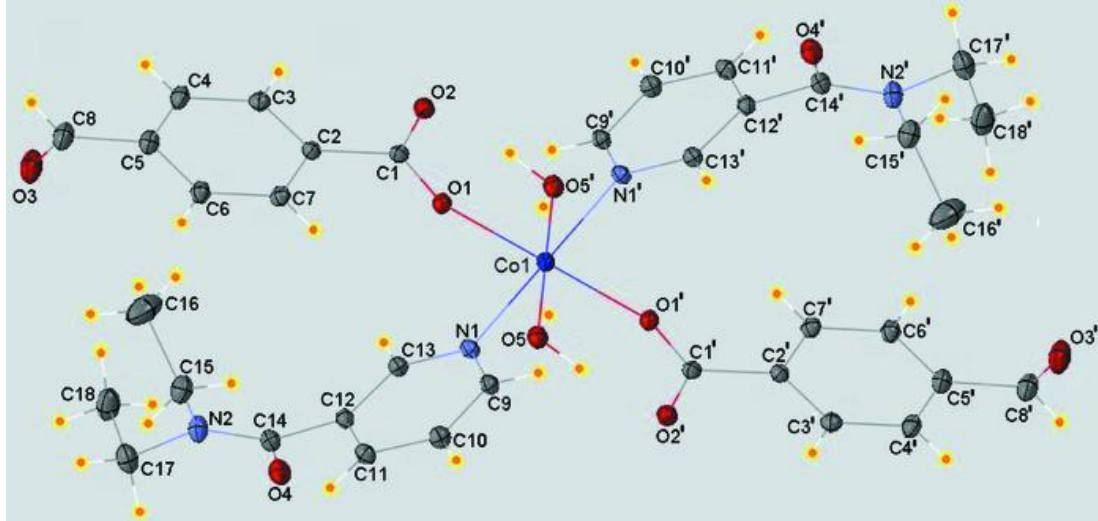
Şekil 1. 25. $[\text{Cd}(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2$ kompleksinin molekül yapısı.

Sertçelik ve arkadaşları tarafından $[\text{Co}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$, $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$, $[\text{Cu}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ve $[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ molekül formülüne sahip dört kompleks sentezlenmiştir. Sentezlenen kompleksler eş yapılı olup her bir kompleks iki FBA anyonu, iki nikotinamid ligandının piridin halkasının N donör atomu ve iki su molekülü ile koordine olmuştur [30–33].

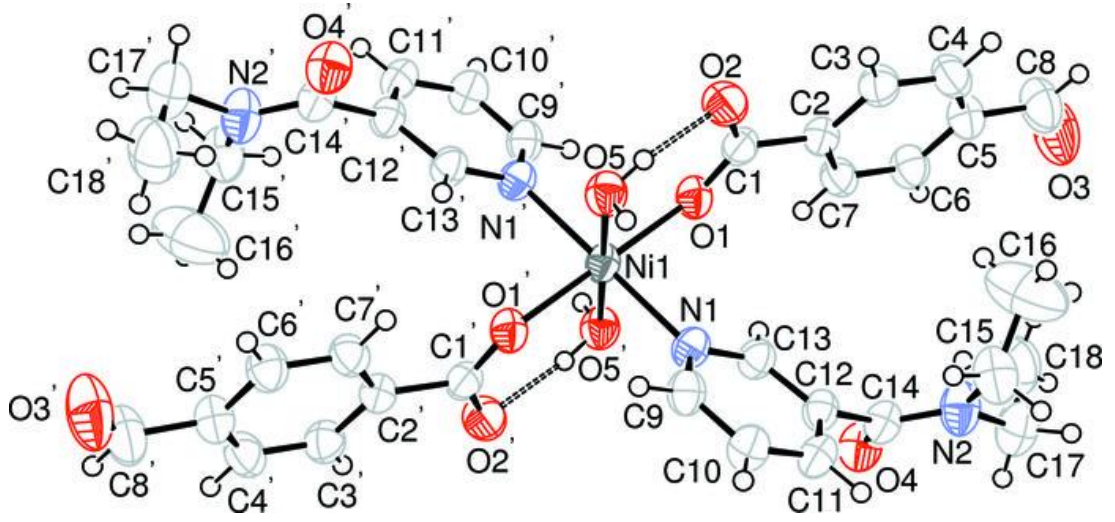


Şekil 1. 26. $[\text{Co}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin molekül yapısı

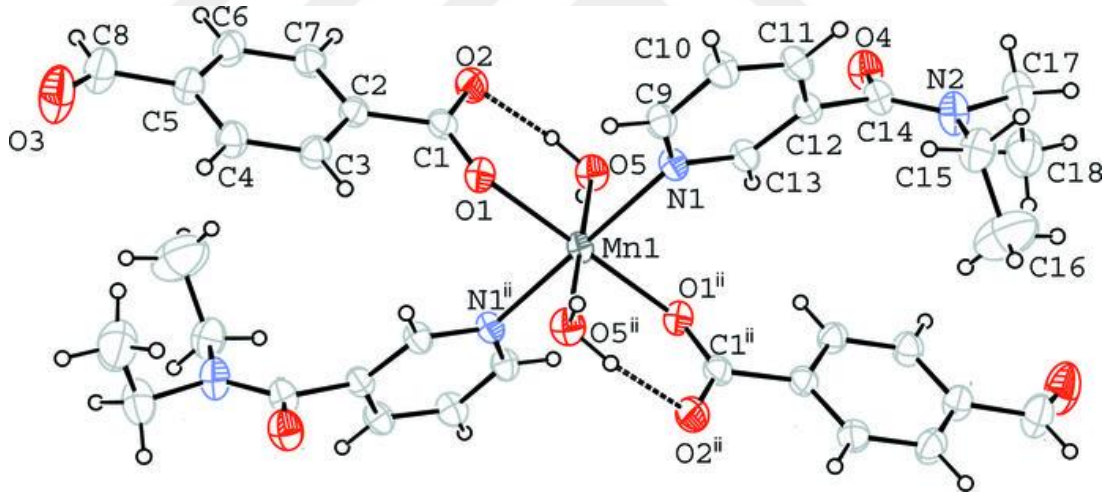
Sertçelik ve arkadaşları tarafından sentezlenen $[\text{Co}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $[\text{Mn}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ ve $[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ dört komplekste eş yapılı olup, metal atomları simetri merkezinde bulunmaktadır. FBA anyonları ve DENA molekülleri monodentant özellik göstermektedirler. Metalin oktahedrik koordinasyon çevresi iki FBA anyonunun iki karboksil oksijen atomu, iki DENA molekülünün iki N_{py} atomu ve iki su molekülünden oluşmaktadır. Karboksil grubunun metalle bağ oluşturmayan oksijen atomları koordinasyonda olan su molekülleri ile molekül içi hidrojen bağları oluşturmaktadırlar [34–37].



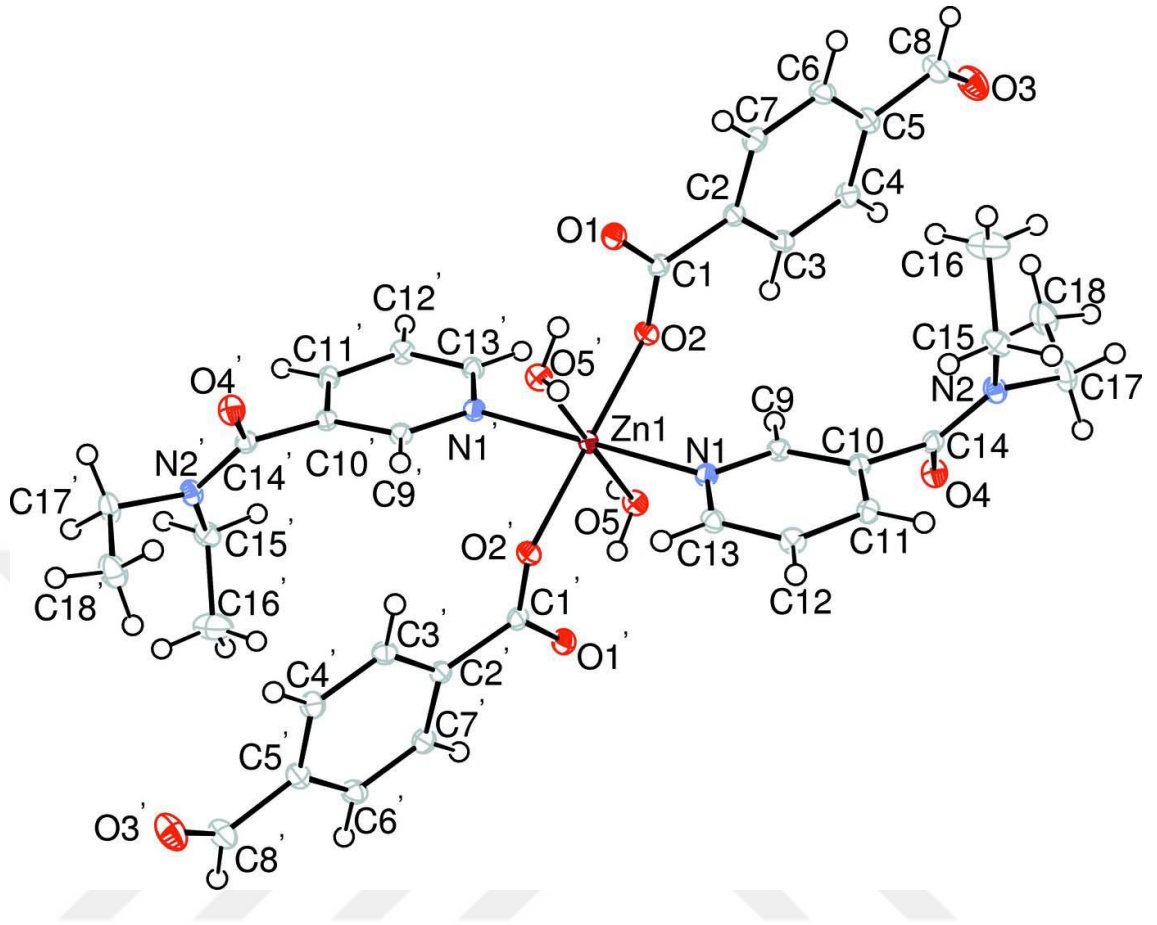
Şekil 1. 27. $[\text{Co}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin molekül yapısı.



Şekil 1. 28. $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin molekül yapısı.

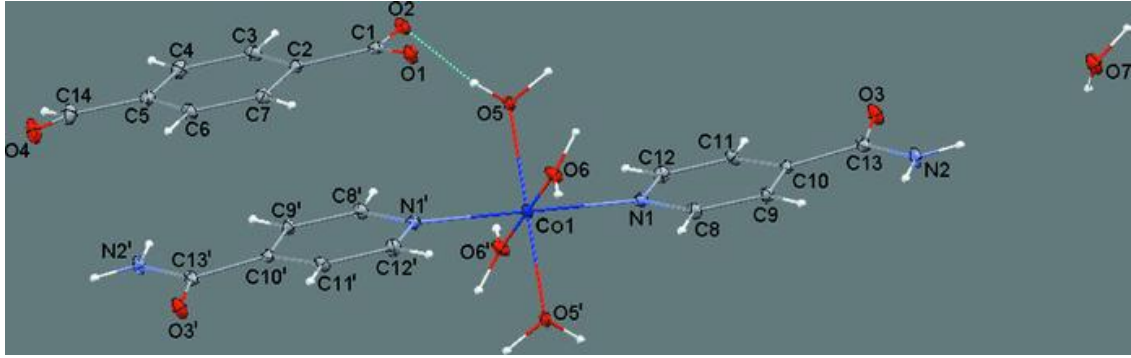


Şekil 1. 29. $[\text{Mn}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin molekül yapısı.

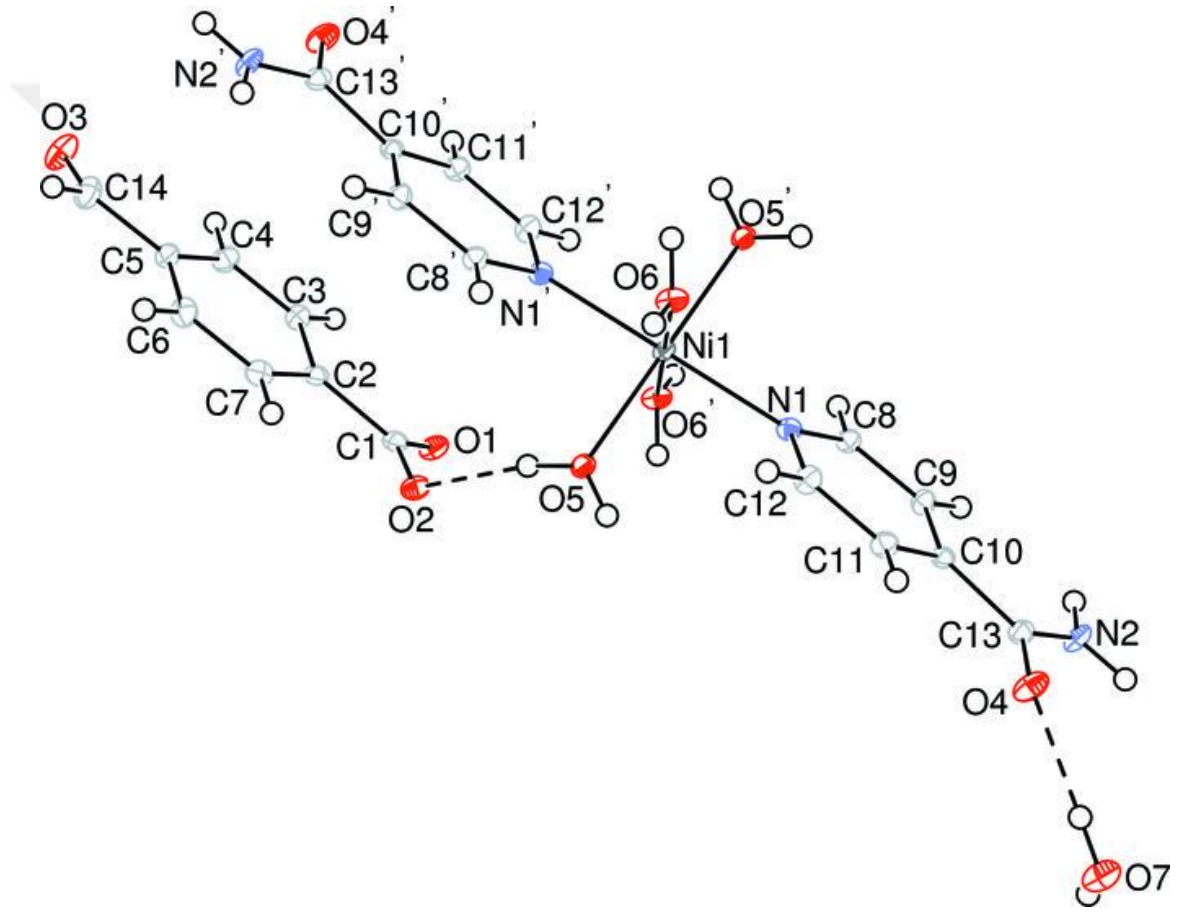


Şekil 1. 30. $[Zn(C_8H_5O_3)_2(C_{10}H_{14}N_2O)_2(H_2O)_2]$ kompleksinin molekül yapısı.

$[Co(C_6H_6N_2O)_2(H_2O)_4](C_8H_5O_3)_2 \cdot 2H_2O$ ve $[Ni(C_6H_6N_2O)_2(H_2O)_4](C_8H_5O_3)_2 \cdot 2H_2O$ molekül formülüne sahip olan komplekslerin ikisinde de metal atomu simetri merkezinde bulunan $[Co(C_6H_6N_2O)_2(H_2O)_4]^{+2}$ ve $[Ni(C_6H_6N_2O)_2(H_2O)_4]^{+2}$ kompleks katyonu, iki FBA anyonu ve iki molekül sudan oluşmaktadır. Co(II) ve Ni(II) etrafındaki ekvatoryal düzlemde dört oksijen atomu kare-düzlemsel geometri oluşturmaktadır. Kristal yapıda O – H \cdots O, O – H \cdots N ve C – H \cdots O hidrojen bağları vasıtasıyla üç boyutlu ağ oluşturmaktadır [38, 39].

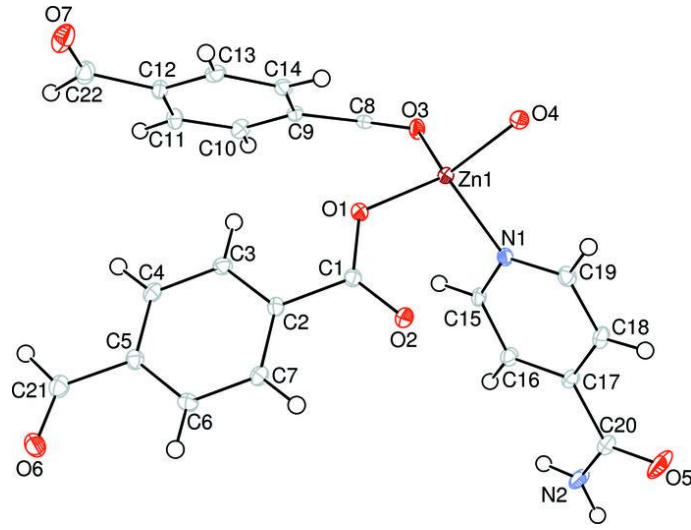


Şekil 1. 31. $[\text{Co}(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ kompleksinin molekül yapısı

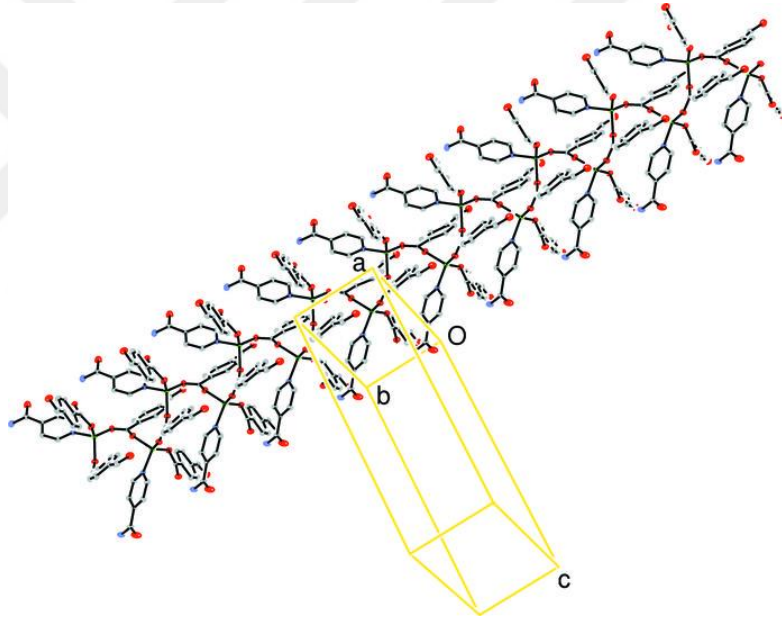


Şekil 1. 32. $[\text{Ni}(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ kompleksinin molekül yapısı

$[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})]_n$ Başlıklı komplekste Zn(II) iyonu iki FBA anyonu ve bir izonikotinamid molekülü ile tetrahedrik olarak koordine olmuştur. FBA anyonlarından biri bidentat köprü rolü oynayarak komşu Zn(II) iyonlarının *b* eksenı yönünde polimerik zincir oluşturmaktadır. Polimer zincirler arasında N – H \cdots O ve C – H \cdots O hidrojen bağları gözlemlenmektedir [40].

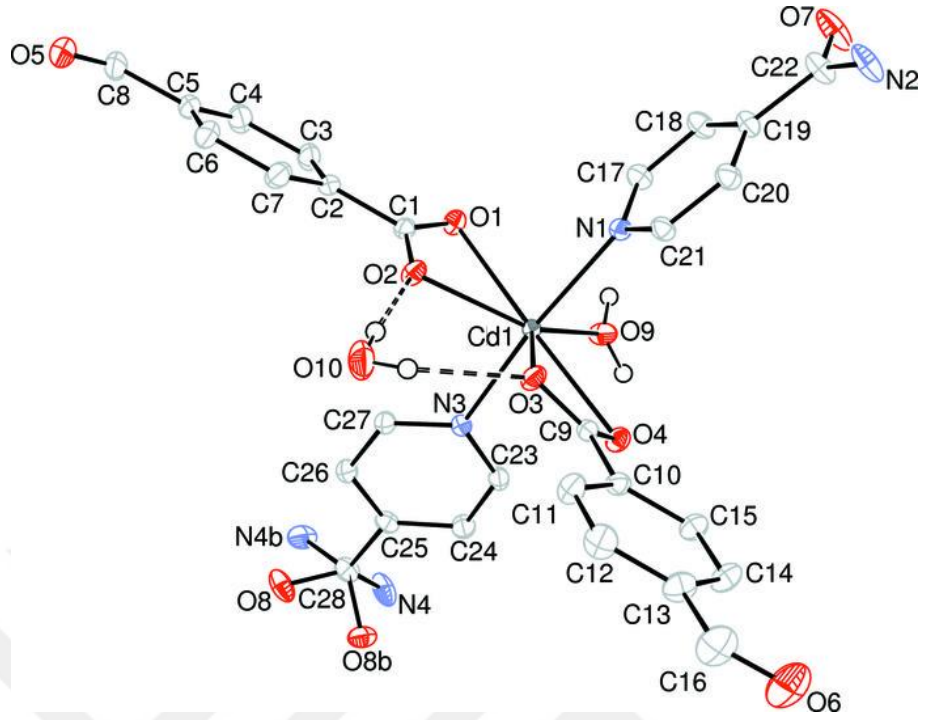


Şekil 1. 33. $[Zn(C_8H_5O_3)_2(C_6H_6N_2O)]_n$ kompleksinin molekül yapısı



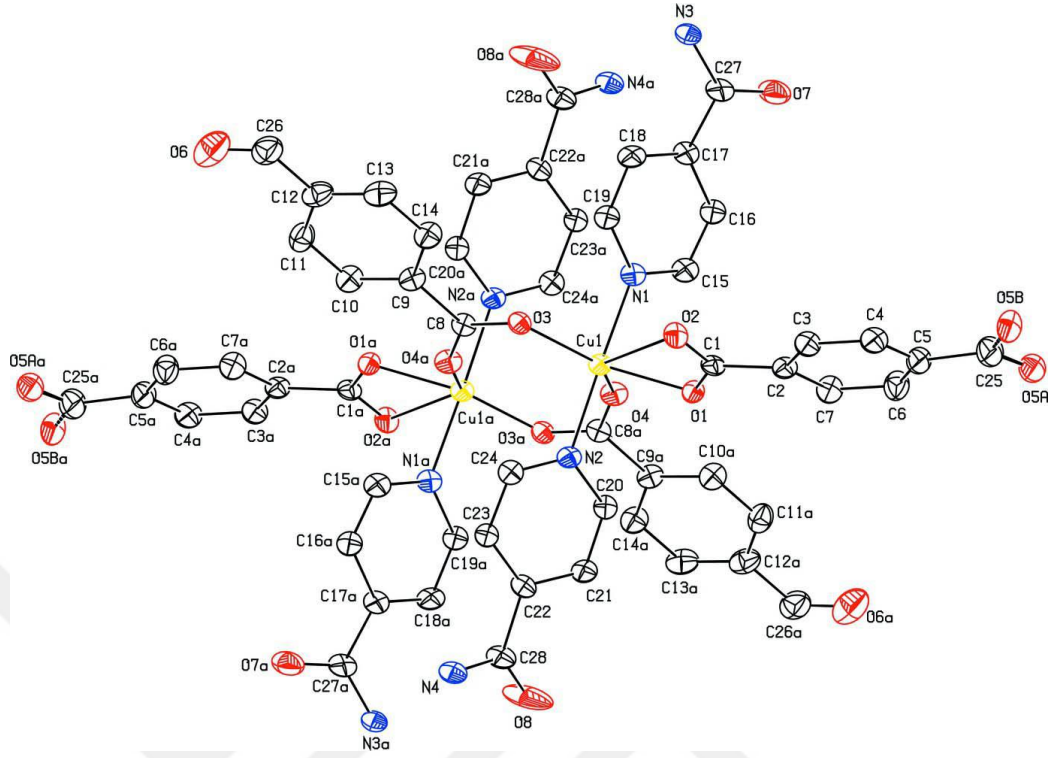
Şekil 1. 34. $[Zn(C_8H_5O_3)_2(C_6H_6N_2O)]_n$ kompleksinin polimerik yapısı

$[Cd(C_8H_5O_3)_2(C_6H_6N_2O)_2(H_2O)] \cdot H_2O$ Başlıklı komplekste simetri merkezinde bulunan Cd atomunun koordinasyon sayısı yedi'dir. Komplekste iki izonikotinamid molekülü, iki FBA atomu, bir koordine olmamış su molekülü ve biri koordine olmuş su molekülü mevcuttur. FBA atomunun iki oksijen atomu bidentant olarak koordinasyona girerken, iki izonikotinamid molekülü iki azot atomu vasıtasıyla koordinasyona girmiştir [41].



Şekil 1. 35. $[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})] \cdot \text{H}_2\text{O}$ kompleksinin molekül yapısı

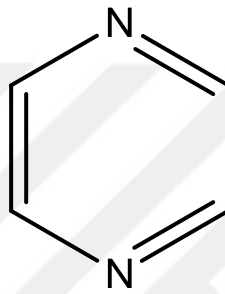
Kapalı formülü $[\text{Cu}_2(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_4]$ olan komplekste iki FBA anyonu Cu atomları arasında köprü görevi görmekte iken, her bir Cu atomuna bir FBA anyonu şelat oluşturmakta ve iki izonikotinamid ligandı piridin halkasındaki N atomu vasıtasıyla bağlanmaktadır [42].



Şekil 1. 36. $[\text{Cu}_2(\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_4]$ kompleksinin molekül yapısı

1.3. Pirazin

Diazinler, altı halkada iki azot bulunduran heterosiklik bileşiklerdir. Azot atomu 1-4 pozisyonunda bulunan diazinler pirazin olarak adlandırılır. Pirazinin kristal yapısı 1957 yılında Wheatly tarafından aydınlatılmıştır [43]. İki dişli bağlanabilmeleri ve köprü oluşturmaları sebebiyle diazinler ve türevleri polimerik komplekslerin sentezi için uygun ligantlardır [44–47]. Literatürde pirazin ve türevlerinin komplekslerinin büyük bir kısmı köprü ligant şeklinde olmakla beraber nadiren tek dişli ligant olarak komplekslerine de rastlanmaktadır [48].



