

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

**Co(II), Ni(II) VE Cu(II) METALLERİNİN 2-İYODOBENZOAT VE  
NİKOTİNAMİD, 2-İYODOBENZOAT LİGANDLARI İÇEREN  
KOMPLEKSLERİNİN SENTEZİ, YAPISAL, SPEKTROSKOPİK VE  
TERMAL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**Ömür AYDIN**

**DANIŞMAN**

**Dr. Öğr. Üyesi Mustafa SERTÇELİK**

**TEMMUZ 2019**

**KARS**



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



**Co(II), Ni(II) VE Cu(II) METALLERİNİN 2-İYODOBENZOAT VE  
NİKOTİNAMİD, 2-İYODOBENZOAT LİGANDLARI İÇEREN  
KOMPLEKSLERİNİN SENTEZİ, YAPISAL, SPEKTROSKOPİK VE  
TERMAL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**Ömür AYDIN**

**DANIŞMAN**

**Dr. Öğr. Üyesi Mustafa SERTÇELİK**

**TEMMUZ 2019**

**KARS**

T.C. Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalı Yüksek Lisans Öğrencisi Ömür AYDIN'ın Dr. Öğr. Üyesi Mustafa SERTÇELİK'in danışmanlığında yüksek lisans tezi olarak hazırladığı "Co(II), Ni(II) VE Cu(II) Metallerinin 2-İyodobenzoat Ve Nikotinamid, 2-İyodobenzoat Ligandları İçeren Komplekslerinin Sentezi, Yapısal, Spektroskopik Ve Termal Özelliklerinin İncelenmesi" adlı bu çalışma yapılan tez savunması sınavı sonunda jüri tarafından Lisansüstü Eğitim Öğretim Yönetmeliği uyarınca değerlendirilerek oy birliği ile kabul edilmiştir.

02/07/2019



Adı-Soyadı

İmza

Başkan : Prof Dr. Hacı NECEFOĞLU  
Üye : Doç. Dr. Ceyran AHMEDOVA  
Üye : Dr. Öğr. Üyesi Mustafa SERTÇELİK

Bu tezin kabulü, Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun ...../...../20.. gün ve ...../..... sayılı kararıyla onaylanmıştır.

Prof. Dr. Fikret AKDENİZ

Enstitü Müdürü

## ETİK BEYAN

Hazırlamış olduğum yüksek lisans tezini enstitümüz tez yazım kurallarına uygun olarak hazırladığımı;

- Tez içinde bulunan literatürleri akademik ve etik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- Tez çalışmasında eserlerinden faydalandığım tüm çalışmalara atıfta bulunduğumu ve kaynakçada belirttiğimi,
- Tez içerisinde kullanılan bilgilerde herhangi bir değişiklik yapmadığımı,
- Bu tezde sunmuş olduğum çalışmanın özgünlüğünü bildirir, aksi bir durumda aleyhime doğabilecek tüm hak kayıplarını kabullendiğimi beyan ederim.



**Ömür AYDIN**

**02.07.2019**

# ÖZET

(Yüksek Lisans Tezi)

Co(II), Ni(II) VE Cu(II) Metallerinin 2-İyodobenzoat ve Nikotinamid, 2-İyodobenzoat Ligandları İçeren Komplekslerinin Sentezi, Yapısal, Spektroskopik ve Termal Özelliklerinin İncelenmesi

Ömür AYDIN

Kafkas Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Kimya Anabilim Dalı

**Danışmanı: Dr. Öğrt. Üyesi Mustafa SERTÇELİK**

Bu çalışmada altı adet kompleks ilk defa sentezlenmiştir ve metal olarak Co(II), Ni(II) ve Cu(II) kullanılmıştır. Komplekslerin 3 tanesi sadece metal, 2-iyodobenzoat ve su moleküllerinden oluşurken diğer 3 adet kompleks ise metal, 2-iyodobenzoat, nikotinamid ve koordine olmuş su moleküllerinden oluşmaktadır. Bu kompleksler:

|  |     |         |
|--|-----|---------|
| $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]_n$   | (1) | 1:2:2   |
| $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]_n$   | (2) | 1:2:2   |
| $[\text{Cu}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_4(\text{H}_2\text{O})_2]$   | (3) | 2:4:2   |
| $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ | (4) | 1:2:2:2 |
| $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ | (5) | 1:2:2:2 |
| $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ | (6) | 1:2:2:2 |

Sentezlenen dört kompleksin moleköl yapıları tek kristal ve kristal X-ışını kırınımı (X-Ray) tekniđi ile aydınlatılmıştır.

Sentezlenen komplekslerin termal özellikleri, TG-DTG-DTA termik analiz metodu kullanılarak 20-900 °C sıcaklık aralığında azot atmosferinde incelenmiştir.

Parçalanma sonucunda parçalanma ürünü olarak komplekslerde; CoO, NiO ve CuO oluştuđu gözlemlenmiştir.

**Anahtar Kelimeler:** 2-iyodobenzoat, Nikotinamid, Kristal Yapı

**2019, 86 Sayfa**

## ABSTRACT

(M. Sc. Thesis)

Synthesis, Structural, Spectroscopic and Thermal Properties of Co (II), Ni (II) and Cu  
(II) Metals Complexes with 2-Iodobenzoate and Nicotinamide, 2-Iodobenzoate  
Ligandes

**Ömür AYDIN**

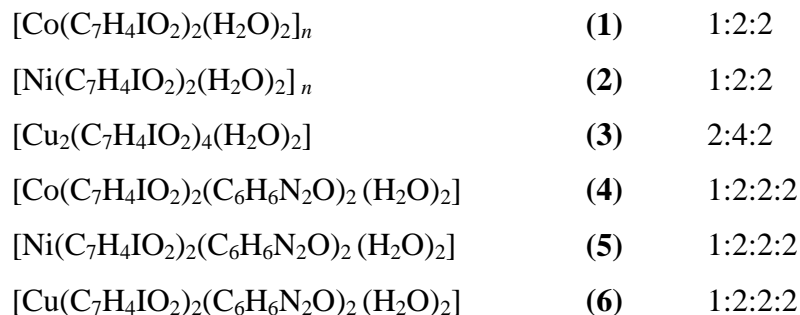
Kafkas University

Graduate School of Applied and Natural Sciences

Department of Chemistry

**Supervisor: Dr. Öğrt. Üyesi Mustafa SERTÇELİK**

In this study six complexes were first synthesized and Co (II), Ni (II) and Cu (II) were used as metal. Three of the complexes consist of only metals 2-iodobenzoate and coordinated water molecular while the other three complexes consist of metals, 2-iodobenzoate, nicotinamide and coordinated water molecular. These complexes:



The molecular and crystal structures of the four synthesized complexes were clarified by single crystal X-Ray diffraction technique.

The thermal properties of the synthesized complexes were investigated by using the TG-DTG-DTA thermal analysis methods under nitrogen atmosphere at a temperature range of (20-900 °C).

After the fragmentation process, it was observed that CoO, NiO and CuO were formed as fragmentation products in the complexes.

**Key Words:** 2-iodobenzoate, Nicotinamide, Crystal Structure

**2019, 86 Pages**





## ÖN SÖZ

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

Yüksek lisans tezimin her aşamasında yardımlarını esirgemeyen, çalışmaların her aşamasında yol gösteren danışmanım Sayın Dr. Öğr. Üyesi Mustafa SERTÇELİK'e

Kafkas Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü'nde yüksek lisans tezimin araştırmalarını yapabilmem için gerekli imkanları sağlayan Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü Anorganik Kimya Anabilim Dalı Başkanı Sayın Prof. Dr. Hacı H. NECEFOĞLU'na

Komplekslerin yapılarının aydınlatılmasında bize destek olan Sayın Prof. Dr. Tuncer HÖKELEK'e

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

**Ömür AYDIN**

## İÇİNDEKİLER

Sayfa

|  |      |
|--|------|
| ETİK BEYAN.....  | iii  |
| ÖZET.....  | iv   |
| ABSTRACT .....   | vi   |
| ÖN SÖZ.....  | viii |
| İÇİNDEKİLER .....  | ix   |
| ŞEKİLLER DİZİNİ .....  | xi   |
| TABLolar DİZİNİ .....  | xiii |
| SEMBOLLER VE KISALTMALAR DİZİNİ .....  | xiv  |
| 1. GENEL BİLGİLER.....   | 1    |
| 1.1. Giriş .....   | 1    |
| 1.2. Literatür Özeti.....  | 1    |
| 1.2.1. İyodobenzoik Asit .....   | 1    |
| 1.2.2. Nikotinamid'in Metal Kompleksleri .....   | 13   |
| 2. MATERYAL VE YÖNTEM.....   | 42   |
| 2.1. Materyal.....   | 42   |
| 2.1.1. Kullanılan Kimyasal Maddeler.....   | 42   |
| 2.1.2. Kullanılan Aletler .....  | 42   |
| 2.2. Sentez.....   | 42   |
| 2.2.1. Katena-Poli[[aqua(2-iyodobenzoat-κO)-kobalt(II)]-μ-aqua-μ-2-iyodobenzoat-κ <sup>2</sup> O:O'] (1) ..... | 42   |
| 2.2.2. Katena-Poli[[aqua(2-iyodobenzoat-κO)-nikel(II)]-μ-aqua-μ-2-iyodobenzoat-κ <sup>2</sup> O:O'] (2) .....  | 42   |

|  |           |
|--|-----------|
| 2.2.3. Tetrakis( $\mu$ -2-iyodobenzoat- $\kappa^2$ O:O')bis-[aquabakır(II)] (3).....   | 43        |
| 2.2.4. Diaquabis(2-iyodobenzoat- $\kappa$ O)bis-(nikotinamid- $\kappa$ N <sup>1</sup> )kobalt(II) (4).....   | 43        |
| 2.2.5. Diaquabis(2-iyodobenzoat- $\kappa$ O)bis-(nikotinamid- $\kappa$ N <sup>1</sup> )nikel(II) (5) .....   | 43        |
| 2.2.6. Diaquabis(2-iyodobenzoat- $\kappa$ O)bis-(nikotinamid- $\kappa$ N <sup>1</sup> )bakır(II) (6) .....   | 44        |
| <b>3. BULGULAR .....</b>   | <b>45</b> |
| <b>3.1. Katena-Poli[[aqua(2-iyodobenzoat-<math>\kappa</math>O)-kobalt(II)]-<math>\mu</math>-aqua-<math>\mu</math>-2-iyodobenzoat-<math>\kappa^2</math>O:O'] (1) Kompleksinin X Işınları Analizi.....</b> | <b>45</b> |
| <b>3.2. Tetrakis(<math>\mu</math>-2-iyodobenzoat-<math>\kappa^2</math>O:O')bis-[aquabakır(II)] (3) Kompleksinin X Işınları Analizi .....</b>   | <b>45</b> |
| <b>3.3. Diaquabis(2-iyodobenzoat-<math>\kappa</math>O)bis-(nikotinamid-<math>\kappa</math>N<sup>1</sup>)kobalt(II) (4) Kompleksinin X Işınları Analizi .....</b>   | <b>46</b> |
| <b>3.4. Diaquabis(2-iyodobenzoat-<math>\kappa</math>O)bis-(nikotinamid-<math>\kappa</math>N<sup>1</sup>)bakır(II) (6) Kompleksinin X Işınları Analizi .....</b>  | <b>47</b> |
| <b>4. TARTIŞMA VE SONUÇ.....</b>   | <b>49</b> |
| <b>5. KAYNAKLAR .....</b>  | <b>57</b> |
| <b>6. EKLER.....</b>   | <b>64</b> |
| <b>ÖZGEÇMİŞ.....</b>   | <b>85</b> |

## ŞEKİLLER DİZİNİ

### Sayfa

|  |    |
|--|----|
| Şekil 1. $[\text{Mn}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{O}_2\text{I})_2(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)_4]_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ Kompleksinin molekül yapısı .....  | 3  |
| Şekil 2. (a) Karmaşık katyonun zig-zag molekül yapısı, (b) Su moleküllerinin oluşturduğu 2D tabaka .....   | 4  |
| Şekil 3. $[\text{Cu}_2(2\text{-IBA})_4(\text{caf})_2]$ Kompleksinin molekül yapısı .....   | 5  |
| Şekil 4. $[\text{Pr}(2\text{-IBA})_3 \cdot 2,2'\text{-bipy}]_2 [\text{Pr}(2\text{-IBA})_3 \cdot 2,2'\text{-bipy}]_2 \cdot 0.5\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} \cdot \text{H}_2\text{O}$ Kompleksinin molekül yapısı ..... | 6  |
| Şekil 5. $[\text{Pr}(2\text{-IBA})_3 \cdot \text{phen}]_2$ Kompleksinin molekül yapısı .....   | 7  |
| Şekil 6. $[\text{Eu}(2\text{-IBA})_3 \cdot \text{H}_2\text{O}]_n$ Kompleksinin molekül yapısı .....  | 8  |
| Şekil 7. $[\text{Eu}(2\text{-IBA})_3 \cdot 2,2'\text{-bpy}]_2$ Kompleksinin molekül yapısı .....   | 9  |
| Şekil 8. $[\text{Eu}(2\text{-IBA})_3 \cdot \text{phen}]_2$ Kompleksinin molekül yapısı .....   | 10 |
| Şekil 9. $[\text{Tb}(2\text{-IBA})_3(\text{H}_2\text{O})_2]_n$ Kompleksinin molekül yapısı .....   | 11 |
| Şekil 10. $[\text{Tb}(2\text{-IBA})_3 \cdot 2,2'\text{-bipy}]_2$ Kompleksinin molekül yapısı .....   | 12 |
| Şekil 11. $[\text{Tb}(2\text{-IBA})_3 \cdot 2,2'\text{-bipy}]_2 \cdot \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ Kompleksinin molekül yapısı .....   | 13 |
| Şekil 12. $[\text{Mn}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin molekül yapısı .....   | 14 |
| Şekil 13. $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin molekül yapısı .....   | 15 |
| Şekil 14. $[\text{Zn}(\text{C}_9\text{H}_9\text{O}_2)_2(\text{NA})_2]$ Kompleksinin molekül yapısı .....   | 16 |
| Şekil 15. $[\text{Pb}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{NA})]_n$ Kompleksinin molekül yapısı .....   | 17 |
| Şekil 16. $\{[\text{Pb}(\text{C}_9\text{H}_9\text{O}_2)_2(\text{NA})] \cdot \text{H}_2\text{O}\}_n$ Kompleksinin molekül yapısı .....  | 18 |
| Şekil 17. $[\text{Mn}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_4(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin molekül yapısı .....   | 19 |
| Şekil 18. $[\text{Co}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_3)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ Kompleksinin molekül yapısı .....   | 20 |
| Şekil 19. $[\text{Co}(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2$ Kompleksinin molekül yapısı .....  | 21 |
| Şekil 20. $[\text{Co}(\text{C}_8\text{H}_8\text{NO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin molekül yapısı.....   | 22 |
| Şekil 21. $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_8\text{NO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin molekül yapısı .....  | 23 |
| Şekil 22. $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin molekül yapısı .....   | 24 |
| Şekil 23. $[\text{Ni}(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2$ Kompleksinin molekül yapısı .....  | 25 |
| Şekil 24. $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin molekül yapısı .....   | 26 |
| Şekil 25. $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin molekül yapısı .....  | 27 |
| Şekil 26. $[\text{Cu}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_3)_4(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin molekül yapısı .....   | 28 |
| Şekil 27. $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})] \cdot 0.5\text{NA} \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ Kompleksinin molekül yapısı ...   | 29 |
| Şekil 28. $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin molekül yapısı .....   | 30 |

|  |    |
|--|----|
| Şekil 29. $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{C}_7\text{H}_5\text{FO}_2)(\text{NA})_2]$ Kompleksinin molekül yapısı .....   | 31 |
| Şekil 30. $[\text{Zn}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{NA})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ Kompleksinin molekül yapısı . .....   | 32 |
| Şekil 31. $[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_8\text{NO}_2)_2(\text{NA})_2]$ Kompleksinin molekül yapısı .....  | 33 |
| Şekil 32. $[\text{Zn}(\text{C}_9\text{H}_9\text{O}_2)_2(\text{NA})_2]$ Kompleksinin molekül yapısı .....   | 34 |
| Şekil 33. $[\text{Zn}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin molekül yapısı .....   | 35 |
| Şekil 34. $[\text{Zn}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_4(\text{NA})_2] \cdot \text{C}_7\text{H}_5\text{FO}_2$ Kompleksinin molekül yapısı .....  | 36 |
| Şekil 35. $[\text{Zn}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot [\text{Zn}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{NA})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ Kompleksinin molekül yapıları . ..... | 37 |
| Şekil 36. $[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_3)_2(\text{NA})_2]$ Kompleksinin molekül yapısı .....   | 38 |
| Şekil 37. $[\text{Zn}(\text{C}_9\text{H}_{10}\text{NO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ Kompleksinin molekül yapısı . .....   | 39 |
| Şekil 38. $[\text{Cd}_2(\text{C}_9\text{H}_{10}\text{NO}_2)_4(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin molekül yapısı .....   | 40 |
| Şekil 39. $[\text{Cd}_2(\text{C}_8\text{H}_8\text{NO}_2)_4(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin molekül yapısı . .....  | 41 |
| Şekil 40. $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]_n$ kompleksinin moleküler yapısı .....   | 52 |
| Şekil 41. $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]_n$ kompleksinin polimerik yapısı .....   | 52 |
| Şekil 42. $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]_n$ kompleksinin tahmini kimyasal diyagramı .....   | 53 |
| Şekil 43. $[\text{Cu}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_4(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin moleküler yapısı .....   | 54 |
| Şekil 44. $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin moleküler yapısı .....  | 55 |
| Şekil 45. $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin tahmini kimyasal diyagramı .....  | 55 |
| Şekil 46. $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin moleküler yapısı .....  | 56 |

## TABLULAR DİZİNİ

|   | <b>Sayfa</b> |
|---|--------------|
| Tablo 1. (1) kompleksinin kristal parametreleri.....    | 45           |
| Tablo 2. (3) kompleksinin kristal parametreleri.....    | 45           |
| Tablo 3. (4) kompleksinin kristal parametreleri.....    | 46           |
| Tablo 4. (6) kompleksinin kristal parametreleri.....    | 47           |
| Tablo 5. Komplekslerinin elementel analiz verileri..... | 47           |
| Tablo 6. Komplekslerin FT-IR spektrum verileri .....    | 48           |



## SEMBOLLER VE KISALTMALAR DİZİNİ

|  |  |
|--|--|
| <b>a, b, c, <math>\alpha</math>, <math>\beta</math>, <math>\gamma</math></b> | : Birim Hücre Parametreleri                                      |
| <b>h, k, l</b>   | : Miller İndisleri   |
| <b>D<sub>x</sub></b>   | : Kristalin X-ışını yoğunluğu                                    |
| <b>Å</b>   | : Angström   |
| <b>°</b>   | : Derece   |
| <b>K</b>   | : Kelvin   |
| <b>°C</b>  | : Santigrad Derece   |
| <b>K</b>   | : Skala Faktörü  |
| <b>MoK<sub><math>\alpha</math></sub></b>                                     | : Molibden K-alfa ( .7 6 Å)                                      |
| <b>l</b>   | : Dalga Boyu   |
| <b>q</b>   | : (Bragg) Gelme ve Yansıma Açısı                                 |
| <b>V</b>   | : Birim Hücre Hacmi  |
| <b>Mr</b>  | : Bileşiğin Formül Ağırlığı                                      |
| <b>Z</b>   | : Birim Hücredeki Asimetrik Birim (molekül) Sayısı               |
| <b>T<sub>mak</sub>*</b>  | : Maksimum Geçirgenlik   |
| <b>T<sub>min</sub>*</b>  | : Minimum Geçirgenlik  |
| <b>q<sub>mak</sub>*</b>  | : Maksimum (Bragg) Yansıma Açısı                                 |
| <b>Rint</b>  | : Toplanan Verilerin Kalitesini Gösteren İstatistiksel Bir İndis |
| <b>2-İBA</b>   | : 2-İyodobenzoik Asit  |
| <b>NA</b>  | : Nikotinamid  |
| <b>Me</b>  | : Metal  |
| <b>DTA</b>   | : Diferansiyel Termik Analiz                                     |
| <b>TGA</b>   | : Termogravimetrik Analiz  |
| <b>cm</b>  | : Santimetre   |
| <b>m</b>   | : Metre  |

## 1. GENEL BİLGİLER

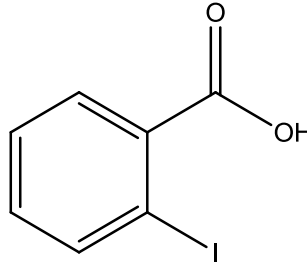
### 1.1. Giriş

Koordinasyon bileşikleri olarak bilinen metal atomuna bağlı karboksilik asit ve ligantlardan oluşan bileşikler ziraat, biyoloji ve tıp gibi alanlarda kullanılabilirler [1–3]. Son yıllarda koordinasyon bileşiklerinin anti-mikrobiyal, anti-tümöral, anti-viral, anti-inflamatuar, anti-hiperlipidemik, anti-diyabetik, di-üretik ve anti-koagulan gibi biyolojik aktiviteleri nedeniyle, çok geniş kapsamlı araştırmaları yapılmaktadır [4–11].

Bu çalışmada toplam olarak altı adet yeni kompleks sentezlenmiştir. Sentezlenen komplekslerin üç tanesi metal + karboksilik asitten oluşurken, diğer üç tanesi metal + karboksilik asit + nikotinamid (NA)'ten oluşmaktadır. Metal olarak iki değerlikli geçiş metalleri; Co(II), Ni(II) ve Cu(II)), karboksilik asit olarak; 2-iyodobenzoik asit ve ligant olarak; NA kullanılmıştır. Sentezlenen komplekslerin yapıları FT-IR spektroskopisi, elemental analiz, TG/DTA ve tek kristal X-ışını diffraksiyonu yöntemleri kullanılarak aydınlatılmıştır.

### 1.2. Literatür Özeti

#### 1.2.1. İyodobenzoik Asit



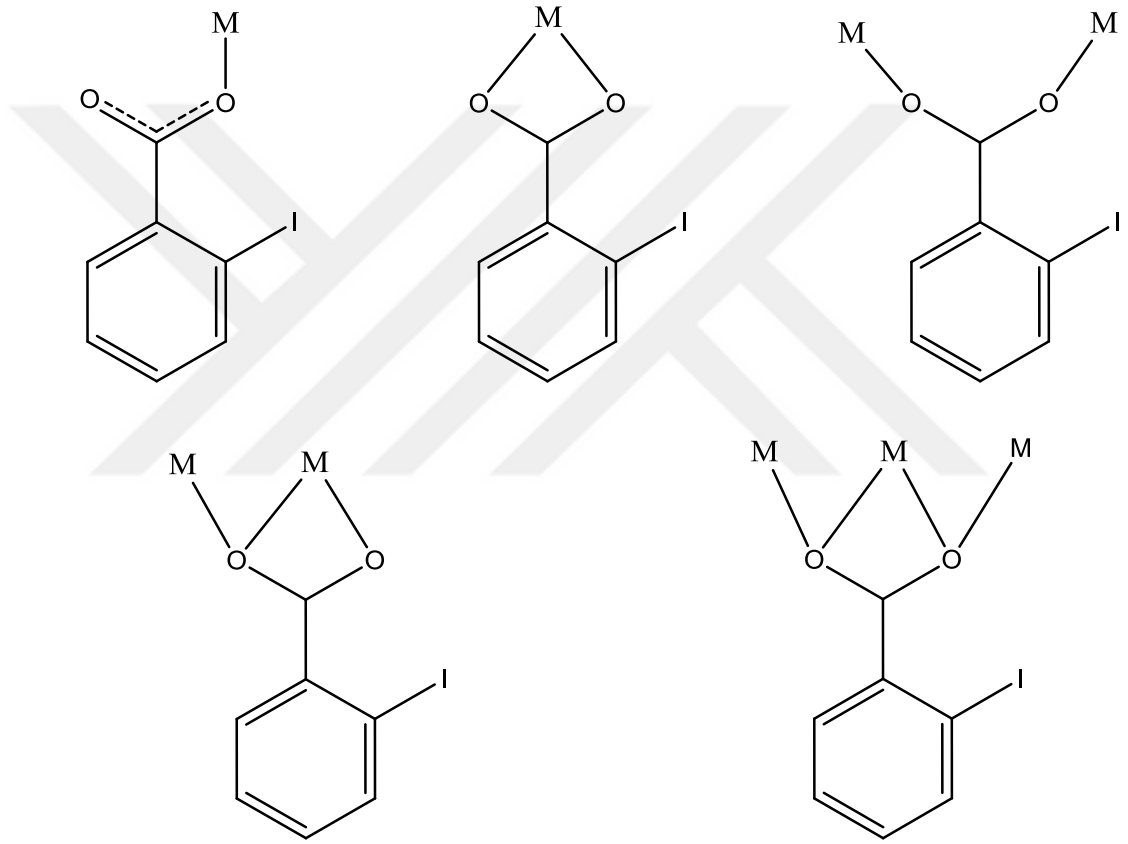
2-iyodobenzoik asit ya da o-iyodobenzoik asitin kapalı formülü;  $C_7H_5IO_2$ , molekül ağırlığı ise 248.018 g/mol'dür. Beyaz kristal görünümündeki katı maddenin erime noktası 162 °C'dir.

2-iyodobenzoik asidin fiziksel ve biyolojik özellikleri bilinmektedir [12,13]. 2-iyodobenzoik asit mikroorganizmaların büyümesini, koruyucu amaçla ticari olarak kullanılan sodyum benzoat'tan daha iyi inhibe eder. O-iyodobenzoatların, bakteri oluşumunu sodyum benzoat'tan çok daha iyi inhibe ettiği ve her ikisinin de mayaları



benzer seviyelere inhibe ettiği bilinmektedir. Sodyum o-iyodobenzoat'ın özellikle E. coli'yi, B. subtilis'i, H. anomala ve S. cerevisiae'ya karşı çok yüksek derecede etkili olduğu bilinmektedir [13].

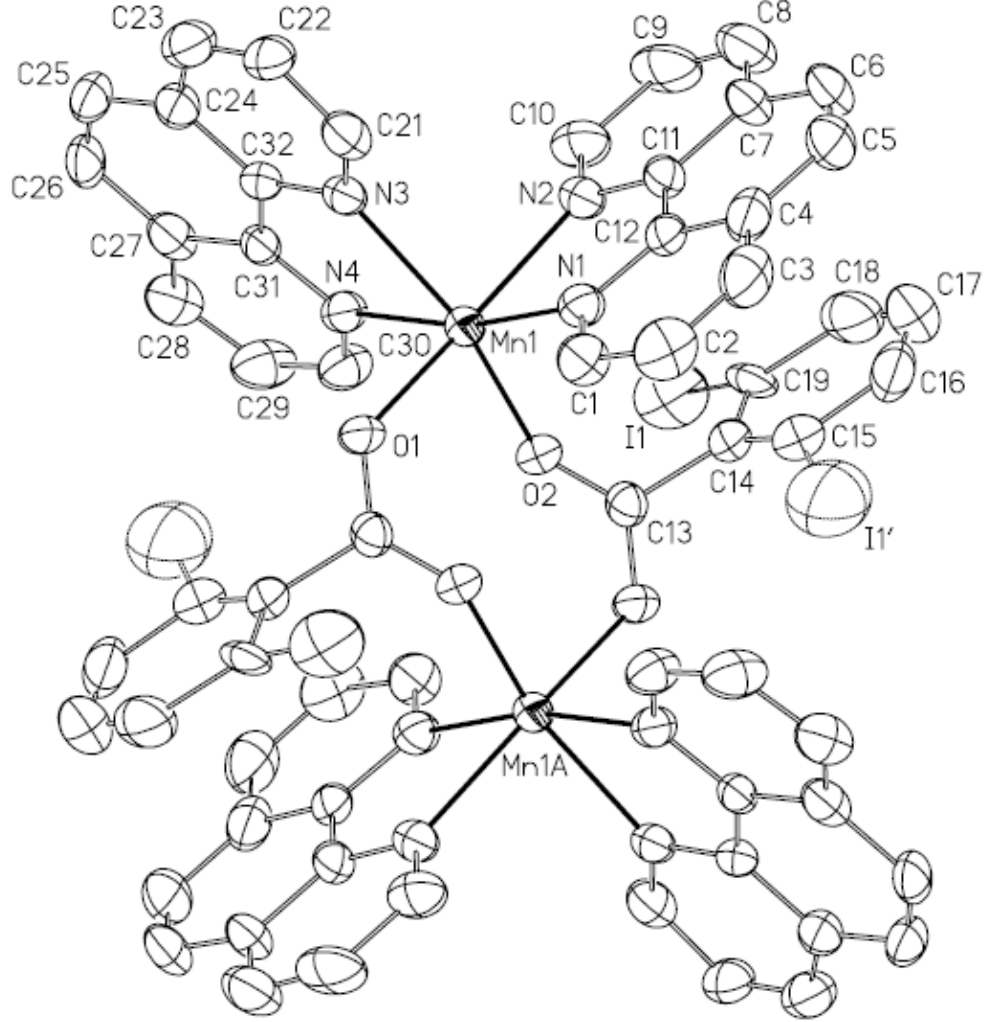
2-İyodobenzoik asit korboksilat oksijen atomu üzerinden tek dişli, şelat, köprü, tridentat ve nadiren tetradentat oluşturacak şekilde metal atomlarıyla koordinasyona girmektedir [12].



Literatürde 2-iyodobenzoik asit kullanılarak sentezlenen ve yapıları aydınlatılan kompleksler:

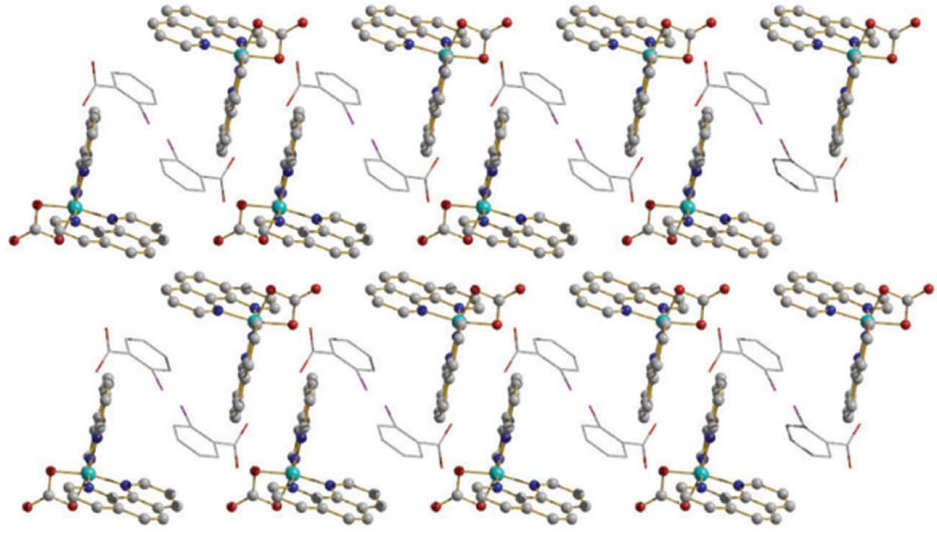
Çift çekirdekli komplekste Mn(II) atomları arasında iki 2-florobenzoat anyonu köprü oluştururken, iki 1,10-fenantrolin ligandından gelen dört N atomu Mn atomuna şelat oluşturmuş ve bozunmuş oktahedral geometri oluşmuştur. Kompleks koordine olmamış iki su molekülüne sahiptir. Komplekste Mn-N bağları [2.225(6) -2.289(5) Å]

aralığında deęişirken, Mn-O baęları 2.140(5)Å ve 2.143(5) Å olup, Mn1...Mn1<sup>i</sup> mesafesi ise 4.860(1) Å'dur (Şekil-1) [14].

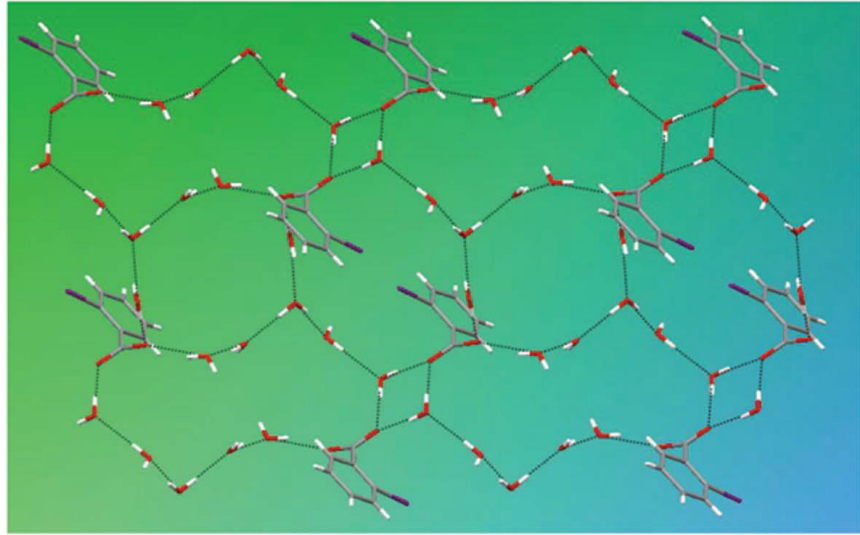


Şekil 1.  $[\text{Mn}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{O}_2\text{I})_2(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  Kompleksinin moleköl yapısı [14].

$\text{C}_{32}\text{H}_{34}\text{ICoN}_4\text{O}_{12}$  kapalı formölüne sahip kompleks triklinik sistemde kristallenmiştir. Komplekste iki bidentat 1,10-fenantrolin ve bir bidentat karbonat ligandı, Co(III) atomuna baęlanarak Co(III) etrefinde çarpık bir oktahedral geometri oluşturmuştur. Asimetrik birimde bir tane  $[\text{Co}(\text{phen})_2\text{CO}_3]^+$ , bir 2-iyodobenzoat anyonu ve yedi tane moleköl su vardır. Karbonat oksijen atomları C-H...O hidrojen baęları ile baęlanmışlardır (Şekil 2.) [15].



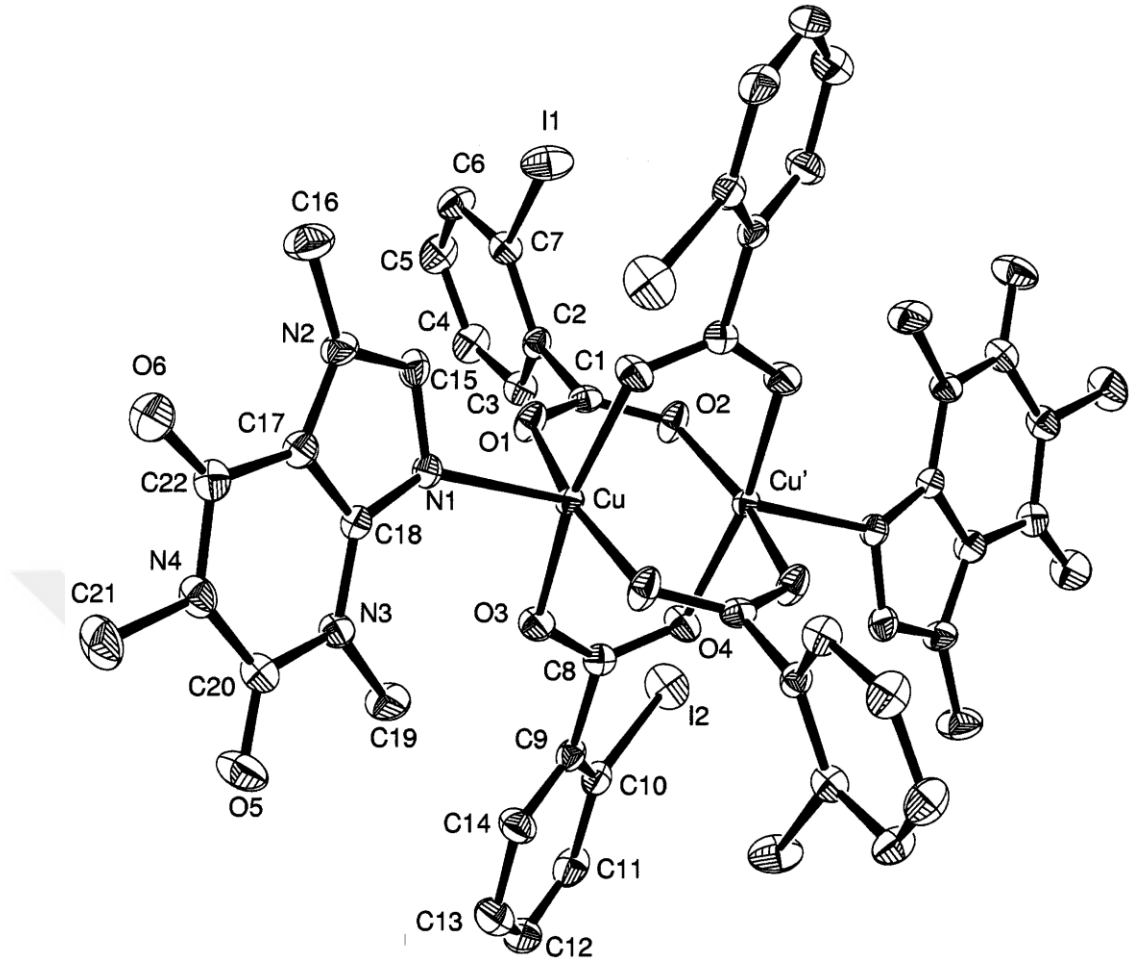
(a)



(b)

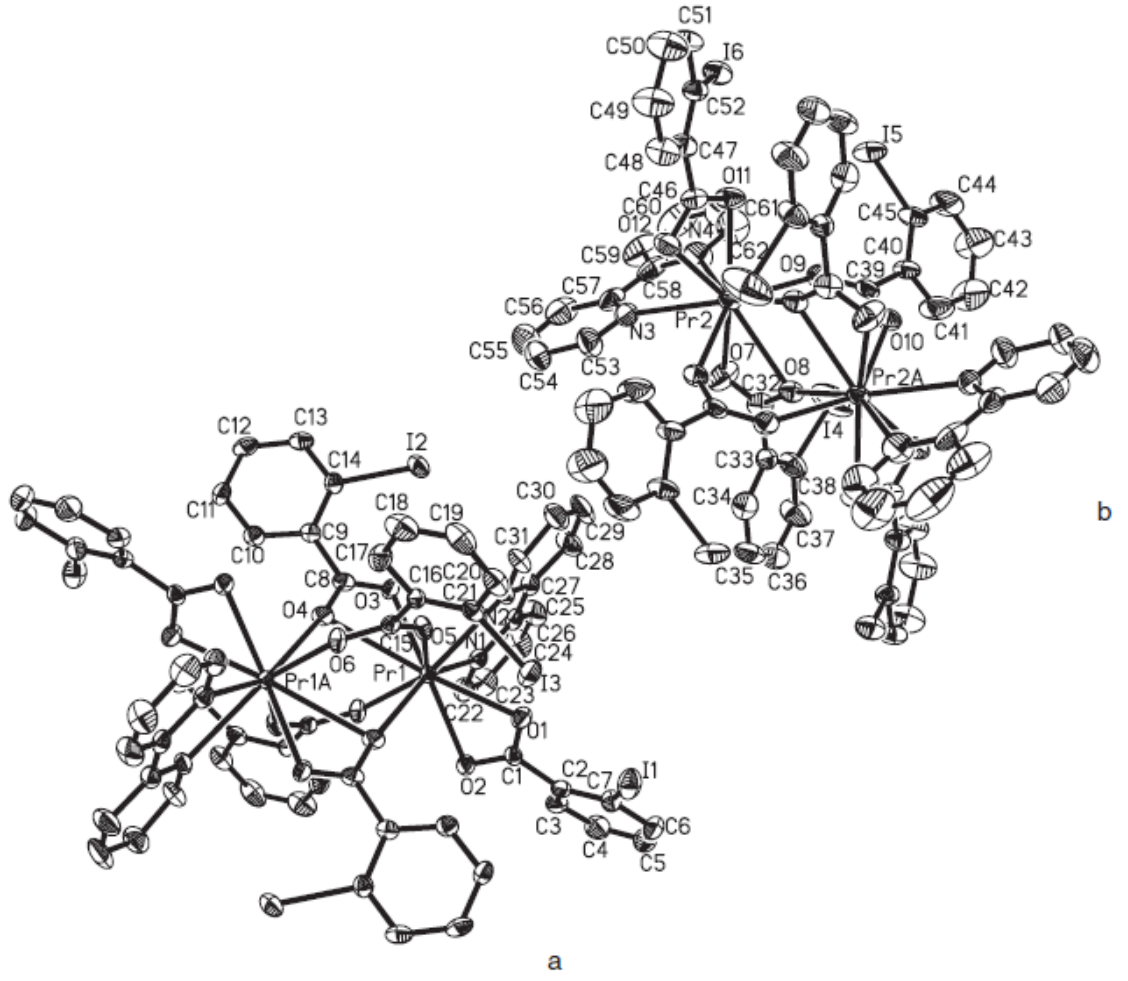
**Şekil 2.** (a) Karmaşık katyonun zig-zag molekül yapısı, (b) Su moleküllerinin oluşturduğu 2D tabaka [15]

[Cu<sub>2</sub>(2-İBA)<sub>4</sub>(caf)<sub>2</sub>] kompleksi monoklinik sistemde kristallenmiştir. Çift çekirdekli komplekste Cu atomları arasında 2-iyodobenzoat anyonunun karboksil grubu oksijen atomları köprü görevi görmektedirler. Her bir bakır atomu dört oksijen atomu tarafından koordine edilir. Kafein molekülünden gelen N atomu ile koordinasyon tamamlanmaktadır (Şekil 3) [16].



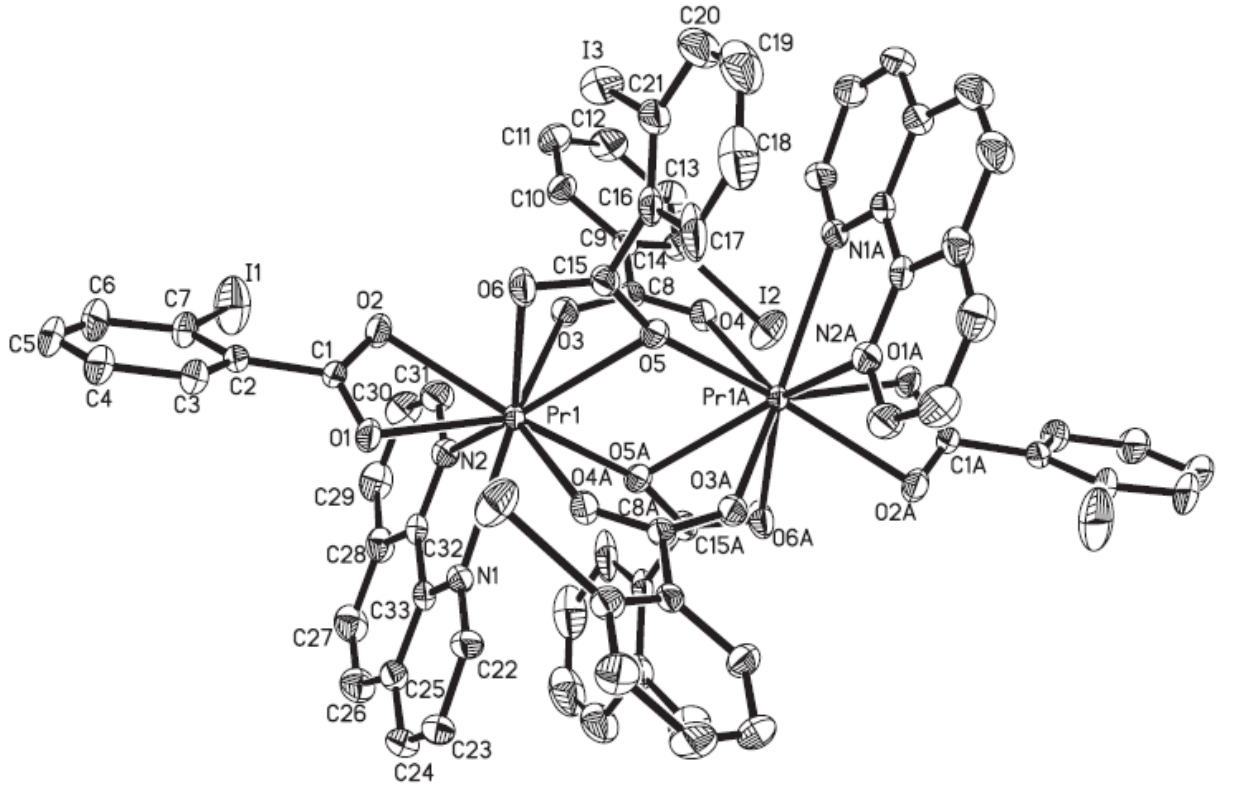
**Şekil 3.**  $[\text{Cu}_2(2\text{-IBA})_4(\text{caf})_2]$  Kompleksinin molekül yapısı [16]

$\{[\text{Pr}(2\text{-IBA})_3\cdot 2,2'\text{-bipy}]_2[\text{Pr}(2\text{-IBA})_3\cdot 2,2'\text{-bipy}]_2\cdot 0.5\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}\cdot \text{H}_2\text{O}\}$  isimli çift çekirdekli kompleks  $\{[\text{Pr}(2\text{-IBA})_3\cdot 2,2'\text{-bipy}]_2$  (a) ve  $[\text{Pr}(2\text{-IBA})_3\cdot 2,2'\text{-bipy}]_2\cdot 0.5\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}\cdot \text{H}_2\text{O}$  (b)'den oluşmaktadır. (a)'da, iki  $\text{Pr}^{+3}$  iyonu, sentrosimetrik bir dimer oluşturmak üzere dört köprülü 2-IBA grubu ile birbirine bağlanır. Her bir merkezi  $\text{Pr}^{+3}$  iyonu ayrıca bir 2-IBA grubu ve bir 2,2'-bipy molekülü ile şelatlanır. Kompleksin koordinasyon sayısı dokuzdur (beş 2-IBA ligandından yedi oksijen atomu ve bir 2,2'-bipy'den gelen iki azot atomu). Molekül (b) neredeyse (a) ile aynıdır (Şekil 5) [17].



**Şekil 4.**  $[\text{Pr}(\text{2-IBA})_3 \cdot \text{2,2}'\text{-bipy}]_2 [\text{Pr}(\text{2-IBA})_3 \cdot \text{2,2}'\text{-bipy}]_2 \cdot 0.5\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} \cdot \text{H}_2\text{O}$  Kompleksinin molekül yapısı [17]

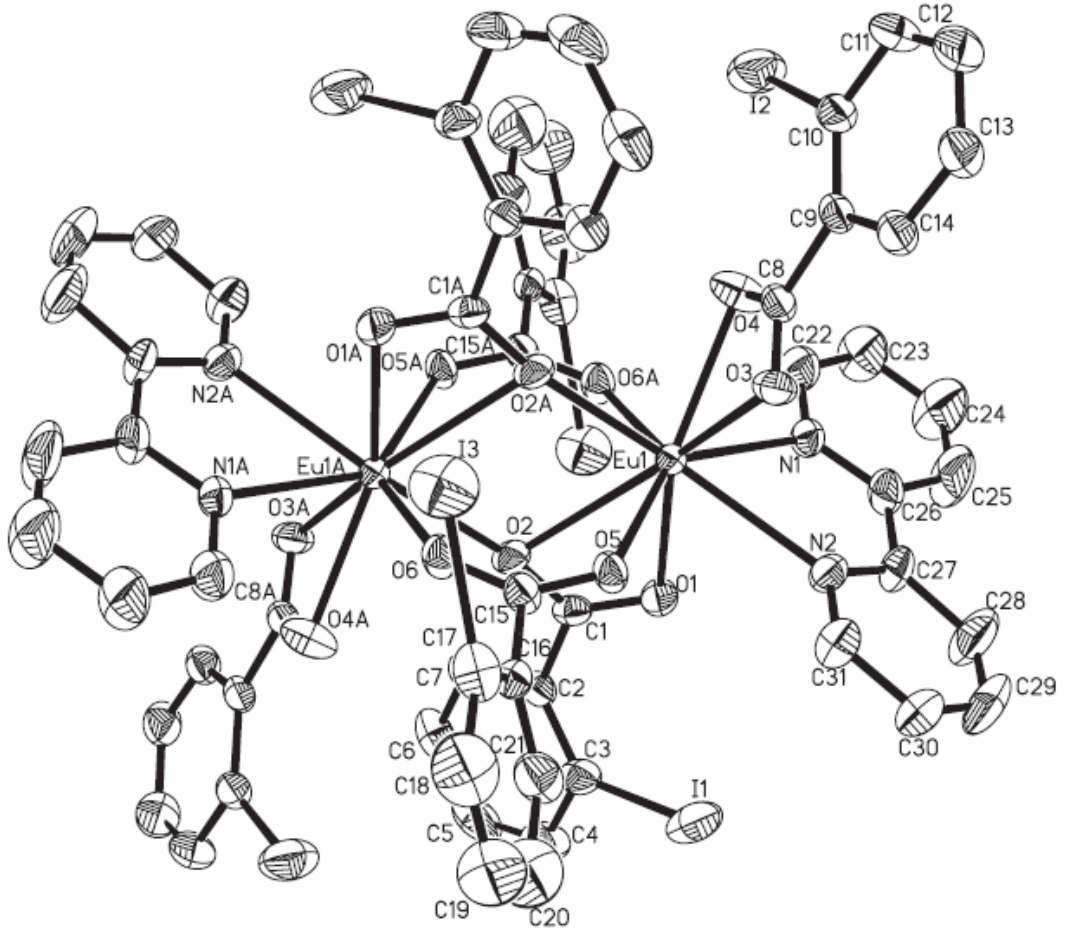
$[\text{Pr}(\text{2-IBA})_3 \text{ phen}]_2$  formülüne sahip dimerik komplekste Pr1 metalleri iki tane çift dişli ve iki tane üç dişli köprüleme olmak üzere dört köprülü 2-IBA ile birbirine bağlanırlar. Ayrıca her bir Pr1 metaline bir 2-IBA grubu ve bir 1,10-fenantrolin ligandı şelatlanır ve koordinasyon sayısını dokuz tamamlar (Şekil 6) [17] .



Şekil 5.  $[\text{Pr}(\text{2-IBA})_3 \cdot \text{phen}]_2$  Kompleksinin molekül yapısı [17]

$[\text{Eu}(\text{2-IBA})_3 \cdot \text{H}_2\text{O}]_n$  kompleksi polimer yapıdadır. Üç farklı  $\text{Eu}^{+3}$  iyonunu 2-İBA karboksil grubu tetradentat olarak birbirine bağlarken, her bir  $\text{Eu}^{+3}$  iyonu iki 2-İBA karboksil grubu ile şelat oluşturur ve bir su molekülü ile koordinasyon sayısını dokuza tamamlar (Şekil 7) [12].