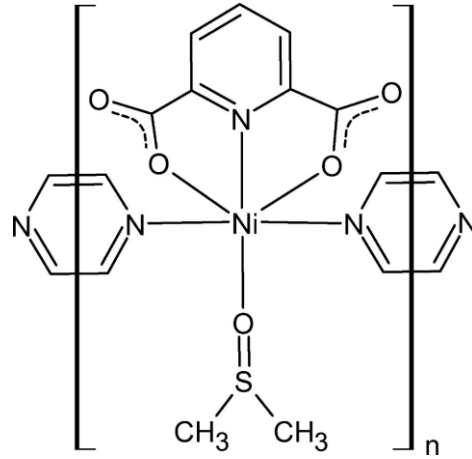
Şekil 1. 37. Pirazinin molekül yapısı

Pirazin (*prz*), erime noktası 57 °C olan renksiz ve çözünürlüğü yüksek olan bir bileşiktir. Pirazin ve türevlerinin çözünürlüğünün kolay olması ve kolayca koordinasyona girerek köprü oluşturabilmesi polimer komplekslerde tercih edilen bir ligant olmasını sağlamıştır.

Pirazin kompleksleri hem biyolojik aktivitelerinin yüksek olması hem de fiziksel uygulama alanları sebebiyle bir çok araştırmaya konu olmaktadır. Pirazin molekülü, manyetik, gaz adsorpsiyonu, fotoluminesans özellikleri ve antibakteriyel, antifungal, antienflamatuvar, antikanser, antidiyabetik, antiviral benzeri farmakoloji uygulamaları gibi birçok alanda yer alan çok yönlü organik bileşik olarak kabul edilir [49–52].

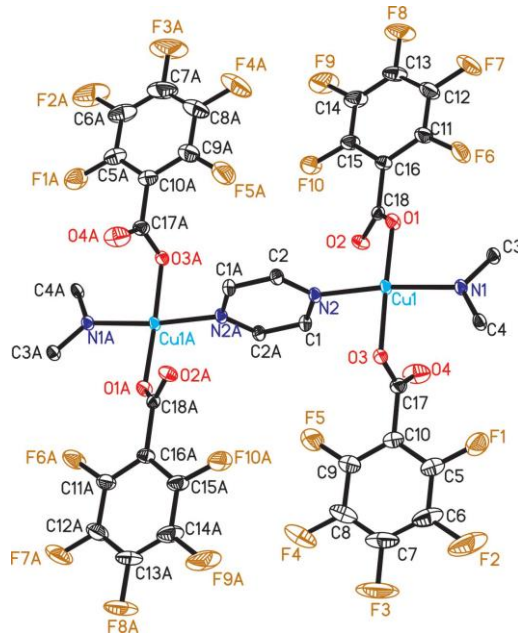
1.4. Pirazinin Metal Kompleksleri

$[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_3\text{NO}_4)(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{C}_2\text{H}_6\text{OS})]_n$ formüllü komplekste Ni(II) iyonları arasında pirazin molekülü monodentat-köprü görevi görmektedir. 2,6- piridin-dikarboksilik asidin karboksil gruplarından gelen oksijen atomları ve dimetil sülfoksitin oksijen atomu ile koordinasyonunu tamamlamıştır [46].

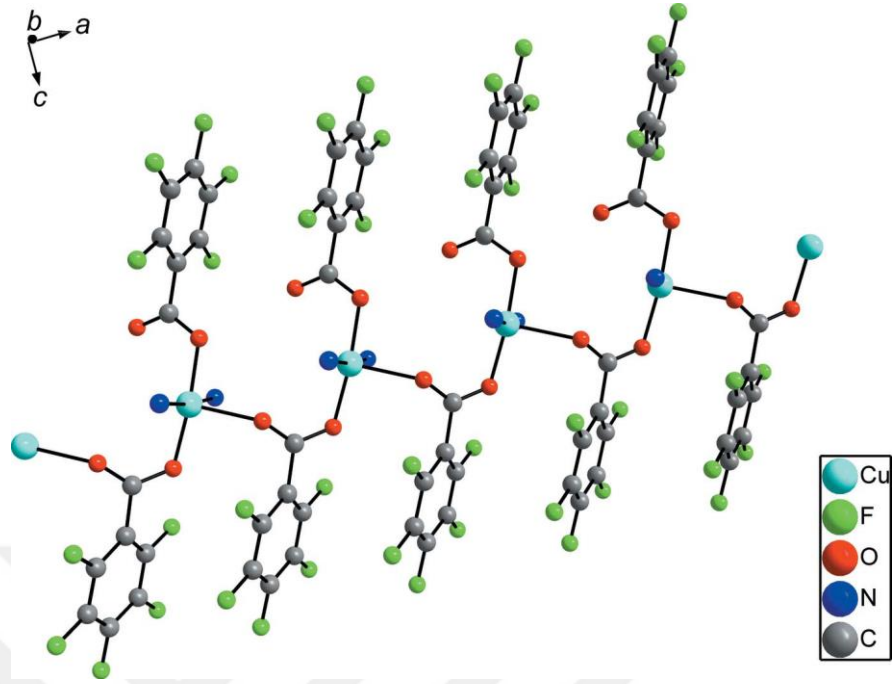


Şekil 1. 38. $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_3\text{NO}_4)(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{C}_2\text{H}_6\text{OS})]_n$ Kompleksinin Molekül Yapısı

$[\text{Cu}(\text{C}_6\text{F}_5\text{COO})_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)]_n$ formüllü polimerik kompleksin asimetrik biriminde bir Cu(II) kasyonu, iki pentaflorobenzoat ligandı ve bir pirazin ligandı yer almaktadır. Her bir Cu(II) merkezi üç bağımsız pentaflorobenzoat anyonunun üç O atomu ve ayrıca iki pirazin ligandından iki N atomu ile koordinasyonunu tamamlamıştır ve hemen hemen kare piramidal koordinasyon geometrisine sahiptir. Komşu Cu(II) kationları, iki boyutlu bir tabaka verecek şekilde bir pirazin ligandı ve iki pentaflorobenzoat anyonuyla köprülenir [53].

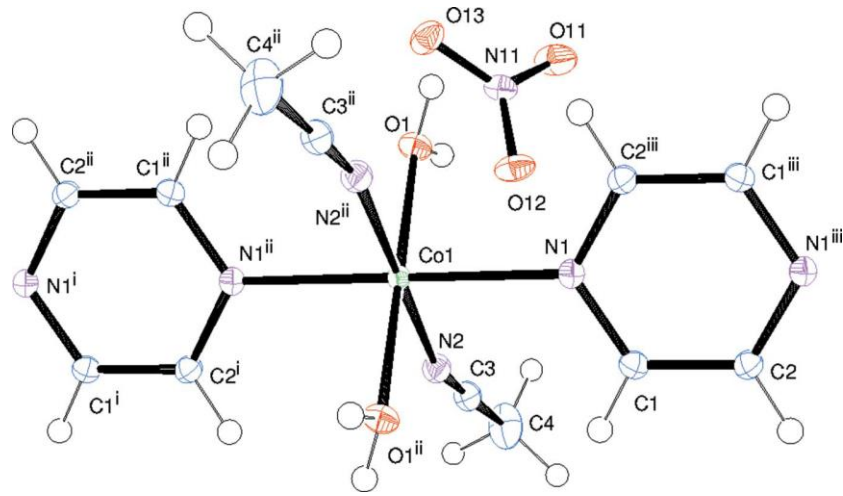


Şekil 1. 39. $[\text{Cu}(\text{C}_6\text{F}_5\text{COO})_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)]_n$ Kompleksinin Molekül Yapısı



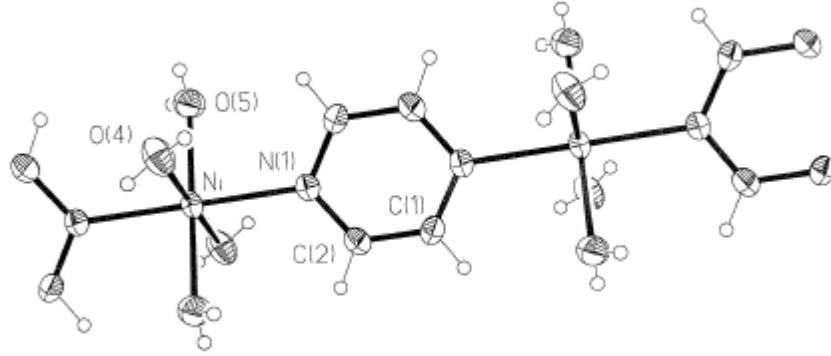
Şekil 1. 40. $[\text{Cu}(\text{C}_6\text{F}_5\text{COO})_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)]_n$ Kompleksinin Molekül Yapısı

$[\text{Co}(\text{NO}_3)_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{CH}_3\text{CN})_2(\text{H}_2\text{O})_2]_n$ formüllü polimerik komplekste pirazin molekülü $\text{Co}(\text{II})$ iyonları arasında köprü görevi görmektedir. $\text{Co}(\text{II})$ iyonu su molekülünün iki oksijen atomu, iki piridin molekülünün iki azot atomu ve iki asetonitril ligandının iki azot atomuyla oktahedral geometri oluştururken molekülün yük dengesini iki NO_3^- anyonları sağlamaktadır[54].



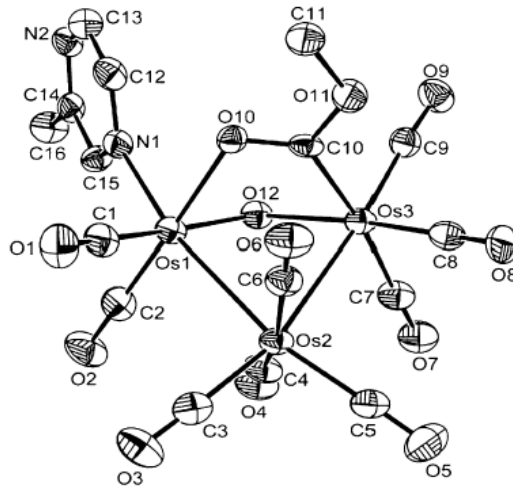
Şekil 1. 41. $[\text{Co}(\text{NO}_3)_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{N}_2)(\text{CH}_3\text{CN})_2(\text{H}_2\text{O})_2]_n$ Kompleksinin Molekül Yapısı

Polimerik kompleksin molekül formülü $[[\text{Ni}(\text{prz})(\text{H}_2\text{O})_4](\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]_n$ şeklindedir. Ni(II) iyonları arasında pirazin molekülü köprü oluşturmaktadır. Her bir Ni(II) atomu dört su molekülü ve iki pirazin molekülüyle oktahedral koordinasyonu tamamlarken, iki nitrat anyonu yük dengesini sağlamaktadır ve yapıda koordine olmamış iki su molekülü yer almaktadır [45]



Şekil 1. 42. $[[\text{Ni}(\text{prz})(\text{H}_2\text{O})_4](\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]_n$ Kompleksinin Molekül Yapısı

$[\text{Os}_3(\text{CO})_9(\mu\text{-OH})(\mu\text{-OMeCO})(\text{prz})]$ olarak kapalı formülü verilen komplekste üç osmiyum atomuna Os(1) iki, Os(2) dört ve Os(3) üç olmak üzere toplamda dokuz CO grubu bağlanmaktadır. Os(1) \cdots Os(2) arasında bir hidroksil ve bir metoksikarbonil ligandı köprü oluşturmaktadır. Bir pirazin ligandı ise Os(1) atomuna koordine olmaktadır [48].

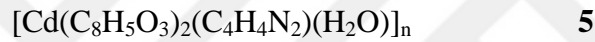
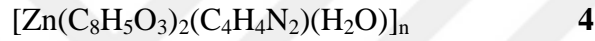
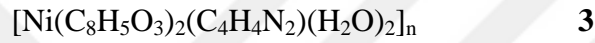
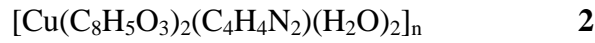
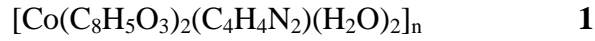


Şekil 1. 43. $[\text{Os}_3(\text{CO})_9(\mu\text{-OH})(\mu\text{-OMeCO})(\text{prz})]$ Kompleksinin Molekül Yapısı

2. MATERYAL VE YÖNTEM

2.1. Sentez

Komplekslerin sentezinde, Merck marka kobalt(II) sülfat ($\text{CoSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$), bakır(II) sülfat ($\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$) nikel(II) sülfat ($\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$), çinko(II) sülfat ($\text{ZnSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$), kadmiyum(II) sülfat ($3\text{CdSO}_4 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$), Sigma-Aldrich marka 4-formilbenzoik asit, sodyum bikarbonat ve pirazin kullanılmıştır.



kompleksleri aşağıdaki gibi sentezlenmiştir.

Sodyum 4-formilbenzoatların eldesi için 20 mmol 4-formilbenzoik asit, 20 mmol sodyum bikarbonatla 100 ml saf su içerisinde reaksiyona sokuldu. Tepkime esnasında oluşan karbondioksit ortamdan tamamen uzaklaşmaya kadar karıştırıldı.



Daha ayrı ayrı beherlerde 10 mmol Me(II) sülfatların (Me = Co, Cu, Ni, Zn, Cd) 30 ml suda çözeltisi hazırlandı ve ayrı bir beherde 10 mmol pirazin 50 ml suda tamamen çözüldükten sonra Me(II) sülfat çözeltisi üzerine ilave edildi. Oluşan karışımın üzerine de daha önceden hazırlanan 20 mmol sodyum 4-formilbenzoat çözeltisi ilave edildi.

Oda sıcaklığında elde edilen çözeltiler kristallenene kadar bekletildi. Bir hafta sonunda pembe renkli (Co kompleksi), yeşil renkli (Cu kompleksi), yeşil renkli (Ni kompleksi), renksiz (Zn kompleksi) ve krem renkli (Cd kompleksi), tek kristaller oluştu. Oluşan kristaller süzülerek saf suyla yıkandı ve oda sıcaklığında kurutuldu.

2.2. Yöntem

2.2.1. Elemental Analiz

Elemental analiz çalışmalarıyla komplekslerin içerdiği elementlerin miktarları hakkında kesin bir veri elde edilebilir. Bu elde edilen deneysel verilerle teorik verilerin karşılaştırılması suretiyle komplekslerin yapısında hangi ligandan ne oranda bulunduğu hakkında, kesin olmasa da, bir fikir yürütebilmemize yardımcı olur.

Elemental analizler (C, H, ve N analizi) İnönü Üniversitesi Bilimsel ve Teknoloji Merkez Araştırma Laboratuvarında CHNS932 elementel analiz cihazı ile yapıldı.

2.2.2. Infrared Spektrum

Komplekslerin bünyesinde bulunan fonksiyonel gruplar, bağlanan atomlar ve bu atomların bağlanma pozisyonları IR spektroskopisi ile belirlenebilir. Bunun yanında bu fonksiyonel grup ve atomların oluşturduğu titreşim frekanslarından da faydalanmak suretiyle komplekslerin geometrik şekilleri ve de yapıda bulunan bağların türleri hakkında da fikirler yürütülebilir.

Infrared çalışmaları, Kafkas Üniversitesi Mühendislik Mimarlık Fakültesi Laboratuvarlarında PerkinElmer FrontierTM FT-IR spektrometresiyle yapıldı. Sentezlenen katı komplekslerin IR spektrumları 6004000 cm^{-1} aralığında kaydedildi.

2.2.3. X-Ray Yapı Analizi

Analiz edilecek olan kristal yapının içeriğinin atomik seviyede resmini elde etmek için X-ışını (X-ray) difraksiyonu analizini kullanırız. X-ray analizi neticesinde moleküldeki tüm atomların konumları, atomlar arası mesafeler, bağ açıları hesaplanabilir. Molekül geometrisi tespit edilebilir [55].

Komplekslerin X-ray yapı analizleri Aksaray Üniversitesi Bilim ve Teknoloji Araştırma Uygulama Merkezinde Bruker SMART BREEZE CCD marka cihaz ile yapılmış ve yapı aydınlatması Hacettepe Üniversitesi Fizik Mühendisliği Öğretim Üyesi Prof. Dr. Tuncer HÖKELEK tarafından yapılmıştır.

2.2.4. Komplekslerin Antimikrobiyal Aktivitenin Belirlenmesi

Sentezlenen 5 yeni kompleks agar kuyucuk difüzyon yöntemi kullanılarak gram negatif *Pseudomonas aeruginosa* (ATCC 27853), *Klebsiella pneumoniae* (ATCC 4352), ve *Escherichia coli* (ATCC 25922), gram pozitif *Staphylococcus aureus* (ATCC) 6538) bakterilerine karşı antimikrobiyal aktivite çalışmaları gerçekleştirildi. Mikroorganizmalar Mikrobiyolojik Çevre Koruma firmasından temin edilerek Kafkas Üniversitesi Mühendislik Mimarlık Fakültesi araştırma laboratuvarlarında çoğaltıldı. Antimikrobiyal aktivite için besiyeri olarak Müller Hilton Agar (MHA), kullanıldı. Mikroorganizmalar çalışmaya başlamadan önce stoklardan alınarak Muller Hilton Broth (MHB)'a aşılansak aktivasyonu sağlandı. Aktifleştirmeler 24 saat 37 °C'lik inkübasyon ortamında yapıldı. Steril olarak hazırlanan petri kutularına bakteriler, 0,5 McFarland standardı ile standardize edilerek aşılandı. Bakteri aşılanan petri kaplarına steril edilmiş cam çubuk yardımı ile 4 mm çapında kuyucuklar açıldı. Sentezlenen komplekslerden 0,05 g alınarak 5 ml DMSO'te çözünerek homojen çözeltiler hazırlandı ve otomatik pipet yardımı ile 4 mm çapında açılmış olan kuyucuklara stoklardan 50 µl olarak enjekte edildi. İnhibisyon zon çaplarının belirlenmesi için 18-24±2 saat süre ile 37±1 °C de inkübe edildi. [56, 57].

İnkübasyon sonrası kuyucukların etrafında meydana gelen inhibisyon zon çapları mm cinsinden ölçülerek hesaplamalar yapıldı.

3. BULGULAR

3.1. Elemental Analiz

İlk kez sentezlenen beş yeni 4-formilbenzoat kompleksinin elemental analiz sonuçları Tablo 3.1’de verilmiştir.

Tablo 3. 1. Komplekslerin elemental analiz verileri.

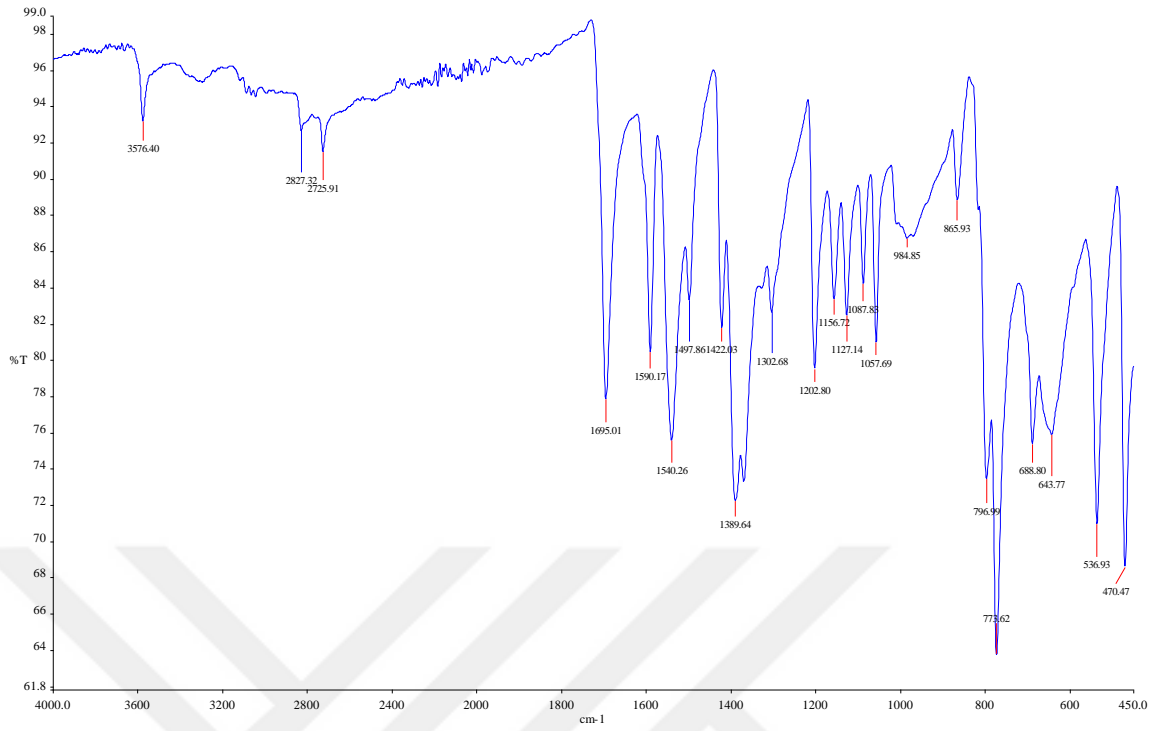
| KOMPLEKS | %C | %H | %N |
|----------|-----------------|-----------------|-----------------|
| | Deneysel-Teorik | Deneysel-Teorik | Deneysel-Teorik |
| 1 | 49.92-50.75 | 3.08-3.83 | 5.74-5.92 |
| 2 | 48.25-50.26 | 2.92-3.80 | 4.25-5.86 |
| 3 | 49.85-50.78 | 3,43-3.84 | 5.62-5.92 |
| 4 | 51.24-52.02 | 3.15-3.49 | 5.85-6.07 |
| 5 | 46.10-47.22 | 2.92-3.17 | 5.05-5,51 |

3.2. Infrared Spektrum

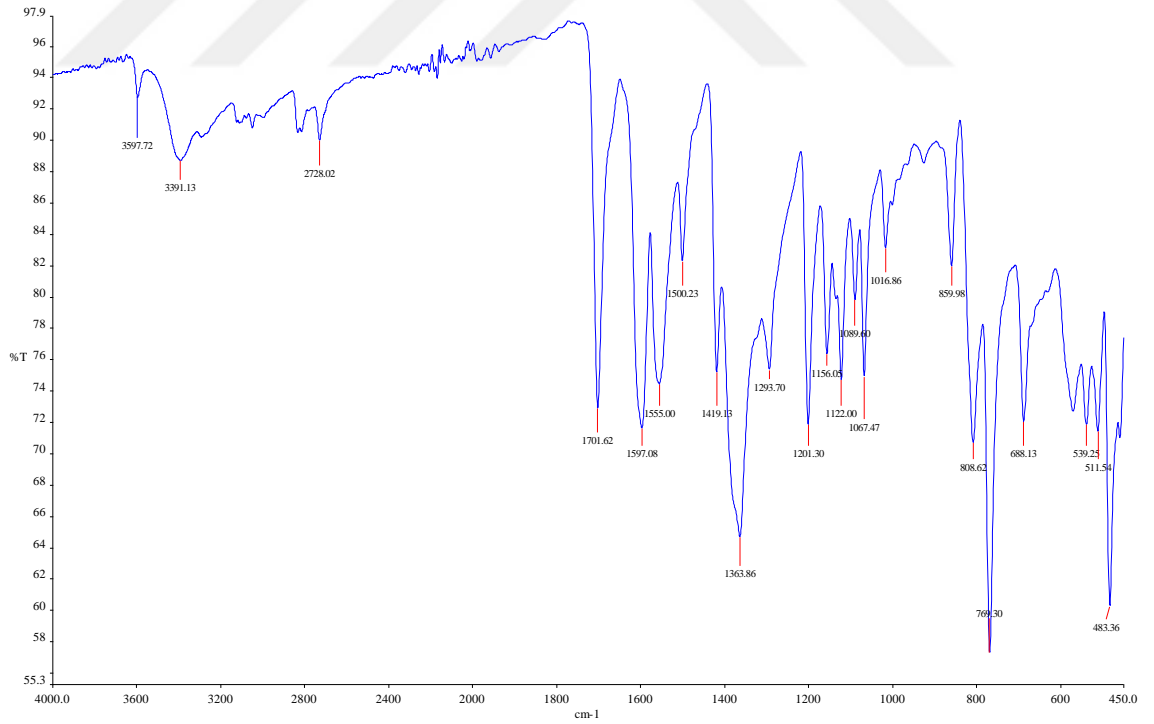
Sentezlenen komplekslerin FT-IR spektrumları Şekil 3.1-3.5’de verilirken, FT-IR spektrum pikleri de Tablo 3.2’de verilmiştir.