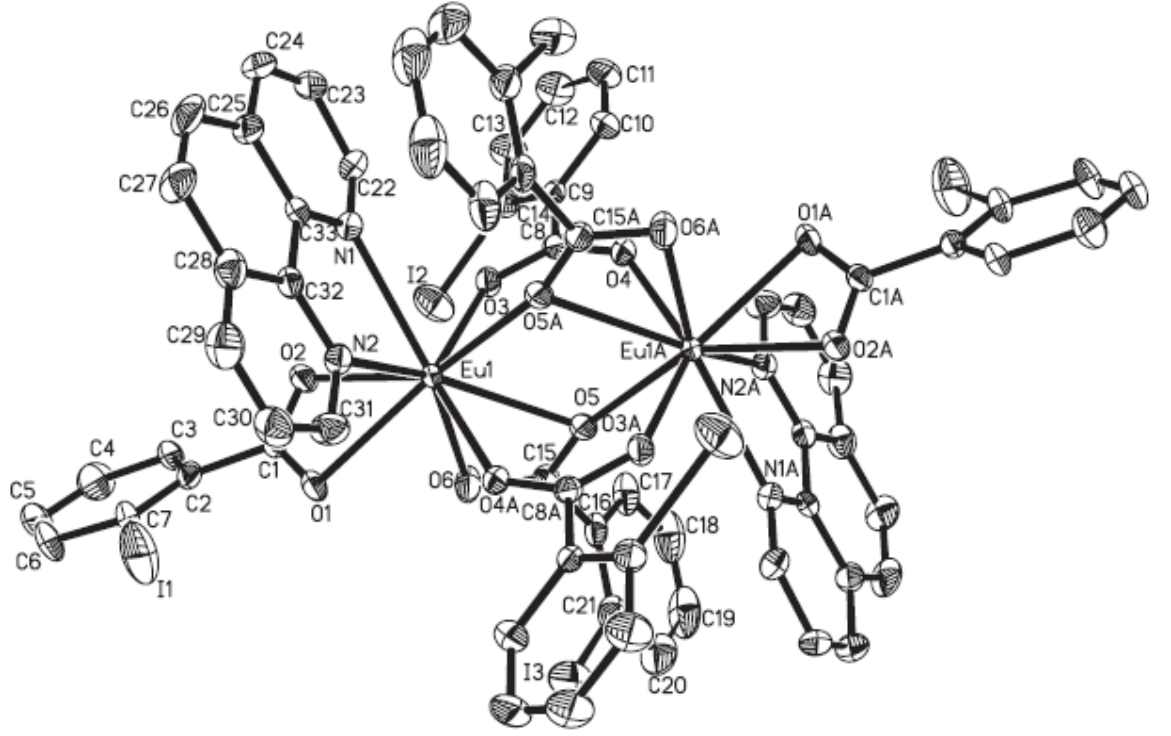




**Şekil 7.**  $[\text{Eu}(\text{2-IBA})_3 \cdot \text{2,2}'\text{-bpy}]_2$  Kompleksinin molekül yapısı [12]

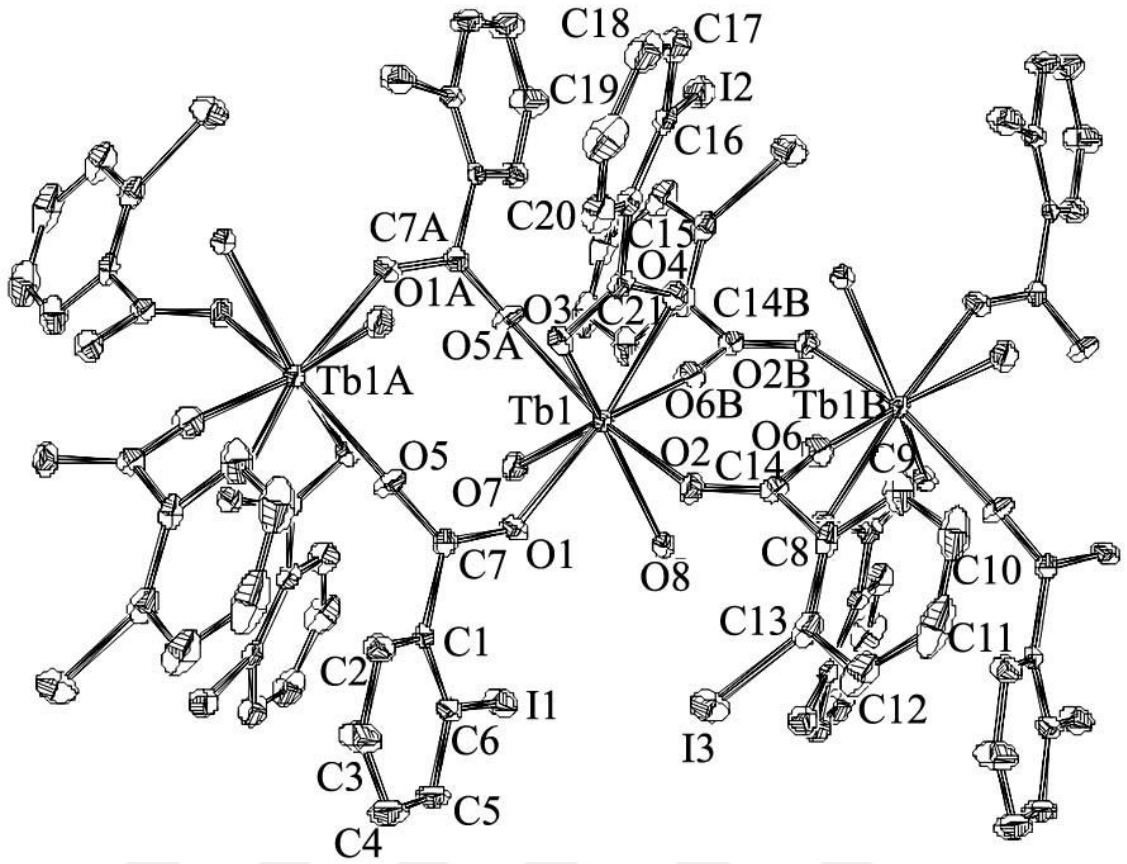
$[\text{Eu}(\text{2-IBA})_3 \cdot \text{phen}]_2$  kompleksi şekil 8'de verilen  $[\text{Eu}(\text{2-IBA})_3 \cdot \text{2,2}'\text{-bpy}]_2$  kompleksi ile benzerlik göstermektedir. 2-IBA karboksil grubundan gelen yedi oksijen atomu ve 1,10-fenatrolin ligandından gelen iki N atomuyla koordinasyon sayısını dokuza tamamlanır (Şekil 9) [12].





**Şekil 8.** [Eu(2-IBA)<sub>3</sub>.phen]<sub>2</sub> Kompleksinin molekül yapısı [12]

[Tb(2-IBA)<sub>3</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]<sub>n</sub> isimli polimerik kompleks'te dört tane 2-IBA karboksil oksijen atomu üç tane Tb<sup>+3</sup> iyonları arasında köprü görevi görmektedir. Her bir Tb<sup>+3</sup> iyonuna bir tane 2-IBA'nın karboksil oksijenleri şelat oluşturmakta ve iki su molekülü ile sekizli koordinasyon yapısına sahiptir (Şekil 10) [18].

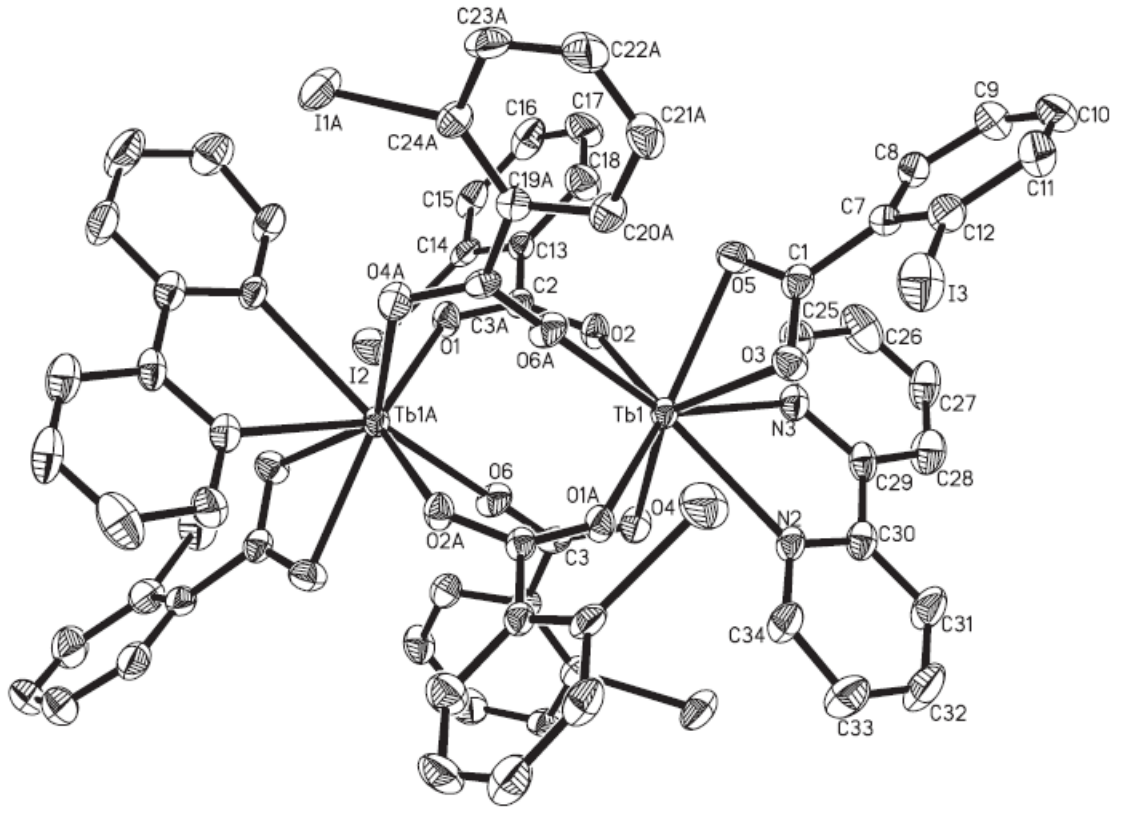


Şekil 9.  $[Tb(2-IBA)_3(H_2O)_2]_n$  Kompleksinin molekül yapısı [18]

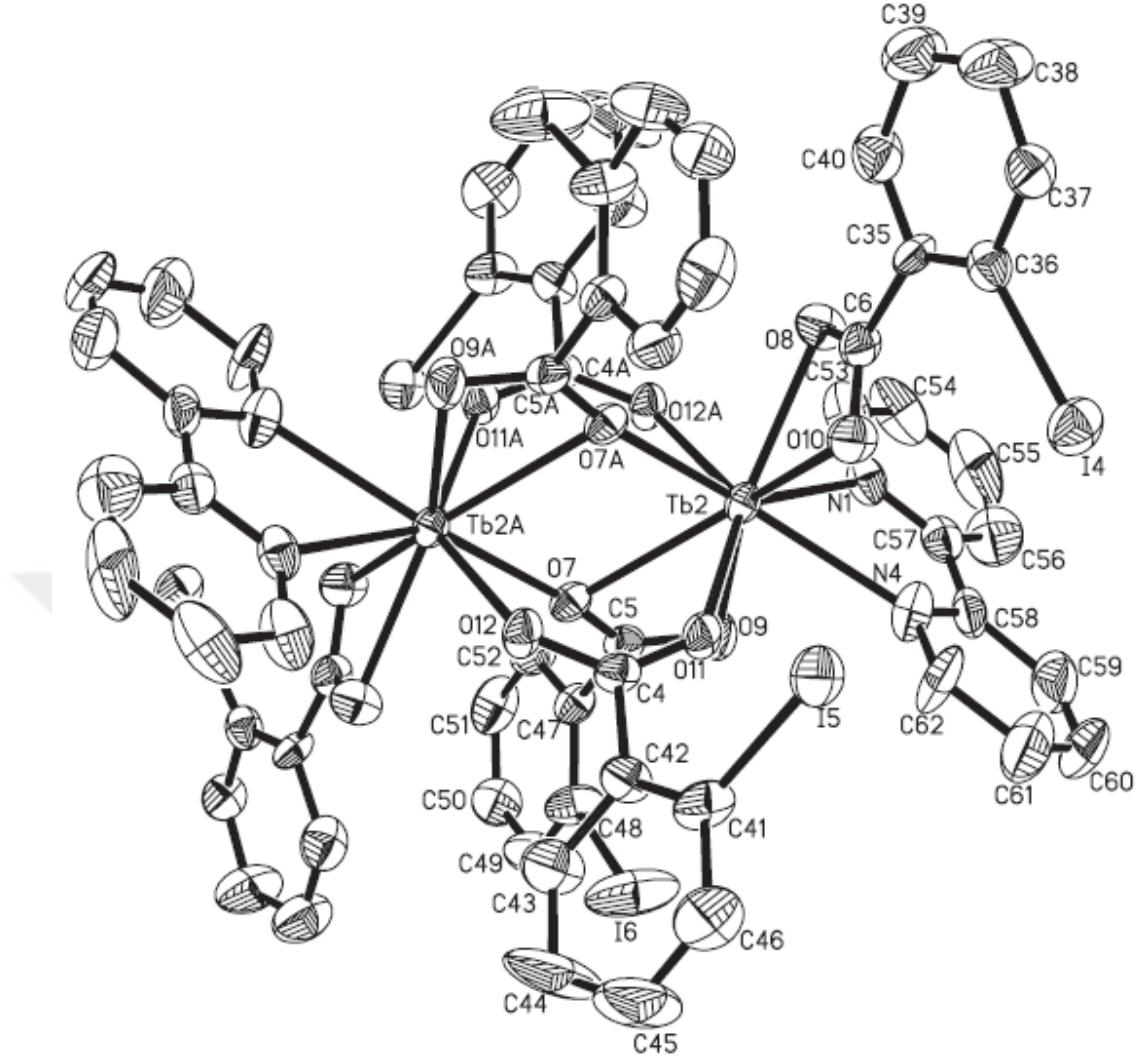
$\{[Tb(2-IBA)_3 \cdot 2,2'-bipy]_2 \cdot C_2H_5OH\}$  isimli kompleks  $[Tb(2-IBA)_3 \cdot 2,2'-bipy]_2$  (Şekil 11) ve  $[Tb(2-IBA)_3 \cdot 2,2'-bipy]_2 \cdot C_2H_5OH$  (Şekil 12) kapalı formülüne sahip iki bağımsız molekülden oluşmaktadır. Her iki kompleks'te dimerik yapıdadır [19].

$[Tb(2-IBA)_3 \cdot 2,2'-bipy]_2$  isimli dimerik kompleks'te  $Tb^{+3}$  iyonları arasında dört tane 2-IBA ligandının 8 tane karboksil oksijen atomu köprü oluşturmaktadır. Bir tane 2-IBA ligandının karboksil oksijenleri ve bir tane 2,2'-bipy ligandının N atomları her bir  $Tb^{+3}$  iyonuna şelatlanmış ve  $Tb^{+3}$  iyonunun koordinasyon sayısı sekiz olmuştur (Şekil 11) [19].

$[Tb(2-IBA)_3 \cdot 2,2'-bipy]_2 \cdot C_2H_5OH$  kompleksinde  $Tb^{+3}$  iyonları arasında iki 2-IBA karboksil oksijen atomları köprü oluşturmakta, iki tane 2-IBA ligandının karboksil oksijenleri atomları şelat köprü görevi görmekte, bir tane 2-IBA ligandının karboksil oksijenleri şelat oluşturmakta ve 2,2'-bipy ligandının N atomlarıyla dokuzlu koordinasyon oluşturmaktadır (Şekil 12) [19].



Şekil 10.  $[\text{Tb}(\text{2-IBA})_3 \cdot \text{2,2'-bipy}]_2$  Kompleksinin molekül yapısı [19]



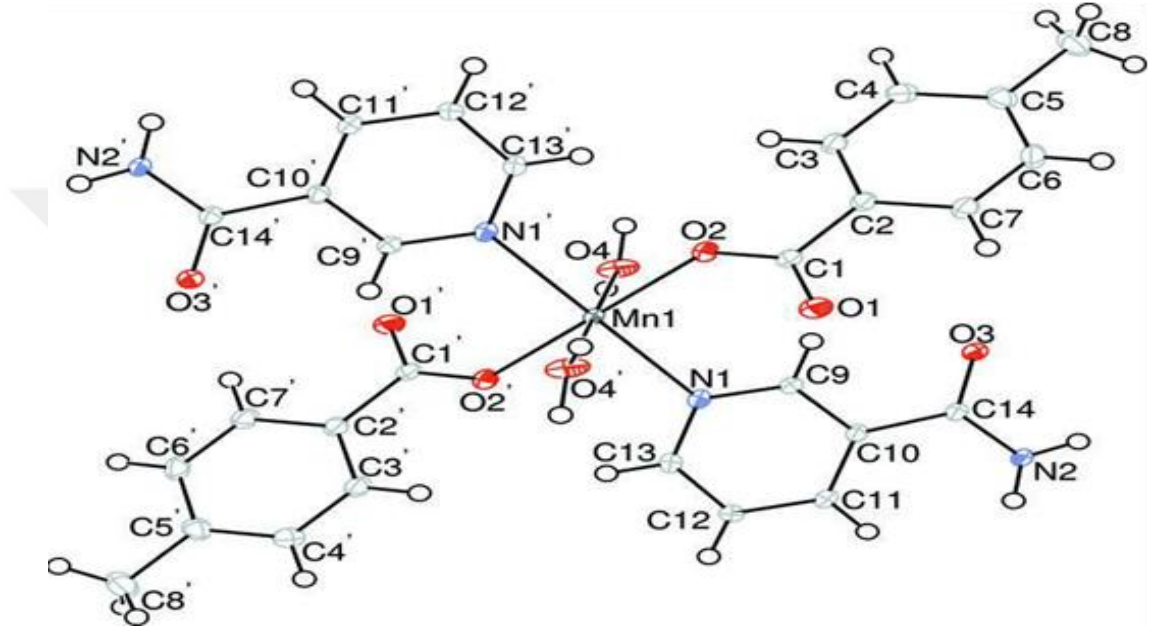
**Şekil 11.**  $[\text{Tb}(\text{2-IBA})_3 \text{ 2,2'-bipy}]_2 \text{ C}_2\text{H}_5\text{OH}$  Kompleksinin molekül yapısı [19]

### 1.2.2. Nikotinamid'in Metal Kompleksleri

2-iyodobenzoik asitle birlikte ligant olarak kullanılan nikotinamidin (NA) biyolojik aktiviteleri literatürde yer almaktadır [20,21]. Nikotinamidin'in meta komplekslerinde metal atomlarına piridin halkası üzerindeki azot atomu üzerinden monodentat olarak koordine olmakla beraber karboksamid grubunun oksijen atomu ile metal atomlarına koordine olduğu ve her iki atom üzerinden de koordine olarak köprü oluşturduğu durumları içeren çok sayıda rapor literatürde yer almaktadır [22–24]. Bölüm 2.2.1.'de bunların bazılarını yer verilmektedir.

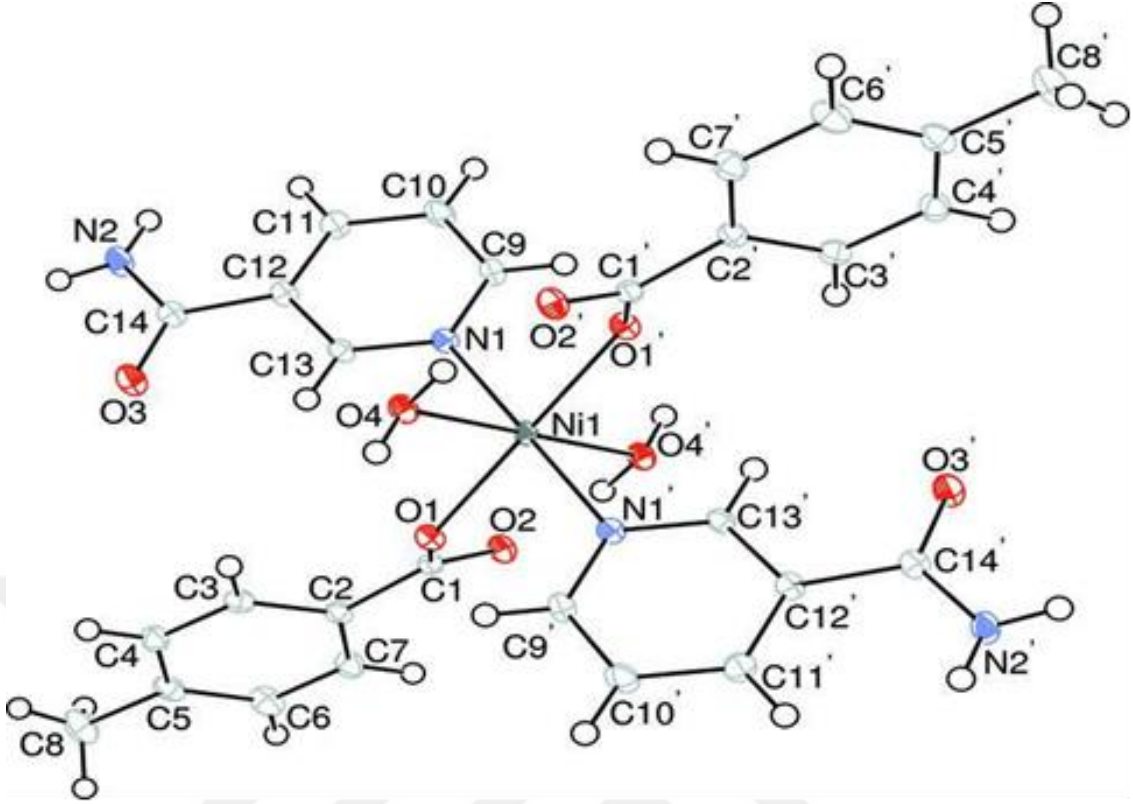
$[\text{Mn}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  isimli kompleks [25] monomerik olup kristalografik simetri merkezi üzerinde Mn(II) kasyonu bulunmaktadır. Asimetrik birimde bir tane

NA ligandı, bir tane 4-metilbenzoat anyonu ve bir tane de koordine su molekülü mevcuttur. Ekvator düzleminde bulunan Mn(II) katyonu dört oksijen atomu ile hafifçe bozulmuş kare düzlem geometrisine sahiptir (Şekil 13). Oktahedral koordinasyon aksenal pozisyonundaki iki tane piridin azot atomu ile tamamlanmaktadır. Moleküler arası O-H $\cdots$ O, N-H $\cdots$ O ve C-H $\cdots$ O hidrojen bağları ile O-H $\cdots$  $\pi$  ve C-H $\cdots$  $\pi$  etkileşimleri, üç boyutlu bir yapının oluşmasına neden olmaktadır.



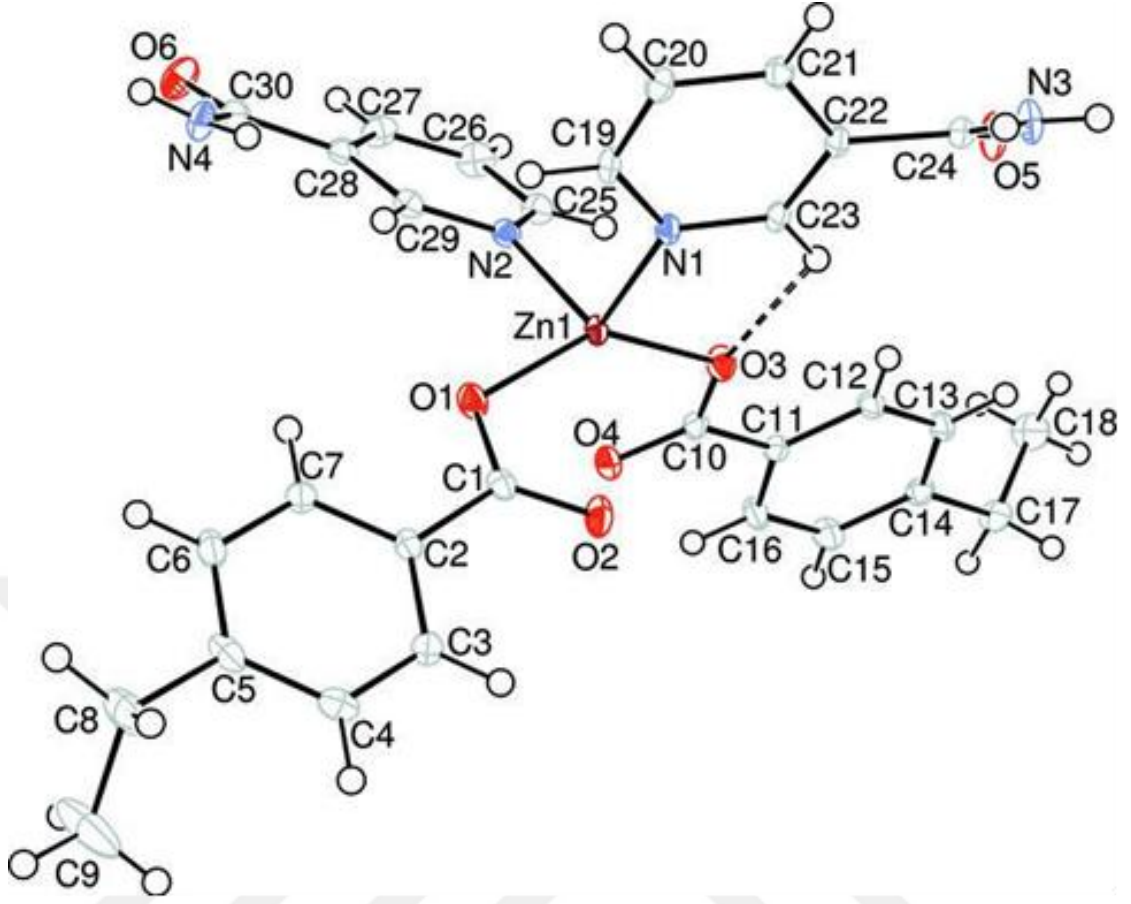
Şekil 12.  $[\text{Mn}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  Kompleksinin molekül yapısı [25].

$[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  isimli kompleks'te [26] Ni(II) katyonu simetri merkezi üzerindedir. Bu kompleks; koordine olmuş iki su molekülü, iki 4-metilbenzoat ligandı ve iki NA ligandı içermektedir. Komplekste bulunan bütün ligandlar monodentat yapıdadır. Ni atomu etrafında dört oksijen atomu hafifçe bozulmuş kare düzlem geometrisi oluştururken aksenal pozisyonundaki NA ligandının azot atomları ile oktahedral koordinasyon tamamlanmaktadır (Şekil 14). Benzen halkası ile karboksilat grubu arasındaki dihedral açı  $26.15^\circ$  iken benzen ve piridin halkaları arasındaki dihedral açı  $87.81^\circ$  dir.



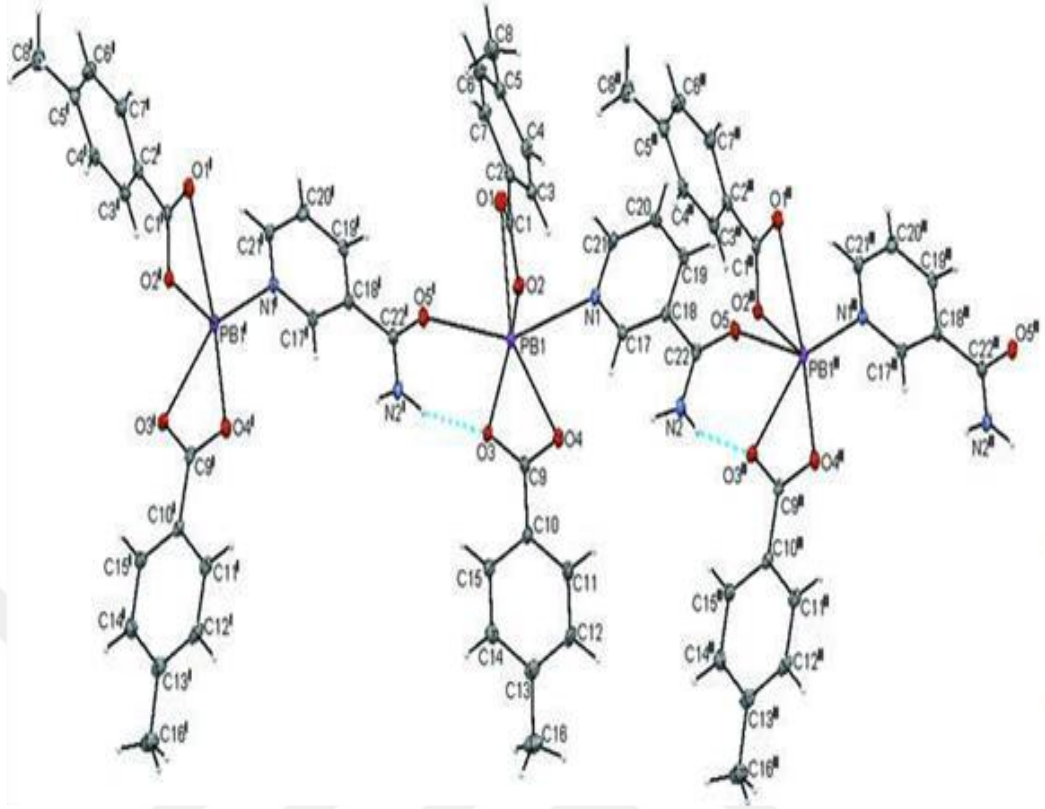
Şekil 13.  $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  Kompleksinin molekül yapısı [26].

$[\text{Zn}(\text{C}_9\text{H}_9\text{O}_2)_2(\text{NA})_2]$  isimli kompleks'te [27] Zn atomu etrafında iki tane NA ligandı azot atomu ile iki tane 4-etilbenzoat oksijen atomu bozulmuş tetrahedral koordinasyon geometrisi oluştururlar (Şekil 15). Kompleks monoklinik sistemde kristallenmiştir. Kristal yapıda, moleküller arası N-H...O hidrojen bağları iki boyutlu bir ağ oluştururlarken iki tane zayıf C-H... $\pi$  etkileşimi ve molekül içi C-H...O hidrojen bağı yapının daha kararlı olmasına katkıda bulunurlar.



Şekil 14.  $[Zn(C_9H_9O_2)_2(NA)_2]$  Kompleksinin molekül yapısı [27].

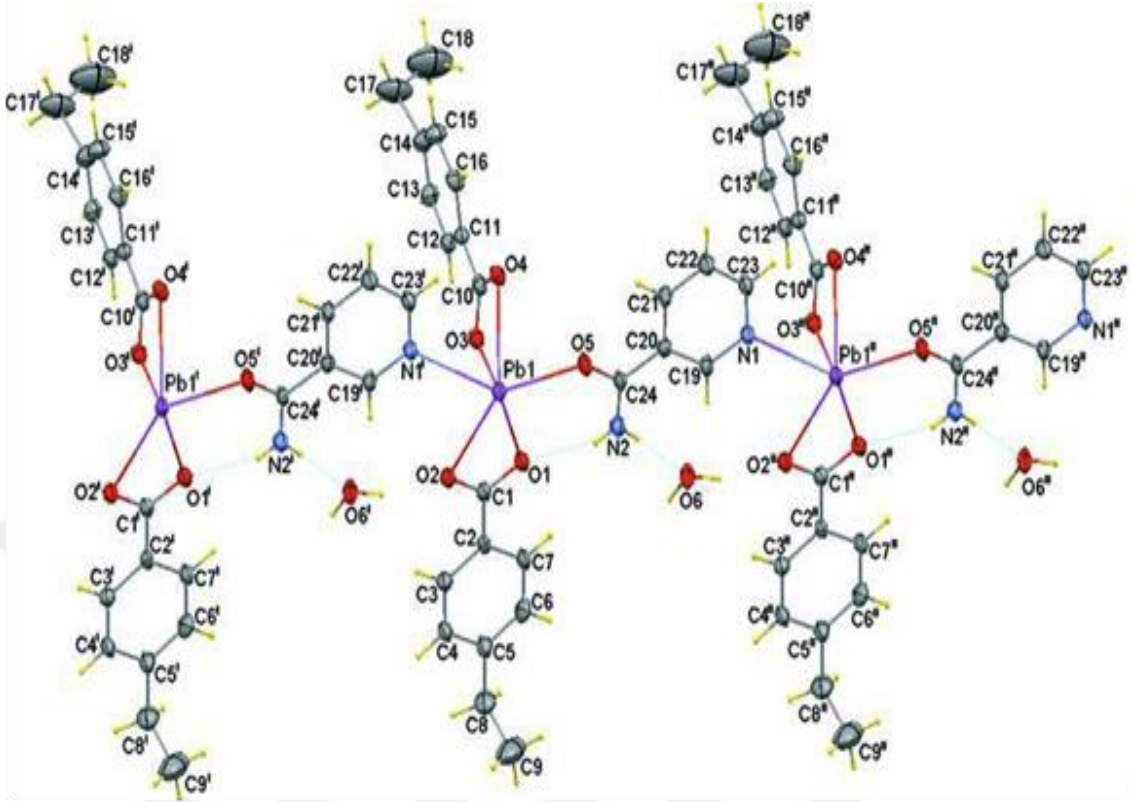
$[Pb(C_8H_7O_2)_2(NA)]_n$  kompleksi [28], Kurşun(II) iyonu birbirine komşu olan Pb(II) iyonları ile simetrik konumdaki NA ligandları ile köprü oluştururken; iki 4-metilbenzoat ligandı ve bir NA ligandı ile koordinasyonunu tamamlamaktadır. Bunun sonucunda *c*-ekseni boyunca uzanan polimerik zincirler meydana gelmektedir (Şekil 16). İki 4-metilbenzoat anyonundaki karboksilat grupları,  $22.9^\circ$  ve  $4.6^\circ$  ile benzen halkalarına belirtilen konumda bağlanarak bükülme göstermiştir. 4-metilbenzoat anyonlarındaki iki benzen halkası  $83.7^\circ$  lik bir dihedral açıda konumlanmıştır. Polimerik zincirdeki NA ligandları 4-metilbenzoat anyonlarına molekül içi N-H...O hidrojen bağları ile bağlanmıştır. Kristal yapıdaki komşu polimerik zincirler, N-H...O ve C-H...O hidrojen bağları üzerinden etkileşime girmektedir. Bunun sonucunda *bc*-düzlemine paralel iki boyutlu ağ oluşmaktadır.



Şekil 15.  $[\text{Pb}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{NA})]_n$  Kompleksinin molekül yapısı [28].

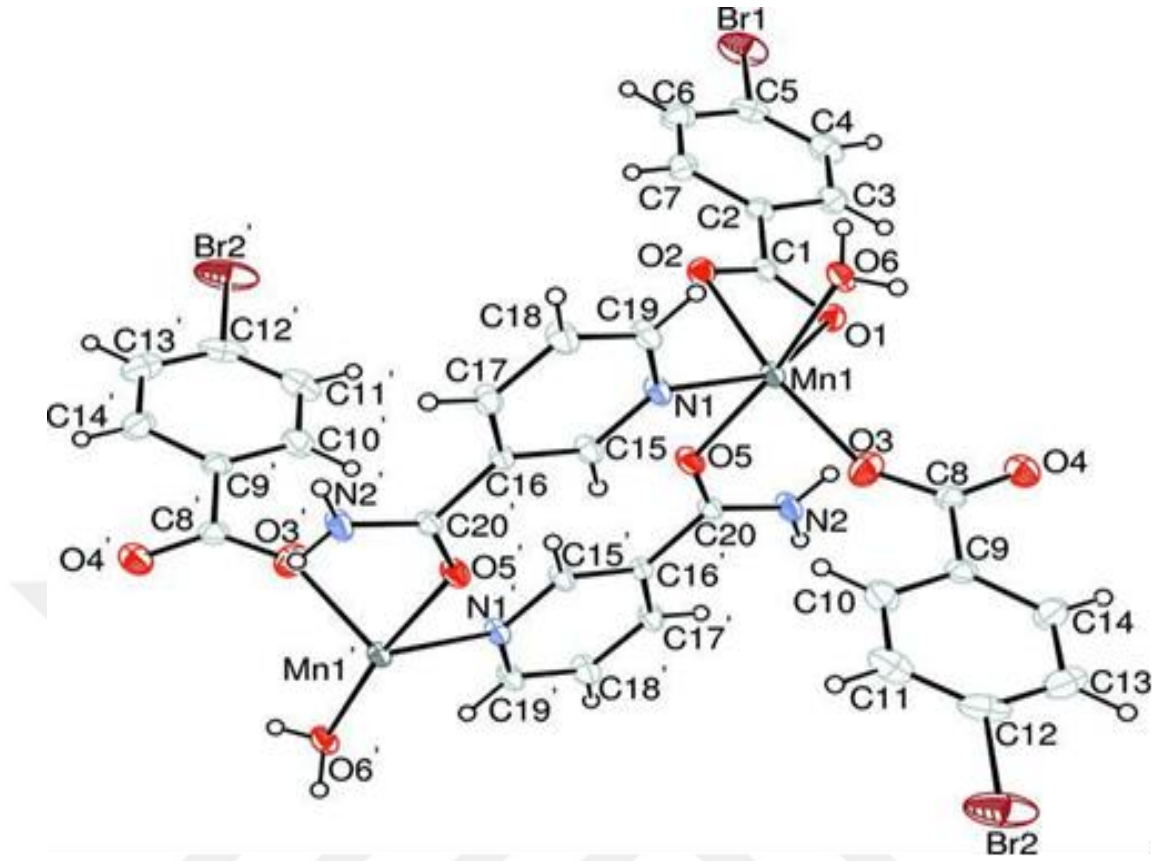
Polimerik yapıda olan  $\{[\text{Pb}(\text{C}_9\text{H}_9\text{O}_2)_2(\text{NA})] \cdot \text{H}_2\text{O}\}_n$  kompleksinde kurşun atomunun koordinasyon çevresi köprü oluşturan iki NA ligandı ve şelat oluşturan iki 4-etilbenzoat anyonundan oluşmaktadır.[29] Bunun neticesinde *b*-ekseni boyunca uzanan polimerik bir zincir meydana gelmektedir (Şekil 17) Kompleks tahrif olmuş oktahedral geometri sergiler. İki 4-etilbenzoat anyonundaki karboksilat grupları,  $4.0^\circ$  ve  $13.3^\circ$  ile benzen halkalarına belirtilen konumda bağlanarak bükülme göstermiştir. Aynı metal iyonuna bağlı 4-etilbenzoat anyonlarındaki iki benzen halkası  $87.4^\circ$  lik bir dihedral açıda konumlanmıştır. Polimerik zincirdeki NA ligandları 4-etilbenzoat anyonlarına molekül içi N-H...O hidrojen bağları ile bağlanmıştır. Kristal yapıdaki komşu polimerik zincirler, N-H...O ve zayıf C-H...O hidrojen bağları üzerinden etkileşime girmektedir. Örgülü (kafes şeklindeki) su molekülü, polimerik zincire N-H...O ve O-H...O hidrojen bağları ile bağlanmaktadır. Kristal yapı içerisinde, benzen ve piridin halkaları arasındaki  $\pi - \pi$  etkileşimlerinin yanısıra, zayıf C-H... $\pi$  etkileşimlerinin olduğu da görülmüştür. Merkez atomlar arasındaki uzaklık:  $3.805 \text{ \AA}$ 'dur.





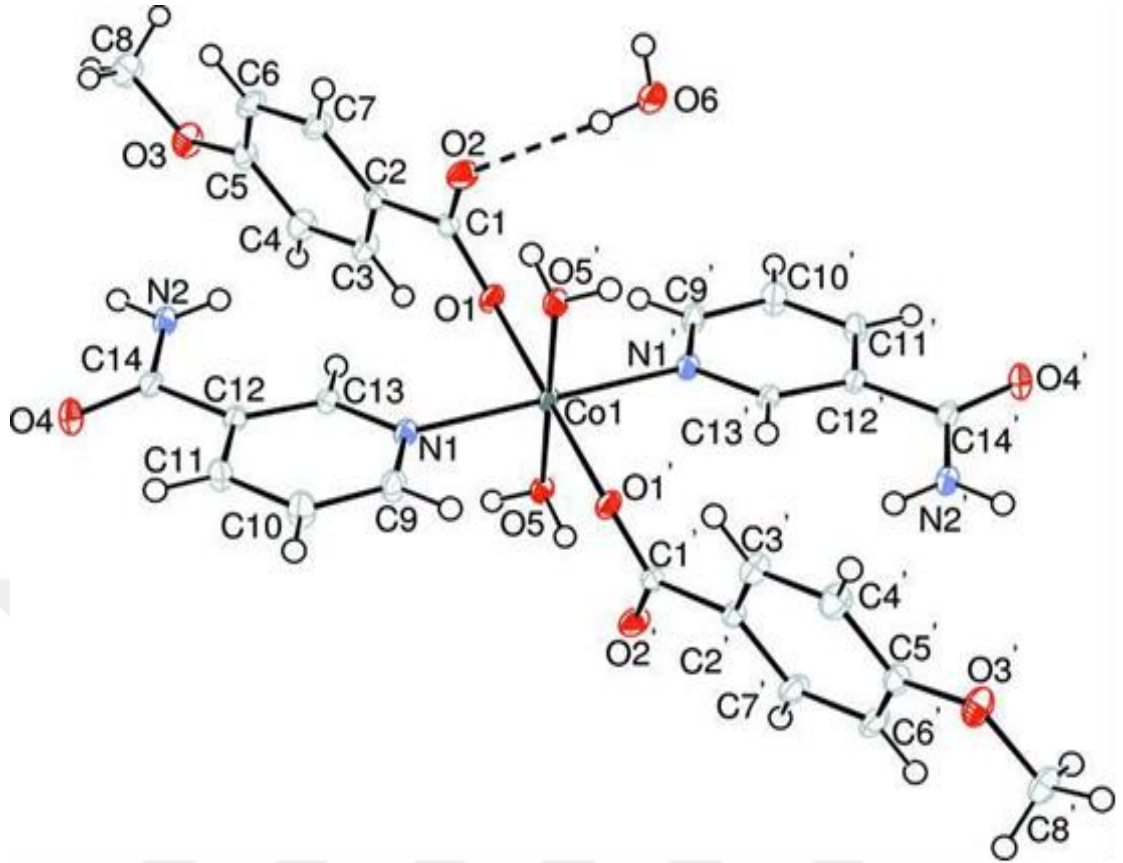
**Şekil 16.** {[Pb(C<sub>9</sub>H<sub>9</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(NA)].H<sub>2</sub>O}<sub>n</sub> Kompleksinin molekül yapısı [29].

[Mn<sub>2</sub>(C<sub>7</sub>H<sub>4</sub>BrO<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(NA)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] kompleksi [30] triklinik olup simetri merkezli çift çekirdekli bir Mn bileşiğidir. Mn atomunun koordinasyon çevresinde, köprülü NA ligandından gelen bir azot atomu, diğer simetrik yapıda bulunan köprülü NA ligandından gelen oksijen atomu, iki 4-bromobenzoat ligandından gelen üç oksijen atomu ve bir su molekülü bulunmaktadır. Kompleks bozulmuş oktahedral geometri oluşturmaktadır (Şekil 18). Mn-Mn arasındaki mesafe 7.180 Å'dur.



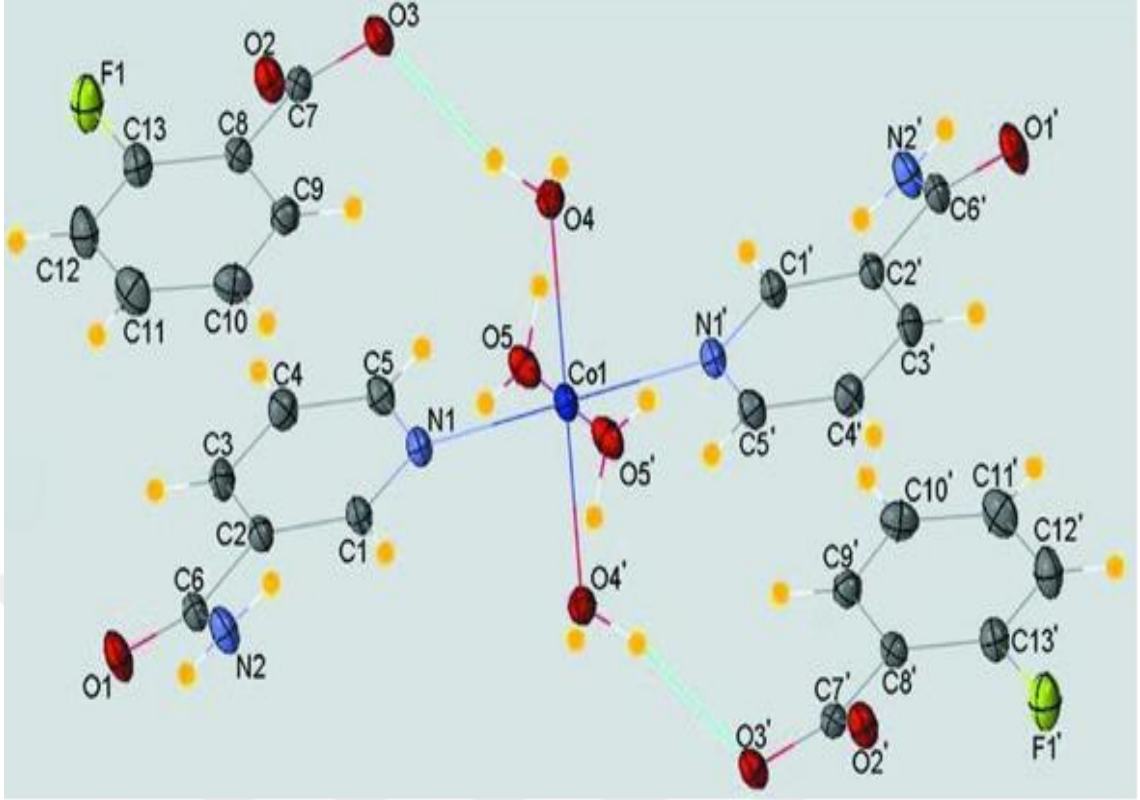
Şekil 17.  $[Mn_2(C_7H_4BrO_2)_4(NA)_2(H_2O)_2]$  Kompleksinin molekül yapısı [24].

$[Co(C_8H_7O_3)_2(NA)_2(H_2O)_2] \cdot 2H_2O$  kompleksi [30] kristalografik olarak simetri merkezli tek çekirdekli bir komplekstir. Bileşiğin asimetrik birimi, monodentat ligandlar gibi rol oynayan bir 4-metoksibenzoat anyonu, bir NA ligandı ile biri koordine olmuş biri koordine olmamış iki su molekülünden oluşmaktadır. Ligandların hepsi monodentat olarak koordinasyona katılmaktadır. Kobalt atomu etrafında ekvatorial düzlemdeki dört oksijen atomu kare-düzlem tertibinde biçimlenmekte ve eksen pozisyonundaki NA ligandının iki piridin azot atomunun koordinasyona katılması ile oktahedral geometri tamamlanmaktadır (Şekil 19). Karboksilat grup ve bağlı benzen halkaları arasındaki dihedral açı  $6.47^\circ$  dir. Benzen halkaları (N1/C9—C13)  $72.80^\circ$  lik dihedral açıda konumlanmıştır. Koordinasyona girmemiş su molekülü karboksilat gruplarından birine O-H...O hidrojen bağı ile bağlanır. Kristalde üç boyutlu ağ içerisindeki moleküller birbirilerine moleküller arası O-H...O, N-H...O ve C-H...O hidrojen bağları ile bağlanmaktadır.



**Şekil 18.**  $[\text{Co}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_3)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  Kompleksinin molekül yapısı [30].

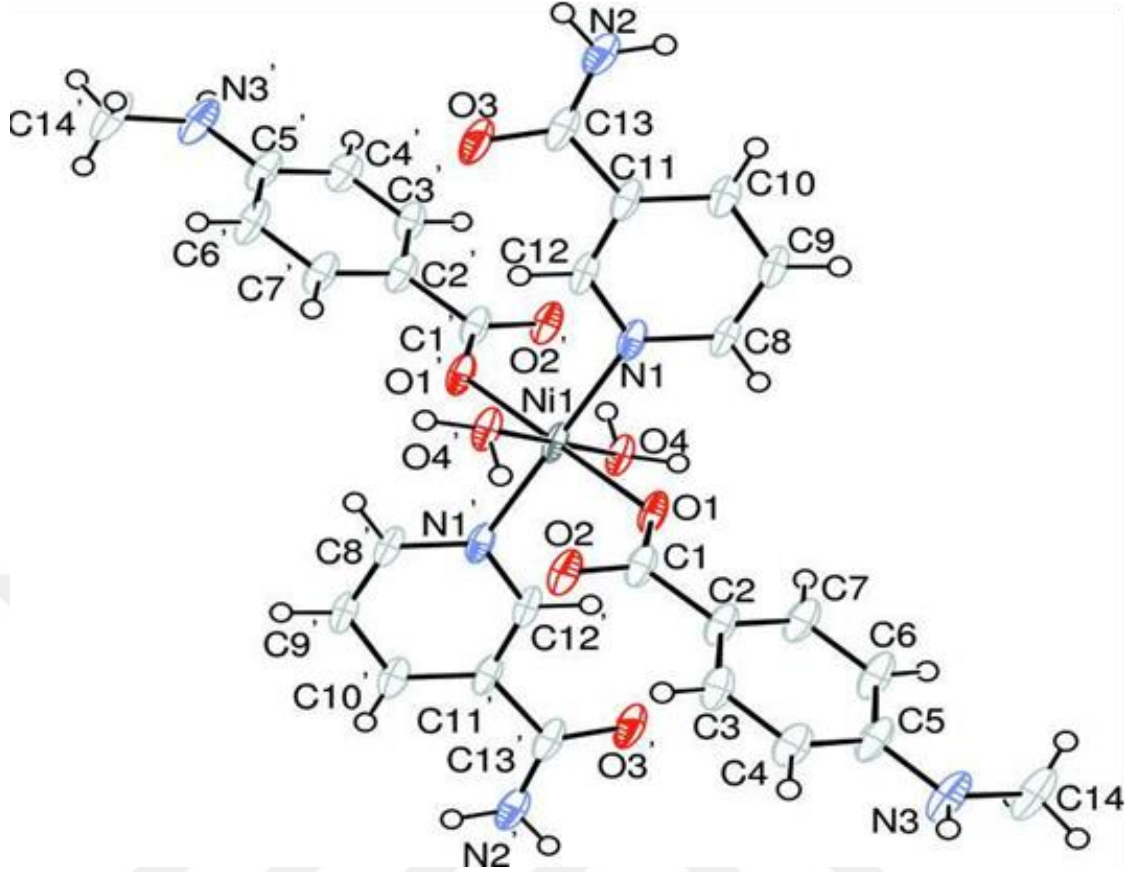
$[\text{Co}(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2$  kompleksi [31] triklinik düzlemde kristallenmiştir. Kristalin yapısı Co atomu etrafında iki tek dişli NA ligandı, koordinasyona girmiş dört su molekülü ve iki florobenzoat anyonu vasıtasıyla birbirine bağlanan oktahedronlar ağından oluşmaktadır. Co atomu etrafında ekvatorial düzlemde bulunan dört oksijen atomu hafif tahrif olmuş kare-düzlem tertibi biçiminde bulunmakta ve NA ligandının eksen pozisyonundaki iki azot atomu ile oktahedral koordinasyona tamamlanmaktadır (Şekil 20). Karboksil grubu ve komşu benzen halkaları arasındaki dihedral açı  $29.8^\circ$  dir. Piridin ve benzen halkaları arasındaki dihedral açı  $7.97^\circ$  lik doğrultuda yönelmektedir. Kristalde moleküller sınırsız üç boyutlu ağ oluşturan O-H...O, N-H...O ve N-H...F hidrojen bağları ile bağlanmaktadır. Piridin halkası (Cg1) ve benzen halkaları (Cg2) arasındaki merkezleri arasındaki mesafe Cg1-Cg2: 3.673 Å dur. Co, O, N atomları arasındaki bağ uzunlukları sırasıyla şu şekildedir: Co1-O4, Co1-O5, Co1-N1 bağ uzunluğu 2.143 Å, 2.075 Å, 2.145 Å' dur. Co-O ve Co-N mesafelerine eşit demek mümkündür.



Şekil 19.  $[\text{Co}(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2$  Kompleksinin molekül yapısı [31].

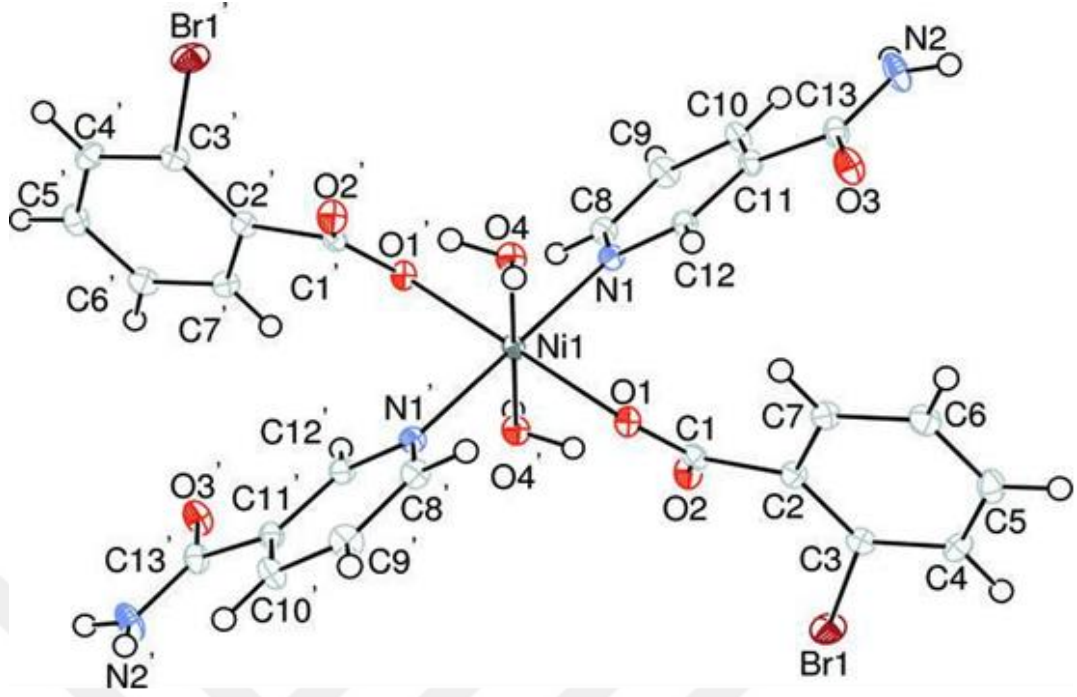
$[\text{Co}(\text{C}_8\text{H}_8\text{NO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  kompleksi [32] kobalt(II) simetri merkezli tek çekirdekli bir komplekstir. Asimetrik birimlerden meydana gelmekte ve birimlerin her biri de birbirinin aynı yapılardan oluşmaktadır. Co atomlarının her biri simetri merkezi üzerinde bulunmaktadır. Her bir Co atomu, iki 4-metilaminobenzoat, iki NA ligandı ve iki su molekülleri ile koordinasyona katılmaktadır. Kompleks oktahedral geometri yapısı oluşturmaktadır (Şekil 21). Karboksilat grupları ve komşu benzen halkaları arasındaki dihedral açılar  $3.0^\circ$  ve  $2.54^\circ$  iken; piridin ve benzen halkaları arasındaki dihedral açılar  $67.40^\circ$  ve  $66.25^\circ$  dir. Kristalde supramoleküler yapı içerisinde moleküller moleküller arası O-H...O ve N-H...O hidrojen bağları ile birbirilerine bağlanmaktadır.