Tablo 3. 2. Sentezlenen komplekslerin FT-IR spektrumlar

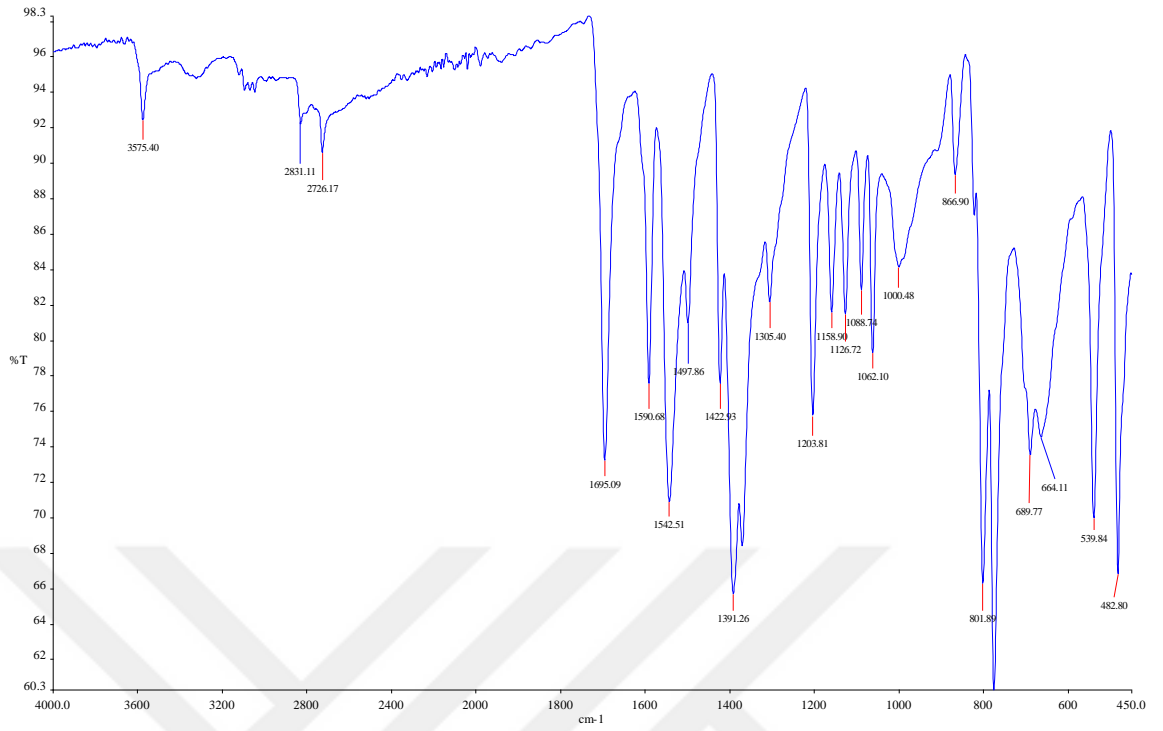
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 |
|--|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| $\nu(\text{O-H})$ | 3576 | 3597 | 3575 | 3300-3100 | 3300-3100 |
| $\nu_{\text{ar}}(\text{C-H})_{\text{arom}}$ | 3100-3000 | 3100-3000 | 3100-3000 | 3100-3000 | 3100-3000 |
| $\nu(\text{C=O})_{\text{aldehit}}$ | 2725 | 2728 | 2726 | 2750 | 2751 |
| $\nu(\text{CN}^-)_{\text{pirazin}}$ (gerilme) | 1540 | 1555 | 1542 | 1536 | 1536 |
| $\nu(\text{COO}^-)_{\text{as}}$ | 1590 | 1597 | 1590 | 1588 | 1588 |
| $\nu(\text{COO}^-)_{\text{s}}$ | 1389 | 1363 | 1391 | 1374 | 1395 |
| $\Delta\nu(\text{COO}^-)$ | 201 | 232 | 199 | 215 | 193 |
| $\nu(\text{CN}^-)_{\text{pirazin}}$ (eğilme) | 1202 | 1201 | 1203 | 1198 | 1200 |
| $\nu_{\text{ar}}(\text{C-H})$ | 1127 | 1122 | 1126 | 1135 | 1156 |
| $\nu(\text{Me-O})$ | 470 | 483 | 482 | 512 | 500 |
| $\nu(\text{Me-N})$ | 688 | 688 | 700 | 700 | 686 |



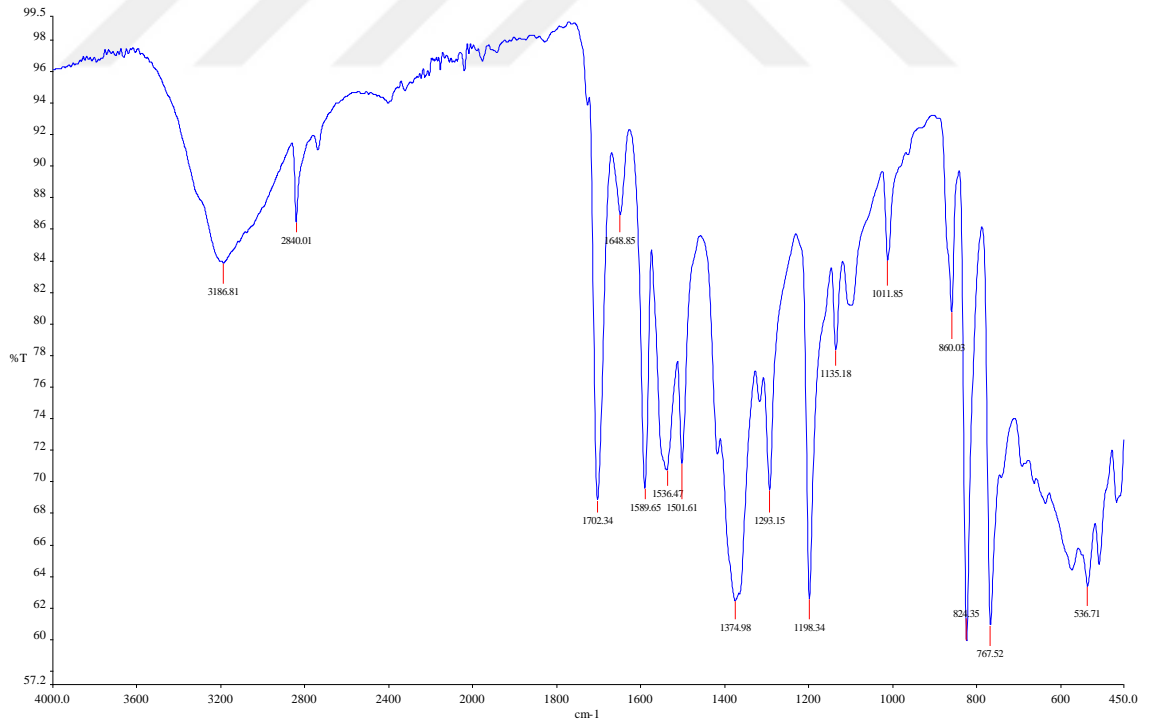
Şekil 3. 1. 1 kompleksinin FT-IR spektrumu



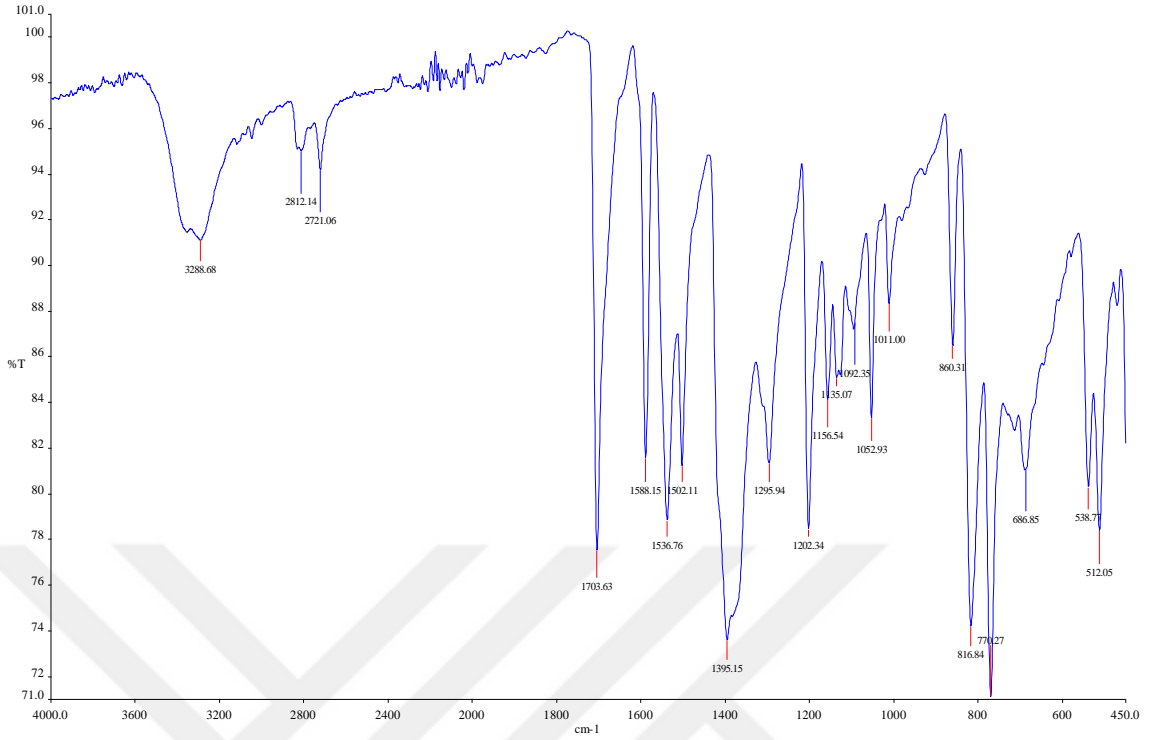
Şekil 3. 2. 2 kompleksinin FT-IR spektrumu



Şekil 3. 3. 3 kompleksinin FT-IR spektrumu



Şekil 3. 4. 4 kompleksinin FT-IR spektrumu



Şekil 3. 5. 5 kompleksinin FT-IR spektrumu

3.3. X-Işınları Kristallografisi

Sentezlenen komplekslerden tamamının molekül yapısı X-ışını kırınımıyla aydınlatılmıştır ve makale olarak yayınlanmıştır. Komplekslerin X-ışınları kristallografisi verileri ve parametreleri Tablo 3.3-3.22’de verilmiştir.

Tablo 3. 3. 1 kompleksinin kristalografik verileri [58]

Kristal verileri

| | |
|----------------------------|--|
| Kimyasal Formülü | [Co(C ₈ H ₅ O ₃) ₂ (C ₄ H ₄ N ₂)(H ₂ O) ₂] |
| M_r | 473.29 |
| Kristal sistem, uzay grubu | Monoklinik, $C2/c$ |
| Sıcaklık (K) | 296 |
| a, b, c (Å) | 22.1623 (6), 7.1193 (2), 12.2911 (3) |
| β (°) | 94.432 (1) |
| V (Å ³) | 1933.49 (9) |
| Z | 4 |

| | |
|---|--|
| Işın Kaynağı | Mo K_{α} |
| μ (mm^{-1}) | 0.94 |
| Kristal boyutu (mm) | $0.47 \times 0.22 \times 0.11$ |
| Veri Toplama | |
| Difaktometre | Bruker SMART BREEZE CCD |
| Soğurma düzeltimi | multi-scan (SADABS; Bruker, 2012) |
| T_{\min} , T_{\max} | 0.830, 0.914 |
| Ölçülebilen, gözlenebilen [$I > 2\sigma(I)$] ve serbest yansıma sayısı | 27023, 2427, 2336 |
| R_{int} | 0.024 |
| $(\sin \theta/\lambda)_{\text{max}}$ (\AA^{-1}) | 0.668 |
| Arıtım | |
| $R[F^2 > 2\sigma(F^2)]$, $wR(F^2)$, S | 0.025, 0.071, 1.06 |
| Yansıma sayısı | 2427 |
| Parametre sayısı | 154 |
| Sınırların sayısı | 1 |
| H-atomları davranışı | Bağımsız ve sabit arınım karışımı tarafından incelenmiş H atomları |
| $\Delta\rho_{\text{max}}$, $\Delta\rho_{\text{min}}$ (e \AA^{-3}) | 0.35, -0.34 |

Tablo 3. 4. 1 kompleksine ait atomik koordinatlar ve izotropik eşdeğer yer değiştirme parametreleri (\AA^2) [58]

| | x | y | z | $U_{\text{iso}}^*/U_{\text{eq}}$ |
|-----|-------------|---------------|--------------|----------------------------------|
| Co1 | 1.0000 | -0.05145 (3) | 0.7500 | 0.01998 (9) |
| O1 | 0.91572 (4) | -0.04830 (13) | 0.80894 (9) | 0.0276 (2) |
| O2 | 0.86274 (5) | -0.17780 (18) | 0.66579 (9) | 0.0402 (3) |
| O3 | 0.60114 (6) | -0.1312 (3) | 0.95577 (12) | 0.0651 (4) |
| O4 | 0.96115 (5) | -0.06701 (18) | 0.58454 (9) | 0.0352 (2) |
| H41 | 0.9245 (12) | -0.104 (4) | 0.600 (2) | 0.058 (6)* |
| H42 | 0.9564 (12) | 0.019 (4) | 0.555 (2) | 0.066 (8)* |
| N1 | 1.0000 | 0.2518 (2) | 0.7500 | 0.0247 (3) |

| | | | | |
|-----|-------------|---------------|--------------|------------|
| N2 | 1.0000 | 0.6436 (2) | 0.7500 | 0.0235 (3) |
| C1 | 0.86731 (5) | -0.11157 (17) | 0.75983 (11) | 0.0240 (2) |
| C2 | 0.81095 (5) | -0.10250 (17) | 0.82116 (10) | 0.0226 (2) |
| C3 | 0.81105 (6) | -0.0089 (2) | 0.92052 (11) | 0.0268 (2) |
| H3 | 0.8467 | 0.0439 | 0.9518 | 0.032* |
| C4 | 0.75794 (6) | 0.0058 (2) | 0.97289 (11) | 0.0301 (3) |
| H4 | 0.7580 | 0.0682 | 1.0394 | 0.036* |
| C5 | 0.70463 (6) | -0.0726 (2) | 0.92617 (12) | 0.0292 (3) |
| C6 | 0.70446 (6) | -0.1685 (2) | 0.82755 (12) | 0.0307 (3) |
| H6 | 0.6689 | -0.2222 | 0.7967 | 0.037* |
| C7 | 0.75745 (6) | -0.18340 (19) | 0.77557 (11) | 0.0271 (3) |
| H7 | 0.7574 | -0.2478 | 0.7098 | 0.032* |
| C8 | 0.64849 (8) | -0.0553 (3) | 0.98296 (15) | 0.0430 (4) |
| H8 | 0.6472 (7) | 0.029 (2) | 1.0463 (12) | 0.021 (4)* |
| C9 | 0.97461 (6) | 0.35053 (18) | 0.82681 (11) | 0.0287 (3) |
| H9 | 0.9563 | 0.2869 | 0.8815 | 0.034* |
| C10 | 0.97486 (7) | 0.54530 (17) | 0.82719 (12) | 0.0282 (3) |
| H10 | 0.9571 | 0.6090 | 0.8825 | 0.034* |

Tablo 3. 5. 1 kompleksinin geometrik parametreler (\AA , $^\circ$) [58]

| | | | |
|------------------------|-------------|----------|-------------|
| Co1—O1 | 2.0551 (9) | C2—C1 | 1.5093 (17) |
| Co1—O1 ⁱ | 2.0551 (9) | C2—C3 | 1.3911 (18) |
| Co1—O4 | 2.1491 (11) | C2—C7 | 1.3961 (17) |
| Co1—O4 ⁱ | 2.1491 (11) | C3—H3 | 0.9300 |
| Co1—N1 | 2.1588 (15) | C4—C3 | 1.3884 (18) |
| Co1—N2 ⁱⁱ | 2.1714 (15) | C4—H4 | 0.9300 |
| O1—C1 | 1.2721 (16) | C5—C4 | 1.390 (2) |
| O2—C1 | 1.2451 (17) | C5—C6 | 1.391 (2) |
| O3—C8 | 1.205 (2) | C5—C8 | 1.478 (2) |
| O4—H41 | 0.89 (3) | C6—H6 | 0.9300 |
| O4—H42 | 0.71 (3) | C7—C6 | 1.3836 (18) |
| N1—C9 | 1.3357 (15) | C7—H7 | 0.9300 |
| N1—C9 ⁱ | 1.3357 (15) | C8—H8 | 0.984 (13) |
| N2—Co1 ⁱⁱⁱ | 2.1714 (15) | C9—H9 | 0.9300 |
| N2—C10 | 1.3347 (15) | C10—C9 | 1.3866 (19) |
| N2—C10 ⁱ | 1.3347 (15) | C10—H10 | 0.9300 |
| O1—Co1—O1 ⁱ | 178.75 (5) | C3—C2—C1 | 120.92 (11) |

| | | | |
|---|--------------|-------------|--------------|
| O1—Co1—O4 | 91.46 (4) | C3—C2—C7 | 119.58 (12) |
| O1 ⁱ —Co1—O4 | 88.60 (4) | C7—C2—C1 | 119.46 (11) |
| O1—Co1—O4 ⁱ | 88.60 (4) | C2—C3—H3 | 120.0 |
| O1 ⁱ —Co1—O4 ⁱ | 91.46 (4) | C4—C3—C2 | 119.94 (12) |
| O1—Co1—N1 | 89.38 (3) | C4—C3—H3 | 120.0 |
| O1 ⁱ —Co1—N1 | 89.38 (3) | C3—C4—C5 | 120.15 (13) |
| O1—Co1—N2 ⁱⁱ | 90.62 (3) | C3—C4—H4 | 119.9 |
| O1 ⁱ —Co1—N2 ⁱⁱ | 90.62 (3) | C5—C4—H4 | 119.9 |
| O4—Co1—O4 ⁱ | 174.09 (7) | C4—C5—C6 | 120.13 (12) |
| O4—Co1—N1 | 92.96 (4) | C4—C5—C8 | 119.41 (14) |
| O4 ⁱ —Co1—N1 | 92.96 (4) | C6—C5—C8 | 120.46 (14) |
| O4—Co1—N2 ⁱⁱ | 87.04 (4) | C5—C6—H6 | 120.2 |
| O4 ⁱ —Co1—N2 ⁱⁱ | 87.04 (4) | C7—C6—C5 | 119.67 (12) |
| N1—Co1—N2 ⁱⁱ | 180.000 (1) | C7—C6—H6 | 120.2 |
| C1—O1—Co1 | 125.81 (9) | C2—C7—H7 | 119.7 |
| Co1—O4—H41 | 96.6 (15) | C6—C7—C2 | 120.52 (12) |
| Co1—O4—H42 | 118 (2) | C6—C7—H7 | 119.7 |
| H41—O4—H42 | 105 (3) | O3—C8—C5 | 125.34 (17) |
| C9—N1—Co1 | 121.75 (8) | O3—C8—H8 | 114.5 (10) |
| C9 ⁱ —N1—Co1 | 121.75 (8) | C5—C8—H8 | 120.1 (10) |
| C9—N1—C9 ⁱ | 116.49 (15) | N1—C9—C10 | 121.79 (12) |
| C10—N2—Co1 ⁱⁱⁱ | 121.61 (8) | N1—C9—H9 | 119.1 |
| C10 ⁱ —N2—Co1 ⁱⁱⁱ | 121.61 (8) | C10—C9—H9 | 119.1 |
| C10—N2—C10 ⁱ | 116.79 (15) | N2—C10—C9 | 121.57 (12) |
| O1—C1—C2 | 116.62 (11) | N2—C10—H10 | 119.2 |
| O2—C1—O1 | 125.42 (12) | C9—C10—H10 | 119.2 |
| O2—C1—C2 | 117.96 (11) | | |
| O4—Co1—O1—C1 | 23.45 (11) | C3—C2—C1—O1 | 7.53 (18) |
| O4 ⁱ —Co1—O1—C1 | -150.64 (11) | C3—C2—C1—O2 | -171.75 (13) |
| N1—Co1—O1—C1 | 116.39 (10) | C7—C2—C1—O1 | -174.80 (12) |
| N2 ⁱⁱ —Co1—O1—C1 | -63.61 (10) | C7—C2—C1—O2 | 5.92 (18) |
| O1—Co1—N1—C9 | 35.39 (8) | C1—C2—C3—C4 | 176.79 (12) |
| O1 ⁱ —Co1—N1—C9 | -144.61 (8) | C7—C2—C3—C4 | -0.9 (2) |
| O1—Co1—N1—C9 ⁱ | -144.61 (8) | C1—C2—C7—C6 | -176.64 (12) |
| O1 ⁱ —Co1—N1—C9 ⁱ | 35.39 (8) | C3—C2—C7—C6 | 1.1 (2) |
| O4—Co1—N1—C9 | 126.82 (8) | C5—C4—C3—C2 | -0.1 (2) |
| O4 ⁱ —Co1—N1—C9 | -53.18 (8) | C4—C5—C6—C7 | -0.8 (2) |
| O4—Co1—N1—C9 ⁱ | -53.18 (8) | C6—C5—C4—C3 | 1.0 (2) |

| | | | |
|---|-------------|--------------|--------------|
| O4 ⁱ —Co1—N1—C9 ⁱ | 126.82 (8) | C8—C5—C4—C3 | -179.86 (14) |
| Co1—O1—C1—O2 | -3.6 (2) | C8—C5—C6—C7 | -179.95 (14) |
| Co1—O1—C1—C2 | 177.23 (8) | C4—C5—C8—O3 | -172.93 (18) |
| Co1—N1—C9—C10 | 179.66 (10) | C6—C5—C8—O3 | 6.3 (3) |
| C9 ⁱ —N1—C9—C10 | -0.34 (10) | C2—C7—C6—C5 | -0.2 (2) |
| Co1 ⁱⁱⁱ —N2—C10—C9 | 179.66 (10) | N2—C10—C9—N1 | 0.7 (2) |
| C10 ⁱ —N2—C10—C9 | -0.34 (10) | | |

Simetri Kodları: (i) $-x+2, y, -z+3/2$; (ii) $x, y-1, z$; (iii) $x, y+1, z$.

Tablo 3. 6. 1 kompleksine ait hidrojen bağ geometrisi (Å, °) [58]

| <i>D—H...A</i> | <i>D—H</i> | <i>H...A</i> | <i>D...A</i> | <i>D—H...A</i> |
|----------------------------|------------|--------------|--------------|----------------|
| O4—H41...O2 | 0.89 (3) | 1.72 (3) | 2.5909 (16) | 164 (2) |
| O4—H42...O4 ⁱ | 0.71 (3) | 2.63 (3) | 2.958 (2) | 111 (2) |
| C10—H10...O3 ⁱⁱ | 0.93 | 2.46 | 3.320 (2) | 154 |
| C7—H7...Cg1 ⁱⁱⁱ | 0.93 | 2.65 | 3.4216 (15) | 142 |

Tablo 3. 7. 2 kompleksinin kristalografik verileri [59]

Kristal verileri

| | |
|----------------------------|--|
| Kimyasal Formülü | [Cu(C ₈ H ₅ O ₃) ₂ (C ₄ H ₄ N ₂)(H ₂ O) ₂] |
| <i>M_r</i> | 477.90 |
| Kristal sistem, uzay grubu | Monoklinik, <i>C2/c</i> |
| Sıcaklık (K) | 296 |
| <i>a, b, c</i> (Å) | 21.7514 (4), 6.8794 (2), 12.9048 (3) |
| β (°) | 93.621 (3) |
| <i>V</i> (Å ³) | 1927.17 (8) |
| <i>Z</i> | 4 |
| Işın Kaynağı | Mo <i>K_α</i> |
| μ (mm ⁻¹) | 1.19 |

Kristal boyutu (mm) $0.42 \times 0.22 \times 0.13$

Veri Toplama

Difaktometre Bruker SMART BREEZE CCD
Soğurma düzeltimi multi-scan (*SADABS*; Bruker, 2012)
 T_{\min} , T_{\max} 0.738, 0.857
Ölçülebilen, gözlenebilen [$I > 2\sigma(I)$] 14917, 2398, 2231
ve serbest yansıma sayısı
 R_{int} 0.024

Arıtım

$R[F^2 > 2\sigma(F^2)]$, $wR(F^2)$, S 0.028, 0.089, 1.14
Yansıma sayısı 2398
Parametre sayısı 150
Sınırların sayısı 2
H-atomları davranışı Bağımsız ve sabit arınım karışımı tarafından
incelenmiş H atomları
 $\Delta\rho_{\max}$, $\Delta\rho_{\min}$ ($e \text{ \AA}^{-3}$) 0.47, -0.30

Tablo 3. 8. 2 kompleksine ait atomik koordinatlar ve izotropik eşdeğer yer değiştirme parametreleri (\AA^2) [59]

| | x | y | z | $U_{\text{iso}}^*/U_{\text{eq}}$ |
|-----|-------------|--------------|--------------|----------------------------------|
| Cu1 | 0.50000 | 0.56167 (4) | 0.25000 | 0.0226 (1) |
| O1 | 0.58159 (6) | 0.55545 (17) | 0.19469 (11) | 0.0283 (3) |
| O2 | 0.63771 (7) | 0.6755 (3) | 0.33131 (11) | 0.0478 (5) |
| O3 | 0.90018 (8) | 0.6186 (4) | 0.03875 (15) | 0.0643 (7) |
| O4 | 0.54054 (7) | 0.5818 (3) | 0.43338 (12) | 0.0429 (5) |
| N1 | 0.50000 | 0.8590 (3) | 0.25000 | 0.0222 (5) |
| N2 | 0.50000 | 1.2632 (3) | 0.25000 | 0.0228 (5) |
| C1 | 0.63185 (7) | 0.6123 (2) | 0.24173 (13) | 0.0255 (4) |
| C2 | 0.68848 (7) | 0.5984 (2) | 0.18010 (13) | 0.0233 (4) |
| C3 | 0.68624 (8) | 0.5098 (3) | 0.08295 (13) | 0.0278 (4) |
| C4 | 0.73941 (8) | 0.4934 (3) | 0.02948 (13) | 0.0311 (5) |
| C5 | 0.79501 (8) | 0.5656 (3) | 0.07299 (15) | 0.0298 (5) |

| | | | | |
|-----|--------------|------------|--------------|-------------|
| C6 | 0.79729 (8) | 0.6554 (3) | 0.16972 (14) | 0.0322 (5) |
| C7 | 0.74435 (8) | 0.6718 (3) | 0.22284 (13) | 0.0286 (5) |
| C8 | 0.85122 (10) | 0.5472 (3) | 0.01458 (19) | 0.0433 (7) |
| C9 | 0.52244 (8) | 0.9602 (2) | 0.17228 (13) | 0.0263 (5) |
| C10 | 0.52268 (8) | 1.1618 (2) | 0.17257 (13) | 0.0265 (5) |
| H3 | 0.64910 | 0.46150 | 0.05390 | 0.0330* |
| H4 | 0.73790 | 0.43420 | -0.03540 | 0.0370* |
| H6 | 0.83440 | 0.70420 | 0.19860 | 0.0390* |
| H7 | 0.74590 | 0.73200 | 0.28750 | 0.0340* |
| H8 | 0.84820 | 0.47380 | -0.04600 | 0.0520* |
| H9 | 0.53820 | 0.89410 | 0.11700 | 0.0310* |
| H10 | 0.53900 | 1.22800 | 0.11770 | 0.0320* |
| H41 | 0.5464 (15) | 0.485 (3) | 0.465 (2) | 0.065 (10)* |
| H42 | 0.5738 (10) | 0.609 (5) | 0.414 (2) | 0.064 (9)* |