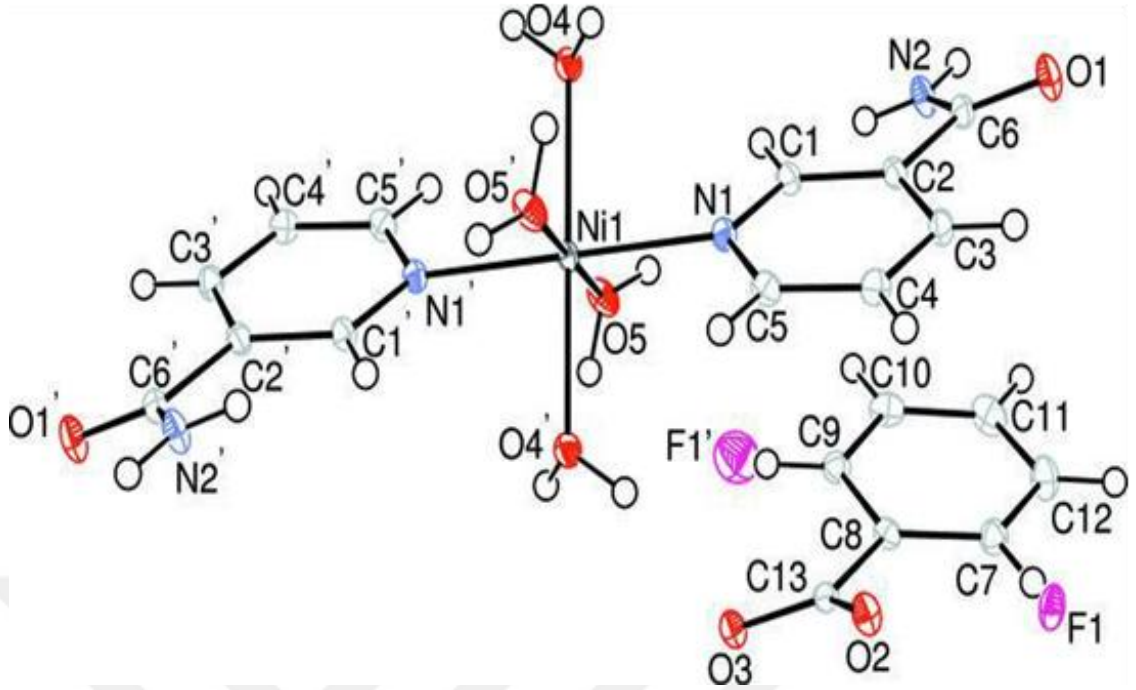
**Şekil 21.**  $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_8\text{NO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  Kompleksinin molekül yapısı [33].

$[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  başlıklı kompleksin [34] simetri merkezinde Ni(II) metali olup ligandlar monodentat olarak bağlanmıştır. Ni atomunun koordinasyon çevresinde iki 2-bromobenzoat ligandı, iki su molekülü ve iki monodentat NA ligandının heteroazot atomları bağ oluşturmuştur (Şekil 28). Ni-O ortalama bağ uzunluğu 2.0909 Å'dur.  $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  kompleksi monoklinik düzlemde kristallenmiştir. Karboksilat grubu ve komşu benzen halkası arasındaki dihedral açı  $30.81^\circ$  olurken; piridin ve benzen halkaları  $84.66^\circ$  lik dihedral açıda konumlanmıştır. Kristal yapıdaki O-H...O ve N-H...O hidrojen bağları supramoleküler yapı içerisinde bulunan moleküller üzerinden etkileşime girmektedir. Kristal yapı içerisinde zayıf C-H... $\pi$  etkileşimleri de bulunmaktadır. Ni-O bağ uzunlukları Ni1-O1: 2.0806 Å ve Ni1-O4: 2.1012 Å şeklindedir. Ni-N bağ uzunluğu 2.068 Å'dur. NA ligandının geometrik parametreleri önceki komplekslerde bulunan değerlere yakındır.



Şekil 22.  $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  Kompleksinin molekül yapısı [34].

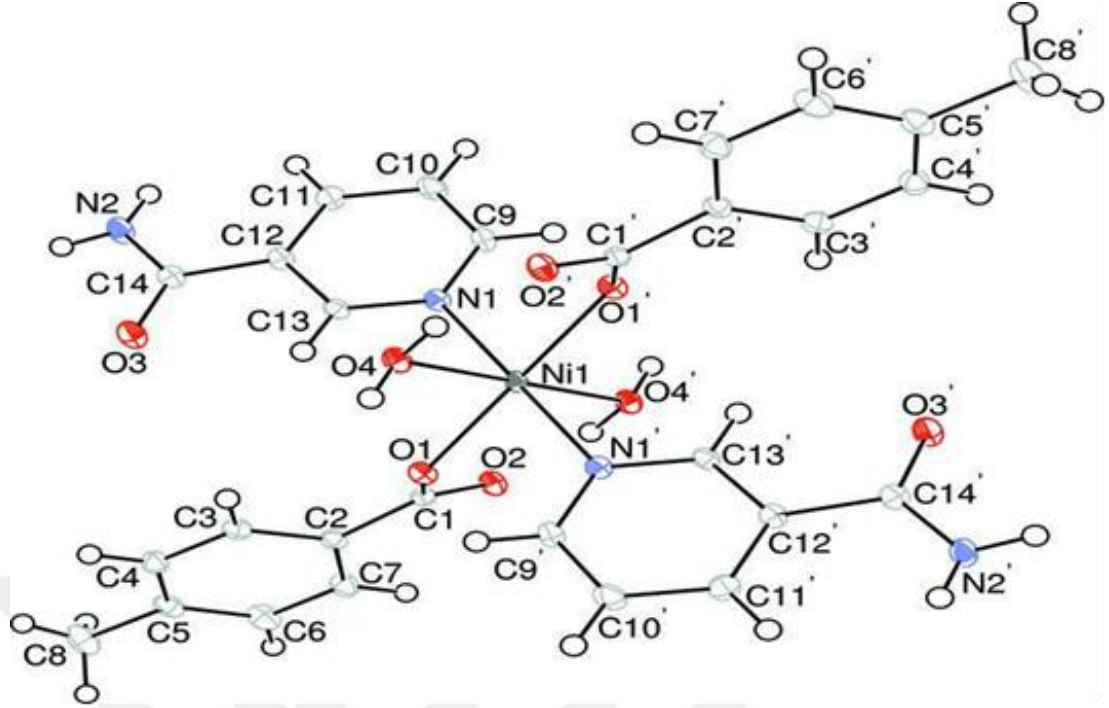
$[\text{Ni}(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2$  başlıklı kompleks [35] triklinik düzlemde kristallenmiştir. Kompleksin asimetrik birimi simetri merkezi üzerinde bulunan Ni atomu ve bir karşı anyon olan 2-florobenzoat'tan oluşmaktadır. Ni atomu etrafında ekvatorial düzlemdeki dört oksijen atomu, NA ligandının eksen pozisyonundaki piridin halkasındaki iki heteroazot atomu tarafından oktahedral koordinasyona tamamlanmasıyla kare-düzlem tertibinde biçimlenir (Şekil 29). Kare-düzlem yapı içerisindeki Ni-O ortalama bağ uzunluğu 2.079 Å'dur. Karboksil grubu ve bağlı benzen halkaları arasındaki dihedral açı 28.28° dir. Piridin ve benzen halkaları arasındaki dihedral açı 8.31° dir. Kristal yapıda üç boyutlu ağ içerisindeki moleküller, O-H...O, N-H...O, C-H...O ve C-H...F hidrojen bağları üzerinden etkileşime girmektedir. Piridin ve benzen halkaları arasındaki  $\pi$ - $\pi$  etkileşimleri kristal yapıyı daha kararlı kılabilir (N<sub>amid</sub>-C<sub>karbonil</sub>: 3.626 Å). İki Ni-O bağı birbiriyle eşittir (Ni1-O4: 2.0925 Å ve Ni1-O5: 2.0658 Å). Ni-N bağı uzunluğu ise Ni1-N1: 2.0834 Å'dur.



**Şekil 23.**  $[\text{Ni}(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2$  Kompleksinin molekül yapısı [35].

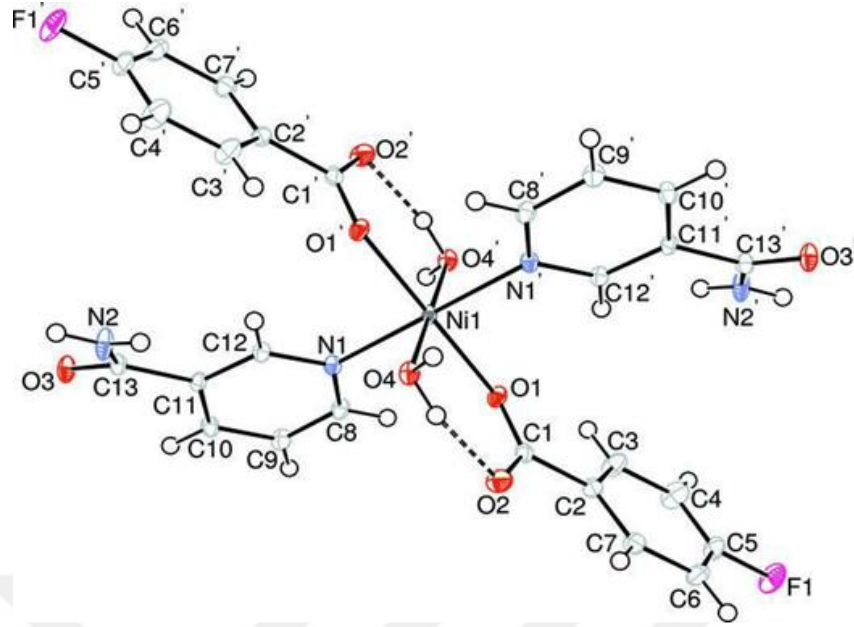
$[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  başlıklı kompleksin [36] yapısı incelendiğinde ligand olarak koordinasyona giren NA yapısındaki piridin halkasında bulunan heteroazot atomu üzerinden koordinasyona dahil olduğu anlaşılmıştır. Bu bileşik simetri merkezli tek çekirdekli bir kompleks olup, merkez atomu simetri merkezi üzerinde yer almaktadır. Bileşik monodentat ligandlar gibi rol oynayan iki 4-metilbenzoat ve iki NA ligandı ile iki koordinasyona girmiş su molekülü bulunmaktadır. Ni atomu çevresindeki en yakın dört oksijen atomu, NA ligandının eksen pozisyonunda piridin halkasındaki iki azot atomu tarafından oktahedral koordinasyona tamamlanmasıyla kare-düzlem tertibinde biçimlenir. Karboksilat grubu ve komşu benzen halkaları  $26.15^\circ$  lik belirtilen dihedral açıda konumlanırken; piridin ve benzen halkaları arasındaki dihedral açı  $87.81^\circ$  dir. Kristal yapıda moleküller, O-H...O ve N-H...O hidrojen bağları üzerinden etkileşime girmektedir. Ni-O ortalama bağ uzunluğu  $2.0746 \text{ \AA}$ 'dur. Ni atomları karboksilat grupları ile yaklaşık olarak  $0.5087 \text{ \AA}$  mesafe olacak şekilde koordinasyona katılmaktadır. Benzen halkaları arasındaki  $\pi$ - $\pi$  etkileşimleri yapıyı daha kararlı kılabilir (C2-C7:  $3.896 \text{ \AA}$ ). Komplekste zayıf C-H... $\pi$  etkileşimleri de bulunmaktadır.





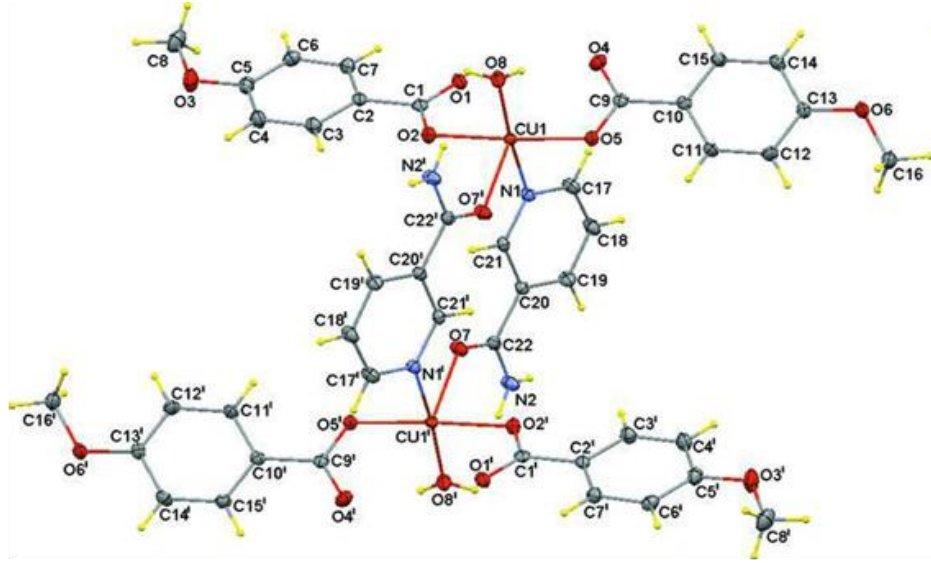
**Şekil 24.**  $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  Kompleksinin molekül yapısı [36].

$[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  başlıklı kompleks [37] tek çekirdekli olup Ni atomu simetri merkezinde bulunmaktadır ve Bu kompleks; Ni atomu ile iki NA ligandı, iki 4-florobenzoat ligandı ve iki su molekülü ile tahrif olmuş oktahedral bir  $\text{N}_2\text{O}_4$  geometri sergilemektedir (Şekil 31). Kristal monoklinik düzlemde kristallenmiştir. Birim hücre parametreleri:  $M_r = 617.18$ ,  $a = 12.2001 \text{ \AA}$ ,  $b = 8.8473 \text{ \AA}$ ,  $c = 17.1341 \text{ \AA}$ ,  $\beta = 136.080^\circ$ ,  $V = 1282.86 \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 2$ ,  $T = 100 \text{ K}$ ,  $\mu = 0.83 \text{ mm}^{-1}$ . Karboksilat grubu ve komşu benzen halkaları arasındaki dihedral açı  $8.95^\circ$  iken; piridin ve benzen halkaları arasındaki dihedral açı  $75.01^\circ$  dir. Su molekülleri, komşu karboksilat oksijen atomlarına molekül içi O-H...O hidrojen bağı ile bağlanır. Kristal yapıdaki O-H...O, N-H...O, C-H...O ve C-H...F hidrojen bağları üç boyutlu ağ içerisindeki moleküllere bağlanırlar. Paralel konumdaki piridin halkaları arasındaki  $\pi$ - $\pi$  etkileşimlerine de dikkat edilmelidir (N1/C8-C12:  $3.728 \text{ \AA}$ ). Çünkü yapının kararlı olmasına önemli ölçüde katkı sağlamaktadır. Ni-O bağı uzunluğu Ni1-O1:  $2.0500 \text{ \AA}$  ve Ni1-O4:  $2.0872 \text{ \AA}$ . Ni1-N bağı uzunluğu:  $2.1033 \text{ \AA}$ .



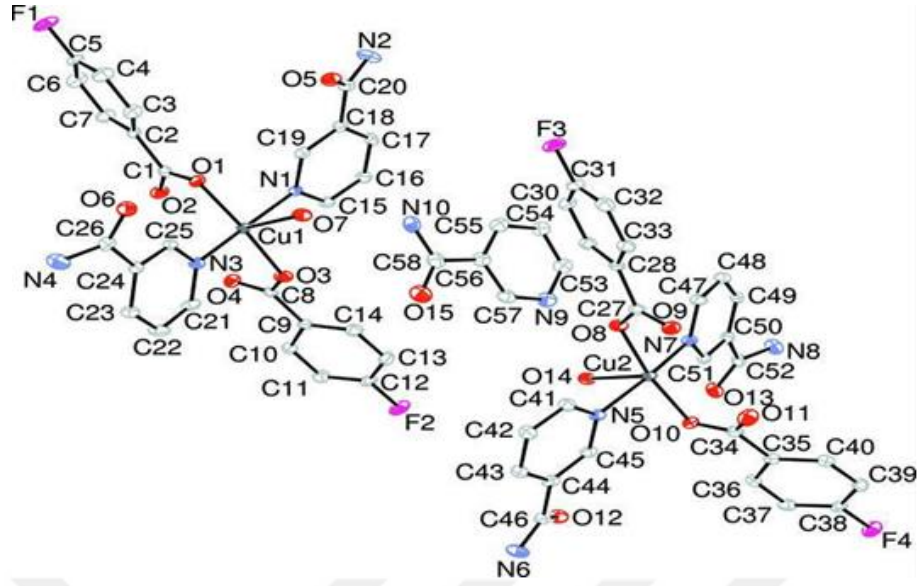
**Şekil 25.**  $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  Kompleksinin molekül yapısı [37].

$[\text{Cu}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_3)_4(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  başlıklı bileşik [38] iki çekirdekli simetri merkezli bakır kompleksi, bir köprülü NA ligandından gelen bir azot atomu, simetri konumundaki köprülü NA ligandından gelen oksijen atomu, iki 4-metoksibenzoat ligandından gelen iki oksijen atomu ve bir su molekülü ile bozulmuş kare-piramidal bir geometri sergiler (Şekil 32). Kompleks monoklinikdir. Birim hücre parametreleri:  $M_r = 1011.93$ ,  $a = 14.1707 \text{ \AA}$ ,  $b = 8.4319 \text{ \AA}$ ,  $c = 18.0225 \text{ \AA}$ ,  $\beta = 95.847^\circ$ ,  $V = 2142.23 \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 2$  şeklindedir. Moleküller arası O-H...O ve N—H...O hidrojen bağları paralel uzanan moleküller üzerinden etkileşime girmektedir. Benzen halkaları arasındaki ve piridin halkaları arasındaki  $\pi$ - $\pi$  etkileşimleri yapının daha kararlı olmasına katkıda bulunmaktadır. Ayrıca benzen halkaları ile piridin halkalarının merkezleri arasındaki mesafe sırasıyla  $3.801 \text{ \AA}$  ve  $3.653 \text{ \AA}$ 'dur. Bunun yanısıra düzlemsel karboksilat ve komşu benzen halkaları arasındaki dihedral açılar sırasıyla C2-C7:  $1.85^\circ$  ve C10-C15:  $10.16^\circ$  dir. Karboksilat grupları (A), benzen halkaları (B) ve piridin halkaları (C) (N1/C17-C21) arasında şu şekilde açısally bir oran vardır: A/B:  $28.50^\circ$ , A/C:  $81.64^\circ$ , B/C:  $58.50^\circ$  dir.



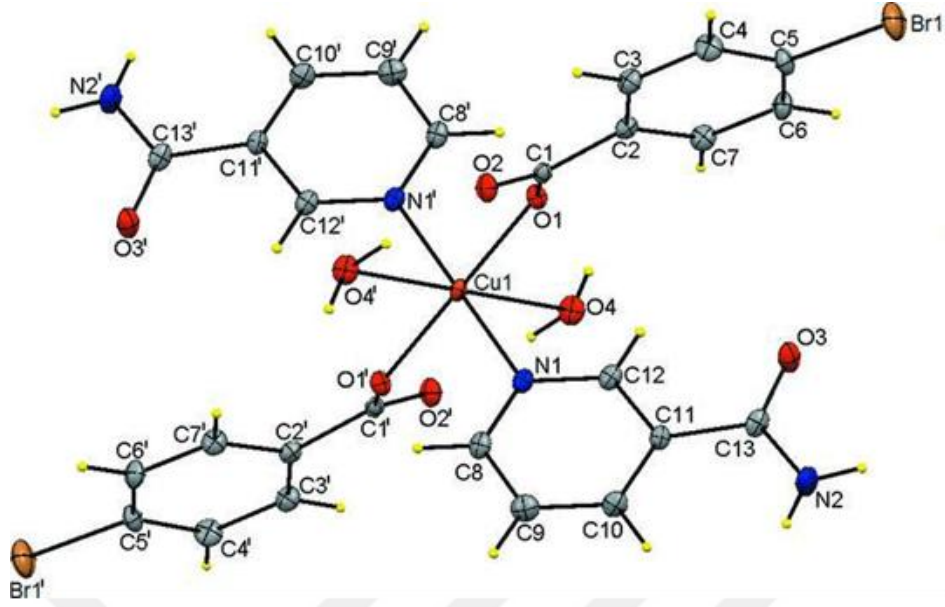
**Şekil 26.**  $[\text{Cu}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_3)_4(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  Kompleksinin molekül yapısı [38].

$[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})].0.5\text{NA}.3\text{H}_2\text{O}$  başlıklı kompleks [39] iki aquabis(4-florobenzoat) bis(NA)bakır(II) molekülü, bir NA molekülü ve altı su molekülden oluşmaktadır. Bakır kompleksi Cu atomu ile iki 4-florobenzoat ligandından gelen iki oksijen atomu, iki NA ligandından gelen iki azot atomu ve bir su molekülünden gelen oksijen atomu ile tahrif olmuş kare-piramidal geometri oluşturmaktadır (Şekil 33). Kompleks monoklinik düzlemde kristallenmiştir. Kristal yapıda bulunan O-H...O, O-H...N ve N-H...O hidrojen bağları ile kristal örgünün dayanıklılığını pekiştirmektedir. Aynı özelliği aromatik halkalar arasındaki  $\pi$ - $\pi$  etkileşimleri de göstermekte olup aromatik halkaların merkezleri arasındaki mesafe: 3.692 Å - 3.794 Å. Komplekste bütün ligandlar monodentat şeklinde koordinasyona girmiştir. C1-O: 1.281 Å, C1-O2: 1.240 Å, C8-O: 1.282 Å, C8-O4: 1.249 Å ve C27-O8: 1.278 Å, C27-O9: 1.249 Å, C34-O10: 1.285 Å, C34-O11: 1.245 Å bağ uzunluklarına eşit demek mümkündür. Cu-O bağ uzunluğu benzoat oksijeni için; 1.933 Å - 1.945 Å olup, su molekülünün oksijeni için de 2.445 Å - 2.479 Å aralığındadır. Ayrıca Cu-N bağ uzunluğu 2.021 Å - 2.044 Å'dur.



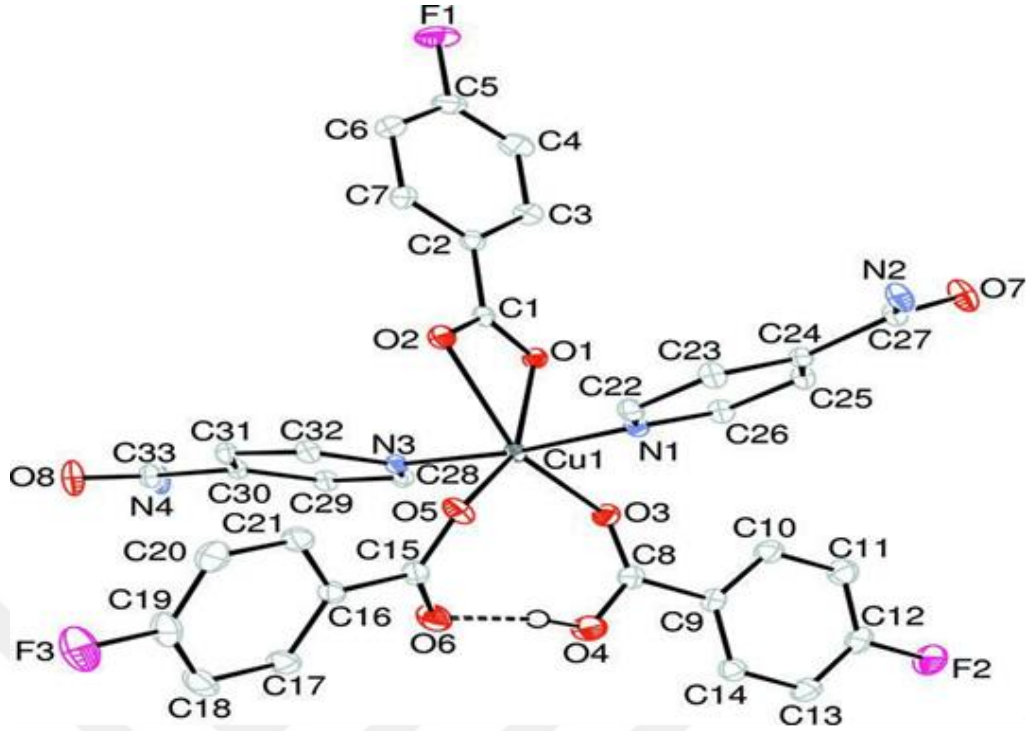
**Şekil 27.**  $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})].0.5\text{NA}.3\text{H}_2\text{O}$  Kompleksinin molekül yapısı [39].

$[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  başlıklı bileşik tek çekirdekli bir komplekstir [40]. Cu atomu kompleksin simetri merkezinde bulunmaktadır. Birim hücre iki NA, iki 4-bromobenzoat ligandı ve iki koordine olmuş su molekülü içermektedir. Cu(II) anyonun etrafındaki en yakın dört oksijen atomu, NA ligandının eksen pozisyonundaki piridin halkasındaki iki azot atomu tarafından oktahedral koordinasyon tamamlanmasıyla kare-düzlem geometrisi şeklinde biçimlenir (Şekil 36). Karboksilat grubu ve komşu benzen halkaları arasındaki dihedral açı  $22.17^\circ$  olup, piridin ve benzen halkaları arasındaki dihedral açı  $82.80^\circ$  dir. Kristal yapıda üç boyutlu ağ içerisindeki moleküller, N-H...O, O-H...O ve C-H...O hidrojen bağları ile bağlanmaktadır. Kristalde zayıf C-H... $\pi$  etkileşimlerine rastlamak da mümkündür. Cu-O bağ uzunlukları  $1.9756 \text{ \AA}$  (benzoat oksijenleri için),  $2.4199 \text{ \AA}$  (su moleküllerinin oksijenleri için) ve Cu-N bağ uzunluğu da  $2.0116 \text{ \AA}$ 'dur. Düzlemsel karboksilat grupları ve komşu benzen halkaları arasındaki dihedral açı  $22.17 \text{ \AA}$  dir.



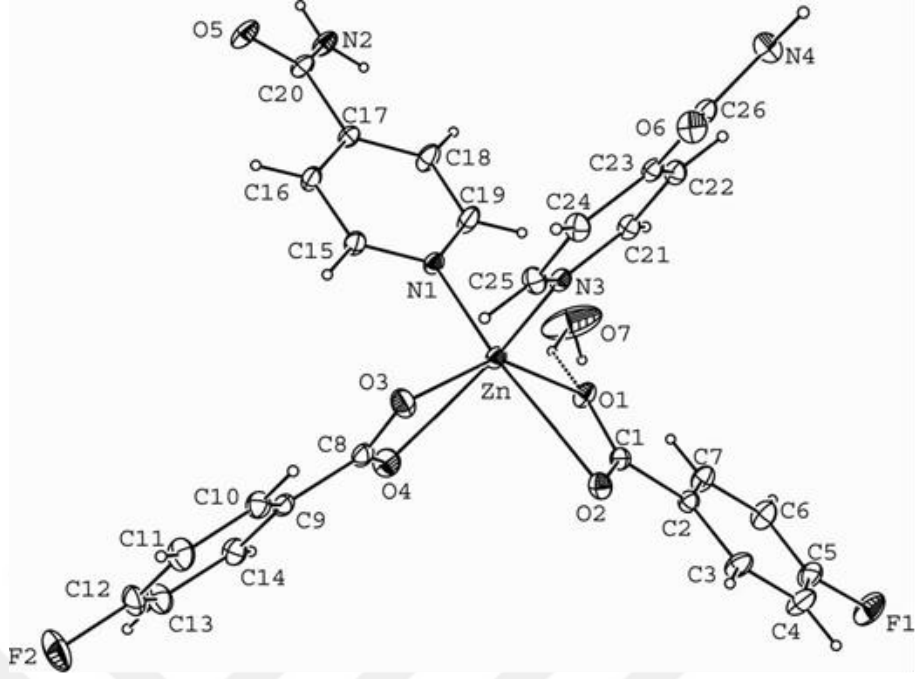
Şekil 28.  $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  Kompleksinin molekül yapısı [40].

$[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{C}_7\text{H}_5\text{FO}_2)(\text{NA})_2]$  başlıklı komplekte [41] Cu atomu ile iki NA ligandından gelen iki azot atomu, iki 4-florobenzoat anyonundan gelen dört oksijen atomu ve bir 4-florobenzoik asit molekülü ile birlikte tahrif olmuş oktahedral geometri oluşturmaktadır (Şekil 37). Moleküldeki iki Cu-O bağ uzunluğu diğer ikisine göre önemli ölçüde daha uzundur. Karboksilat grupları ve komşu benzen halkaları arasındaki dihedral açılar sırasıyla  $11.08^\circ$ ,  $7.62^\circ$  ve  $5.73^\circ$  olup; benzen halkaları  $15.62^\circ$ ,  $33.71^\circ$  ve  $26.60^\circ$  lik dihedral açılarda konumlanmıştır. Kristal yapıda üç boyutlu ağ içerisindeki moleküller önemli ölçüde N-H...O, C-H...F ve C-H...O hidrojen bağları üzerinden etkileşime girmektedir. Benzen halkaları arasındaki  $\pi$ - $\pi$  etkileşimleri kristal yapıyı daha kararlı kılmaktadır (Benzen halkalarının merkezleri arası uzaklık:  $3.5517 \text{ \AA}$ ,  $3.8456 \text{ \AA}$  ve  $3.9265 \text{ \AA}$ ). Kompleks triklinik düzlemde kristallenmiştir. Birim hücre parametreleri ise  $M_r = 726.12$ ,  $a = 10.3370 \text{ \AA}$ ,  $b = 11.6707 \text{ \AA}$ ,  $c = 14.1121 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 110.824^\circ$ ,  $\beta = 101.333^\circ$ ,  $\gamma = 95.761^\circ$ ,  $V = 15.3309 \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 2$  şeklindedir.



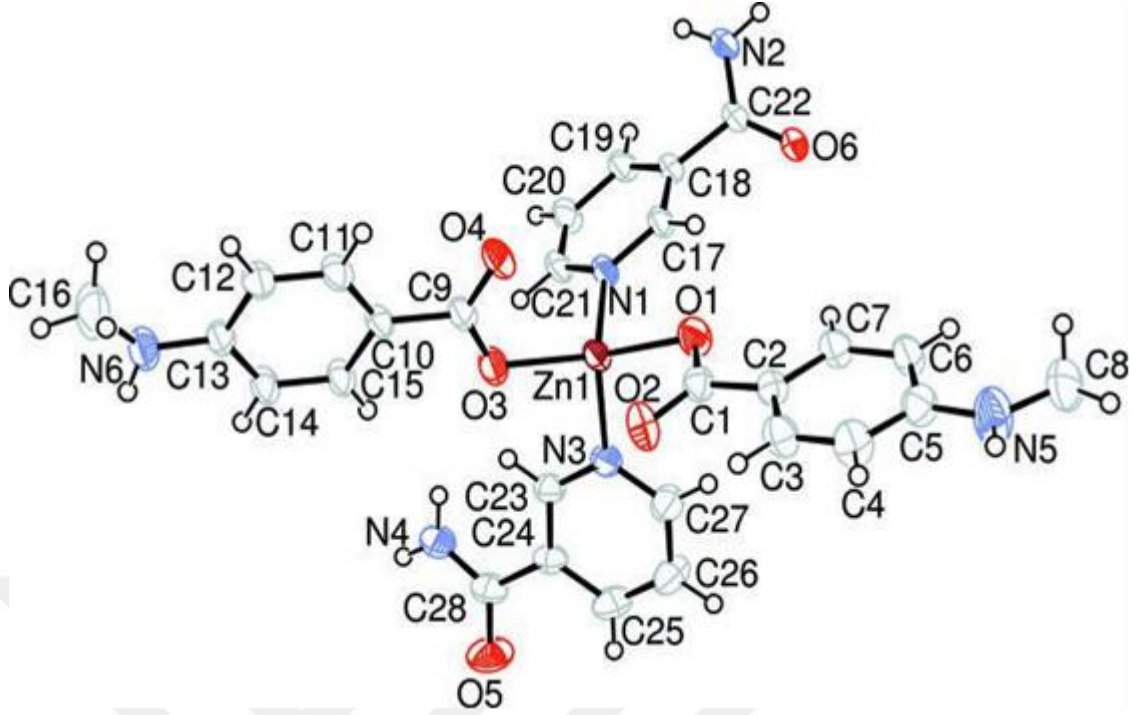
Şekil 29.  $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{C}_7\text{H}_5\text{FO}_2)(\text{NA})_2]$  Kompleksinin molekül yapısı [41].

$[\text{Zn}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{NA})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$  başlıklı bileşik [42] monomeriktir. Kompleks iki 4-florobenzoat ve iki NA ligandı ile koordine olmamış bir su molekülü içermektedir. NAlar monodentat ligandlar gibi rol oynarken; 4-florobenzoatlar çift dişli şelat ligandlar gibi koordinasyona dahil olmaktadır. Zn atomu etrafındaki altı koordinasyonlu geometri, yüksek oranda bozulmuş oktahedral şeklinde de tarif edilebilir (Şekil 38). İki NA ligandı *cis*- konumunda düzenlenmiştir. Kompleksi triklinik düzlemde kristallenmiştir. Birim hücre parametreleri ise  $M_r = 605.87$ ,  $a = 8.2363 \text{ \AA}$ ,  $b = 12.3711 \text{ \AA}$ ,  $c = 14.8971 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 113.178^\circ$ ,  $\beta = 99.015^\circ$ ,  $\gamma = 99.465^\circ$ ,  $V = 1334.7 \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 2$  şeklindedir. Zn-O bağ uzunlukları sırasıyla, Zn-O1:  $1.978 \text{ \AA}$ , Zn-O2:  $2.564 \text{ \AA}$ , Zn-O3:  $2.010 \text{ \AA}$  ve Zn-O4:  $2.458 \text{ \AA}$  olup, Zn-N bağ uzunlukları ise Zn-N1:  $2.079 \text{ \AA}$  ve Zn-N3:  $2.095 \text{ \AA}$ 'dur.



Şekil 30.  $[Zn(C_7H_4FO_2)_2(NA)_2] \cdot H_2O$  Kompleksinin molekül yapısı [42].

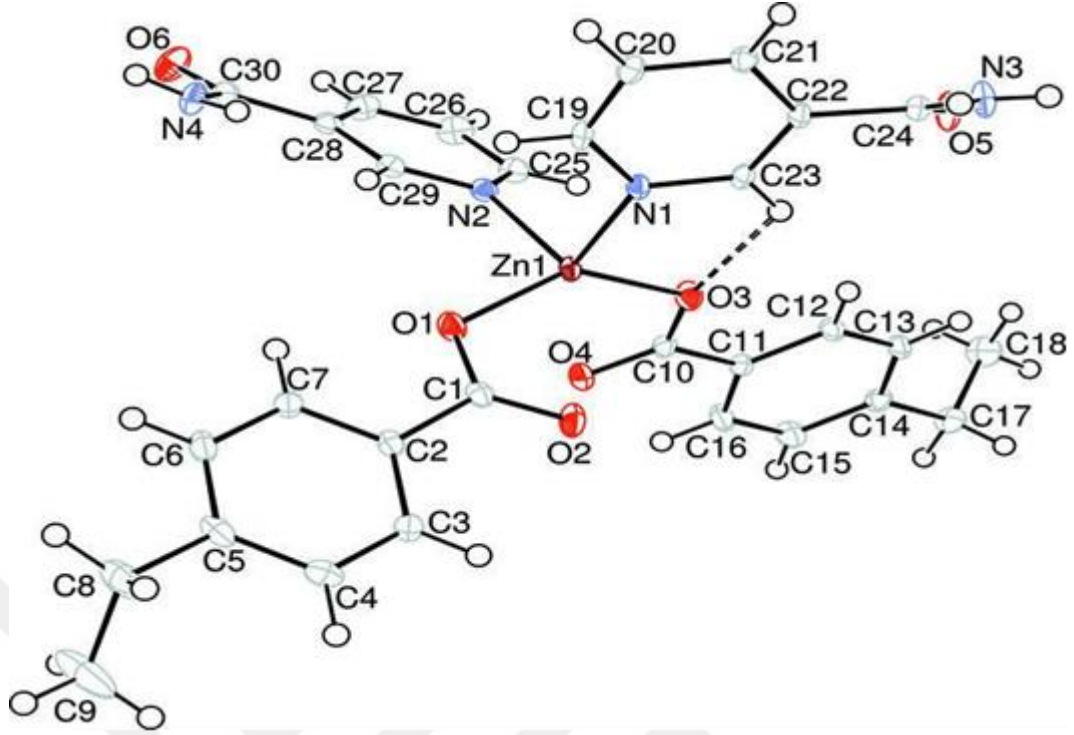
$[Zn(C_8H_8NO_2)_2(NA)_2]$  başlıklı komplekste [43] Zn atomu ile iki monodentat 4-(metilamino)benzoat ve iki monodentat NA ligandından oluşmaktadır. Zn atomunun koordinasyon çevresi bozulmuş tetrahedral geometri oluşturmaktadır (Şekil 39). İki benzen halkası ve iki piridin halkası arasındaki dihedral açılar  $78.30^\circ$  ve  $68.86^\circ$  dir. Kristal yapıda moleküller, sonsuz üç boyutlu ağ içerisinde N-H...O hidrojen bağları üzerinden etkileşime girmektedir. Kompleks monoklinik düzlemde kristallenmiştir. Birim hücre parametreleri:  $M_r = 609.93$ ,  $a = 8.085 \text{ \AA}$ ,  $b = 16.036 \text{ \AA}$ ,  $c = 21.333 \text{ \AA}$ ,  $\beta = 95.78^\circ$ ,  $V = 2751.8 \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 4$ ,  $\mu = 0.95 \text{ mm}^{-1}$ ,  $T = 294 \text{ K}$ 'dir. Zn-O ve Zn-N bağ uzunlukları: Zn1-O1:  $1.9584 \text{ \AA}$  ve Zn1-O3:  $1.9210 \text{ \AA}$  olup, ikisi için de eşit demek mümkündür. Zn1-N1:  $2.0722 \text{ \AA}$  ve Zn1-N3:  $2.0854 \text{ \AA}$  ve aynı durum için Zn-N bağ uzunluklarından da bahsedilebilir.



**Şekil 31.**  $[Zn(C_8H_8NO_2)_2(NA)_2]$  Kompleksinin molekül yapısı [43].

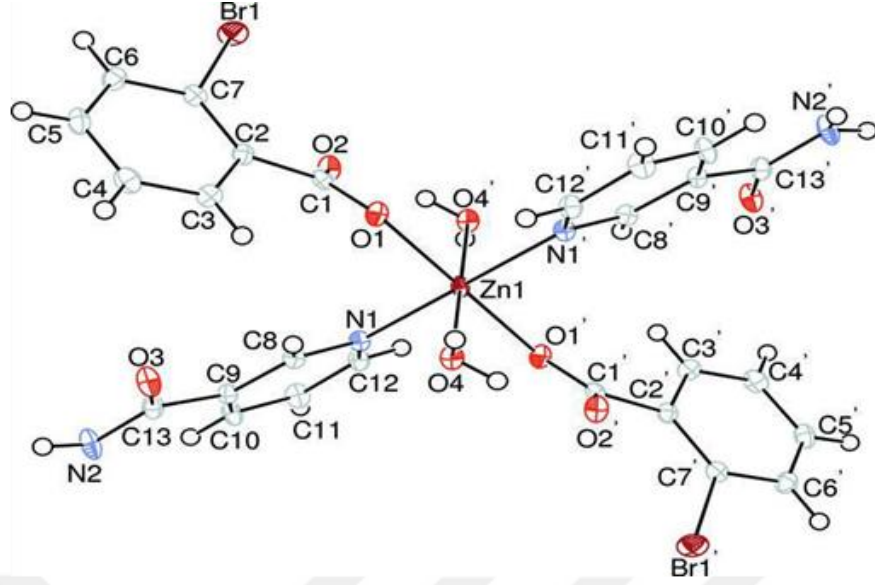
$[Zn(C_9H_9O_2)_2(NA)_2]$  başlıklı komplekste [44] Zn atomuna bağlı iki 4-etilbenzoat ve iki NA ligandı ile bozulmuş tetrahedral koordinasyon yapısına sahiptir (Şekil 40). Kompleks monoklinik düzlemde kristallenme göstermiştir. Kompleksin birim hücre parametreleri:  $M_r = 607.97$ ,  $a = 8.0601 \text{ \AA}$ ,  $b = 15.9736 \text{ \AA}$ ,  $c = 21.2568 \text{ \AA}$ ,  $\beta = 94.384^\circ$ ,  $V = 2728.78 \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 4$ ,  $\mu = 0.95 \text{ mm}^{-1}$ ,  $T = 100 \text{ K}$ . Piridin ve benzen halkaları arasındaki dihedral açılar sırasıyla  $68.46^\circ$  ve  $81.09^\circ$  dir. Karboksilat grupları ve komşu benzen halkası arasındaki dihedral açılar ise sırasıyla  $10.33^\circ$  ve  $2.38^\circ$  dir. Kristal yapıda, moleküller arası N-H...O yapısında hidrojen ile oksijen arasında bir hidrojen bağı mevcuttur ve üç boyutlu bir ağ oluşturur. Benzen halkasında iki zayıf C-H... $\pi$  bağı ve C-H...O etkileşimi vardır. Karboksilat gruplarındaki C1-O1:  $1.282 \text{ \AA}$ , C1-O2:  $1.238 \text{ \AA}$  ve C10-O3:  $1.283 \text{ \AA}$ , C1-O2:  $1.243 \text{ \AA}$  bağları, lokalize tek ve çift bağlanma yerine, delocalize bağlanma örgüsü göstermektedir. Zn-O bağ uzunlukları  $1.9321 \text{ \AA}$  ve  $1.9470 \text{ \AA}$  iken; Zn-N bağ uzunlukları  $2.0525 \text{ \AA}$  ve  $2.0767 \text{ \AA}$  'dur.





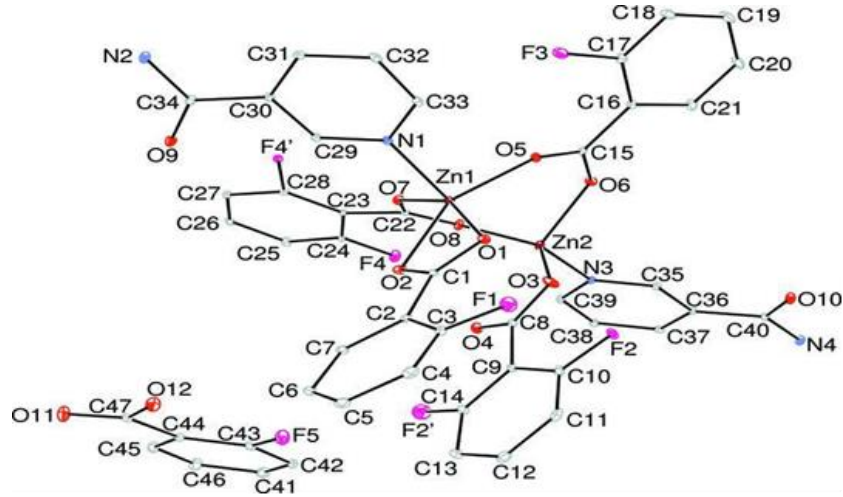
Şekil 32.  $[Zn(C_9H_9O_2)_2(NA)_2]$  Kompleksinin molekül yapısı [44].

$[Zn(C_7H_4BrO_2)_2(NA)_2(H_2O)_2]$  başlıklı [45] tek çekirdekli komplekste simetri merkezinde Zn atomu bulunmaktadır. Molekül, iki 2-bromobenzoat ve iki NA ligandı ile iki koordine olmuş su molekülü içermektedir. Kompleks monoklinik düzlemde kristallenmiştir. Koordinasyona katılan ligandların hepsi tek dişli ligand gibi davranmaktadır. Kompleksin birim hücre parametreleri:  $M_r = 745.68$ ,  $a = 7.9111 \text{ \AA}$ ,  $b = 18.1604 \text{ \AA}$ ,  $c = 9.8345 \text{ \AA}$ ,  $\beta = 106.346^\circ$ ,  $V = 1355.80 \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 2$ ,  $\mu = 3.91 \text{ mm}^{-1}$ . Zn atomunun ekvatorial düzlemdeki en yakın dört oksijen atomu, NA ligandının eksen pozisyonundaki piridin halkalarından gelen iki azot atomu ile hafifçe tahrif olmuş oktahedral geometriyi tamamlamakta ve kare-düzlem şeklinde biçimlenmektedir (Şekil 41). Karboksil grubu ve komşu benzen halkaları arasındaki dihedral açı  $31.14^\circ$  olup, piridin ve benzen halkaları arasındaki dihedral açı  $83.54^\circ$  dir. Kristal yapıda moleküller O-H...O ve N-H...O hidrojen bağları ile bağlanarak sınırsız zincirler oluşturmaktadır. Yapıda zayıf C-H... $\pi$  etkileşimleri de mevcuttur. Zn-O ve Zn-N bağ uzunlukları sırasıyla Zn1-O1:  $2.1182 \text{ \AA}$  ve Zn1-O4:  $2.1647 \text{ \AA}$ , Zn1-N1:  $2.1124 \text{ \AA}$ .



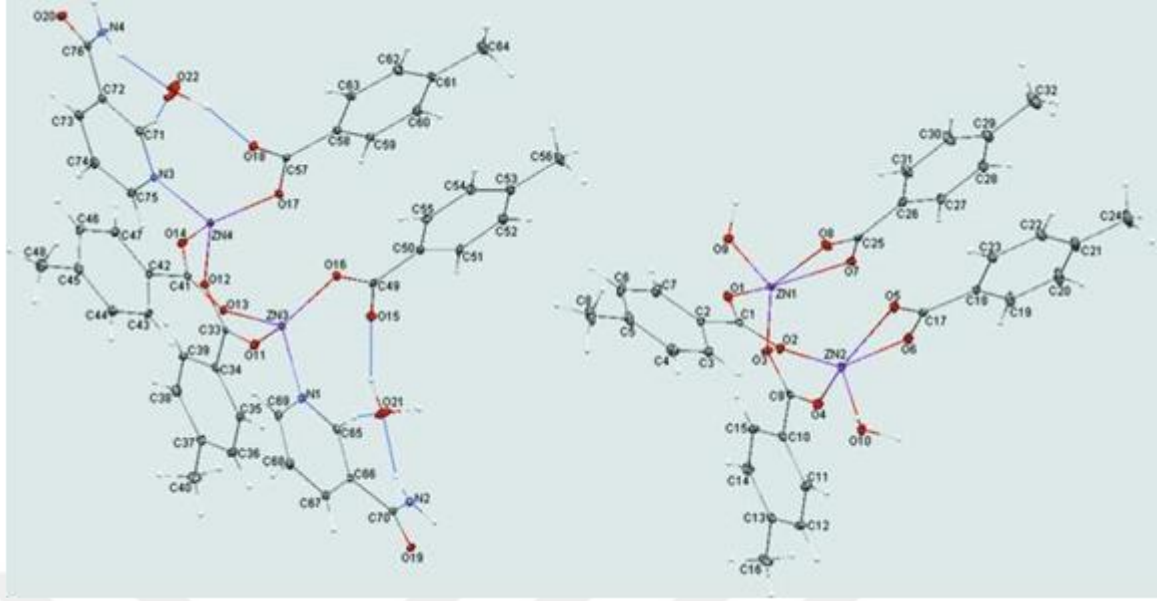
Şekil 33.  $[Zn(C_7H_4BrO_2)_2(NA)_2(H_2O)_2]$  Kompleksinin molekül yapısı [45].

$[Zn_2(C_7H_4FO_2)_4(NA)_2].C_7H_5FO_2$  başlıklı kompleks [46] çift çekirdekli olup Zn atomu ile 2-florobenzoat anyonunun iki karboksilat grupları ve bir 2-florobenzoik asit molekülü ile köprü konumundadır. Bir Zn(II) katyonu, iki köprülü 2-florobenzoat anyonu, bir şelatlı 2-florobenzoat anyonu ve bir NA ligandı ile koordinasyona girerek tahrif olmuş kare-piramidal geometri yapısı oluşturmaktadır. İki köprülü 2-florobenzoat anyonu, bir monodentat 2-florobenzoat anyonu ve bir NA ligandı ile koordinasyonu hafif bozulmuş oktahedral geometriye tamamlamakta ve kare-piramidal tertibinde biçimlenmektedir (Şekil 42). Çift çekirdekli molekülde, piridin halkaları  $19.41^\circ$  lik dihedral açıda konumlanmıştır. Kristal yapıda koordine olmamış 2-florobenzoik asit molekülleri O-H...O hidrojen bağları ile bağlanmaktadır ve simetri merkezli supramoleküllerin dimerleri oluşmaktadır. Üç boyutlu ağdaki kompleks molekülleri, moleküller arası N-H...O hidrojen bağları ile bağlanmaktadır. Birbirine oldukça yakın olan paralel piridin ve benzen halkaları arasındaki  $\pi - \pi$  etkileşimleri kristal yapının kararlılığına katkıda bulunmaktadır. Dihedral açıları sırasıyla  $19.41^\circ$  ve  $12.72^\circ$  olmakla beraber, merkezleri arasındaki mesafe ise  $3.701 \text{ \AA}$  ve  $3.857 \text{ \AA}$ 'dur.



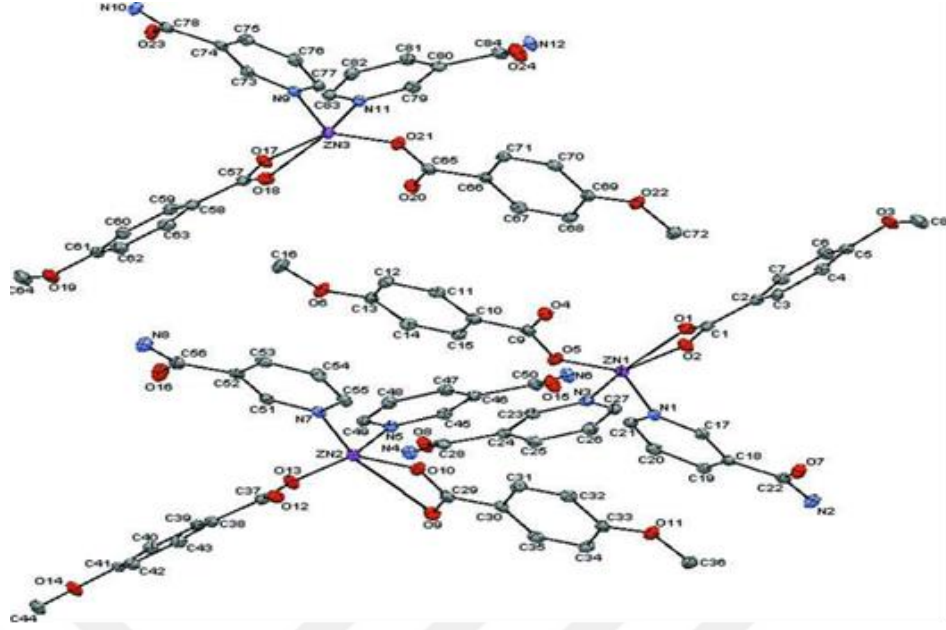
**Şekil 34.**  $[Zn_2(C_7H_4FO_2)_4(NA)_2].C_7H_5FO_2$  Kompleksinin molekül yapısı [46].

$[Zn_2(C_8H_7O_2)_4(H_2O)_2].[Zn_2(C_8H_7O_2)_4(NA)_2].2H_2O$  başlıklı komplekste [47], çift çekirdekli iki çeşit Zn kompleksini (A kompleksi ve B kompleksi) ve koordine olmamış su moleküllerini içermektedir. A bileşiği  $[Zn_2(C_8H_7O_2)_4(H_2O)_2]$  formüllü komplekstir. Bu komplekste her bir Zn(II) katyonu çevresinde, bir 4-metilbenzoat anyonu ile koordine olmuş bir su molekülü şelat oluşturmaktadır. Böylece iki 4-metilbenzoat anyonları trigonalbipiramidal bir geometri içerisinde köprülü ligand olarak görev almaktadır.  $[Zn_2(C_8H_7O_2)_4(NA)_2]$  formüllü B kompleksinde ise her bir Zn(II) katyonu, bir monodentat 4-metilbenzoat anyonu ve bir NA ligandı ile koordinasyona girmektedir. Kompleks tetrahedral geometri yapısı sergilemektedir (Şekil 43). Bu koordinasyon yapısı içerisindeki iki 4-metilbenzoat anyonu yine aynı şekilde köprülü bir ligand görevini üstlenmektedir. B kompleksinde komşu benzen halkaları arasında molekül içi zayıf  $\pi - \pi$  etkileşimleri görülmektedir ve benzen halkalarının merkezleri arasındaki mesafe ise 3.710 Å olmaktadır. Belirtilen kristal yapıda, O-H...O ve N-H...O hidrojen bağı ile zayıf C-H...O hidrojen bağlarına oldukça sık rastlanmaktadır. Kristalin bir rasemik çifti incelendi ve bu rasemik çiftlerden daha küçük olanın bileşen maddelerinin sadece % 38'i incelenmiştir. Zn-O ortalama bağ uzunlukları sırasıyla 2.071 Å ve 1.942 Å'dur.