Tablo 3. 9. 2 kompleksinin geometrik parametreler (\AA , $^\circ$) [59]

| | | | |
|-------------------------|-------------|----------|-------------|
| Cu1—O1 | 1.9547 (13) | C2—C3 | 1.392 (2) |
| Cu1—O4 | 2.4766 (15) | C2—C7 | 1.397 (2) |
| Cu1—N1 | 2.046 (2) | C3—C4 | 1.388 (2) |
| Cu1—N2 ⁱ | 2.053 (2) | C4—C5 | 1.392 (3) |
| Cu1—O1 ⁱⁱ | 1.9547 (13) | C5—C6 | 1.391 (3) |
| Cu1—O4 ⁱⁱ | 2.4766 (15) | C5—C8 | 1.482 (3) |
| O1—C1 | 1.278 (2) | C6—C7 | 1.381 (2) |
| O2—C1 | 1.234 (2) | C9—C10 | 1.3869 (19) |
| O3—C8 | 1.196 (3) | C3—H3 | 0.9300 |
| O4—H42 | 0.80 (2) | C4—H4 | 0.9300 |
| O4—H41 | 0.79 (2) | C6—H6 | 0.9300 |
| N1—C9 ⁱⁱ | 1.3382 (19) | C7—H7 | 0.9300 |
| N1—C9 | 1.3382 (19) | C8—H8 | 0.9300 |
| N2—C10 | 1.3382 (19) | C9—H9 | 0.9300 |
| N2—C10 ⁱⁱ | 1.3382 (19) | C10—H10 | 0.9300 |
| C1—C2 | 1.511 (2) | | |
| O1—Cu1—O4 | 94.21 (5) | C3—C2—C7 | 119.60 (15) |
| O1—Cu1—N1 | 91.25 (4) | C1—C2—C7 | 119.15 (14) |
| O1—Cu1—N2 ⁱ | 88.75 (4) | C1—C2—C3 | 121.23 (14) |
| O1—Cu1—O1 ⁱⁱ | 177.49 (5) | C2—C3—C4 | 120.02 (16) |

| | | | |
|--|--------------|-------------|-------------|
| O1—Cu1—O4 ⁱⁱ | 85.93 (5) | C3—C4—C5 | 120.01 (16) |
| O4—Cu1—N1 | 86.80 (5) | C4—C5—C6 | 120.08 (16) |
| O4—Cu1—N2 ⁱ | 93.21 (5) | C4—C5—C8 | 119.21 (18) |
| O1 ⁱⁱ —Cu1—O4 | 85.93 (5) | C6—C5—C8 | 120.71 (17) |
| O4—Cu1—O4 ⁱⁱ | 173.59 (7) | C5—C6—C7 | 119.87 (17) |
| N1—Cu1—N2 ⁱ | 180.00 | C2—C7—C6 | 120.41 (16) |
| O1 ⁱⁱ —Cu1—N1 | 91.25 (4) | O3—C8—C5 | 125.6 (2) |
| O4 ⁱⁱ —Cu1—N1 | 86.80 (5) | N1—C9—C10 | 121.31 (16) |
| O1 ⁱⁱ —Cu1—N2 ⁱ | 88.75 (4) | N2—C10—C9 | 121.45 (16) |
| O4 ⁱⁱ —Cu1—N2 ⁱ | 93.21 (5) | C2—C3—H3 | 120.00 |
| O1 ⁱⁱ —Cu1—O4 ⁱⁱ | 94.21 (5) | C4—C3—H3 | 120.00 |
| Cu1—O1—C1 | 126.09 (12) | C3—C4—H4 | 120.00 |
| Cu1—O4—H41 | 119.0 (18) | C5—C4—H4 | 120.00 |
| Cu1—O4—H42 | 89.4 (18) | C5—C6—H6 | 120.00 |
| H41—O4—H42 | 104 (3) | C7—C6—H6 | 120.00 |
| C9—N1—C9 ⁱⁱ | 117.30 (18) | C2—C7—H7 | 120.00 |
| Cu1—N1—C9 | 121.35 (10) | C6—C7—H7 | 120.00 |
| Cu1—N1—C9 ⁱⁱ | 121.35 (10) | O3—C8—H8 | 117.00 |
| Cu1 ⁱⁱⁱ —N2—C10 | 121.42 (10) | C5—C8—H8 | 117.00 |
| C10—N2—C10 ⁱⁱ | 117.16 (18) | N1—C9—H9 | 119.00 |
| Cu1 ⁱⁱⁱ —N2—C10 ⁱⁱ | 121.42 (10) | C10—C9—H9 | 119.00 |
| O1—C1—O2 | 125.98 (16) | N2—C10—H10 | 119.00 |
| O2—C1—C2 | 118.42 (15) | C9—C10—H10 | 119.00 |
| O1—C1—C2 | 115.60 (14) | | |
| O4—Cu1—O1—C1 | -20.13 (13) | O1—C1—C2—C7 | 174.99 (15) |
| N1—Cu1—O1—C1 | 66.75 (12) | O2—C1—C2—C3 | 173.20 (18) |
| N2 ⁱ —Cu1—O1—C1 | -113.26 (12) | O2—C1—C2—C7 | -5.2 (2) |
| | | | -177.90 |
| O4 ⁱⁱ —Cu1—O1—C1 | 153.44 (13) | C1—C2—C3—C4 | (16) |
| | | | |
| O1—Cu1—N1—C9 | 39.77 (10) | C7—C2—C3—C4 | 0.5 (3) |
| O1—Cu1—N1—C9 ⁱⁱ | -140.23 (10) | C1—C2—C7—C6 | 177.88 (16) |
| O4—Cu1—N1—C9 | 133.92 (9) | C3—C2—C7—C6 | -0.6 (3) |
| O4—Cu1—N1—C9 ⁱⁱ | -46.08 (9) | C2—C3—C4—C5 | 0.0 (3) |
| O1 ⁱⁱ —Cu1—N1—C9 | -140.23 (10) | C3—C4—C5—C6 | -0.4 (3) |
| | | | -179.83 |
| O4 ⁱⁱ —Cu1—N1—C9 | -46.08 (9) | C3—C4—C5—C8 | (19) |
| | | | |
| Cu1—O1—C1—O2 | 2.3 (2) | C4—C5—C6—C7 | 0.4 (3) |
| Cu1—O1—C1—C2 | -177.93 (9) | C8—C5—C6—C7 | 179.77 (19) |

| | | | |
|-------------------------------|--------------|--------------|-----------|
| Cu1—N1—C9—C10 | -179.70 (12) | C4—C5—C8—O3 | 172.6 (2) |
| C9 ⁱⁱ —N1—C9—C10 | 0.3 (2) | C6—C5—C8—O3 | -6.8 (4) |
| Cu1 ⁱⁱⁱ —N2—C10—C9 | -179.70 (12) | C5—C6—C7—C2 | 0.1 (3) |
| C10 ⁱⁱ —N2—C10—C9 | 0.3 (2) | N1—C9—C10—N2 | -0.6 (2) |
| O1—C1—C2—C3 | -6.6 (2) | | |

Symmetry codes: (i) $x, y-1, z$; (ii) $-x+1, y, -z+1/2$; (iii) $x, y+1, z$.

Tablo 3. 10. 2 kompleksine ait hidrojen bađ geometrisi (\AA , $^\circ$) [59]

| $D-H\cdots A$ | $D-H$ | $H\cdots A$ | $D\cdots A$ | $D-H\cdots A$ |
|----------------------------------|----------|-------------|-------------|---------------|
| O4—H42 \cdots O2 | 0.80 (2) | 1.86 (2) | 2.640 (2) | 163 (3) |
| O4—H41 \cdots O4 ^{iv} | 0.79 (2) | 2.41 (3) | 2.778 (2) | 110 (3) |
| C9—H9 \cdots O3 ^v | 0.93 | 2.49 | 3.335 (3) | 152 |
| C7—H7 \cdots Cg ^{vi} | 0.93 | 2.66 | 3.433 (2) | 141 |

Symmetry codes: (iv) $-x+1, -y+1, -z+1$; (v) $-x+3/2, -y+3/2, -z$; (vi) $-x+3/2, y+1/2, -z+1/2$.

Tablo 3. 11. 3 kompleksinin kristalografik verileri [60]

Kristal verileri

| | |
|----------------------------|--|
| Kimyasal Formülü | [Ni(C ₈ H ₅ O ₃) ₂ (C ₄ H ₄ N ₂)(H ₂ O) ₂] |
| M_r | 473.07 |
| Kristal sistem, uzay grubu | Monoklinik, $C2/c$ |
| Sıcaklık (K) | 296 |
| a, b, c (\AA) | 22.1032 (5), 6.9925 (2), 12.3366 (3) |
| β ($^\circ$) | 94.160 (3) |
| V (\AA^3) | 1901.68 (8) |
| Z | 4 |
| Işın Kaynađı | Mo K_α |
| μ (mm^{-1}) | 1.08 |
| Kristal boyutu (mm) | 0.48 \times 0.23 \times 0.14 |

Veri Toplama

| | |
|-------------------|--|
| Difaktometre | Bruker SMART BREEZE CCD |
| Sođurma d¼zeltimi | multi-scan (<i>SADABS</i> ; Bruker, 2012) |

| | |
|--|------------------|
| T_{\min}, T_{\max} | 0.743, 0.860 |
| Ölçülebilen, gözlenebilen [$I > 2\sigma(I)$] ve serbest yansıma sayısı | 9913, 1717, 1554 |
| R_{int} | 0.070 |

Aritım

| | |
|---|--|
| $R[F^2 > 2\sigma(F^2)], wR(F^2), S$ | 0.079, 0.209, 1.16 |
| Yansıma sayısı | 1717 |
| Parametre sayısı | 150 |
| Sınırların sayısı | 2 |
| H-atomları davranışı | Bağımsız ve sabit arınım karışımı tarafından incelenmiş H atomları |
| $\Delta\rho_{\max}, \Delta\rho_{\min}$ ($e \text{ \AA}^{-3}$) | 2.49, -1.05 |

Tablo 3. 12. 3 kompleksine ait atomik koordinatlar ve izotropik eşdeğer yer değiştirme parametreleri (\AA^2) [60]

| | | | | |
|-----|--------------|--------------|------------|-------------|
| Ni1 | 0.00000 | 0.44790 (12) | 0.25000 | 0.0222 (3) |
| O1 | 0.13672 (19) | 0.3246 (7) | 0.3338 (3) | 0.0435 (14) |
| O2 | 0.08397 (17) | 0.4511 (5) | 0.1900 (3) | 0.0294 (11) |
| O3 | 0.3999 (2) | 0.3724 (9) | 0.0460 (4) | 0.0614 (19) |
| O4 | 0.0372 (2) | 0.4332 (6) | 0.4119 (3) | 0.0342 (12) |
| N1 | 0.00000 | 0.1464 (8) | 0.25000 | 0.0242 (17) |
| N2 | 0.00000 | 0.7500 (8) | 0.25000 | 0.0260 (19) |
| C1 | 0.1321 (2) | 0.3907 (7) | 0.2394 (5) | 0.0277 (16) |
| C2 | 0.1890 (2) | 0.3983 (7) | 0.1787 (5) | 0.0284 (16) |
| C3 | 0.1889 (3) | 0.4908 (8) | 0.0787 (5) | 0.0300 (17) |
| C4 | 0.2420 (3) | 0.5042 (9) | 0.0271 (5) | 0.0320 (17) |
| C5 | 0.2955 (3) | 0.4294 (8) | 0.0736 (5) | 0.0339 (17) |

| | | | | |
|-----|-------------|-------------|------------|-------------|
| C6 | 0.2958 (3) | 0.3342 (8) | 0.1733 (5) | 0.0338 (17) |
| C7 | 0.2424 (2) | 0.3196 (8) | 0.2243 (5) | 0.0290 (17) |
| C8 | 0.3520 (3) | 0.4471 (10) | 0.0178 (6) | 0.045 (2) |
| C9 | 0.0252 (3) | 0.0463 (7) | 0.1723 (5) | 0.0290 (17) |
| C10 | 0.0250 (2) | 0.8494 (7) | 0.1733 (4) | 0.0280 (17) |
| H3 | 0.15320 | 0.54320 | 0.04700 | 0.0360* |
| H4 | 0.24170 | 0.56450 | -0.04010 | 0.0380* |
| H6 | 0.33140 | 0.28130 | 0.20480 | 0.0410* |
| H7 | 0.24240 | 0.25590 | 0.29040 | 0.0350* |
| H8 | 0.35070 | 0.52240 | -0.04450 | 0.0540* |
| H9 | 0.04310 | 0.11080 | 0.11700 | 0.0350* |
| H10 | 0.04300 | 0.78400 | 0.11840 | 0.0340* |
| H41 | 0.040 (4) | 0.545 (5) | 0.430 (7) | 0.06 (3)* |
| H42 | 0.0721 (18) | 0.396 (13) | 0.407 (7) | 0.07 (3)* |

Tablo 3. 13. 3 kompleksinin geometrik parametreler (\AA , $^\circ$) [60]

| | | | |
|---------------------|-----------|----------------------|-----------|
| Ni1—O2 | 2.048 (4) | C2—C3 | 1.393 (8) |
| Ni1—O4 | 2.107 (4) | C2—C7 | 1.384 (7) |
| Ni1—N1 | 2.108 (6) | C3—C4 | 1.378 (9) |
| Ni1—N2 | 2.112 (6) | C4—C5 | 1.379 (9) |
| Ni1—O2 ⁱ | 2.048 (4) | C5—C6 | 1.398 (9) |
| Ni1—O4 ⁱ | 2.107 (4) | C5—C8 | 1.474 (9) |
| O1—C1 | 1.250 (7) | C6—C7 | 1.381 (8) |
| O2—C1 | 1.260 (6) | C9—C10 ⁱⁱ | 1.377 (7) |
| O3—C8 | 1.209 (8) | C3—H3 | 0.9300 |
| O4—H42 | 0.82 (5) | C4—H4 | 0.9300 |
| O4—H41 | 0.81 (4) | C6—H6 | 0.9300 |
| N1—C9 ⁱ | 1.340 (7) | C7—H7 | 0.9300 |
| N1—C9 | 1.340 (7) | C8—H8 | 0.9300 |

| | | | |
|--------------------------------------|-------------|------------------------------|---------------|
| N2—C10 | 1.327 (6) | C9—H9 | 0.9300 |
| N2—C10 ⁱ | 1.327 (6) | C10—H10 | 0.9300 |
| C1—C2 | 1.511 (7) | | |
| O2—Ni1—O4 | 92.38 (16) | C3—C2—C7 | 119.4 (5) |
| O2—Ni1—N1 | 90.63 (10) | C1—C2—C7 | 120.0 (5) |
| O2—Ni1—N2 | 89.37 (10) | C1—C2—C3 | 120.5 (5) |
| O2—Ni1—O2 ⁱ | 178.75 (15) | C2—C3—C4 | 119.6 (6) |
| O2—Ni1—O4 ⁱ | 87.68 (16) | C3—C4—C5 | 121.0 (6) |
| O4—Ni1—N1 | 87.20 (12) | C4—C5—C6 | 119.7 (6) |
| O4—Ni1—N2 | 92.80 (12) | C4—C5—C8 | 120.2 (6) |
| O2 ⁱ —Ni1—O4 | 87.68 (16) | C6—C5—C8 | 120.0 (6) |
| O4—Ni1—O4 ⁱ | 174.41 (17) | C5—C6—C7 | 119.1 (6) |
| N1—Ni1—N2 | 180.00 (1) | C2—C7—C6 | 121.2 (6) |
| O2 ⁱ —Ni1—N1 | 90.63 (10) | O3—C8—C5 | 125.7 (7) |
| O4 ⁱ —Ni1—N1 | 87.20 (12) | N1—C9—C10 ⁱⁱ | 120.9 (5) |
| O2 ⁱ —Ni1—N2 | 89.37 (10) | N2—C10—C9 ⁱⁱⁱ | 122.2 (5) |
| O4 ⁱ —Ni1—N2 | 92.80 (12) | C2—C3—H3 | 120.00 |
| O2 ⁱ —Ni1—O4 ⁱ | 92.38 (16) | C4—C3—H3 | 120.00 |
| Ni1—O2—C1 | 125.3 (4) | C3—C4—H4 | 119.00 |
| Ni1—O4—H41 | 103 (6) | C5—C4—H4 | 120.00 |
| Ni1—O4—H42 | 105 (6) | C5—C6—H6 | 120.00 |
| H41—O4—H42 | 106 (9) | C7—C6—H6 | 120.00 |
| C9—N1—C9 ⁱ | 117.0 (5) | C2—C7—H7 | 120.00 |
| Ni1—N1—C9 | 121.5 (3) | C6—C7—H7 | 119.00 |
| Ni1—N1—C9 ⁱ | 121.5 (3) | O3—C8—H8 | 117.00 |
| Ni1—N2—C10 | 121.6 (3) | C5—C8—H8 | 117.00 |
| Ni1—N2—C10 ⁱ | 121.6 (3) | N1—C9—H9 | 120.00 |
| C10—N2—C10 ⁱ | 116.8 (5) | C10 ⁱⁱ —C9—H9 | 120.00 |
| O1—C1—O2 | 125.7 (5) | N2—C10—H10 | 119.00 |
| O2—C1—C2 | 116.9 (5) | C9 ⁱⁱⁱ —C10—H10 | 119.00 |
| O1—C1—C2 | 117.4 (4) | | |
| O4—Ni1—O2—C1 | 22.0 (4) | Ni1—N1—C9—C10 ⁱⁱ | 179.9 (4) |
| N1—Ni1—O2—C1 | -65.3 (4) | Ni1—N2—C10—C9 ⁱⁱⁱ | 179.9 (4) |
| N2—Ni1—O2—C1 | 114.7 (4) | | -172.2 (5) |
| O4 ⁱ —Ni1—O2—C1 | -152.5 (4) | O1—C1—C2—C3 | 5.2 (8) |
| O2—Ni1—N1—C9 | -35.6 (3) | O1—C1—C2—C7 | 8.0 (7) |
| O2—Ni1—N1—C9 ⁱ | 144.4 (3) | O2—C1—C2—C3 | -174.5 |
| | | O2—C1—C2—C7 | |

| | | | |
|-----------------------------|------------|-------------|-----------|
| O4—Ni1—N1—C9 | -128.0 (3) | C1—C2—C3—C4 | 176.9 (5) |
| O4—Ni1—N1—C9 ⁱ | 52.0 (3) | C7—C2—C3—C4 | -0.6 (8) |
| O2 ⁱ —Ni1—N1—C9 | 144.4 (3) | C1—C2—C7—C6 | -176.3 |
| O4 ⁱ —Ni1—N1—C9 | 52.0 (3) | C3—C2—C7—C6 | (5) |
| O2—Ni1—N2—C10 | 35.5 (3) | C2—C3—C4—C5 | 1.2 (8) |
| O2—Ni1—N2—C10 ⁱ | -144.5 (3) | C3—C4—C5—C6 | -0.8 (9) |
| O4—Ni1—N2—C10 | 127.9 (3) | C3—C4—C5—C8 | 1.6 (9) |
| O4—Ni1—N2—C10 ⁱ | -52.1 (3) | C4—C5—C6—C7 | -179.3 |
| O2 ⁱ —Ni1—N2—C10 | -144.5 (3) | C8—C5—C6—C7 | (6) |
| O4 ⁱ —Ni1—N2—C10 | -52.1 (3) | C4—C5—C8—O3 | -1.0 (9) |
| Ni1—O2—C1—O1 | -2.3 (8) | C6—C5—C8—O3 | 179.9 (6) |
| Ni1—O2—C1—C2 | 177.5 (3) | C5—C6—C7—C2 | -172.9 |
| | | | (7) |
| | | | 6.3 (10) |
| | | | -0.4 (9) |

Symmetry codes: (i) $-x, y, -z+1/2$; (ii) $x, y-1, z$; (iii) $x, y+1, z$.

Tablo 3. 14. 3 kompleksine ait hidrojen bađ geometrisi (Å, °) [60]

| $D-H\cdots A$ | $D-H$ | $H\cdots A$ | $D\cdots A$ | $D-H\cdots A$ |
|----------------------------------|----------|-------------|-------------|---------------|
| O4—H42 \cdots O1 | 0.82 (5) | 1.81 (6) | 2.579 (6) | 155 (8) |
| O4—H41 \cdots O3 ^{iv} | 0.82 (2) | 2.65 (5) | 3.395 (8) | 152 (8) |
| C9—H9 \cdots O3 ^v | 0.93 | 2.45 | 3.311 (8) | 154 |
| C7—H7 \cdots Cg1 ^{vi} | 0.93 | 2.62 | 3.395 (6) | 141 |

Symmetry codes: (iv) $-x+1/2, y+1/2, -z+1/2$; (v) $-x+1/2, -y+1/2, -z$; (vi) $-x+1/2, y-1/2, -z+1/2$.

Tablo 3. 15. 4 kompleksinin kristalografik verileri [61]

| Kristal verileri | |
|--|--|
| Kimyasal Formülü | [Zn(C ₈ H ₅ O ₃) ₂ (C ₄ H ₄ N ₂)(H ₂ O)] |
| M_r | 461.74 |
| Kristal sistem, uzay grubu | Monoklinik, $P2_1/c$ |
| Sıcaklık (K) | 296 |
| a, b, c (Å) | 22.4721 (7), 7.1729 (2), 23.6377 (8) |
| β (°) | 91.764 (2) |
| V (Å ³) | 3808.4 (2) |
| Z | 8 |
| Işın Kaynağı | Mo K_α |
| μ (mm ⁻¹) | 1.34 |
| Kristal boyutu (mm) | 0.50 × 0.29 × 0.28 |
| Veri Toplama | |
| Difaktometre | Bruker SMART BREEZE CCD |
| Soğurma düzeltimi | multi-scan (SADABS; Bruker, 2012) |
| T_{\min}, T_{\max} | 0.628, 0.676 |
| Ölçülebilen, gözlenebilen [$I > 2\sigma(I)$] ve serbest yansıma sayısı | 87627, 9571, 7984 |
| R_{int} | 0.031 |
| Arıtım | |
| $R[F^2 > 2\sigma(F^2)], wR(F^2), S$ | 0.041, 0.102, 1.10 |
| Yansıma sayısı | 9571 |
| Parametre sayısı | 583 |
| Sınırların sayısı | 8 |
| H-atomları davranışı | Bağımsız ve sabit arıtım karışımı tarafından incelenmiş H atomları |
| $\Delta\rho_{\max}, \Delta\rho_{\min}$ (e Å ⁻³) | 0.64, -0.65 |

Tablo 3. 16. 4 kompleksine ait atomik koordinatlar ve izotropik eşdeğer yer değiştirme parametreleri (\AA^2) [61]

| | <i>x</i> | <i>y</i> | <i>z</i> | $U_{\text{iso}}^*/U_{\text{eq}}$ | Occ. (<1) |
|------|---------------|-------------|---------------|----------------------------------|-----------|
| Zn1 | 0.744994 (11) | 0.75073 (4) | 0.403123 (11) | 0.02258 (7) | |
| Zn2 | 0.747592 (11) | 0.65126 (4) | 0.153050 (11) | 0.02257 (7) | |
| O1 | 0.64782 (8) | 0.7653 (3) | 0.39486 (8) | 0.0367 (4) | |
| O2 | 0.68812 (7) | 0.7386 (3) | 0.47961 (8) | 0.0382 (4) | |
| O3 | 0.82950 (8) | 0.7338 (3) | 0.42612 (9) | 0.0431 (5) | |
| O4 | 0.85759 (9) | 0.8088 (4) | 0.51393 (10) | 0.0694 (8) | |
| O5A | 0.36210 (12) | 0.7654 (6) | 0.51051 (16) | 0.0724 (11) | 0.75 |
| O5B | 0.3980 (6) | 0.710 (2) | 0.5801 (6) | 0.107 (5) | 0.25 |
| O6 | 1.15317 (10) | 0.6472 (5) | 0.43755 (12) | 0.0785 (9) | |
| O7 | 0.75486 (8) | 0.7571 (3) | 0.31819 (7) | 0.0313 (4) | |
| H71 | 0.7277 (10) | 0.721 (4) | 0.2918 (10) | 0.045 (9)* | |
| H72 | 0.7893 (8) | 0.736 (4) | 0.3040 (11) | 0.033 (8)* | |
| O8 | 0.64987 (8) | 0.6395 (3) | 0.14295 (8) | 0.0382 (4) | |
| O9 | 0.69021 (7) | 0.6319 (3) | 0.22812 (8) | 0.0396 (4) | |
| O10 | 0.83197 (8) | 0.6462 (3) | 0.17805 (9) | 0.0433 (5) | |
| O11 | 0.85687 (9) | 0.7240 (4) | 0.26661 (9) | 0.0617 (7) | |
| O12A | 0.36444 (14) | 0.6022 (7) | 0.25759 (18) | 0.0804 (13) | 0.70 |
| O12B | 0.4034 (4) | 0.5896 (16) | 0.3355 (5) | 0.091 (3) | 0.30 |
| O13 | 1.15688 (9) | 0.6937 (4) | 0.18855 (11) | 0.0677 (7) | |
| O14 | 0.75787 (8) | 0.6458 (3) | 0.06810 (8) | 0.0330 (4) | |

| | | | | |
|------|--------------|------------|--------------|-------------|
| H141 | 0.7321 (10) | 0.667 (4) | 0.0432 (10) | 0.031 (8)* |
| H142 | 0.7912 (10) | 0.665 (5) | 0.0536 (13) | 0.052 (10)* |
| N1 | 0.74426 (8) | 1.0554 (3) | 0.40613 (8) | 0.0266 (4) |
| N2 | 0.74172 (8) | 1.4441 (3) | 0.40378 (8) | 0.0272 (4) |
| N3 | 0.74446 (8) | 0.9567 (3) | 0.15473 (9) | 0.0273 (4) |
| N4 | 0.74520 (8) | 1.3452 (3) | 0.15394 (8) | 0.0261 (4) |
| C1 | 0.64294 (10) | 0.7548 (3) | 0.44733 (11) | 0.0287 (5) |
| C2 | 0.58192 (10) | 0.7557 (3) | 0.47132 (10) | 0.0262 (5) |
| C3 | 0.57341 (11) | 0.7017 (4) | 0.52678 (11) | 0.0337 (5) |
| H3 | 0.6059 | 0.6714 | 0.5503 | 0.040* |
| C4 | 0.51606 (12) | 0.6931 (4) | 0.54700 (11) | 0.0373 (6) |
| H4 | 0.5101 | 0.6543 | 0.5839 | 0.045* |
| C5 | 0.46791 (11) | 0.7419 (4) | 0.51255 (13) | 0.0376 (6) |
| C6 | 0.47625 (11) | 0.8009 (4) | 0.45766 (12) | 0.0396 (6) |
| H6 | 0.4438 | 0.8366 | 0.4348 | 0.048* |
| C7 | 0.53321 (11) | 0.8062 (4) | 0.43705 (11) | 0.0324 (5) |
| H7 | 0.5389 | 0.8440 | 0.4000 | 0.039* |
| C8 | 0.40702 (14) | 0.7343 (5) | 0.53588 (17) | 0.0566 (9) |
| H8 | 0.4038 | 0.6009 | 0.5274 | 0.068* |
| C9 | 0.86731 (10) | 0.7533 (3) | 0.46598 (11) | 0.0307 (5) |
| C10 | 0.93070 (10) | 0.7064 (3) | 0.45186 (10) | 0.0257 (5) |
| C11 | 0.94340 (11) | 0.6169 (4) | 0.40145 (11) | 0.0316 (5) |
| H11 | 0.9128 | 0.5835 | 0.3761 | 0.038* |
| C12 | 1.00211 (11) | 0.5777 (4) | 0.38922 (11) | 0.0349 (6) |