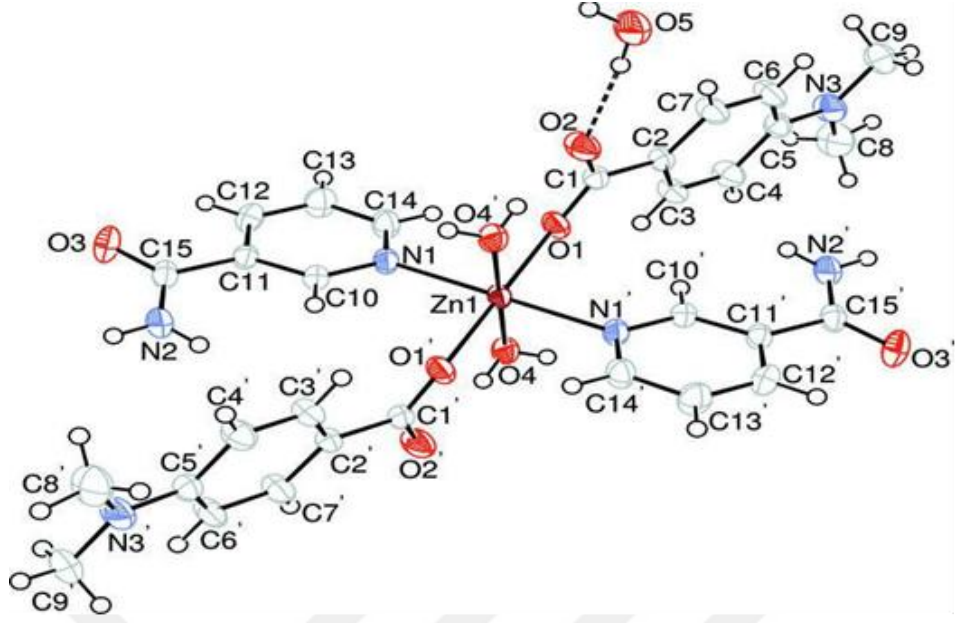
**Şekil 35.**  $[\text{Zn}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{H}_2\text{O})_2].[\text{Zn}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{NA})_2].2\text{H}_2\text{O}$  Kompleksinin molekül yapıları [47].

$[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_3)_2(\text{NA})_2]$  başlıklı kompleksde [48] benzer konfigürasyona sahip birbirinden bağımsız üç kristalografik molekül içermektedir. Kristal triklinik düzlemde kristallenme göstermiştir. Birim hücre parametreleri ise  $M_r = 611.92$ ,  $a = 10.6828 \text{ \AA}$ ,  $b = 16.6230 \text{ \AA}$ ,  $c = 23.8011 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 77.050^\circ$ ,  $\beta = 85.654^\circ$ ,  $\gamma = 78.526^\circ$ ,  $V = 4034.63 \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 6$  şeklindedir.  $[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_3)_2(\text{NA})_2]$  kompleksi, Zn atomu ile iki NA ligandından gelen iki azot atomu ve iki 4-metoksibenzoat anyonundan gelen üç oksijen atomu ile koordinasyonu sonucu bozulmuş trigonal-bipiramidal geometri sergilemektedir (Şekil 44). Birbirinden bağımsız her bir molekülde, bir Zn-O bağ mesafesi diğer ikisine göre önemli ölçüde daha uzundur. Üç molekül için bağ mesafesi sırasıyla şu şekildedir:  $2.5181 \text{ \AA}$ ,  $2.5931 \text{ \AA}$  ve  $2.4085 \text{ \AA}$ . Kristal yapıdaki N-H...O ve C-H...O hidrojen bağları üç boyutlu ağ içerisindeki molekülleri üzerinden etkileşime girmektedir. Piridin halkaları arasındaki ile piridin ve benzen halkaları arasındaki  $\pi - \pi$  etkileşimleri kristal yapının daha fazla kararlı olmasına katkıda bulunmaktadır. Piridin halkaları ile piridin ve benzen halkalarının merkezleri arasındaki mesafeler sırasıyla  $3.7655 \text{ \AA}$  ve  $3.8453 \text{ \AA}$ 'dur.



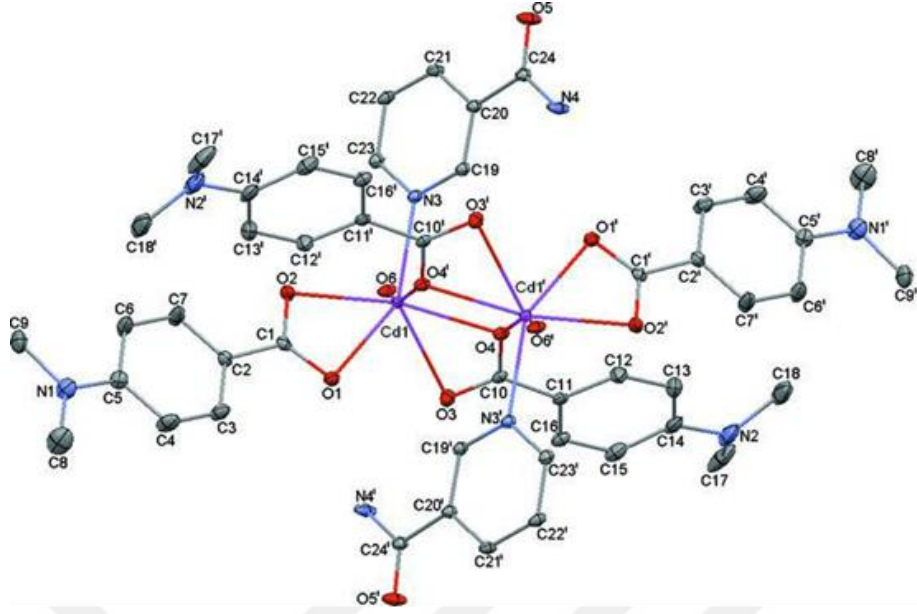
Şekil 36.  $[Zn(C_8H_7O_3)_2(NA)_2]$  Kompleksinin molekül yapısı [48].

$[Zn(C_9H_{10}NO_2)_2(NA)_2(H_2O)_2].2H_2O$  başlıklı komplekste [49] simetri merkezli tek çekirdekli bir komplekstir. Zn(II) kasyonu simetri merkezi üzerinde bulunmaktadır. Kompleks, Zn kasyonu ile iki 4-(metilamino)benzoat anyonu, iki NA ligandı ile iki su molekülü tarafından koordine olmaktadır ve hafif tahrif olmuş oktahedral bir geometri oluşturmaktadır (Şekil 45). Kompleks triklinik düzlemde kristallenmiştir. Birim hücre parametreleri:  $M_r = 710.07$ ,  $a = 8.1810 \text{ \AA}$ ,  $b = 9.9877 \text{ \AA}$ ,  $c = 10.1982 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 76.141^\circ$ ,  $\beta = 88.894^\circ$ ,  $\gamma = 78.200^\circ$ ,  $V = 791.55 \text{ \AA}^3$  şeklindedir. Karboksilat grubu ve bağlı benzen halkası arasındaki dihedral açı  $3.09^\circ$  olup, piridin ve benzen halkaları arasındaki dihedral açı ise  $77.10^\circ$  dir. Koordine olmamış su molekülleri NA ligandlarına O-H...O hidrojen bağları ile bağlanmaktadır. Kristaldeki, moleküller arası N-H...O, O-H...O ve C-H...O hidrojen bağları ile üç boyutlu ağ içerisindeki molekülleri birbirine bağlamaktadır. Yapı içerisinde N-H... $\pi$  etkileşimleri de meydana gelmektedir. Zn-O ve Zn-N bağ uzunlukları sırasıyla Zn1-O:  $2.0442 \text{ \AA}$  ve Zn1-O4:  $2.1503 \text{ \AA}$  ile Zn1-N1:  $2.1963 \text{ \AA}$ 'dur. Ortalama Zn-O bağ uzunluğu  $2.0973 \text{ \AA}$ .



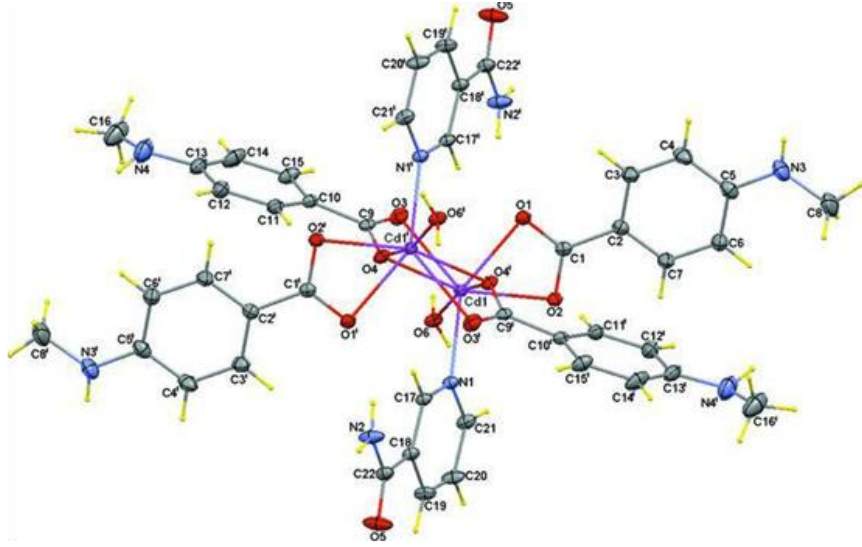
Şekil 37.  $[Zn(C_9H_{10}NO_2)_2(NA)_2(H_2O)_2].2H_2O$  Kompleksinin molekül yapısı [49].

$[Cd_2(C_9H_{10}NO_2)_4(NA)_2(H_2O)_2]$  başlıklı bileşik [50] simetri merkezli dimerik bir kadmiyum kompleksidir. Her biri yedi koordinasyonlu olan Cd atomu, iki 4-(dimetilamino)benzoat anyonunun karboksilat grupları ile şelat oluşturmuştur. Monomerik birimlerden ikisi, iki karboksilat grubundan gelen iki oksijen atomu arasında köprü oluşturmuştur (Şekil 46). Kristal triklinikdir ve Birim hücre parametreleri ise  $M_r = 1161.83$ ,  $a = 9.5453 \text{ \AA}$ ,  $b = 10.2372 \text{ \AA}$ ,  $c = 13.5697 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 74.102^\circ$ ,  $\beta = 79.479^\circ$ ,  $\gamma = 66.547^\circ$ ,  $V = 1165.85 \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 1$  şeklindedir. Kristal yapıdaki moleküller arası O-H...O, N-H...O ve C-H...O hidrojen bağları üç boyutlu ağ içerisindeki moleküller üzerinden etkileşime girmektedir. Cd-O ve Cd-N bağ uzunlukları sırasıyla Cd1-O1: 2.3511 Å, Cd1-O2: 2.3362 Å, Cd1-O3: 2.5705 Å, Cd1-O4i: 2.5762 Å, Cd1-O6: 2.3170 Å ve Cd1-N3: 2.3339 Å. Cd-O' nun ortalama bağ uzunluğu 2.4302 Å. Piridin halkaları arasındaki  $\pi$ - $\pi$  etkileşimleri yapının daha kararlı olmasına katkıda bulunmaktadır. Piridin halkalarının merkezleri arasındaki mesafe: 3.974 Å. Yapı içerisinde zayıf C-H... $\pi$  etkileşimlerinin olduğu da görülmüştür.



**Şekil 38.**  $[Cd_2(C_9H_{10}NO_2)_4(NA)_2(H_2O)_2]$  Kompleksinin molekül yapısı [50].

$[Cd_2(C_8H_8NO_2)_4(NA)_2(H_2O)_2]$  başlıklı bileşik [51] simetri merkezli çift çekirdekli kadmiyum kompleksidir. Kompleksteki Cd metal atomu 4-(metilamino)benzoat anyonlarından gelen iki karboksilat grupları ile şelat oluşturmaktadır, bir NA ligandı ve bir su molekülü ile koordine olmaktadır. Aynı zamanda komşu 4-(metilamino)benzoat anyonlarından gelen bir karboksilat oksijen atomu, Cd atomuna köprü konumunda bağlanarak düzensiz yapıda yedi koordinasyonlu bir geometri oluşturur (Şekil 47). Kompleks triklinik düzlemde kristalleşmektedir. Birim hücre parametreleri ise,  $M_r = 1105.72$ ,  $a = 9.5286 \text{ \AA}$ ,  $b = 10.1734 \text{ \AA}$ ,  $c = 13.2876 \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 72.831^\circ$ ,  $\beta = 75.741^\circ$ ,  $\gamma = 67.172^\circ$ ,  $V = 1121.51 \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 1$  şeklindedir. Kristal yapıdaki moleküller arası O-H...O, N-H...O ve C-H...O hidrojen bağları üç boyutlu ağ içerisindeki moleküllere bağlanırlar. Piridin halkaları arasındaki  $\pi$ - $\pi$  etkileşimleri yapının kararlılığına katkıda bulunmaktadır. Piridin halkalarının merkezleri arasındaki mesafe:  $3.965 \text{ \AA}$ . Ayrıca yapı içerisinde C-H... $\pi$  etkileşimlerinin varlığından söz etmek de mümkündür. Cd-O bağ uzunlukları sırasıyla Cd1-O1:  $2.3170 \text{ \AA}$ , Cd1-O2:  $2.3844 \text{ \AA}$  ve Cd1-O3:  $2.5099 \text{ \AA}$ . Cd-N bağ uzunluğu Cd1-N1:  $2.3265 \text{ \AA}$ . Ortalama Cd-O bağ uzunluğu  $2.4013 \text{ \AA}$  'dur.



Şekil 39.  $[\text{Cd}_2(\text{C}_8\text{H}_8\text{NO}_2)_4(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  Kompleksinin molekül yapısı [51].



## 2. MATERYAL VE YÖNTEM

### 2.1. Materyal

#### 2.1.1. Kullanılan Kimyasal Maddeler

Bu çalışma Kafkas Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Anorganik Kimya Araştırma Laboratuvarında gerçekleştirilmiştir. Komplekslerin sentezinde 2-iyodobenzoik asit, NA, sodyum bikarbonat, nikel(II)sülfat heksahidrat, kobalt(II)sülfat heptahidrat ve bakır(II)sülfat pentahidrat kullanılmıştır.

#### 2.1.2. Kullanılan Aletler

Çalışmada sentezlenen bileşiklerin yapı aydınlatılmasında kullanılan FT-IR Spektrumları Kafkas Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümünde, ALPHA-P BRUKER FT-IR spektrometresinde alınmıştır. Elementel analiz sonuçları İnönü Üniversitesi Merkez Araştırma Laboratuvarında LECO CHNS 932 elementel analiz cihazında alınmıştır. Termal bozunmaları Hacettepe Üniversitesi Fen Fakültesi Kimya Bölümünde Rigaku TG 8110 termik analizatörlü TAS 100 model cihaz ile azot atmosferinde alınmıştır. Tek kristal X-Işınları Verileri Anadolu Üniversitesi Merkez Araştırma Laboratuvarında Bruker Kappa APEX 2 CCD cihazında alınmıştır.

### 2.2. Sentez

#### 2.2.1. Katena-Poli[[aqua(2-iyodobenzoat-κO)-kobalt(II)]-μ-aqua-μ-2-iyodobenzoat-κ<sup>2</sup>O:O'] (1)

Sentez için ilk olarak CoSO<sub>4</sub>.7H<sub>2</sub>O (1,41 g, 5 mmol) saf su (50 ml) içerisinde çözüldü. Daha sonra 2-iyodobenzoik asidin sodyum tuzu için 2-iyodobenzoik asit (2,48 g, 10 mmol) ve sodyum bikarbonat (0,84g, 10 mmol) 100 ml suda 60 °C'de karbondioksit tamamen uzaklaşmaya kadar karıştırıldı ve kobalt sülfat çözeltisi üzerine süzülerek eklendi ve kristallenmesi için bırakıldı. Bir hafta sonunda pembe kristaller oluştu. 1 nolu kompleks olarak tanımlandı.

#### 2.2.2. Katena-Poli[[aqua(2-iyodobenzoat-κO)-nikel(II)]-μ-aqua-μ-2-iyodobenzoat-κ<sup>2</sup>O:O'] (2)

Sentez için ilk olarak NiSO<sub>4</sub>.6H<sub>2</sub>O (1,31 g, 5 mmol) saf su (50 ml) içerisinde çözüldü. Daha sonra 2-iyodobenzoik asidin sodyum tuzu için 2-iyodobenzoik asit (2,48 g, 10 mmol) ve sodyum bikarbonat (0,84g, 10 mmol) 100 ml suda 60 °C'de karbondioksit

tamamen uzaklaşınca kadar karıştırıldı ve kobalt sülfat çözeltisi üzerine süzülerek eklendi ve sonra kristallenmesi için bırakıldı. 5-6 gün sonunda yeşil kristaller oluştu. **2** nolu kompleks olarak tanımlandı.

### **2.2.3. Tetrakis( $\mu$ -2-iyodobenzoat- $\kappa^2$ O:O')bis-[aquabakır(II)] (3)**

Sentez için ilk olarak  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  (1,25 g, 5 mmol) saf su (100 ml) içerisinde çözüldü. Daha sonra 2-iyodobenzoik asidin sodyum tuzu için 2-iyodobenzoik asit (2,48 g, 10 mmol) ve sodyum bikarbonat (0,84g, 10 mmol) 100 ml suda 60 °C'de karbondioksit tamamen uzaklaşınca kadar karıştırıldı ve bakır sülfat çözeltisi üzerine süzülerek eklendi daha sonra kristallenmesi için bırakıldı. Bir gün sonunda yeşil kristaller oluştu. **3** nolu kompleks olarak tanımlandı.

### **2.2.4. Diaquabis(2-iyodobenzoat- $\kappa$ O)bis-(nikotinamid- $\kappa$ N<sup>1</sup>)kobalt(II) (4)**

Sentez için ilk olarak  $\text{CoSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$  (1,41 g, 5 mmol) 20 ml saf su içerisinde çözüldü ve NA (1,22g, 10 mmol) saf su (20 ml) içerisinde çözünerek kobalt sülfat çözeltisi üzerine eklendi. Daha sonra 2-iyodobenzoik asidin sodyum tuzu için 2-iyodobenzoik asit (2,48 g, 10 mmol) ve sodyum bikarbonat (0,84g, 10 mmol) 100 ml suda 60 °C'de karbondioksit tamamen uzaklaşınca kadar karıştırıldı ve kobalt sülfat çözeltisi üzerine süzülerek eklendi ve kristallenmesi için bırakıldı. 4-5 gün sonunda pembe kristaller oluştu. **4** nolu kompleks olarak tanımlandı.

### **2.2.5. Diaquabis(2-iyodobenzoat- $\kappa$ O)bis-(nikotinamid- $\kappa$ N<sup>1</sup>)nikel(II) (5)**

Sentez için ilk olarak  $\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  (1,31 g, 5 mmol) saf su (20 ml) içerisinde çözüldü ve NA (1,22g, 10 mmol) saf su (20 ml) içerisinde çözünerek kobalt sülfat çözeltisi üzerine eklendi. Daha sonra 2-iyodobenzoik asidin sodyum tuzu için 2-iyodobenzoik asit (2,48 g, 10 mmol) ve sodyum bikarbonat (0,84g, 10 mmol) 100 ml suda 60 °C'de karbondioksit tamamen uzaklaşınca kadar karıştırıldı ve nikel sülfat çözeltisi üzerine süzülerek eklendi ve kristallenmesi için bırakıldı. 4-5 gün sonunda yeşil kristaller oluştu. **5** nolu kompleks olarak tanımlandı.

### 2.2.6. Diaquabis(2-iyodobenzoat-κO)bis-(nikotinamid-κN<sup>1</sup>)bakır(II) (6)

Sentez için ilk olarak CuSO<sub>4</sub>.5H<sub>2</sub>O (1,25 g, 5 mmol) saf su (20 ml ) içerisinde çözüldü ve NA (1,22g, 10 mmol) saf su (20 ml) içerisinde çözünerek bakır sülfat çözeltisi üzerine eklendi. Daha sonra 2-iyodobenzoik asidin sodyum tuzu için 2-iyodobenzoik asit (2,48 g, 10 mmol) ve sodyum bikarbonat (0,84g, 10 mmol) 100 ml suda 60 °C’de karbondioksit tamamen uzaklaşincaya kadar karıştırıldı ve bakır sülfat çözeltisi üzerine süzülerek eklendi ve kristallenmesi için bırakıldı. 1 hafta sonunda mavi kristaller oluştu. 6 nolu kompleks olarak tanımlandı.

### 3. BULGULAR

#### 3.1. Katena-Poli[[aqua(2-iyodobenzoat-κO)-kobalt(II)]-μ-aqua-μ-2-iyodobenzoat-κ<sup>2</sup>O:O'] (1) Kompleksinin X Işınları Analizi

Tablo 1. (1) kompleksinin kristal parametreleri

##### Kristal Özellikleri

|                           |   |
|---------------------------|---|
| Kimyasal Formül           | Co(C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> IO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> |
| Molekül Ağırlığı          | 588,97  |
| Kristal Sistemi           | Ortorombik  |
| Birim Hücre Parametreleri | a = 7,5051 (3), b = 10,5639 (4), c = 21,6723 (9) Å  |
| Birim Hücre Hacmi         | 1718,25 (12) Å <sup>3</sup>   |
| Boyut/Biçim/Renk          | 0,26 x 0,23 x 0,17 mm <sup>3</sup> /Blok/Turuncu  |

#### 3.2. Tetrakis(μ-2-iyodobenzoat-κ2O:O')bis-[aquabakır(II)] (3) Kompleksinin X Işınları Analizi

Tablo 2. (3) kompleksinin kristal parametreleri

##### Kristal Özellikleri

|                           |  |
|---------------------------|--|
| Kimyasal Formül           | [Cu <sub>2</sub> (C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> IO <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] |
| Molekül Ağırlığı          | 1151,14  |
| Kristal Sistemi           | Triklinik  |
| Birim Hücre Parametreleri | a = 7,3563 (2), b = 10,7448 (3), c = 10,9066 (3) Å<br>α = 83,167 (3)°, β = 72,779 (2)°, γ = 77,227 (2)°          |
| Birim Hücre Hacmi         | 801,73 (4) Å <sup>3</sup>  |

Boyut/Biçim/Renk 0,39 x0,36 x0,24 mm<sup>3</sup>/Blok/Yeşil

**3.3. Diaquabis(2-iyodobenzoat-κO)bis-(nikotinamid-κN1)kobalt(II) (4)  
Kompleksinin X Işınları Analizi**

Tablo 3. (4) kompleksinin kristal parametreleri

| Kristal Özellikleri       |   |
|---------------------------|---|
| Kimyasal Formül           | Co(C <sub>7</sub> H <sub>4</sub> IO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (NA) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub>           |
| Molekül Ağırlığı          | 833,22  |
| Kristal Sistemi           | Monoklinik  |
| Birim Hücre Parametreleri | a = 7,5051 (3), b = 10,5639 (4), c = 21,6723 (9) Å<br>a = 7,9475 (2), b = 19,7551 (4), c = 9,7070 (3) Å°<br>β= 108,642 (3)° |
| Birim Hücre Hacmi         | 1444,07 (7)Å <sup>3</sup>   |
| Boyut/Biçim/Renk          | 0,35 x0,22 x0,17 mm <sup>3</sup> /Blok/Pembe  |

**3.4. Diaquabis(2-iyodobenzoat-κO)bis-(nikotinamid-κN1)bakır(II) (6)  
Kompleksinin X Işımları Analizi**

**Tablo 4. (6) kompleksinin kristal parametreleri**

| Kristal Özellikleri       |  |
|---------------------------|--|
| Kimyasal Formül           | $\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2$            |
| Molekül Ağırlığı          | 837,85   |
| Kristal Sistemi           | Monoklinik   |
| Birim Hücre Parametreleri | $a = 8,1617 (2), b = 18,3365 (4), c = 9,7047 (3) \text{ \AA}$<br>$\beta = 103,573 (3)^\circ$ |
| Birim Hücre Hacmi         | 1411,81 (7) $\text{Å}^3$   |
| Boyut/Biçim/Renk          | 0,39 x 0,36 x 0,24 mm <sup>3</sup> /Blok/Mavi  |

**Tablo 5. Komplekslerinin elementel analiz verileri**

| Kod | Kompleksler   | % C                | % H                | % N                |
|-----|---|--------------------|--------------------|--------------------|
|     |   | <i>Den.-teorik</i> | <i>Den.-teorik</i> | <i>Den.-teorik</i> |
| 1   | $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$              | 28,55-28,48        | 2,05-2,24          | -                  |
| 2   | $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$              | 28,54-27,86        | 2,05-2,27          | -                  |
| 3   | $[\text{Cu}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_4(\text{H}_2\text{O})_2]$            | 29,21-29,29        | 1,75-2,00          | -                  |
| 4   | $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ | 37,50-37,48        | 3,08-2,90          | 6,70-6,72          |
| 5   | $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ | 37,49-37,39        | 3,06-2,90          | 6,73-6,72          |
| 6   | $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ | 37,27-38,81        | 2,89-2,77          | 6,69-6,93          |

**Tablo 6.** Komplekslerin FT-IR spektrum verileri

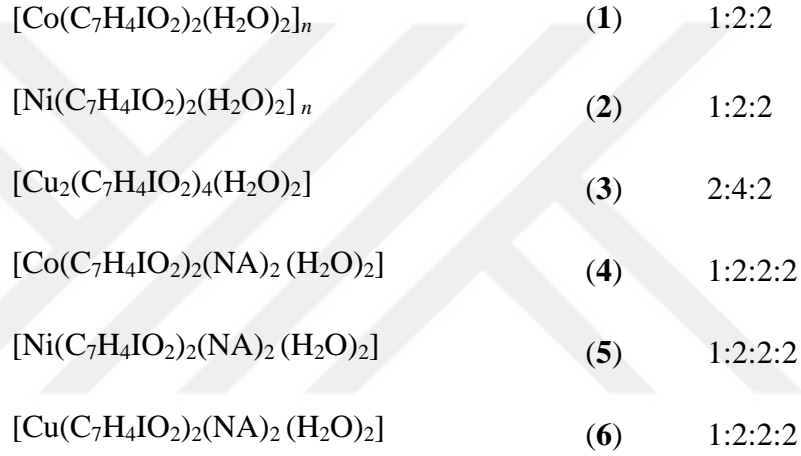
| GRUPLAR                          | (1)  | (2)  | (3)  | (4)  | (5)  | (6)  |
|----------------------------------|------|------|------|------|------|------|
| $\nu(\text{OH})$                 | 3600 | 3600 | 3600 | 3600 | 3600 | 3600 |
|                                  | 3000 | 3000 | 3000 | 3000 | 3000 | 3000 |
| $\nu(\text{C=O})_{\text{amid}}$  | -    | -    | -    | 1691 | 1688 | 1668 |
| $\nu(\text{C=C})_{\text{halka}}$ | 1580 | 1573 | 1580 | 1624 | 1625 | 1629 |
| $\nu(\text{N-H})$                | -    | -    | -    | 3492 | 3496 | 3373 |
|                                  | -    | -    | -    | 3370 | 3365 | 3311 |
| $\nu(\text{COO}^-)_{\text{as}}$  | 1549 | 1543 | 1555 | 1571 | 1538 | 1541 |
| $\nu(\text{COO}^-)_{\text{s}}$   | 1397 | 1384 | 1383 | 1379 | 1381 | 1361 |
| $\Delta\nu$                      | 152  | 159  | 172  | 192  | 157  | 180  |
| $\nu(\text{C-N})_{\text{py}}$    | -    | -    | -    | 1049 | 1035 | 1053 |
| $\nu(\text{C-H})_{\text{halka}}$ | -    | -    | -    | 3075 | 3215 | 3069 |
| <i>o</i> -<br>disubstitue benzen | 746  | 740  | 740  | 746  | 744  | 742  |
| $\nu(\text{C-N})_{\text{amid}}$  | -    | -    | -    | 1101 | 1035 | 1113 |
| $\nu(\text{M-O})$                | 635  | 636  | 637  | 634  | 650  | 633  |
| $\nu(\text{M-N})$                | -    | -    | -    | 471  | 480  | 474  |

#### 4. TARTIŞMA VE SONUÇ

##### Spektroskopik Deęerlendirme

İlk kez sentezlenen 6 adet 2-iyodobenzoat kompleksinde metal olarak Co(II), Ni(II) ve Cu(II) kullanılmıřtır. Sentezlenen 3 adet komplekste sadece Co(II), Ni(II) ve Cu(II) ve 2-iyodobenzoattan oluřurken; 3 adet kompleks Co(II), Ni(II) ve Cu(II) ve 2-iyodobenzoat/NA den oluřmuřtur.