| | | | | |
|-----|--------------|------------|--------------|-------------|
| H12 | 1.0107 | 0.5146 | 0.3561 | 0.042* |
| C13 | 1.04793 (11) | 0.6319 (4) | 0.42600 (11) | 0.0331 (5) |
| C14 | 1.03533 (11) | 0.7237 (4) | 0.47596 (11) | 0.0349 (6) |
| H14 | 1.0661 | 0.7617 | 0.5005 | 0.042* |
| C15 | 0.97691 (11) | 0.7583 (4) | 0.48905 (11) | 0.0319 (5) |
| H15 | 0.9684 | 0.8167 | 0.5230 | 0.038* |
| C16 | 1.11037 (13) | 0.5922 (5) | 0.41156 (15) | 0.0518 (8) |
| H16 | 1.1144 (15) | 0.523 (5) | 0.3781 (10) | 0.064 (11)* |
| C17 | 0.71703 (11) | 1.1488 (3) | 0.36395 (11) | 0.0333 (5) |
| H17 | 0.6983 | 1.0825 | 0.3347 | 0.040* |
| C18 | 0.71592 (11) | 1.3417 (3) | 0.36259 (11) | 0.0328 (5) |
| H18 | 0.6968 | 1.4016 | 0.3323 | 0.039* |
| C19 | 0.76825 (12) | 1.3503 (3) | 0.44611 (11) | 0.0324 (5) |
| H19 | 0.7863 | 1.4165 | 0.4758 | 0.039* |
| C20 | 0.76983 (11) | 1.1575 (3) | 0.44727 (11) | 0.0309 (5) |
| H20 | 0.7892 | 1.0976 | 0.4775 | 0.037* |
| C21 | 0.64505 (10) | 0.6280 (3) | 0.19529 (11) | 0.0292 (5) |
| C22 | 0.58421 (10) | 0.6087 (3) | 0.21928 (10) | 0.0256 (5) |
| C23 | 0.57669 (11) | 0.6078 (4) | 0.27715 (11) | 0.0362 (6) |
| H23 | 0.6096 | 0.6147 | 0.3019 | 0.043* |
| C24 | 0.51980 (12) | 0.5964 (4) | 0.29793 (12) | 0.0411 (6) |
| H24 | 0.5147 | 0.5928 | 0.3368 | 0.049* |
| C25 | 0.47064 (11) | 0.5905 (4) | 0.26150 (12) | 0.0368 (6) |
| C26 | 0.47806 (11) | 0.5890 (4) | 0.20375 (12) | 0.0419 (7) |

| | | | | |
|-----|--------------|------------|--------------|-------------|
| H26 | 0.4451 | 0.5832 | 0.1790 | 0.050* |
| C27 | 0.53487 (11) | 0.5963 (4) | 0.18292 (11) | 0.0349 (6) |
| H27 | 0.5400 | 0.5928 | 0.1440 | 0.042* |
| C28 | 0.40987 (14) | 0.5920 (5) | 0.28524 (17) | 0.0579 (9) |
| H28 | 0.4083 | 0.4555 | 0.2839 | 0.069* |
| C29 | 0.86873 (10) | 0.6787 (3) | 0.21806 (11) | 0.0306 (5) |
| C30 | 0.93360 (10) | 0.6650 (3) | 0.20327 (10) | 0.0248 (5) |
| C31 | 0.94955 (10) | 0.5928 (3) | 0.15123 (10) | 0.0297 (5) |
| H31 | 0.9204 | 0.5538 | 0.1251 | 0.036* |
| C32 | 1.00910 (10) | 0.5795 (4) | 0.13868 (10) | 0.0315 (5) |
| H32 | 1.0200 | 0.5284 | 0.1043 | 0.038* |
| C33 | 1.05277 (10) | 0.6418 (4) | 0.17684 (11) | 0.0297 (5) |
| C34 | 1.03676 (11) | 0.7148 (4) | 0.22858 (11) | 0.0322 (5) |
| H34 | 1.0660 | 0.7570 | 0.2542 | 0.039* |
| C35 | 0.97750 (10) | 0.7249 (3) | 0.24191 (10) | 0.0296 (5) |
| H35 | 0.9669 | 0.7719 | 0.2768 | 0.035* |
| C36 | 1.11601 (12) | 0.6292 (5) | 0.16198 (13) | 0.0442 (7) |
| H36 | 1.1225 (14) | 0.564 (4) | 0.1284 (10) | 0.055 (10)* |
| C37 | 0.71896 (11) | 1.0551 (4) | 0.11238 (11) | 0.0335 (5) |
| H37 | 0.7006 | 0.9920 | 0.0822 | 0.040* |
| C38 | 0.71914 (12) | 1.2480 (3) | 0.11217 (11) | 0.0335 (6) |
| H38 | 0.7006 | 1.3111 | 0.0821 | 0.040* |
| C39 | 0.77052 (12) | 1.2490 (3) | 0.19636 (11) | 0.0328 (5) |
| H39 | 0.7890 | 1.3126 | 0.2264 | 0.039* |

| | | | | |
|-----|--------------|------------|--------------|------------|
| C40 | 0.76986 (11) | 1.0558 (3) | 0.19668 (11) | 0.0321 (5) |
| H40 | 0.7877 | 0.9932 | 0.2272 | 0.039* |

Tablo 3. 17. 4 kompleksinin geometrik parametreler (\AA , $^\circ$) [61]

| | | | |
|---------------------|-------------|----------|------------|
| Zn1—O1 | 2.1889 (18) | C10—C9 | 1.511 (3) |
| Zn1—O2 | 2.2477 (19) | C10—C15 | 1.390 (3) |
| Zn1—O3 | 1.9628 (18) | C11—C10 | 1.391 (3) |
| Zn1—O7 | 2.0271 (17) | C11—C12 | 1.388 (3) |
| Zn2—O8 | 2.2034 (18) | C11—H11 | 0.9300 |
| Zn2—O9 | 2.2297 (19) | C12—C13 | 1.383 (4) |
| Zn2—O10 | 1.9689 (18) | C12—H12 | 0.9300 |
| Zn2—O14 | 2.0288 (18) | C13—C16 | 1.482 (4) |
| Zn1—N1 | 2.186 (2) | C14—C13 | 1.389 (4) |
| Zn1—N2 ⁱ | 2.200 (2) | C14—H14 | 0.9300 |
| Zn2—N3 | 2.192 (2) | C15—C14 | 1.380 (3) |
| Zn2—N4 ⁱ | 2.1957 (19) | C15—H15 | 0.9300 |
| Zn1—C1 | 2.550 (2) | C16—H16 | 0.943 (18) |
| Zn2—C21 | 2.545 (2) | C17—H17 | 0.9300 |
| O1—C1 | 1.251 (3) | C18—C17 | 1.384 (3) |
| O2—C1 | 1.256 (3) | C18—H18 | 0.9300 |
| O3—C9 | 1.257 (3) | C19—H19 | 0.9300 |
| O4—C9 | 1.227 (3) | C21—C22 | 1.503 (3) |
| O5A—C8 | 1.179 (5) | C22—C23 | 1.383 (3) |
| O6—C16 | 1.192 (4) | C22—C27 | 1.385 (3) |
| O7—H71 | 0.897 (16) | C23—C24 | 1.386 (4) |
| O7—H72 | 0.866 (16) | C23—H23 | 0.9300 |
| O8—C21 | 1.248 (3) | C24—H24 | 0.9300 |
| O9—C21 | 1.259 (3) | C25—C24 | 1.380 (4) |
| O10—C29 | 1.258 (3) | C25—C28 | 1.492 (4) |
| O11—C29 | 1.230 (3) | C26—C25 | 1.380 (4) |
| O13—C36 | 1.190 (4) | C26—H26 | 0.9300 |
| O14—H141 | 0.826 (17) | C27—C26 | 1.383 (3) |
| O14—H142 | 0.845 (18) | C27—H27 | 0.9300 |
| N1—C17 | 1.334 (3) | C28—O12A | 1.197 (5) |
| N1—C20 | 1.333 (3) | C28—O12B | 1.202 (10) |

| | | | |
|------------------------|-------------|-------------|------------|
| N2—Zn1 ⁱⁱ | 2.200 (2) | C28—H28 | 0.9800 |
| N2—C18 | 1.338 (3) | C31—C32 | 1.383 (3) |
| N2—C19 | 1.331 (3) | C31—C30 | 1.392 (3) |
| N3—C37 | 1.339 (3) | C31—H31 | 0.9300 |
| N3—C40 | 1.334 (3) | C34—C35 | 1.380 (3) |
| N4—Zn2 ⁱⁱ | 2.1957 (19) | C34—C33 | 1.388 (3) |
| N4—C38 | 1.330 (3) | C34—H34 | 0.9300 |
| N4—C39 | 1.331 (3) | C20—C19 | 1.384 (3) |
| C2—C1 | 1.500 (3) | C20—H20 | 0.9300 |
| C2—C3 | 1.386 (3) | C30—C35 | 1.392 (3) |
| C2—C7 | 1.390 (3) | C30—C29 | 1.513 (3) |
| C3—C4 | 1.390 (3) | C32—C33 | 1.386 (3) |
| C3—H3 | 0.9300 | C32—H32 | 0.9300 |
| C4—H4 | 0.9300 | C33—C36 | 1.477 (3) |
| C5—C4 | 1.379 (4) | C35—H35 | 0.9300 |
| C5—C6 | 1.383 (4) | C36—H36 | 0.937 (18) |
| C5—C8 | 1.492 (4) | C37—H37 | 0.9300 |
| C6—H6 | 0.9300 | C38—C37 | 1.383 (3) |
| C7—C6 | 1.384 (3) | C38—H38 | 0.9300 |
| C7—H7 | 0.9300 | C39—H39 | 0.9300 |
| C8—O5B | 1.086 (14) | C40—C39 | 1.386 (3) |
| C8—H8 | 0.9800 | C40—H40 | 0.9300 |
| O1—Zn1—O2 | 58.88 (7) | C11—C10—C9 | 120.8 (2) |
| O1—Zn1—N2 ⁱ | 90.85 (7) | C15—C10—C9 | 119.5 (2) |
| O1—Zn1—C1 | 29.37 (7) | C15—C10—C11 | 119.8 (2) |
| O2—Zn1—C1 | 29.52 (7) | C10—C11—H11 | 120.2 |
| O3—Zn1—O1 | 169.01 (8) | C12—C11—C10 | 119.6 (2) |
| O3—Zn1—O2 | 110.13 (8) | C12—C11—H11 | 120.2 |
| O3—Zn1—O7 | 98.12 (8) | C11—C12—H12 | 119.8 |
| O3—Zn1—N1 | 93.49 (8) | C13—C12—C11 | 120.4 (2) |
| O3—Zn1—N2 ⁱ | 88.20 (8) | C13—C12—H12 | 119.8 |
| O3—Zn1—C1 | 139.64 (9) | C12—C13—C14 | 120.0 (2) |
| O7—Zn1—O1 | 92.86 (7) | C12—C13—C16 | 119.5 (3) |
| O7—Zn1—O2 | 151.61 (7) | C14—C13—C16 | 120.4 (3) |
| O7—Zn1—N1 | 90.62 (7) | C13—C14—H14 | 120.1 |
| O7—Zn1—N2 ⁱ | 91.96 (7) | C15—C14—C13 | 119.7 (2) |
| O7—Zn1—C1 | 122.20 (8) | C15—C14—H14 | 120.1 |
| N1—Zn1—O1 | 86.95 (7) | C10—C15—H15 | 119.8 |

| | | | |
|--------------------------|-------------|-------------|-------------|
| N1—Zn1—O2 | 90.42 (7) | C14—C15—C10 | 120.5 (2) |
| N1—Zn1—N2 ⁱ | 176.68 (7) | C14—C15—H15 | 119.8 |
| N1—Zn1—C1 | 88.14 (7) | O6—C16—C13 | 124.9 (3) |
| N2 ⁱ —Zn1—O2 | 86.32 (7) | O6—C16—H16 | 121 (2) |
| N2 ⁱ —Zn1—C1 | 88.73 (7) | C13—C16—H16 | 114 (2) |
| O8—Zn2—O9 | 59.00 (7) | N1—C17—C18 | 121.8 (2) |
| O8—Zn2—C21 | 29.37 (7) | N1—C17—H17 | 119.1 |
| O9—Zn2—C21 | 29.64 (7) | C18—C17—H17 | 119.1 |
| O10—Zn2—O8 | 168.30 (8) | N2—C18—C17 | 121.7 (2) |
| O10—Zn2—O9 | 109.58 (8) | N2—C18—H18 | 119.2 |
| O10—Zn2—O14 | 99.14 (8) | C17—C18—H18 | 119.2 |
| O10—Zn2—N3 | 92.54 (8) | N2—C19—C20 | 122.0 (2) |
| O10—Zn2—N4 ⁱ | 90.13 (8) | N2—C19—H19 | 119.0 |
| O10—Zn2—C21 | 139.14 (9) | C20—C19—H19 | 119.0 |
| O14—Zn2—O8 | 92.03 (7) | N1—C20—C19 | 121.6 (2) |
| O14—Zn2—O9 | 150.78 (7) | N1—C20—H20 | 119.2 |
| O14—Zn2—N3 | 92.41 (8) | C19—C20—H20 | 119.2 |
| O14—Zn2—N4 ⁱ | 89.63 (8) | O8—C21—Zn2 | 59.97 (12) |
| O14—Zn2—C21 | 121.28 (8) | O8—C21—O9 | 121.1 (2) |
| N3—Zn2—O8 | 90.45 (7) | O8—C21—C22 | 119.2 (2) |
| N3—Zn2—O9 | 91.62 (7) | O9—C21—Zn2 | 61.18 (13) |
| N3—Zn2—N4 ⁱ | 176.35 (7) | O9—C21—C22 | 119.7 (2) |
| N3—Zn2—C21 | 91.63 (7) | C22—C21—Zn2 | 178.24 (17) |
| N4 ⁱ —Zn2—O8 | 86.45 (7) | C23—C22—C21 | 120.9 (2) |
| N4 ⁱ —Zn2—O9 | 85.14 (7) | C23—C22—C27 | 119.6 (2) |
| N4 ⁱ —Zn2—C21 | 84.72 (7) | C27—C22—C21 | 119.5 (2) |
| C1—O1—Zn1 | 91.51 (15) | C22—C23—C24 | 119.5 (2) |
| C1—O2—Zn1 | 88.67 (15) | C22—C23—H23 | 120.2 |
| C9—O3—Zn1 | 145.76 (18) | C24—C23—H23 | 120.2 |
| Zn1—O7—H71 | 126.2 (19) | C23—C24—H24 | 119.7 |
| Zn1—O7—H72 | 120.4 (18) | C25—C24—C23 | 120.7 (2) |
| H71—O7—H72 | 106 (2) | C25—C24—H24 | 119.7 |
| C21—O8—Zn2 | 90.66 (15) | C24—C25—C26 | 119.9 (2) |
| C21—O9—Zn2 | 89.18 (15) | C24—C25—C28 | 119.3 (3) |
| C29—O10—Zn2 | 145.70 (18) | C26—C25—C28 | 120.8 (3) |
| Zn2—O14—H141 | 127 (2) | C25—C26—C27 | 119.5 (2) |
| Zn2—O14—H142 | 122 (2) | C25—C26—H26 | 120.2 |
| H141—O14—H142 | 107 (3) | C27—C26—H26 | 120.2 |

| | | | |
|--------------------------|-------------|---------------|-----------|
| C17—N1—Zn1 | 118.79 (16) | C22—C27—H27 | 119.6 |
| C20—N1—Zn1 | 124.69 (16) | C26—C27—C22 | 120.8 (2) |
| C20—N1—C17 | 116.5 (2) | C26—C27—H27 | 119.6 |
| C18—N2—Zn1 ⁱⁱ | 123.89 (16) | O12A—C28—O12B | 114.5 (6) |
| C19—N2—Zn1 ⁱⁱ | 119.73 (16) | O12A—C28—C25 | 124.7 (4) |
| C19—N2—C18 | 116.3 (2) | O12A—C28—H28 | 90.8 |
| C37—N3—Zn2 | 121.77 (16) | O12B—C28—C25 | 120.7 (6) |
| C40—N3—Zn2 | 122.19 (16) | O12B—C28—H28 | 90.8 |
| C40—N3—C37 | 116.0 (2) | C25—C28—H28 | 90.8 |
| C38—N4—Zn2 ⁱⁱ | 121.85 (16) | O10—C29—C30 | 115.4 (2) |
| C38—N4—C39 | 117.1 (2) | O11—C29—O10 | 126.5 (2) |
| C39—N4—Zn2 ⁱⁱ | 121.05 (16) | O11—C29—C30 | 118.1 (2) |
| O1—C1—Zn1 | 59.12 (12) | C31—C30—C29 | 120.3 (2) |
| O1—C1—O2 | 120.9 (2) | C31—C30—C35 | 119.9 (2) |
| O1—C1—C2 | 118.9 (2) | C35—C30—C29 | 119.8 (2) |
| O2—C1—Zn1 | 61.81 (13) | C30—C31—H31 | 120.3 |
| O2—C1—C2 | 120.1 (2) | C32—C31—C30 | 119.5 (2) |
| C2—C1—Zn1 | 177.97 (18) | C32—C31—H31 | 120.3 |
| C3—C2—C1 | 120.7 (2) | C31—C32—C33 | 120.6 (2) |
| C3—C2—C7 | 119.7 (2) | C31—C32—H32 | 119.7 |
| C7—C2—C1 | 119.6 (2) | C33—C32—H32 | 119.7 |
| C2—C3—C4 | 119.6 (2) | C32—C33—C34 | 119.8 (2) |
| C2—C3—H3 | 120.2 | C32—C33—C36 | 119.5 (2) |
| C4—C3—H3 | 120.2 | C34—C33—C36 | 120.7 (2) |
| C3—C4—H4 | 119.8 | C33—C34—H34 | 120.0 |
| C5—C4—C3 | 120.3 (3) | C35—C34—C33 | 119.9 (2) |
| C5—C4—H4 | 119.8 | C35—C34—H34 | 120.0 |
| C4—C5—C6 | 120.3 (2) | C30—C35—H35 | 119.9 |
| C4—C5—C8 | 119.0 (3) | C34—C35—C30 | 120.2 (2) |
| C6—C5—C8 | 120.7 (3) | C34—C35—H35 | 119.9 |
| C5—C6—C7 | 119.5 (3) | O13—C36—C33 | 125.7 (3) |
| C5—C6—H6 | 120.3 | O13—C36—H36 | 120 (2) |
| C7—C6—H6 | 120.3 | C33—C36—H36 | 114 (2) |
| C2—C7—H7 | 119.7 | N3—C37—C38 | 121.9 (2) |
| C6—C7—C2 | 120.5 (2) | N3—C37—H37 | 119.0 |
| C6—C7—H7 | 119.7 | C38—C37—H37 | 119.0 |
| O5A—C8—C5 | 125.8 (4) | N4—C38—C37 | 121.5 (2) |
| O5A—C8—H8 | 91.3 | N4—C38—H38 | 119.2 |

| | | | |
|----------------------------|--------------|-------------------------------|--------------|
| O5B—C8—O5A | 109.7 (8) | C37—C38—H38 | 119.2 |
| O5B—C8—C5 | 124.3 (8) | N4—C39—C40 | 121.2 (2) |
| O5B—C8—H8 | 91.3 | N4—C39—H39 | 119.4 |
| C5—C8—H8 | 91.3 | C40—C39—H39 | 119.4 |
| O3—C9—C10 | 115.5 (2) | N3—C40—C39 | 122.2 (2) |
| O4—C9—O3 | 126.4 (2) | N3—C40—H40 | 118.9 |
| O4—C9—C10 | 118.2 (2) | C39—C40—H40 | 118.9 |
| O2—Zn1—O1—C1 | 0.71 (14) | Zn1—N1—C20—C19 | 179.19 (18) |
| O3—Zn1—O1—C1 | 1.0 (5) | C17—N1—C20—C19 | -0.1 (4) |
| O7—Zn1—O1—C1 | 177.90 (15) | Zn1 ⁱⁱ —N2—C18—C17 | 177.49 (19) |
| N1—Zn1—O1—C1 | -91.63 (15) | C19—N2—C18—C17 | -0.2 (4) |
| N2 ⁱ —Zn1—O1—C1 | 85.90 (15) | Zn1 ⁱⁱ —N2—C19—C20 | -177.02 (19) |
| O1—Zn1—O2—C1 | -0.71 (14) | C18—N2—C19—C20 | 0.8 (4) |
| O3—Zn1—O2—C1 | 179.35 (14) | Zn2—N3—C37—C38 | -177.2 (2) |
| O7—Zn1—O2—C1 | -6.6 (2) | C40—N3—C37—C38 | 0.2 (4) |
| N1—Zn1—O2—C1 | 85.47 (15) | Zn2—N3—C40—C39 | 176.65 (19) |
| N2 ⁱ —Zn1—O2—C1 | -93.92 (15) | C37—N3—C40—C39 | -0.7 (4) |
| O1—Zn1—O3—C9 | -20.6 (6) | Zn2 ⁱⁱ —N4—C38—C37 | 178.53 (19) |
| O2—Zn1—O3—C9 | -20.4 (3) | C39—N4—C38—C37 | -0.8 (4) |
| O7—Zn1—O3—C9 | 162.5 (3) | Zn2 ⁱⁱ —N4—C39—C40 | -179.05 (19) |
| N1—Zn1—O3—C9 | 71.3 (3) | C38—N4—C39—C40 | 0.3 (4) |
| N2 ⁱ —Zn1—O3—C9 | -105.8 (3) | C3—C2—C1—O1 | 165.0 (2) |
| C1—Zn1—O3—C9 | -19.9 (4) | C7—C2—C1—O1 | -13.2 (3) |
| O1—Zn1—N1—C17 | -55.30 (18) | C3—C2—C1—O2 | -13.1 (4) |
| O1—Zn1—N1—C20 | 125.40 (19) | C7—C2—C1—O2 | 168.7 (2) |
| O2—Zn1—N1—C17 | -114.10 (18) | C1—C2—C3—C4 | -176.2 (2) |
| O2—Zn1—N1—C20 | 66.59 (19) | C7—C2—C3—C4 | 2.0 (4) |
| O3—Zn1—N1—C17 | 135.70 (18) | C1—C2—C7—C6 | 177.4 (2) |
| O3—Zn1—N1—C20 | -43.6 (2) | C3—C2—C7—C6 | -0.8 (4) |
| O7—Zn1—N1—C17 | 37.53 (18) | C2—C3—C4—C5 | -1.4 (4) |
| O7—Zn1—N1—C20 | -141.78 (19) | C6—C5—C4—C3 | -0.4 (4) |
| C1—Zn1—N1—C17 | -84.67 (18) | C8—C5—C4—C3 | -178.9 (3) |
| C1—Zn1—N1—C20 | 96.02 (19) | C4—C5—C6—C7 | 1.6 (4) |
| O1—Zn1—C1—O2 | 178.8 (2) | C8—C5—C6—C7 | -179.9 (3) |
| O2—Zn1—C1—O1 | -178.8 (2) | C4—C5—C8—O5A | -177.0 (4) |
| O3—Zn1—C1—O1 | -179.71 (14) | C4—C5—C8—O5B | 8.1 (11) |
| O3—Zn1—C1—O2 | -0.9 (2) | C6—C5—C8—O5A | 4.4 (6) |
| O7—Zn1—C1—O1 | -2.48 (17) | C6—C5—C8—O5B | -170.5 (10) |

| | | | |
|------------------------------|--------------|------------------|------------|
| O7—Zn1—C1—O2 | 176.29 (13) | C2—C7—C6—C5 | -1.0 (4) |
| N1—Zn1—C1—O1 | 87.09 (15) | C11—C10—C9—O3 | -11.0 (3) |
| N1—Zn1—C1—O2 | -94.15 (15) | C11—C10—C9—O4 | 170.3 (3) |
| N2 ⁱ —Zn1—C1—O1 | -93.99 (15) | C15—C10—C9—O3 | 167.2 (2) |
| N2 ⁱ —Zn1—C1—O2 | 84.77 (15) | C15—C10—C9—O4 | -11.5 (4) |
| O9—Zn2—O8—C21 | -0.91 (14) | C9—C10—C15—C14 | -177.4 (2) |
| O10—Zn2—O8—C21 | 12.3 (5) | C11—C10—C15—C14 | 0.8 (4) |
| O14—Zn2—O8—C21 | 175.05 (15) | C12—C11—C10—C9 | 179.2 (2) |
| N3—Zn2—O8—C21 | -92.53 (15) | C12—C11—C10—C15 | 1.0 (4) |
| N4 ⁱ —Zn2—O8—C21 | 85.54 (15) | C10—C11—C12—C13 | -1.9 (4) |
| O8—Zn2—O9—C21 | 0.90 (14) | C11—C12—C13—C14 | 1.0 (4) |
| O10—Zn2—O9—C21 | -176.27 (14) | C11—C12—C13—C16 | -178.7 (3) |
| O14—Zn2—O9—C21 | -7.4 (2) | C12—C13—C16—O6 | 172.9 (3) |
| N3—Zn2—O9—C21 | 90.46 (15) | C14—C13—C16—O6 | -6.8 (5) |
| N4 ⁱ —Zn2—O9—C21 | -87.87 (15) | C15—C14—C13—C12 | 0.8 (4) |
| O8—Zn2—O10—C29 | -37.1 (6) | C15—C14—C13—C16 | -179.4 (3) |
| O9—Zn2—O10—C29 | -25.1 (4) | C10—C15—C14—C13 | -1.7 (4) |
| O14—Zn2—O10—C29 | 160.4 (3) | N2—C18—C17—N1 | -0.5 (4) |
| N3—Zn2—O10—C29 | 67.6 (3) | N1—C20—C19—N2 | -0.6 (4) |
| N4 ⁱ —Zn2—O10—C29 | -109.9 (3) | O8—C21—C22—C23 | -175.8 (2) |
| C21—Zn2—O10—C29 | -27.9 (4) | O9—C21—C22—C23 | 4.4 (4) |
| O8—Zn2—N3—C37 | -56.67 (19) | O8—C21—C22—C27 | 2.6 (3) |
| O8—Zn2—N3—C40 | 126.14 (18) | O9—C21—C22—C27 | -177.2 (2) |
| O9—Zn2—N3—C37 | -115.67 (18) | C21—C22—C23—C24 | 177.7 (2) |
| O9—Zn2—N3—C40 | 67.14 (19) | C27—C22—C23—C24 | -0.7 (4) |
| O10—Zn2—N3—C37 | 134.64 (19) | C21—C22—C27—C26 | -176.3 (2) |
| O10—Zn2—N3—C40 | -42.54 (19) | C23—C22—C27—C26 | 2.1 (4) |
| O14—Zn2—N3—C37 | 35.38 (19) | C22—C23—C24—C25 | -1.5 (4) |
| O14—Zn2—N3—C40 | -141.80 (19) | C26—C25—C24—C23 | 2.4 (4) |
| C21—Zn2—N3—C37 | -86.02 (19) | C28—C25—C24—C23 | -175.7 (3) |
| C21—Zn2—N3—C40 | 96.79 (19) | C24—C25—C28—O12A | 173.7 (4) |
| O8—Zn2—C21—O9 | -178.4 (2) | C24—C25—C28—O12B | -3.4 (8) |
| O9—Zn2—C21—O8 | 178.4 (2) | C26—C25—C28—O12A | -4.3 (6) |
| O10—Zn2—C21—O8 | -176.21 (15) | C26—C25—C28—O12B | 178.6 (7) |
| O10—Zn2—C21—O9 | 5.4 (2) | C27—C26—C25—C24 | -1.0 (4) |
| O14—Zn2—C21—O8 | -5.79 (18) | C27—C26—C25—C28 | 177.1 (3) |
| O14—Zn2—C21—O9 | 175.79 (14) | C22—C27—C26—C25 | -1.3 (4) |
| N3—Zn2—C21—O8 | 88.02 (15) | C31—C30—C29—O10 | -9.5 (3) |

| | | | |
|-----------------------------|--------------|-----------------|------------|
| N3—Zn2—C21—O9 | -90.40 (15) | C31—C30—C29—O11 | 172.2 (3) |
| N4 ⁱ —Zn2—C21—O8 | -92.14 (15) | C35—C30—C29—O10 | 170.5 (2) |
| N4 ⁱ —Zn2—C21—O9 | 89.44 (15) | C35—C30—C29—O11 | -7.8 (4) |
| Zn1—O1—C1—O2 | -1.3 (2) | C29—C30—C35—C34 | -179.3 (2) |
| Zn1—O1—C1—C2 | -179.36 (19) | C31—C30—C35—C34 | 0.7 (4) |
| Zn1—O2—C1—O1 | 1.2 (2) | C32—C31—C30—C29 | -179.3 (2) |
| Zn1—O2—C1—C2 | 179.30 (19) | C32—C31—C30—C35 | 0.7 (4) |
| Zn1—O3—C9—O4 | -3.0 (5) | C30—C31—C32—C33 | -1.7 (4) |
| Zn1—O3—C9—C10 | 178.4 (2) | C31—C32—C33—C34 | 1.3 (4) |
| Zn2—O8—C21—O9 | 1.6 (2) | C31—C32—C33—C36 | -178.9 (3) |
| Zn2—O8—C21—C22 | -178.21 (19) | C32—C33—C36—O13 | 172.4 (3) |
| Zn2—O9—C21—O8 | -1.6 (2) | C34—C33—C36—O13 | -7.7 (5) |
| Zn2—O9—C21—C22 | 178.23 (19) | C35—C34—C33—C32 | 0.1 (4) |
| Zn2—O10—C29—O11 | 6.8 (5) | C35—C34—C33—C36 | -179.7 (3) |
| Zn2—O10—C29—C30 | -171.3 (2) | C33—C34—C35—C30 | -1.1 (4) |
| Zn1—N1—C17—C18 | -178.7 (2) | N4—C38—C37—N3 | 0.6 (4) |
| C20—N1—C17—C18 | 0.7 (4) | N3—C40—C39—N4 | 0.5 (4) |

Symmetry codes: (i) $x, y-1, z$; (ii) $x, y+1, z$.

Tablo 3. 18. 4 kompleksine ait hidrojen bađ geometrisi (Å, °) [61]

| $D-H\cdots A$ | $D-H$ | $H\cdots A$ | $D\cdots A$ | $D-H\cdots A$ |
|--------------------------------------|----------|-------------|-------------|---------------|
| O7—H71 \cdots O9 | 0.90 (2) | 1.82 (2) | 2.694 (3) | 165 (2) |
| O7—H72 \cdots O11 | 0.87 (2) | 1.78 (2) | 2.640 (3) | 170 (2) |
| O14—H141 \cdots O2 ⁱⁱⁱ | 0.83 (2) | 1.90 (2) | 2.705 (3) | 165 (2) |
| O14—H142 \cdots O4 ⁱⁱⁱ | 0.84 (2) | 1.80 (3) | 2.635 (3) | 172 (3) |
| C17—H17 \cdots O12A ^{iv} | 0.93 | 2.56 | 3.375 (5) | 146 |
| C19—H19 \cdots O6 ^v | 0.93 | 2.47 | 3.222 (4) | 138 |
| C23—H23 \cdots O1 | 0.93 | 2.57 | 3.361 (3) | 143 |
| C38—H38 \cdots O5A ^{iv} | 0.93 | 2.59 | 3.381 (4) | 144 |
| C39—H39 \cdots O13 ^{vi} | 0.93 | 2.47 | 3.154 (4) | 130 |
| C12—H12 \cdots Cg10 ^{vii} | 0.93 | 2.81 | 3.579 (3) | 140 |

Symmetry codes: (iii) $x, -y+3/2, z-1/2$; (iv) $-x+1, y+1/2, -z+1/2$; (v) $-x+2, -y+2, -z+1$; (vi) $-x+2, y+1/2, -z+1/2$; (vii) $-x, y-1/2, -z+1/2$.

Tablo 3. 19. 5 kompleksinin kristalografik verileri [61]

| Kristal verileri | |
|--|--|
| Kimyasal Formülü | [Cd(C ₈ H ₅ O ₃) ₂ (C ₄ H ₄ N ₂)(H ₂ O)] |
| M_r | 508.76 |
| Kristal sistem, uzay grubu | Monoklinik, $P2_1/c$ |
| Sıcaklık (K) | 294 |
| a, b, c (Å) | 22.6016 (5), 7.4947 (2), 11.9196 (3) |
| β (°) | 99.673 (2) |
| V (Å ³) | 1990.38 (9) |
| Z | 4 |
| Işın Kaynağı | Mo K_α |
| μ (mm ⁻¹) | 1.14 |
| Kristal boyutu (mm) | 0.45 × 0.35 × 0.15 |
| Veri Toplama | |
| Difaktometre | Bruker SMART BREEZE CCD |
| Soğurma düzeltimi | multi-scan (SADABS; Bruker, 2012) |
| T_{\min}, T_{\max} | 0.625, 0.842 |
| Ölçülebilen, gözlenebilen [$I > 2\sigma(I)$] ve serbest yansıma sayısı | 40178, 3587, 3497 |
| R_{int} | 0.048 |
| Aritım | |
| $R[F^2 > 2\sigma(F^2)], wR(F^2), S$ | 0.051, 0.144, 1.35 |
| Yansıma sayısı | 3587 |

| | |
|---|--|
| Parametre sayısı | 287 |
| Sınırların sayısı | 3 |
| H-atomları davranışı | Bağımsız ve sabit arınım karışımı tarafından incelenmiş H atomları |
| $\Delta\rho_{\max}, \Delta\rho_{\min}$ ($e \text{ \AA}^{-3}$) | 1.77, -1.85 |

Tablo 3. 20. 5 kompleksine ait atomik koordinatlar ve izotropik eşdeğer yer değiştirme parametreleri (\AA^2) [61]

| | <i>x</i> | <i>y</i> | <i>z</i> | $U_{\text{iso}}^*/U_{\text{eq}}$ | Occ. (<1) |
|-----|-------------|-------------|-------------|----------------------------------|-----------|
| Cd1 | 0.25229 (2) | 0.17641 (6) | 0.12918 (4) | 0.02711 (18) | |
| O1 | 0.3237 (2) | 0.1914 (8) | 0.2983 (4) | 0.0451 (13) | |
| O2 | 0.3601 (2) | 0.1504 (9) | 0.1430 (5) | 0.0567 (16) | |
| O3 | 0.6257 (4) | 0.2685 (15) | 0.5777 (8) | 0.105 (3) | |
| O4 | 0.1447 (2) | 0.1687 (9) | 0.0798 (5) | 0.0551 (16) | |
| O5 | 0.1829 (2) | 0.1597 (8) | 0.2594 (5) | 0.0503 (15) | |
| O6A | -0.1449 (4) | 0.134 (2) | 0.2280 (11) | 0.124 (6) | 0.79 (2) |
| O6B | -0.111 (2) | 0.139 (9) | 0.378 (6) | 0.16 (3) | 0.21 (2) |
| O7 | 0.2521 (2) | 0.1713 (7) | -0.0625 (4) | 0.0362 (11) | |
| H71 | 0.263 (3) | 0.278 (4) | -0.054 (7) | 0.056* | |
| H72 | 0.221 (2) | 0.168 (9) | -0.109 (6) | 0.056* | |
| N1 | 0.2519 (2) | 0.4797 (9) | 0.1242 (4) | 0.0299 (13) | |
| N2 | 0.2503 (2) | 0.8645 (6) | 0.1216 (5) | 0.0263 (11) | |
| C1 | 0.3678 (3) | 0.1700 (9) | 0.2472 (6) | 0.0330 (15) | |
| C2 | 0.4297 (3) | 0.1712 (9) | 0.3143 (6) | 0.0304 (14) | |
| C3 | 0.4421 (3) | 0.2522 (11) | 0.4201 (6) | 0.0406 (17) | |

| | | | | | |
|------|--------------|-------------|-------------|-------------|------|
| H3 | 0.4112 | 0.3025 | 0.4521 | 0.049* | |
| C4 | 0.5005 (4) | 0.2584 (12) | 0.4780 (6) | 0.047 (2) | |
| H4 | 0.5089 | 0.3158 | 0.5480 | 0.056* | |
| C5 | 0.5460 (3) | 0.1806 (12) | 0.4330 (7) | 0.047 (2) | |
| C6 | 0.5336 (4) | 0.0950 (14) | 0.3294 (8) | 0.059 (2) | |
| H6 | 0.5645 | 0.0402 | 0.2996 | 0.071* | |
| C7 | 0.4760 (3) | 0.0897 (12) | 0.2694 (7) | 0.0452 (19) | |
| H7 | 0.4681 | 0.0321 | 0.1993 | 0.054* | |
| C8 | 0.6082 (4) | 0.1889 (19) | 0.4960 (10) | 0.082 (4) | |
| H8 | 0.6366 | 0.1221 | 0.4662 | 0.099* | |
| C9 | 0.1387 (3) | 0.1613 (9) | 0.1813 (6) | 0.0335 (15) | |
| C10 | 0.0767 (3) | 0.1475 (10) | 0.2111 (6) | 0.0351 (16) | |
| C13 | -0.0386 (4) | 0.1296 (14) | 0.2620 (8) | 0.054 (2) | |
| C11A | 0.0653 (14) | 0.171 (3) | 0.320 (3) | 0.050 (4) | 0.50 |
| H11A | 0.0972 | 0.1880 | 0.3797 | 0.060* | 0.50 |
| C12A | 0.0074 (12) | 0.170 (3) | 0.342 (2) | 0.050 (4) | 0.50 |
| H12A | 0.0005 | 0.1985 | 0.4151 | 0.060* | 0.50 |
| C14A | -0.0278 (12) | 0.089 (3) | 0.153 (2) | 0.050 (4) | 0.50 |
| H14A | -0.0592 | 0.0529 | 0.0966 | 0.060* | 0.50 |
| C15A | 0.0301 (13) | 0.104 (3) | 0.128 (3) | 0.050 (4) | 0.50 |
| H15A | 0.0369 | 0.0829 | 0.0548 | 0.060* | 0.50 |
| C11B | 0.0702 (14) | 0.106 (4) | 0.319 (3) | 0.057 (5) | 0.50 |
| H11B | 0.1038 | 0.0856 | 0.3747 | 0.068* | 0.50 |
| C12B | 0.0126 (12) | 0.093 (3) | 0.348 (2) | 0.057 (5) | 0.50 |

| | | | | | |
|------|--------------|-------------|-------------|-------------|------|
| H12B | 0.0076 | 0.0606 | 0.4208 | 0.068* | 0.50 |
| C14B | -0.0305 (12) | 0.171 (3) | 0.153 (2) | 0.057 (5) | 0.50 |
| H14B | -0.0635 | 0.1966 | 0.0976 | 0.068* | 0.50 |
| C15B | 0.0255 (13) | 0.174 (3) | 0.126 (3) | 0.057 (5) | 0.50 |
| H15B | 0.0303 | 0.1945 | 0.0515 | 0.068* | 0.50 |
| C16 | -0.0996 (5) | 0.1259 (19) | 0.2908 (12) | 0.081 (3) | |
| H16A | -0.1021 | 0.1161 | 0.3677 | 0.097* | 0.80 |
| H16B | -0.1313 | 0.1104 | 0.2310 | 0.097* | 0.20 |
| C17 | 0.2264 (3) | 0.5861 (11) | 0.0310 (7) | 0.0441 (18) | |
| H17 | 0.2087 | 0.5283 | -0.0352 | 0.053* | |
| C18 | 0.2260 (3) | 0.7705 (9) | 0.0313 (6) | 0.0391 (17) | |
| H18 | 0.2080 | 0.8306 | -0.0339 | 0.047* | |
| C19 | 0.2755 (3) | 0.7728 (10) | 0.2113 (6) | 0.0381 (17) | |
| H19 | 0.2933 | 0.8340 | 0.2762 | 0.046* | |
| C20 | 0.2764 (3) | 0.5877 (9) | 0.2121 (6) | 0.0375 (16) | |
| H20 | 0.2954 | 0.5323 | 0.2783 | 0.045* | |

Tablo 3. 21. 5 kompleksinin geometrik parametreler (Å , °) [61]

| | | | |
|---------------------|-----------|----------|------------|
| Cd1—N1 | 2.274 (6) | C6—H6 | 0.9300 |
| Cd1—O7 | 2.284 (5) | C7—H7 | 0.9300 |
| Cd1—N2 ⁱ | 2.340 (5) | C8—H8 | 0.9300 |
| Cd1—O1 | 2.364 (5) | C9—C10 | 1.505 (10) |
| Cd1—O5 | 2.388 (5) | C10—C15A | 1.36 (3) |
| Cd1—O4 | 2.405 (5) | C10—C11B | 1.36 (3) |
| Cd1—O2 | 2.423 (6) | C10—C11A | 1.38 (3) |
| Cd1—C9 | 2.744 (7) | C10—C15B | 1.42 (3) |
| Cd1—C1 | 2.750 (7) | C13—C12A | 1.33 (3) |

| | | | |
|-------------------------|-------------|---------------|------------|
| O1—C1 | 1.262 (9) | C13—C14B | 1.38 (3) |
| O2—C1 | 1.234 (9) | C13—C14A | 1.40 (3) |
| O3—C8 | 1.154 (14) | C13—C12B | 1.44 (3) |
| O4—C9 | 1.242 (9) | C13—C16 | 1.475 (13) |
| O5—C9 | 1.247 (9) | C11A—C12A | 1.38 (3) |
| O6A—C16 | 1.165 (15) | C11A—H11A | 0.9300 |
| O6A—H16B | 0.3504 | C12A—H12A | 0.9300 |
| O6B—C16 | 1.12 (6) | C14A—C15A | 1.39 (3) |
| O7—H71 | 0.83 (2) | C14A—H14A | 0.9300 |
| O7—H72 | 0.82 (2) | C15A—H15A | 0.9300 |
| N1—C20 | 1.365 (9) | C11B—C12B | 1.40 (3) |
| N1—C17 | 1.410 (10) | C11B—H11B | 0.9300 |
| N2—C19 | 1.318 (9) | C12B—H12B | 0.9300 |
| N2—C18 | 1.326 (9) | C14B—C15B | 1.36 (3) |
| N2—Cd1 ⁱⁱ | 2.340 (5) | C14B—H14B | 0.9300 |
| C1—C2 | 1.491 (9) | C15B—H15B | 0.9300 |
| C2—C3 | 1.385 (10) | C16—H16A | 0.9300 |
| C2—C7 | 1.394 (10) | C16—H16B | 0.9300 |
| C3—C4 | 1.383 (11) | C17—C18 | 1.382 (11) |
| C3—H3 | 0.9300 | C17—H17 | 0.9300 |
| C4—C5 | 1.368 (12) | C18—H18 | 0.9300 |
| C4—H4 | 0.9300 | C19—C20 | 1.387 (10) |
| C5—C6 | 1.378 (12) | C19—H19 | 0.9300 |
| C5—C8 | 1.479 (12) | C20—H20 | 0.9300 |
| C6—C7 | 1.376 (11) | | |
| N1—Cd1—O7 | 89.51 (17) | C6—C7—H7 | 120.2 |
| N1—Cd1—N2 ⁱ | 176.30 (17) | C2—C7—H7 | 120.2 |
| O7—Cd1—N2 ⁱ | 87.02 (18) | O3—C8—C5 | 127.7 (12) |
| N1—Cd1—O1 | 88.49 (18) | O3—C8—H8 | 116.1 |
| O7—Cd1—O1 | 137.71 (18) | C5—C8—H8 | 116.1 |
| N2 ⁱ —Cd1—O1 | 94.94 (19) | O4—C9—O5 | 121.6 (7) |
| N1—Cd1—O5 | 93.98 (19) | O4—C9—C10 | 119.4 (6) |
| O7—Cd1—O5 | 139.32 (18) | O5—C9—C10 | 119.0 (6) |
| N2 ⁱ —Cd1—O5 | 87.8 (2) | O4—C9—Cd1 | 61.2 (4) |
| O1—Cd1—O5 | 82.94 (17) | O5—C9—Cd1 | 60.4 (4) |
| N1—Cd1—O4 | 91.1 (2) | C10—C9—Cd1 | 178.3 (5) |
| O7—Cd1—O4 | 85.57 (18) | C15A—C10—C11B | 116 (2) |
| N2 ⁱ —Cd1—O4 | 87.4 (2) | C15A—C10—C11A | 118.0 (17) |

| | | | |
|--------------------------|-------------|----------------|------------|
| O1—Cd1—O4 | 136.69 (18) | C11B—C10—C15B | 120.2 (17) |
| O5—Cd1—O4 | 53.88 (18) | C11A—C10—C15B | 113.1 (19) |
| N1—Cd1—O2 | 94.7 (2) | C15A—C10—C9 | 119.1 (14) |
| O7—Cd1—O2 | 84.23 (18) | C11B—C10—C9 | 119.6 (14) |
| N2 ⁱ —Cd1—O2 | 86.3 (2) | C11A—C10—C9 | 122.9 (15) |
| O1—Cd1—O2 | 53.89 (17) | C15B—C10—C9 | 120.3 (14) |
| O5—Cd1—O2 | 135.59 (18) | C12A—C13—C14B | 114.6 (19) |
| O4—Cd1—O2 | 168.3 (2) | C12A—C13—C14A | 119.0 (16) |
| N1—Cd1—C9 | 92.74 (18) | C14B—C13—C12B | 119.6 (15) |
| O7—Cd1—C9 | 112.4 (2) | C14A—C13—C12B | 112.0 (17) |
| N2 ⁱ —Cd1—C9 | 87.41 (19) | C12A—C13—C16 | 119.1 (14) |
| O1—Cd1—C9 | 109.87 (19) | C14B—C13—C16 | 120.2 (14) |
| O5—Cd1—C9 | 26.99 (19) | C14A—C13—C16 | 122.0 (14) |
| O4—Cd1—C9 | 26.9 (2) | C12B—C13—C16 | 120.2 (14) |
| O2—Cd1—C9 | 161.8 (2) | C12A—C11A—C10 | 121 (2) |
| N1—Cd1—C1 | 91.69 (18) | C12A—C11A—H11A | 119.5 |
| O7—Cd1—C1 | 110.7 (2) | C10—C11A—H11A | 119.5 |
| N2 ⁱ —Cd1—C1 | 90.73 (19) | C13—C12A—C11A | 121.2 (19) |
| O1—Cd1—C1 | 27.25 (19) | C13—C12A—H12A | 119.4 |
| O5—Cd1—C1 | 109.70 (19) | C11A—C12A—H12A | 119.4 |
| O4—Cd1—C1 | 163.5 (2) | C15A—C14A—C13 | 119.6 (18) |
| O2—Cd1—C1 | 26.64 (19) | C15A—C14A—H14A | 120.2 |
| C9—Cd1—C1 | 136.7 (2) | C13—C14A—H14A | 120.2 |
| C1—O1—Cd1 | 93.7 (4) | C10—C15A—C14A | 121 (2) |
| C1—O2—Cd1 | 91.7 (4) | C10—C15A—H15A | 119.6 |
| C9—O4—Cd1 | 91.9 (4) | C14A—C15A—H15A | 119.6 |
| C9—O5—Cd1 | 92.6 (4) | C10—C11B—C12B | 120 (2) |
| Cd1—O7—H71 | 85 (6) | C10—C11B—H11B | 120.1 |
| Cd1—O7—H72 | 123 (6) | C12B—C11B—H11B | 120.1 |
| H71—O7—H72 | 108 (3) | C11B—C12B—C13 | 119.2 (19) |
| C20—N1—C17 | 109.2 (6) | C11B—C12B—H12B | 120.4 |
| C20—N1—Cd1 | 125.0 (4) | C13—C12B—H12B | 120.4 |
| C17—N1—Cd1 | 125.8 (4) | C15B—C14B—C13 | 120.3 (18) |
| C19—N2—C18 | 116.5 (5) | C15B—C14B—H14B | 119.9 |
| C19—N2—Cd1 ⁱⁱ | 119.1 (4) | C13—C14B—H14B | 119.9 |
| C18—N2—Cd1 ⁱⁱ | 124.4 (4) | C14B—C15B—C10 | 121 (2) |
| O2—C1—O1 | 120.8 (7) | C14B—C15B—H15B | 119.5 |
| O2—C1—C2 | 120.1 (6) | C10—C15B—H15B | 119.5 |

| | | | |
|----------------------------|------------|----------------------------|-------------|
| O1—C1—C2 | 119.1 (6) | O6B—C16—O6A | 106 (3) |
| O2—C1—Cd1 | 61.7 (4) | O6B—C16—C13 | 126 (3) |
| O1—C1—Cd1 | 59.1 (4) | O6A—C16—C13 | 127.2 (13) |
| C2—C1—Cd1 | 177.9 (5) | O6A—C16—H16A | 116.4 |
| C3—C2—C7 | 119.5 (7) | C13—C16—H16A | 116.4 |
| C3—C2—C1 | 121.2 (6) | O6B—C16—H16B | 117.0 |
| C7—C2—C1 | 119.3 (6) | C13—C16—H16B | 117.0 |
| C4—C3—C2 | 119.9 (7) | H16A—C16—H16B | 125.4 |
| C4—C3—H3 | 120.0 | C18—C17—N1 | 124.4 (7) |
| C2—C3—H3 | 120.0 | C18—C17—H17 | 117.8 |
| C5—C4—C3 | 120.5 (7) | N1—C17—H17 | 117.8 |
| C5—C4—H4 | 119.8 | N2—C18—C17 | 122.0 (7) |
| C3—C4—H4 | 119.8 | N2—C18—H18 | 119.0 |
| C4—C5—C6 | 119.7 (7) | C17—C18—H18 | 119.0 |
| C4—C5—C8 | 119.7 (9) | N2—C19—C20 | 122.1 (7) |
| C6—C5—C8 | 120.5 (9) | N2—C19—H19 | 119.0 |
| C7—C6—C5 | 120.8 (8) | C20—C19—H19 | 119.0 |
| C7—C6—H6 | 119.6 | N1—C20—C19 | 125.7 (7) |
| C5—C6—H6 | 119.6 | N1—C20—H20 | 117.1 |
| C6—C7—C2 | 119.5 (7) | C19—C20—H20 | 117.1 |
| N1—Cd1—O1—C1 | -96.7 (4) | Cd1—O5—C9—O4 | 0.4 (7) |
| O7—Cd1—O1—C1 | -9.0 (6) | Cd1—O5—C9—C10 | 178.2 (5) |
| N2 ⁱ —Cd1—O1—C1 | 82.0 (4) | N1—Cd1—C9—O4 | 87.0 (5) |
| O5—Cd1—O1—C1 | 169.1 (5) | O7—Cd1—C9—O4 | -3.6 (5) |
| O4—Cd1—O1—C1 | 173.4 (4) | N2 ⁱ —Cd1—C9—O4 | -89.3 (5) |
| O2—Cd1—O1—C1 | 0.2 (4) | O1—Cd1—C9—O4 | 176.3 (4) |
| C9—Cd1—O1—C1 | 171.0 (4) | O5—Cd1—C9—O4 | -179.6 (7) |
| N1—Cd1—O2—C1 | 84.5 (5) | O2—Cd1—C9—O4 | -159.0 (7) |
| O7—Cd1—O2—C1 | 173.5 (5) | C1—Cd1—C9—O4 | -177.7 (4) |
| N2 ⁱ —Cd1—O2—C1 | -99.1 (5) | N1—Cd1—C9—O5 | -93.4 (4) |
| O1—Cd1—O2—C1 | -0.2 (4) | O7—Cd1—C9—O5 | 176.0 (4) |
| O5—Cd1—O2—C1 | -16.1 (6) | N2 ⁱ —Cd1—C9—O5 | 90.3 (4) |
| O4—Cd1—O2—C1 | -156.6 (9) | O1—Cd1—C9—O5 | -4.0 (5) |
| C9—Cd1—O2—C1 | -29.3 (10) | O4—Cd1—C9—O5 | 179.6 (7) |
| N1—Cd1—O4—C9 | -94.0 (5) | O2—Cd1—C9—O5 | 20.6 (9) |
| O7—Cd1—O4—C9 | 176.6 (5) | C1—Cd1—C9—O5 | 2.0 (6) |
| N2 ⁱ —Cd1—O4—C9 | 89.4 (5) | O4—C9—C10—C15A | 14.6 (15) |
| O1—Cd1—O4—C9 | -5.0 (6) | O5—C9—C10—C15A | -163.3 (13) |

| | | | |
|----------------------------|------------|--------------------|-------------|
| O5—Cd1—O4—C9 | 0.2 (4) | O4—C9—C10—C11B | 167.6 (15) |
| O2—Cd1—O4—C9 | 146.8 (9) | O5—C9—C10—C11B | -10.3 (16) |
| C1—Cd1—O4—C9 | 5.7 (10) | O4—C9—C10—C11A | -167.9 (13) |
| N1—Cd1—O5—C9 | 88.2 (4) | O5—C9—C10—C11A | 14.2 (15) |
| O7—Cd1—O5—C9 | -5.7 (6) | O4—C9—C10—C15B | -11.1 (16) |
| N2 ⁱ —Cd1—O5—C9 | -88.6 (4) | O5—C9—C10—C15B | 171.0 (13) |
| O1—Cd1—O5—C9 | 176.2 (5) | C15A—C10—C11A—C12A | -7 (2) |
| O4—Cd1—O5—C9 | -0.2 (4) | C11B—C10—C11A—C12A | -97 (8) |
| O2—Cd1—O5—C9 | -171.0 (4) | C15B—C10—C11A—C12A | 17 (3) |
| C1—Cd1—O5—C9 | -178.6 (4) | C9—C10—C11A—C12A | 175.2 (14) |
| O7—Cd1—N1—C20 | -150.7 (5) | C14B—C13—C12A—C11A | -29 (2) |
| O1—Cd1—N1—C20 | -13.0 (5) | C14A—C13—C12A—C11A | -1 (3) |
| O5—Cd1—N1—C20 | 69.8 (5) | C12B—C13—C12A—C11A | 79 (5) |
| O4—Cd1—N1—C20 | 123.7 (5) | C16—C13—C12A—C11A | 178.4 (16) |
| O2—Cd1—N1—C20 | -66.6 (5) | C10—C11A—C12A—C13 | 7 (3) |
| C9—Cd1—N1—C20 | 96.9 (5) | C12A—C13—C14A—C15A | -4 (2) |
| C1—Cd1—N1—C20 | -40.0 (5) | C14B—C13—C14A—C15A | 83 (5) |
| O7—Cd1—N1—C17 | 29.5 (5) | C12B—C13—C14A—C15A | -30 (2) |
| O1—Cd1—N1—C17 | 167.3 (5) | C16—C13—C14A—C15A | 176.7 (15) |
| O5—Cd1—N1—C17 | -109.9 (5) | C11B—C10—C15A—C14A | 26 (3) |
| O4—Cd1—N1—C17 | -56.0 (5) | C11A—C10—C15A—C14A | 2 (2) |
| O2—Cd1—N1—C17 | 113.7 (5) | C15B—C10—C15A—C14A | -81 (6) |
| C9—Cd1—N1—C17 | -82.9 (5) | C9—C10—C15A—C14A | 179.9 (14) |
| C1—Cd1—N1—C17 | 140.2 (5) | C13—C14A—C15A—C10 | 3 (3) |
| Cd1—O2—C1—O1 | 0.4 (7) | C15A—C10—C11B—C12B | -26 (3) |
| Cd1—O2—C1—C2 | -178.8 (5) | C11A—C10—C11B—C12B | 75 (7) |
| Cd1—O1—C1—O2 | -0.4 (8) | C15B—C10—C11B—C12B | -1 (3) |
| Cd1—O1—C1—C2 | 178.8 (5) | C9—C10—C11B—C12B | 180.0 (16) |
| N1—Cd1—C1—O2 | -97.0 (5) | C10—C11B—C12B—C13 | -2 (3) |
| O7—Cd1—C1—O2 | -6.9 (5) | C12A—C13—C12B—C11B | -83 (5) |
| N2 ⁱ —Cd1—C1—O2 | 80.2 (5) | C14B—C13—C12B—C11B | 2 (3) |
| O1—Cd1—C1—O2 | 179.6 (7) | C14A—C13—C12B—C11B | 29 (3) |
| O5—Cd1—C1—O2 | 168.1 (5) | C16—C13—C12B—C11B | -176.9 (17) |
| O4—Cd1—C1—O2 | 163.5 (7) | C12A—C13—C14B—C15B | 28 (3) |
| C9—Cd1—C1—O2 | 167.2 (4) | C14A—C13—C14B—C15B | -78 (5) |
| N1—Cd1—C1—O1 | 83.4 (4) | C12B—C13—C14B—C15B | 1 (3) |
| O7—Cd1—C1—O1 | 173.5 (4) | C16—C13—C14B—C15B | -180.0 (17) |
| N2 ⁱ —Cd1—C1—O1 | -99.4 (4) | C13—C14B—C15B—C10 | -4 (3) |

| | | | |
|---------------|-------------|-------------------------------|-------------|
| O5—Cd1—C1—O1 | -11.5 (5) | C15A—C10—C15B—C14B | 90 (7) |
| O4—Cd1—C1—O1 | -16.1 (10) | C11B—C10—C15B—C14B | 5 (3) |
| O2—Cd1—C1—O1 | -179.6 (7) | C11A—C10—C15B—C14B | -18 (3) |
| C9—Cd1—C1—O1 | -12.4 (6) | C9—C10—C15B—C14B | -176.8 (16) |
| O2—C1—C2—C3 | 157.1 (7) | C12A—C13—C16—O6B | -8 (5) |
| O1—C1—C2—C3 | -22.1 (10) | C14B—C13—C16—O6B | -159 (5) |
| O2—C1—C2—C7 | -22.7 (10) | C14A—C13—C16—O6B | 171 (5) |
| O1—C1—C2—C7 | 158.2 (7) | C12B—C13—C16—O6B | 21 (5) |
| C7—C2—C3—C4 | 2.7 (11) | C12A—C13—C16—O6A | 160.9 (19) |
| C1—C2—C3—C4 | -177.0 (7) | C14B—C13—C16—O6A | 10 (3) |
| C2—C3—C4—C5 | -1.8 (13) | C14A—C13—C16—O6A | -20 (3) |
| C3—C4—C5—C6 | -0.2 (14) | C12B—C13—C16—O6A | -171 (2) |
| C3—C4—C5—C8 | 179.8 (9) | C20—N1—C17—C18 | -1.0 (10) |
| C4—C5—C6—C7 | 1.2 (15) | Cd1—N1—C17—C18 | 178.8 (6) |
| C8—C5—C6—C7 | -178.8 (10) | C19—N2—C18—C17 | 0.5 (11) |
| C5—C6—C7—C2 | -0.3 (14) | Cd1 ⁱⁱ —N2—C18—C17 | 179.5 (6) |
| C3—C2—C7—C6 | -1.7 (12) | N1—C17—C18—N2 | 0.2 (13) |
| C1—C2—C7—C6 | 178.0 (8) | C18—N2—C19—C20 | -0.3 (11) |
| C4—C5—C8—O3 | -7.4 (19) | Cd1 ⁱⁱ —N2—C19—C20 | -179.4 (6) |
| C6—C5—C8—O3 | 172.6 (13) | C17—N1—C20—C19 | 1.2 (10) |
| Cd1—O4—C9—O5 | -0.4 (7) | Cd1—N1—C20—C19 | -178.6 (6) |
| Cd1—O4—C9—C10 | -178.2 (6) | N2—C19—C20—N1 | -0.6 (13) |

Symmetry codes: (i) $x, y-1, z$; (ii) $x, y+1, z$.

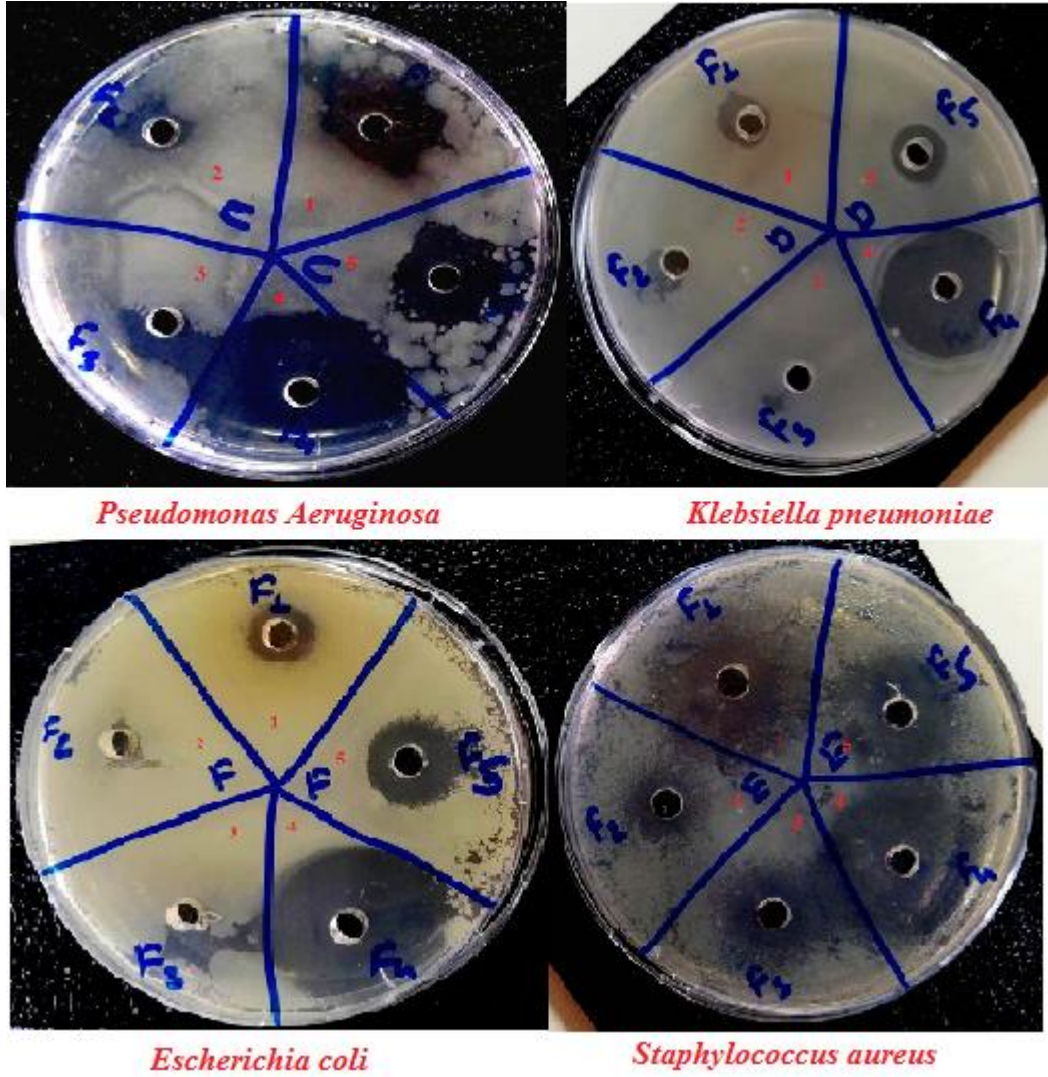
Tablo 3. 22. 5 kompleksine ait hidrojen bađ geometrisi (\AA , $^\circ$) [61]

| $D-H\cdots A$ | $D-H$ | $H\cdots A$ | $D\cdots A$ | $D-H\cdots A$ |
|------------------------------------|----------|-------------|-------------|---------------|
| O7—H72 \cdots O5 ⁱⁱⁱ | 0.82 (2) | 2.10 (6) | 2.727 (7) | 133 (7) |
| C18—H18 \cdots O6A ^{iv} | 0.93 | 2.52 | 3.394 (14) | 157 |
| C19—H19 \cdots O3 ^v | 0.93 | 2.43 | 3.085 (10) | 127 |
| C8—H8 \cdots Cg1 ^{vi} | 0.93 | 2.93 | 3.691 (10) | 147 |

Symmetry codes: (iii) $x, -y+1/2, z-1/2$; (iv) $-x, -y+1, -z$; (v) $-x+1, -y+1, -z+1$; (vi) $-x+1, y-1/2, -z+1/2$.

3.4. Komplekslerin Antibakteriyel Etkileri

Komplekslerin antibakteriyel uygulamaları yapılmış inkubasyon sonrası zon çapları görüntülenmiş ve zon çapları milimetre olarak ölçülmüştür. Bakterilerin zon görüntüleri şekil 3.6'da ve zon çapları çizelge 5.23'te verilmiştir.



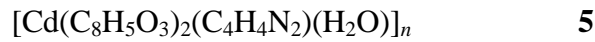
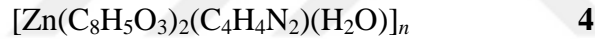
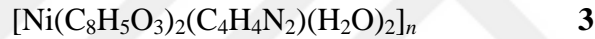
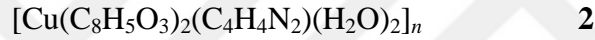
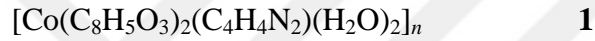
Şekil 3. 6. Komplekslerin Bakterilere karşı zon görüntüleri

Tablo 3. 23. Komplekslere ait antibakteriyel zon apları (mm)

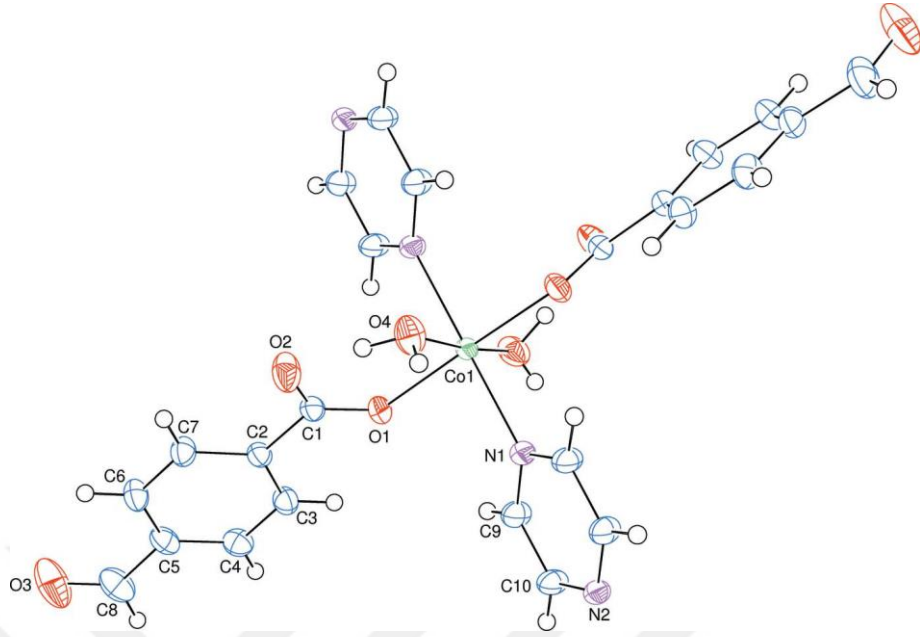
| Kompleksler | Bakteriler | | | |
|--------------------|----------------------|----------------------|----------------|------------------|
| | <i>P. Aeruginosa</i> | <i>K. pneumoniae</i> | <i>E. coli</i> | <i>S. aureus</i> |
| 1 | 18 | 10 | 12 | 18 |
| 2 | 10 | 9 | 7 | 11 |
| 3 | 12 | ----- | ----- | 15 |
| 4 | 35 | 27 | 32 | 30 |
| 5 | 18 | 12 | 16 | 20 |

5. TARTIŞMA VE SONUÇ

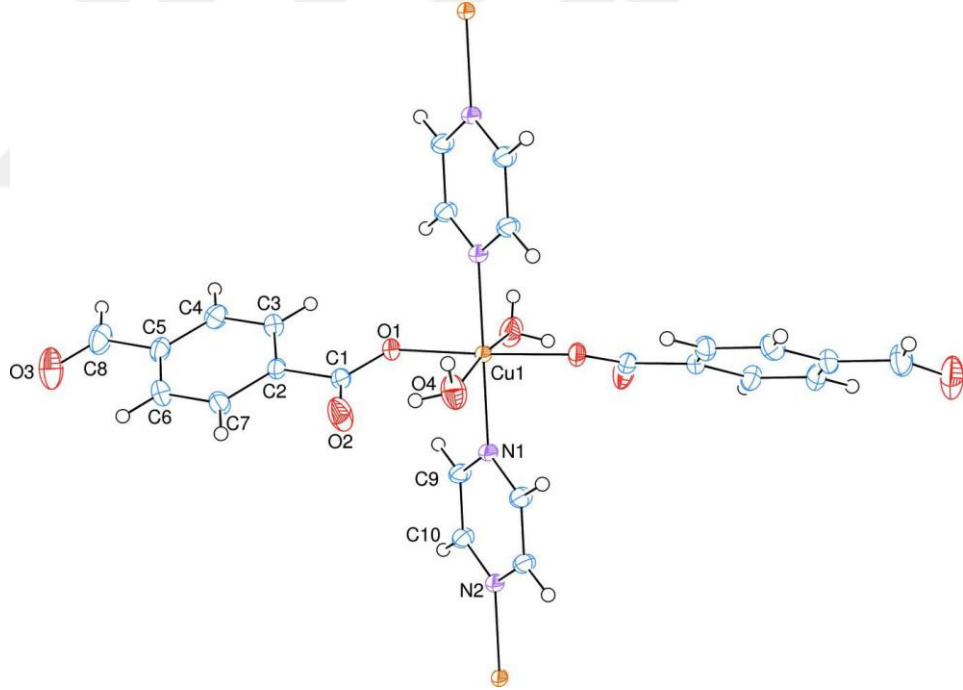
İlk kez sentezlenen beş yeni 4-formilbenzoik asitin pirazin metal komplekslerinin yapıları X-ray yapı analizi neticesinde aydınlatılmış ve yapılar FT-IR spektroskopisi ve elementel analiz sonuçları ile desteklenilmiştir. Literatüre kazandırılan beş polimerik bileşiğin aynı zamanda antibakteriyel özellikleri araştırılmıştır. Sentezlenen beş yeni kompleks de polimerik bir koordinasyon çevresine sahip olsa da farklı koordinasyon yapısına sahiptir. 1, 2 ve 3 Kompleksinin metal: 4-formilbenzoik asit : pirazin : su oranı 1:2:1:2, . 4 ve 5 Kompleksinin metal: 4-formilbenzoik asit : pirazin : su oranı 1:2:1:1 olduğu görülmektedir.



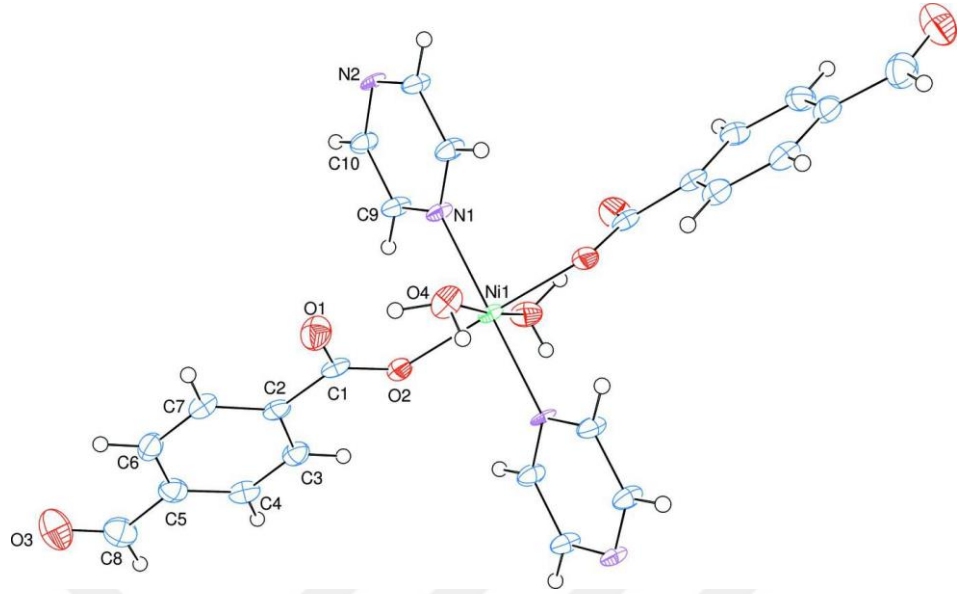
Eş yapılı olan 1, 2 ve 3 kompleksinde metal (Co, Cu, Ni) atomuna monodentat bağlanmış iki FBA anyonunun karboksilat O atomları, iki koordine su molekülünün O atomları ve iki köprü pirazin molekülünün N atomları ile hafif bozunmuş oktahedral geometri oluşturmaktadır. Pirazin molekülü metal atomları arasında köprü görevi görerek polimer yapıyı oluşturmaktadır. Moleküller arası O – H \cdots O ve C – H \cdots O hidrojen bağları oluşmaktadır(Şekil 5.1-5.3).



Şekil 5. 1. 1 kompleksinin molekül yapısı [58]

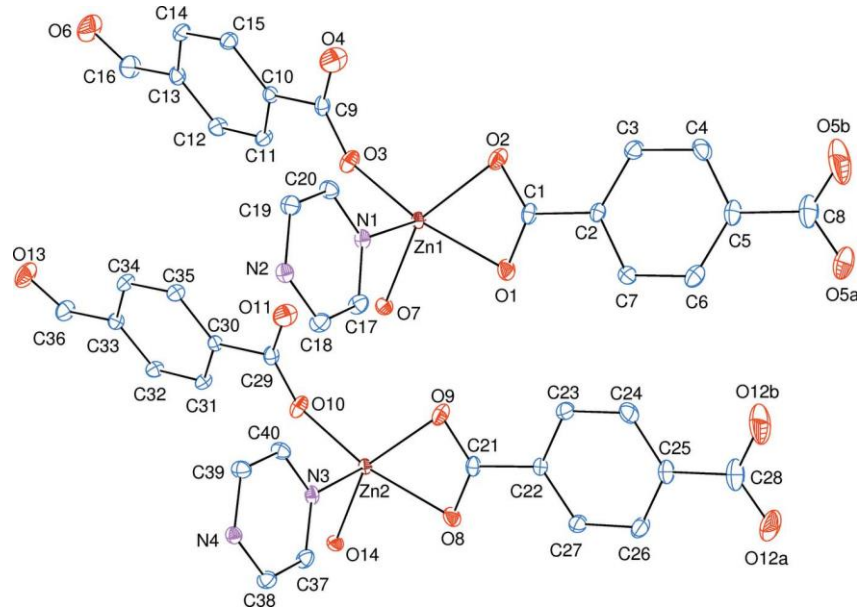


Şekil 5. 2. 2 kompleksinin molekül yapısı [59]



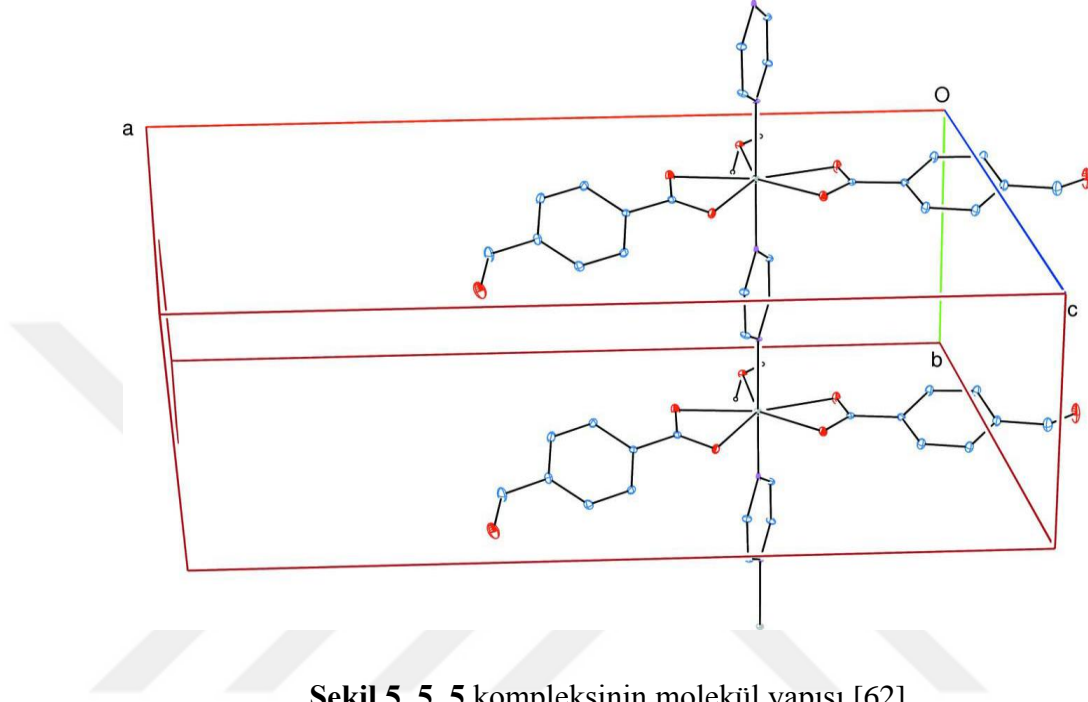
Şekil 5. 3. 3 kompleksinin molekül yapısı [60]

Kompleks 4'ü incelediğimiz zaman merkezde çinko atomuna bir FBA anyonunun karboksilat O atomlarının şelat oluşturduğunu bir FBA anyonunun karboksilat O atomunun ise monodentat bağlandığı görülmektedir. İki pirazin molekülünün N atomları ve bir su molekülünün O atomu ile koordine olmaktadır. Moleküller arası O – H \cdots O ve C – H \cdots O hidrojen bağları oluşmaktadır(Şekil 5.4).



Şekil 5. 4. 4 kompleksinin molekül yapısı [61]

Kompleks 5'te ise kadmiyum atomuna iki FBA anyonunun karboksilat O atomları şelat oluşturmaktadır. Bir su molekülünün O atomu ve köprü konumunda polimer yapıyı oluşturan iki pirazin molekülünün N atomları ile koordinasyon çevresi tamamlanmıştır(Şekil 5.5).



Şekil 5. 5. 5 kompleksinin molekül yapısı [62]

Komplekslerin FT-IR spektrumları Şekil 3.1-3.5'te, pik değerleri Tablo 3.2'de verilmiştir. Sentezlenen tüm komplekslerin yapısındaki su moleküllerinin O-H grubundan kaynaklanan pikler $3500-3300\text{ cm}^{-1}$ aralığında gözlemlenmiştir. O-H grubu absorpsiyon pikleri literatürde yayvan pikler olarak bilinmektedir. Bu piklerin keskin pikler olarak görülmesinin nedeni molekül içi ve moleküller arası hidrojen bağları varlığını göstermektedir. Benzen ve pirazin halkalarına ait olan aromatik C-H pikleri ise $3100-3000\text{ cm}^{-1}$ aralığında kaydedilmiştir.

Aldehit grubu C=O titreşimleri kompleksler için sırasıyla 2725 (1), 2728 (2), 2726 (3), 2750 (4) ve 2751 (5) cm^{-1} de gözlenmiştir. Aldehit grubu pikleri genel olarak bu bölgede görülmektedir. Pik değerlerinde de büyük bir kayma gerçekleşmediğinden aldehit grubunun koordinasyona katılmadığı söylenebilir.

Pirazin halkası C-N grupları için gerilme ve eğilme absorpsiyon bantları 1540-1202 (1), 1555-1201 (2), 1542-1203 (3), 1536-1198 (4) ve 1536-1200 (5) cm^{-1} 'de gözlemlenmiştir.

Komplekslerin karboksil grubu COO^- asimetric ve simetric titreşimleri sırasıyla 1590-1389 (1), 1597-1363 (2), 1590-1391 (3), 1588-1374 (4), 1588-1395 (5) cm^{-1} 'de gözlenirken karboksilik aside ait $\text{C}=\text{O}$ absorpsiyon piklerinin kaybolması karboksilik asidin karboksilat grubu oksijen atomları üzerinden koordine olduğunu doğrulamaktadır. Karboksil grubuna ait asimetric ve simetric titreşimleri arasındaki farktan hesaplanan $\Delta\nu(\text{COO}^-)$ değerleri, inorganik komplekslerin karakterizasyonunda monodentat, şelat bidentat, köprü, vb. gibi karboksilat koordinasyon tipinin belirlemek için bir kriter olarak kullanılmıştır. Genel olarak, iki değerlikli metal karboksilatlar için asidin sodyum tuzu ile kıyaslanması durumunda şu sıralama önerilmiştir: $\Delta\nu_{\text{monodentat}} \gg \Delta\nu_{\text{viyonik}} \geq \Delta\nu_{\text{köprü}} \gg \Delta\nu_{\text{şelat}}$. Ayrıca literatürde genel olarak $\Delta\nu(\text{COO}^-)$ değeri 200 cm^{-1} 'den büyükse monodentat olduğu bildirilmiştir. 1, 2 ve 3 nolu kompleksler tablodan da görülebileceği gibi monodentat, 4 nolu kompleks bidentattır. 5 nolu kompleksin ise hem monodentat hem de bidentat koordine olduğu komplekslerin tek kristal X-ışını diffraksiyonu ile belirlenmiştir.

Sentezlenen komplekslerin Me-O absorpsiyon titreşimleri 470 (1), 483 (2), 482 (3), 512 (4) ve 500 (5) cm^{-1} 'de; Me-N absorpsiyon titreşimleri ise 688 (1), 688 (2), 700 (3), 700 (4) ve 686 (5) cm^{-1} 'de görülmüştür[63–67].

Elementel analiz sonuçları teorik hesaplamalarla uyum içerisindedir.

Sentezlenen polimerik komplekslerin antimikrobiyal etkileri incelenmiş ve zon çapları Tablo 3.23'te verilmiştir. Zon çaplarına baktığımızda *Pseudomonas aeruginosa*, *Klebsiella pneumoniae*, *Escherichia coli* ve *Staphylococcus aureus* bakterilerine karşı her kompleksin farklı etki gösterdiği görülmektedir.

Pseudomonas aeruginosa 'ya karşı kompleksler sırasıyla 18 (1), 10 (2), 12 (3), 35 (4) ve 18 (5) mm zon çapı oluşturmuştur.

Klebsiella pneumoniae 'ya karşı kompleksler sırasıyla 10 (1), 9 (2), 0 (3), 27 (4) ve 12 (5) mm zon çapı oluşturmuştur.

Escherichia coli 'ya karşı kompleksler sırasıyla 12 (1), 7 (2), 0 (3), 32 (4) ve 16 (5) mm zon çapı oluşturmuştur.

Staphylococcus aureus karşı kompleksler sırasıyla 18 (1), 11 (2), 15 (3), 30 (4) ve 20 (5) mm zon çapı oluşturmuştur.

Bu sonuçlara göre sentezlenen polimerik komplekslerin tamamı *Pseudomonas aeruginosa* ve *Staphylococcus aureus* 'a karşı antibakteriyel özellik göstermektedir.

Klebsiella pneumoniae 'ya karşı 1, 2, 4 ve 5 kompleksi antibakteriyel özellik gösterirken 3 kompleksi antibakteriyel özellik göstermemektedir.

Escherichia coli 'ye karşı 1, 2, 4 ve 5 kompleksi antibakteriyel özellik gösterirken 3 kompleksi antibakteriyel özellik göstermemektedir.

Her bir kompleksi oluşturduğu inhibisyon zonlarına göre: 6 mm antibakteriyel etki yok; 6-15 mm zayıf antibakteriyel etki; 15-20 mm iyi antibakteriyel etki; 20-25 mm çok iyi antibakteriyel etki referans aralıklarıyla değerlendirdiğimiz zaman [68];

1 kompleksi *Pseudomonas aeruginosa*, *Klebsiella pneumoniae*, *Escherichia coli* ve *Staphylococcus aureus* 'a karşı iyi derecede antibakteriyel etki göstermektedir.

2 kompleksi *Pseudomonas aeruginosa*, *Klebsiella pneumoniae*, *Escherichia coli* ve *Staphylococcus aureus* 'a karşı zayıf derecede antibakteriyel etki göstermektedir.

3 kompleksi *Pseudomonas aeruginosa* ve *Staphylococcus aureus* 'a karşı zayıf derecede antibakteriyel etki göstermekteyken, *Klebsiella pneumoniae* ve *Escherichia coli* ye karşı bir direnç göstermemektedir.

4 kompleksi *Pseudomonas aeruginosa*, *Klebsiella pneumoniae*, *Escherichia coli* ve *Staphylococcus aureus* 'a karşı çok iyi derece olarak kabul edilen referans aralığında üzerinde antibakteriyel etki göstermektedir.

5 kompleksi *Klebsiella pneumoniae* üzerinde zayıf antibakteriyel etki gösterirken *Pseudomonas aeruginosa*, *Escherichia coli* ve *Staphylococcus aureus* 'a karşı iyi derecede antibakteriyel etki göstermektedir.

Sonuç olarak sentezlenen komplekslerin genel olarak iyi bir antibakteriyel etkiye sahip olduđu klinik patojen bakteriler üzerinde antibakteriyel etkilerinin olduđu tespit edilmiştir. Komplekslerin antibakteriyel inceleme sonuçları, yaygın patojen bakterilere karşı kullanılan antibiyotiklere alternatif olabileceğini göstermiştir. Bilim dünyası için antibiyotik direncinin önemli bir sorun teşkil etmesinden dolayı literatüre yapıları ve antibakteriyal özellikleri belirlenen beş yeni kompleksin yeni ilaç etken malzemesi olarak ileri klinik arařtırmalar ile incelenebileceđi önerilmektedir.



KAYNAKLAR

- [1] Bekarođlu, Ö. (1972). Koordiasyon Kimyası (Birinci Baskı.). İstanbul: Kurtuluş Matbası İstanbul Üniversitesi, Kimya Fakültesi Yayını.
- [2] Desiraju, G. R. (1989). Crystal engineering: the design of organic solids. Amsterdam; New York: Elsevier.
- [3] Saha, S., Mishra, M. K., Reddy, C. M., Desiraju, G. R. (2018). From Molecules to Interactions to Crystal Engineering: Mechanical Properties of Organic Solids. *Accounts of Chemical Research*, 51(11), 2957–2967.
- [4] Z. Laczowski, K., Biernasiuk, A., Baranowska-Laczowska, A., Misiura, K., Malm, A., Plech, T., Paneth, A. (2016). Synthesis, Antibacterial Activity, Interaction with Nucleobase and Molecular Docking Studies of 4-Formylbenzoic Acid Based Thiazoles, *Med Chem.*, 12(6), 553-562.
- [5] Deng, Z., Gao, S., Weng Ng, S. (2006). Hexaaqua-cobalt(II) bis-(4-formylbenzoate) dihydrate. *Acta Cryst. Sec. E.*, 62(12), 3423-3424 .
- [6] Deng, Z.-P., Gao, S., Huo, L.-H. Ng, S. W. (2008). Tetraaquabis(4-formylbenzoato-kappa O)-cobalt(II) tetrahydrate. *Acta Cryst. Sect. E.*, 64, 446
- [7] Deng, Z.-P., Gao, S., Ng, S. W. (2006). Tetraaquabis(4-formylbenzoato-kappa O)nickel(II) tetrahydrate. *Acta Cryst. Sec. E.*, 62, 2904–2905.
- [8] Deng, Z.-P., Gao, S., Ng, S. W. (2006). Diaquabis(4-formylbenzoato-kappa O)copper(II) dihydrate. *Acta Cryst. Sec. E.*, 62, 2906–2907.
- [9] Deng, Z.-P., Gao, S., Huo, L.-H., Ng, S. W. (2008). Diaquabis(4-formylbenzoato-kappa O)zinc(II). *Acta Cryst. Sec. E.*, 64, 447
- [10] Deng, Z.-P., Gao, S., Huo, L.-H., Zhao, H. (2006). Diaquabis(4-formylbenzoato-kappa O)zinc(II) monohydrate. *Acta Cryst. Sec. E.*, 62, 3524–3526.

- [11] Deng, Z.-P., Gao, S., Huo, L.-H., Zhao, H. (2007). Triaquabis(4-formylbenzoato-kappa O-2,O')cadmium(II) trihydrate. *Acta Cryst. Sec. E.*, 63, 2818.
- [12] Deng, Z.-P., Gao, S., Huo, L.-H., Zhao, H. (2006). Triaquabis(4-formylbenzoato-kappa O-2,O')cadmium(II) 3.5-hydrate. *Acta Cryst. Sec. E.*, 62, 3362–3364.
- [13] Deng, Z.-P., Gao, S., Huo, L.-H., Zhao, H. (2006). Heptaaquabis(4-formylbenzoato-kappa O)barium(II). *Acta Cryst. Sec. E.*, 62, 3230–3232.
- [14] Deng, Z.-P., Gao, S., Huo, L.-H., Zhao, H. (2007). Diaquabis(4-formylbenzoato-kO)bis(1H-imidazole-kN(3))cobalt(II). *Acta Cryst. Sec. E.*, 63, 1116–1117.
- [15] Deng, Z.-P., Gao, S., Ng, S. W. (2006). Diaquabis(4-formylbenzoato-kappa O)bis(1H-imidazole-kappa N-3)manganese(II). *Acta Cryst. Sec. E.*, 62, 2106–2107.
- [16] Deng, Z.-P., Gao, S., Ng, S. W. (2006). Diaquabis(4-formylbenzoato-kappa O)bis(1H-imidazole-kappa N-3)nickel(II). *Acta Cryst. Sec. E.*, 62, 2422–2423.
- [17] Deng, Z.-P., Gao, S., Ng, S. W. (2007). Bis(4-formylbenzoato-kappa O)bis(1H-imidazole-kappa N-3)zinc(II). *Acta Cryst. Sec. E.*, 63, 3113.
- [18] Deng, Z.-P., Gao, S., Ng, S. W. (2006). Bis(mu-4-formylbenzoato)-kappa O-3,O': O';kappa 3O: O,O'-bis[(4-formylbenzoato-kappa 2O,O')(imidazole-kappa N)cadmium(II)] dihydrate. *Acta Cryst. Sec. E.*, 62, 3249–3250.
- [19] Deng, Z.-P., Gao, S., Weng Ng, S. (2007). Bis(benzimidazole-kappa N)bis(4-formylbenzoato-kappa O)zinc(II) monohydrate. *Acta Cryst. Sec. E.*, 63(6) 1712.
- [20] Deng, Z.-P., Gao, S., Ng, S. W. (2006). Aquabis(benzimidazole-kappa N)bis(4-formylbenzoato)-kappa O;kappa O-2,O'-cadmium(II) tetrahydrate. *Acta Cryst. Sec. E.*, 62, 3251–3253.

- [21] Deng, Z.-P., Gao, S., Huo, L.-H., Zhao, H. (2006). cis-Aqua-chloro-bis(1,10-phenanthroline- κ^2N,N')manganese(II) 4-formylbenzoate trihydrate. *Acta Crystallographica Section E*, 62(12), 3388–3389.
- [22] Deng, Z.-P., Gao, S., Huo, L.-H., Zhao, H. (2007). Aqua(4-formylbenzoato- κ O)(nitrate- κ O)(1,10-phenanthroline- κ N-2,N') copper(II). *Acta Cryst. Sec. E.*, 63, 2739.
- [23] Deng, Z.-P., Gao, S., Huo, L.-H., Zhao, H. (2006). Aquabis(4-formylbenzoato- κ O)(1,10-phenanthroline- κ N-2,N')zinc(II). *Acta Cryst. Sec. E.*, 62, 3527–3529.
- [24] Deng, Z.-P., Gao, S., Huo, L.-H., Zhao, H. (2007). Aquabis(4-formylbenzoato- κ O-2,O'; κ O-(1,10-phenanthroline- κ N-2,N'))cadmium(II). *Acta Cryst. Sec. E.*, 63, 2694.
- [25] Deng, Z.-P., Gao, S., Ng, S. W. (2006). Bis(4-formylbenzoato- κ O-2,O')(1,10-phenanthroline- κ N-2,N')cadmium(II)-bis(μ (2)-4-formylbenzoato- κ O-2 : O')bis[(4-formylbenzoato- κ O-2,O')(1,10-phenanthroline- κ N-2,N')cadmium(II)] (1/1). *Acta Cryst. Sec. E.*, 62, 3432–3434.
- [26] Deng, Z.-P., Gao, S., Huo, L.-H., Zhao, H. (2007). Di- μ -aqua-bis[aqua(2,2'-bipyridine- κ N-2,N')(4-formylbenzoato- κ O) cobalt(II)]bis(4-formylbenzoate). *Acta Cryst. Sec. E.*, 63, 3124.
- [27] Deng, Z.-P., Gao, S., Huo, L.-H., Zhao, H. (2007). Aqua(2,2'-bipyridine- κ N-2,N')bis(4-formylbenzoato- κ O-2,O')cadmium(II)monohydrate. *Acta Cryst. Sec. E.*, 63, 2799.

- [28] Deng, Z.-P., Gao, S., Huo, L.-H., Zhao, H. (2007). 2,2'-[m-Phenyl-enebis(methyl-eneimino)]dipyridinium dichloridobis(4-formyl-benzoato- κ 2O,O')cadmate(II) dihydrate. *Acta Cryst. Sec. E.*, 63(11), 2834–2834.
- [29] Deng, Z.-P., Gao, S., & Ng, S. W. (2007). Tetraaquabis(nicotinamide- κ N)cadmium(II) bis(4-formylbenzoate). *Acta Crystallographica Section E*, 63(9), 2323–2323.
- [30] Sertçelik, M., Çaylak Delibaş, N., Necefoğlu, H., Hökelek, T. (2012). Diaqua-bis-(4-formyl-benzoato- κ O1)bis-(nicotinamide- κ N1)cobalt(II). *Acta Cryst. Sec. E.*, 68(8), 1091–1092.
- [31] Sertçelik, M., Çaylak Delibaş, N., Necefoğlu, H., Hökelek, T. (2012). Diaqua-bis-(4-formyl-benzoato- κ O1)bis-(nicotinamide- κ N1)nickel(II). *Acta Cryst. Sec. E.*, 68(7), 946–947.
- [32] Sertçelik, M., Çaylak Delibaş, N., Necefoğlu, H., Hökelek, T. (2012). Diaqua-bis-(4-formyl-benzoato- κ O1)bis-(nicotinamide- κ N1)copper(II). *Acta Cryst. Sec. E.*, 68(7), 1010–1011.
- [33] Sertçelik, M., Çaylak Delibaş, N., Necefoğlu, H., Hökelek, T. (2012). Diaqua-bis-(4-formyl-benzoato- κ O1)bis-(nicotinamide- κ N1)zinc. *Acta Cryst. Sec. E.*, 68(8), 1127–1128.
- [34] Sertcelik, M., Tercan, B., Sahin, E., Necefoglu, H., Hokelek, T. (2009). Diaquabis(N,N-diethylnicotinamide-kappa N-1)bis(4-formylbenzoato-kappa O)cobalt(II). *Acta Cryst. Sec. E.*, 65, 389.
- [35] Sertcelik, M., Tercan, B., Sahin, E., Necefoglu, H., Hokelek, T. (2009). Diaquabis(N,N-diethylnicotinamide-kappa N-1)bis(4-formylbenzoato-kappa O)nickel(II). *Acta Cryst. Sec. E.*, 65, 326.

- [36] Sertcelik, M., Tercan, B., Sahin, E., Necefoglu, H., Hokelek, T. (2009). Diaquabis(N,N-diethylnicotinamide-kappa N-1)bis(4-formylbenzoato-kappa O-1)manganese(II). *Acta Cryst. Sec. E.*, 65, 324.
- [37] Sertçelik, M., Çaylak Delibaş, N., Necefoğlu, H., Hökelek, T. (2012). Diaqua-bis-(N,N-diethyl-nicotinamide-κN1)bis-(4-formyl-benzoato-κO1)zinc. *Acta Cryst. Sec. E.*, 68(8), 1067–1068.
- [38] Hökelek, T., Yılmaz, F., Tercan, B., Sertçelik, M., Necefolu, H. (2009). Tetraaquabis(isonicotinamide-N 1)cobalt(II) bis-(4- formylbenzoate) dihydrate. *Acta Cryst. Sec. E.*, 65(9), 1130–1131.
- [39] Hökelek, T., Yılmaz, F., Tercan, B., Gürgen, F., Necefolu, H. (2009). Tetraaquabis(isonicotinamide-κN1)nickel(II) bis-(4- formylbenzoate) dihydrate. *Acta Cryst. Sec. E.*, 65(9), 1101–1102.
- [40] Hokelek, T., Yılmaz, F., Tercan, B., Sertcelik, M., Necefoglu, H. (2009). catena-Poly[[[(4-formylbenzoato-kappa O-1)(isonicotinamide-kappa N-1)zinc(II)]-mu-4-formylbenzoato-kappa O-2(1):O-1 ']. *Acta Cryst. Sec. E.*, 65, 1399.
- [41] Hokelek, T., Yılmaz, F., Tercan, B., Gurgun, F., Necefoglu, H. (2009). Aquabis(4-formylbenzoato-kappa O-2(1),O-1 ')bis(isonicotinamide-kappa N-1)cadmium(II) monohydrate. *Acta Cryst. Sec. E.*, 65, 1416.
- [42] Sertçelik, M., Çaylak Delibaş, N., Necefoğlu, H., Hökelek, T. (2013). Bis(μ-4-formyl-benzoato-κ2O:O')bis-[(4-formyl-benzoato-κ2O,O')bis-(iso-nicotin-amide-κN1)copper(II)]. *Acta Cryst. Sec. E.*, 69(5), 290–291.
- [43] Wheatley, P. J. (1957). The crystal and molecular structure of pyrazine. *Acta Cryst.*, 10, 182-187.

- [44] Bordallo, H. N., Chapon, L., Manson, J. L., Ling, C. D., Qualls, J. S., Hall, D., Argyriou, D. N. (2003). Structural and magnetic behavior of a quasi-1D antiferromagnetic chain compound $\text{Cu}(\text{NCS})_2(\text{pyz})$. *Polyhedron*, 22(14), 2045–2049.
- [45] Choudhury, C. R., Dey, S. K., Sen, S., Bag, B., Mitra, S., Gramlich, V. (2002). A Pyrazine-Bridged Ni(II) Coordination Polymer. *Zeitschrift für Naturforschung B*, 57(11), 1191–1194.
- [46] Liu, C., Thuijs, A. E., Felts, A. C., Ballouk, H. F., Abboud, K. A. (2016). Crystal structure of catena-poly[[[(dimethyl sulfoxide- κO)(pyridine-2,6-di-carboxyl-ato- $\kappa\text{3O,N,O'}$)nickel(II)]- μ -pyrazine- $\kappa\text{2N:N'}$]. *Acta Cryst. Sec. E.*, 72(5), 768–771.
- [47] Liu, C., Felts, A. C., Thuijs, A. E., Useche, A., Abboud, K. A. (2016). Crystal structure of catena-poly[[[trans-bis(aceto-nitrile- κN)diaquacobalt(II)]- μ -pyrazine- $\kappa\text{2N:N'}$] dinitrate]. *Acta Cryst. Sec. E.*, 72(2), 151–154.
- [48] Begum, N., Ghosh, A. C., Kabir, S. E., Miah, Md. A., Hossain, G. M. G. (2005). Synthesis, structures and reactivity of triosmium clusters containing terminal pyrazines, bridging hydroxy and methoxycarbonyl ligands. *Polyhedron*, 24(18), 3074–3081.
- [49] Heine, J., Wehner, T., Bertermann, R., Steffen, A., Müller-Buschbaum, K. (2014). $2\infty[\text{Bi}_2\text{Cl}_6(\text{pyz})_4]$: a 2D-pyrazine coordination polymer as soft host lattice for the luminescence of the lanthanide ions Sm^{3+} , Eu^{3+} , Tb^{3+} , and Dy^{3+} . *Inorganic Chemistry*, 53(14), 7197–7203.
- [50] Ferreira, S. B., Kaiser, C. R. (2012). Pyrazine derivatives: a patent review (2008 – present). *Expert Opinion on Therapeutic Patents*, 22(9), 1033–1051.

- [51] Dolezal, M., Zitko, J. (2015). Pyrazine derivatives: a patent review (June 2012 – present). *Expert Opinion on Therapeutic Patents*, 25(1), 33–47.
- [52] Miniyar, P. B., Murumkar, P. R., Patil, P. S., Bothara, M. A. B. and K. G. (2013). Unequivocal Role of Pyrazine Ring in Medicinally Important Compounds: A Review. *Mini-Reviews in Medicinal Chemistry*, 13, 1607-1625.
- [53] Han, L.-J., Kong, Y.-J. (2014). Poly[(μ -penta-fluoro-benzoato- κ 2O:O')(penta-fluoro-benzoato- κ O)(μ -pyrazine- κ 2N:N')copper(II)]: a coordination polymer linked into a three-dimensional network by inter-molecular C—H \cdots F—C inter-actions. *Acta Cryst. Sect. C*. 70(11), 1017–1020.
- [54] Liu, C., Felts, A. C., Thuijs, A. E., Useche, A., & Abboud, K. A. (2016). Crystal structure of catena-poly[[[trans-bis(aceto-nitrile- κ N)diaquacobalt(II)]- μ -pyrazine- κ 2N:N'] dinitrate]. *Acta Cryst. Sec. E*, 72(2), 151–154.
- [55] Tercan, M.B., (2006) X-ışını kırınımı yöntemiyle kripta-fosfazen türevlerinin kristal yapı analizi, Doktora Tezi, Hacettepe Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Ankara.
- [56] Yıldız, S., Yılmaz, A., Can, Z. (2017). In Vitro Bioactive Properties of Some Wild Mushrooms Collected from Kastamonu Province. *Kastamonu Üniversitesi Orman Fakültesi Dergisi*, 17(3), 523–530.
- [57] Sertçelik, M., Özbek, F. E., Sugeçti, S., Necefoğlu, H. (2018). 4-Formilbenzoat'ın Co(II), Cu(II) ve Zn(II) ile İzonikotinamid Komplekslerinin Sentezi; Spektroskopik, Termik Özelliklerinin ve Antibakteriyel Etkinliklerinin İncelenmesi. *Synthesis Of Isonicotinamide Complexes Of 4-Formilbenzoate with Co (II), Cu (II) And Zn (II); Investigation of Spectroscopic, Thermal Properties and Antibacterial Activities.*, 8(4), 189–195.

- [58] Askin, G. S., Celik, F., Dilek, N., Necefoglu, H., Hokelek, T. (2015). Crystal structure of catena-poly[[diaquabis(4-formylbenzoato- κ O-1)cobalt(II)]- μ -pyrazine- κ N-2:N']. *Acta Cryst. Sec. E.*, 71, 339-341.
- [59] Çelik, F., Dilek, N., Çaylak Delibaş, N., Necefoglu, H., Hökelek, T. (2014). catena-Poly[[di-aqua-bis-(4-formyl-benzoato- κ O1)copper(II)]- μ -pyrazine- κ 2N:N']. *Acta Cryst. Sec. E.*, 70(1), 4–5.
- [60] Çelik, F., Dilek, N., Çaylak Delibaş, N., Necefoglu, H., Hökelek, T. (2014). catena-Poly[[di-aqua-bis-(4-formyl-benzo-ato- κ O1)nickel(II)]- μ -pyrazine- κ 2N:N']. *Acta Cryst. Sec. E.*, 70(2), 65–66.
- [61] Askin, G. S., Celik, F., Dilek, N., Necefoglu, H., Hokelek, T. (2015). Crystal structure of catena-poly[[aquabis(4-formylbenzoato)- κ O-2(1),O1']; κ O-1-zinc]- μ -pyrazine- κ N-2:N']. *Acta Cryst. Sec. E.*, 71, 402-405.
- [62] Çelik, F., Dilek, N., Çaylak Delibaş, N., Necefoglu, H., Hökelek, T. (2014). catena-Poly[[aqua-bis-(4-formyl-benzoato- κ 2O1,O1')cadmium]- μ -pyrazine- κ 2N:N']. *Acta Cryst. Sec. E.*, 70(2), 37–38.
- [63] McAfee, L. (2000). Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds. Part A: Theory and Applications in Inorganic Chemistry; Part B: Application in Coordination, Organometallic, and Bioinorganic Chemistry, 5th Edition (Nakamoto, Kazuo). *Journal of Chemical Education*, 77(9), 1122.
- [64] Bellamy, L. (1975). *The Infra-red Spectra of Complex Molecules*. Springer Netherlands.
- [65] Pavia, D. L., Lampman, G. M., Kriz, G. S. (2001). *Introduction to spectroscopy a guide for students of organic chemistry* (3rd ed.). Fort Worth Harcourt College Publishers.

- [66] Yıldırım, T., Köse, D. A., Avcı, E., Özer, D., Şahin, O. (2019). Novel mixed ligand complexes of acesulfame / nicotinamide with some transition metals. Synthesis, crystal structural characterization, and biological properties. *Journal of Molecular Structure*, 1176, 576–582.
- [67] Özbek, F. E., Sertçelik, M., Yüksek, M., Necefoğlu, H., Çelik, R. Ç., Nayir, G. Y., & Hökelek, T. (2017). Cu(II) and Ni(II) 4-cyanobenzoate complexes with nicotinamide: Synthesis, spectral, structural and optical characterization and thermal behavior. *Journal of Molecular Structure*, 1150, 112–117.
- [68] Al-Majidi, S. M. H. (2014). Synthesis of some new 4-oxo-thiazolidines, tetrazole and triazole derived from 2-SH-benzothiazole and antimicrobial screening of some synthesized. *Journal of Saudi Chemical Society*, 18(6), 893–901.

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Fatih ÇELİK

Doğum Yeri : Erzurum

Doğum Tarihi : 20.09.1980

Medeni Hali : Evli

Yabancı Dili : İngilizce

Eğitim Durumu (Kurum ve Yıl)

Lise : Erzurum Lisesi 1996-1999

Lisans : Atatürk Üniversitesi Fen Fakültesi Kimya Bölümü 2000-2004

Yüksek Lisans: Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalı
Anorganik Kimya Bilim Dalı 2014-Devam

Yayımları (SCI ve diğer)

1. Çelik, F., Dilek, N., Çaylak Delibaş, N., Necefoğlu, H., Hökelek, T., “Catena-Poly[[diaquabis(4-formylbenzoato- κO^1)nickel(II)]- μ -pyrazine- $\kappa^2 N:N'$ ”], Acta Crys. Sec. E:70(2), 65-66, 2014.
2. Çelik, F., Dilek, N., Çaylak Delibaş, N., Necefoğlu, H., Hökelek, T., “Catena-Poly[[aquaabis(4-formylbenzoato- $\kappa^2 O^1, O^1'$)cadmium]- μ -pyrazine- $\kappa^2 N:N'$ ”], Acta Crys. Sec. E:70(2), 37-38, 2014.
3. Çelik, F., Dilek, N., Çaylak Delibaş, N., Necefoğlu, H., Hökelek, T., “Catena-Poly[[diaquabis(4-formylbenzoato- κO^1)copper(II)]- μ -pyrazine- $\kappa^2 N:N'$ ”], Acta Crys. Sec. E:70(2), 4-5, 2014.
4. Aşkin, G.S., Çelik, F., Dilek, N., Necefoğlu, H., Hökelek, T., Weil M., “Crystal structure of catena-poly[[aquaabis(4-formyl-benzoato)- $\kappa^2 O^1, O^1'$; κO^1 -zinc]- μ -pyrazine- $\kappa^2 N:N'$ ”], Acta Crys. Sec. E:71(4), 339-341, 2015.