Yapılan analiz sonuları neticesinde komplekslerin formllerinin ařaęıdaki gibi oldukları tahmin edilmektedir:



Sentezlenen bileřiklerin FT-IR spektrumları sonucunda fonksiyonel gruplara ait pikler yeni bileřiklerin yapılarının tahmininde kullanılmıřtır (Tablo 6).

Kompleksleri Me(II) o-iyodobenzoik asit ve Me(II) o-iyodobenzoik asit/NA olmak zere iki guruba ayırabiliriz.

Sentezlenen komplekslerin tamamında  $3600\text{-}3000\text{ cm}^{-1}$  civarında grlen pikler komplekslerin yapılarındaki koordinasyon suyunun -OH grubundan ileri gelmektedir.

Literatrde o-halojenobenzoik asit C=O titreřimleri  $1664\text{ cm}^{-1}$ 'de gzlenmiřtir [52]. Komplekslerimizin FT-IR sonuları incelendięinde (Ek Őekil 1-6) asimetric ve simetric  $\text{COO}^-$  titreřimleri  $1549\text{-}1397\text{ cm}^{-1}$  (1),  $1543\text{-}1384\text{ cm}^{-1}$  (2),  $1555\text{-}1383\text{ cm}^{-1}$  (3),  $1571\text{-}1379\text{ cm}^{-1}$  (4),  $1538\text{-}1381\text{ cm}^{-1}$  (5) ve  $1581\text{-}1361\text{ cm}^{-1}$  (6)'de gzlenmiřtir. o-iyodobenzoik asidin sodyum tuzu iin bu pikler literatrde  $1542\text{-}1405\text{ cm}^{-1}$ 'de



kaydedilmiş ve  $\Delta$  değeri  $137 \text{ cm}^{-1}$  olarak bulunmuştur [53]. Kompleksler için  $\Delta$  değerleri  $152 \text{ cm}^{-1}$  (1),  $159 \text{ cm}^{-1}$  (2),  $172 \text{ cm}^{-1}$  (3),  $192 \text{ cm}^{-1}$  (4),  $157 \text{ cm}^{-1}$  (5) ve  $180 \text{ cm}^{-1}$  (6) olarak hesaplanmıştır.

Literatürde nikotinamidin amid C=O titreşimi  $1679 \text{ cm}^{-1}$  olarak kaydedilmiştir. Metal(II) o-iyodobenzoik asit/NA komplekslerinin amid gruplarına ait C=O titreşimleri  $1691 \text{ cm}^{-1}$  (4),  $1688 \text{ cm}^{-1}$  (5) ve  $1668 \text{ cm}^{-1}$  (6) olarak gözlemlenmiştir. Bu kuvvetli valans titreşimleri amid grubunun azot ve oksijen atomlarının koordinasyona katılmadığını göstermektedir.

Literatürde nikotinamidin metal komplekslerinde  $\text{NH}_2$  gruplarına ait N-H gerilme titreşimleri  $(3368-3163) \text{ cm}^{-1}$  ve  $(3371-3188) \text{ cm}^{-1}$  aralığında görülmektedir. [53,54]. Bu ligandın bulunduğu 4, 5 ve 6 numaralı kompleksler için titreşim değerleri ise sırasıyla  $(3492-3370) \text{ cm}^{-1}$ ,  $(3496-3365) \text{ cm}^{-1}$ ,  $(3373-3311) \text{ cm}^{-1}$  aralıklarında gözlenmiştir.

Komplekslerin temelini oluşturan Me-O ve Me-N (Me:Co, Ni, Cu) bağlanmalarına uygun gelen absorpsiyon bantları Me-O için;  $635 \text{ cm}^{-1}$  (1),  $636 \text{ cm}^{-1}$  (2),  $637 \text{ cm}^{-1}$  (3),  $635 \text{ cm}^{-1}$  (4),  $635 \text{ cm}^{-1}$  (5) ve  $635 \text{ cm}^{-1}$  (6) gerilme titreşimlerini, Me-N için;  $471 \text{ cm}^{-1}$  (4),  $480 \text{ cm}^{-1}$  (5) ve  $474 \text{ cm}^{-1}$  (6) gerilme titreşimlerini vermektedir.

**1** Nolu kompleksin DTA eğrisi incelendiğinde (Ek Şekil 7)  $127$ ,  $233$  ve  $636^\circ\text{C}$  maksimum sıcaklıklar görülmektedir. Kompleks üç basamakta bozunmaya uğramıştır.  $(96-182)^\circ\text{C}$  sıcaklık aralığında ilk bozunma ile iki mol su molekülü uzaklaşmaktadır (den. %6,15,teo. %6,11).  $(182-900)^\circ\text{C}$  arasında iki basamakta ise 2-iyodobenzoat ligandı parçalanarak son ürün olarak CoO kaldığı tahmin edilmektedir.

**2** Nolu kompleks ile **1** nolu kompleksin DTA eğrileri (Ek Şekil 8) benzerlik göstermektedir. Kompleks üç basamakta bozunmaya uğramıştır.  $(87-152)^\circ\text{C}$  Sıcaklık aralığında ilk bozunma ile iki mol su molekülü uzaklaşmaktadır (den. %6,16, teo. %6,15).  $(52-900)^\circ\text{C}$  Sıcaklık aralığında 2-iyodobenzoat ligandı iki basamakta parçalanarak son ürün olarak NiO kaldığı tahmin edilmektedir.

**3** Nolu kompleksin DTA eğrisine baktığımızda (Ek Şekil 9)  $148$ ,  $375$  ve  $666^\circ\text{C}$  maksimum sıcaklıkları görülmektedir. Üç basamakta bozunan komplekste ilk olarak

(123-158) °C Sıcaklık aralığında iki mol su molekülü uzaklaşmaktadır (den. %3,13,teo. %3,12). (158-900)°C Sıcaklık aralığında 2-iyodobenzoat ligandı iki basamakta parçalanarak son ürün olarak CuO kaldığı tahmin edilmektedir.

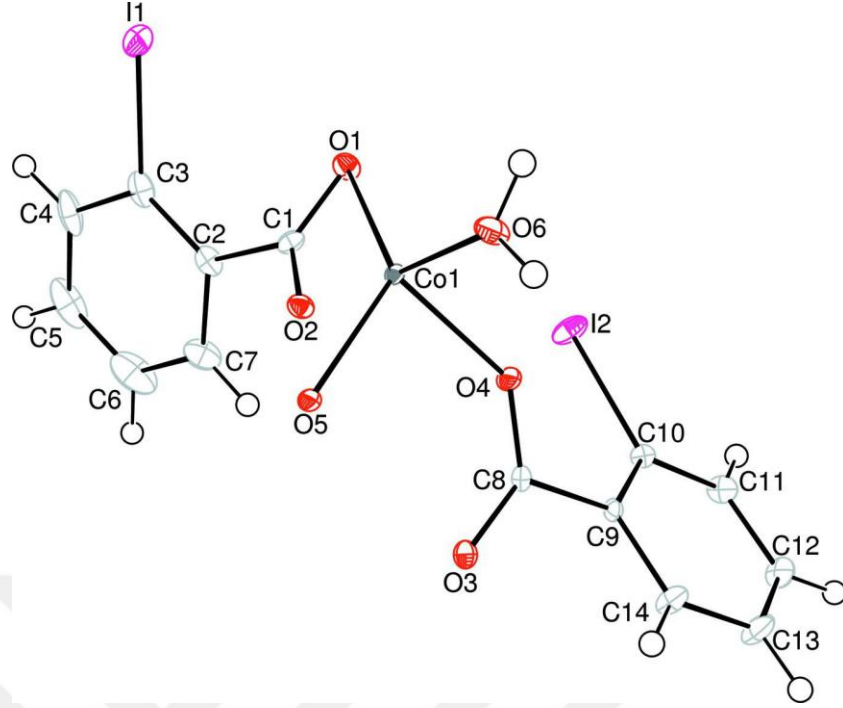
4 Nolu kompleksin DTA eğrisi incelendiğinde (Ek Şekil 10) 108, 141, 193, 254 ve 621 °C maksimum sıcaklıkları görülmektedir. Kompleks dört basamakta bozunmaya uğramıştır. (70-127) °C Sıcaklık aralığında ilk bozunma ile iki mol su molekülü uzaklaşmaktadır (den. %3,80, teo. %3,84). İkinci basamakta (127-294) °C arasında parçalanan molekülün nikotinamid ligandı olduğu deneysel ve teorik hesapları karşılaştırdığımızda anlaşılmaktadır (den. %31,39, teo. %30,48). Sonraki iki basamakta ise 2-iyodobenzoat ligandı parçalanarak son ürün olarak CoO kaldığı tahmin edilmektedir.

4 Nolu kompleks ile eş yapılı olan 5 ve 6 nolu kompleksler de DTA eğrilerine baktığımızda benzer bir parçalanma sonucunda metal oksitlerin kaldığı görülmektedir(Ek Şekil 11-12).

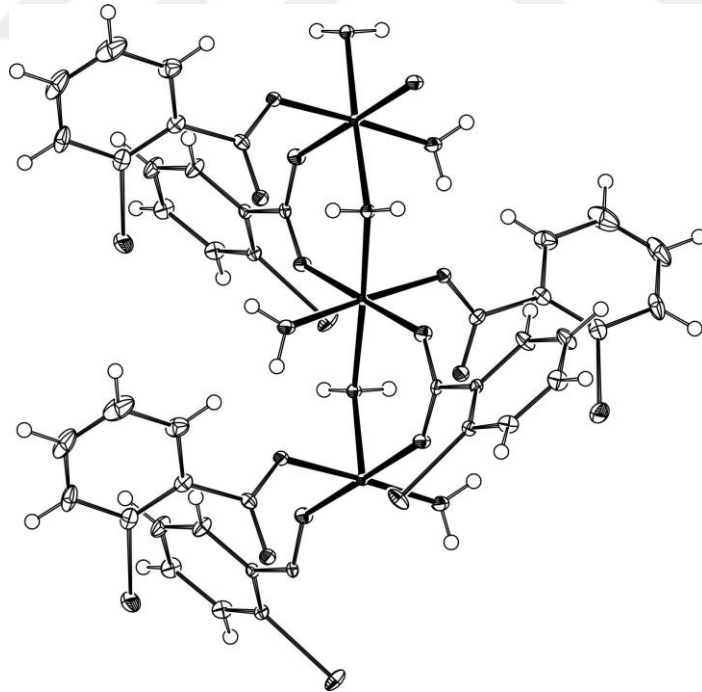
Komplekslerin X-ışınları tek kristal yapı analizleri sonucu ve spektroskopik sonuçlar ışığında elde ettiğimiz yapılar ve tahmini yapılar şu şekildedir.

1 nolu kompleks  $[Co(C_7H_4IO_2)_2(H_2O)_2]_n$  kapalı formülüne sahiptir. Bu komplekste  $Co^{+2}$  kasyonu, iki o-iyodobenzoat anyonu ve iki su molekülünden oluşmaktadır (Şekil 52). Bir iyodobenzoat anyonu ve bir su molekülü, komşu kobalt katyonlara bitişik bir eksen boyunca ilerleyen bir polimerik zincir oluşturur, diğer iyodobenzoat anyonu ve su molekülü ise hafif bozulmuş oktahedral geometriyi tamamlayarak, kobalt katyonuna monodentat bir şekilde koordine olmasını sağlar (Şekil 53).

Kristal yapıda su molekülleri ve karboksilat grubunun O atomu arasında moleküller arası O-H...O hidrojen bağları vardır. Kristal yapıdaki zayıf C-H...O hidrojen bağları polimerik zincirleri üç boyutlu bir supramoleküler ağ oluşturacak şekilde bağlar (Şekil 52 ve 53) [55].

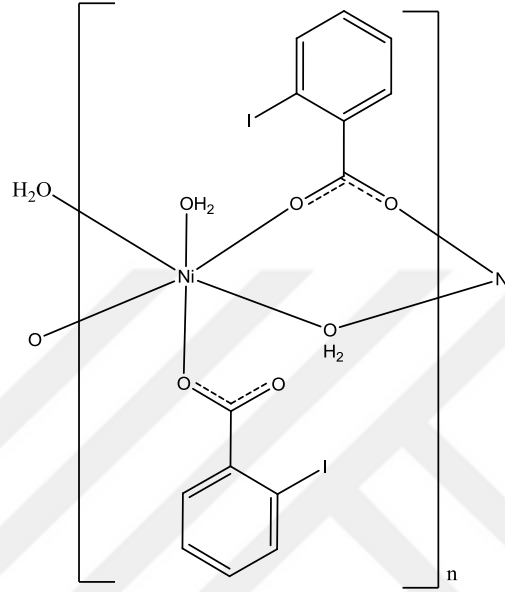


Şekil 40.  $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]_n$  kompleksinin moleküler yapısı [55]



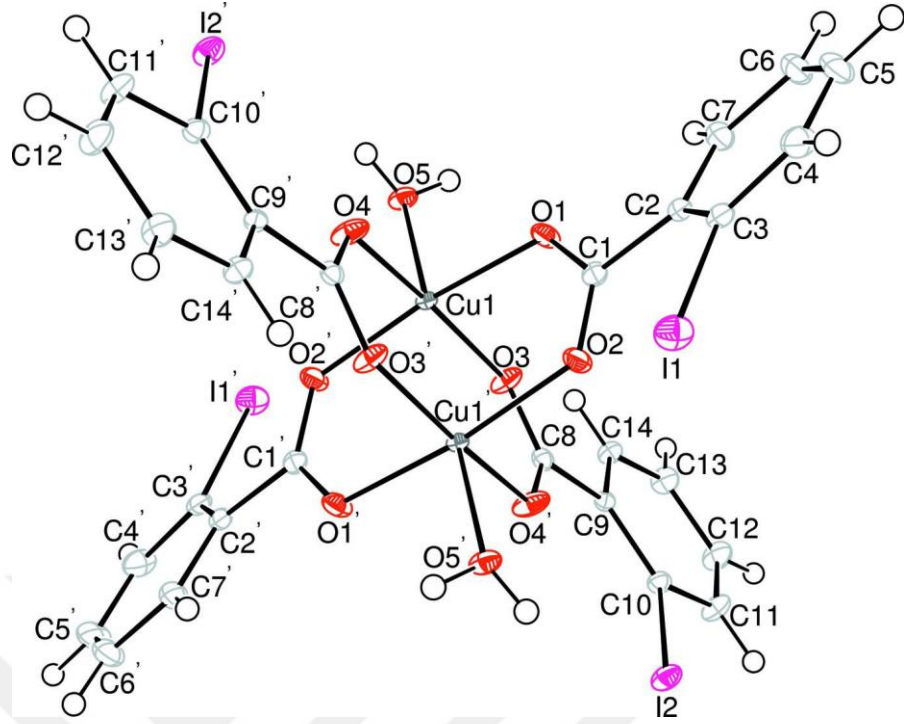
Şekil 41.  $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]_n$  kompleksinin polimerik yapısı [55]

**1** ve **2** numaralı komplekslerin eş yapıları olduğu düşünülmektedir. Bir iyodobenzoat anyonunun ve bir su molekülünün, komşu nikel katyonlara bitişik bir eksen boyunca ilerleyen bir polimerik zincir oluşturduğu ve diğer iyodobenzoat anyonu ve su molekülünün ise hafif bozulmuş oktahedral geometriyi tamamladığı tahmin edilmektedir. Spektroskopik verileri kıyaslandığımızda bu yapıyı doğrulamaktadır.



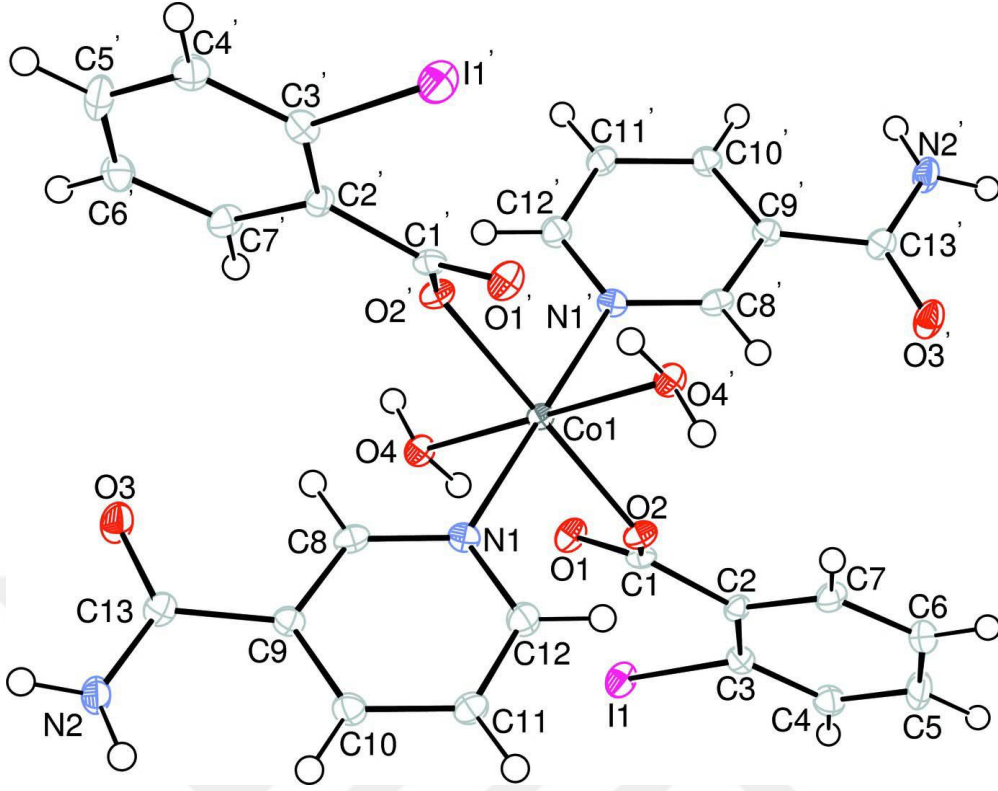
**Şekil 42.**  $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]_n$  kompleksinin tahmini kimyasal diyagramı

**3** nolu kompleks çift çekirdekli olup  $[\text{Cu}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_4(\text{H}_2\text{O})_2]$  kapalı formülüne sahiptir. Dört 2-iyodobenzoat ligandı Cu atomları arasında köprü oluşturmuşlardır. Her bir Cu(II) iyonunun çevresi 2-iyodobenzoatın en yakın dört oksijen atomu ile çarpık kare düzlem oluşturur ve su molekülünün oksijen atomu tarafından çarpık kare piramidal koordinasyon tamamlanır (Şekil 55) [56].

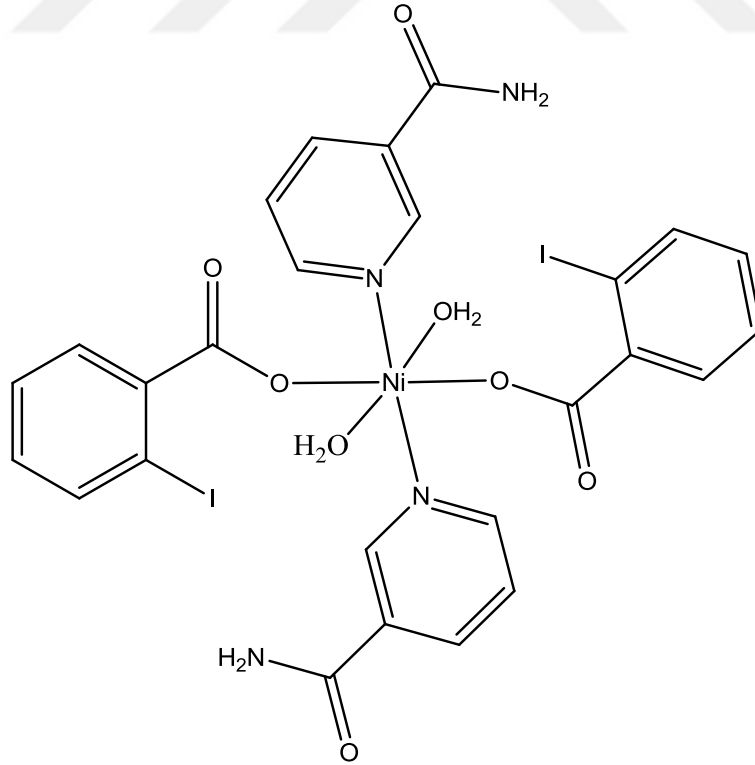


Şekil 43.  $[\text{Cu}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_4(\text{H}_2\text{O})_2]$  kompleksinin moleküler yapısı [56]

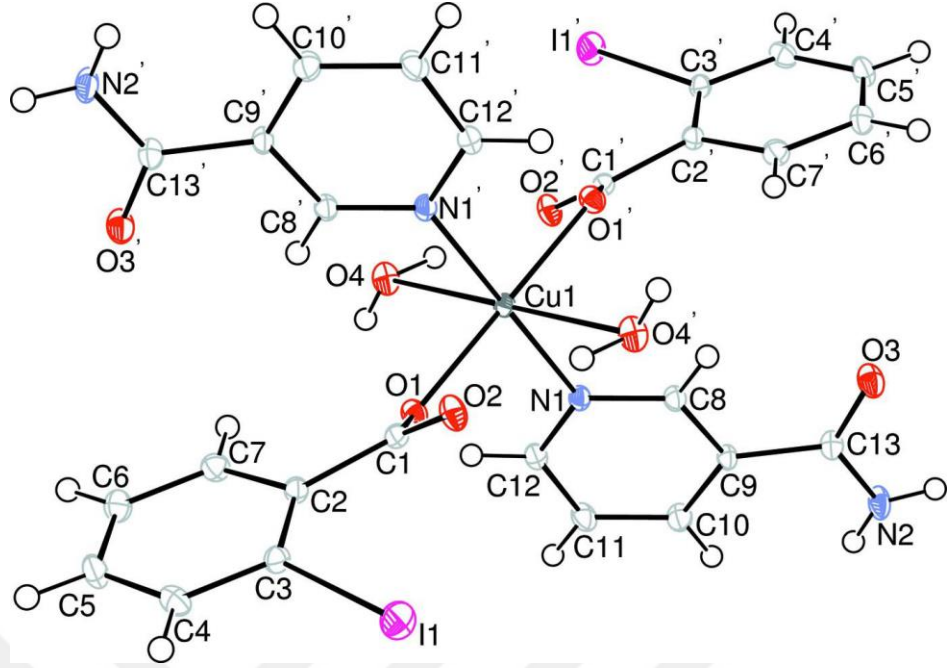
4, 5 ve 6 nolu kompleksler eş yapılı olup kapalı formülleri  $[\text{Me}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ 'dir (Me= Co, Ni ve Cu). Her üç komplekste de Me(II) iyonu simetri merkezinde yer almakta olup iki tane monodentat 2-iyodobenzoat anyonunun oksijen atomu, iki tane NA ligandın piridin halkasının N atomu ve iki su molekülünün oksijen atomuyla çarpık oktahedral koordinasyonunu tamamlamıştır. Karboksilat grubu ve koordine su molekülleri arasında moleküller arası O-H $\cdots$ O hidrojen bağları meydana gelmektedir.



Şekil 44.  $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  kompleksinin moleküler yapısı [57]



Şekil 45.  $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  kompleksinin tahmini kimyasal diyagramı



**Şekil 46.**  $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{IO}_2)_2(\text{NA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  kompleksinin moleküler yapısı [58]

Bu çalışmada sentezlenen komplekslerin dört tanesinin yapısı tek kristal X ışınları analizi ile aydınlatılmıştır. Diğer iki kompleksin ise spektroskopik veriler ışığında tahmini yapıları çıkarılmıştır. Tüm komplekslerin yapıları elementel analiz, termik analiz (TG-DTG-DTA), ve FT-IR spektroskopisi ile desteklenmektedir.

**1** ve **2** nolu kompleksler ile **4**, **5** ve **6** nolu komplekslerin kendi aralarında eş yapıları oldukları düşünülmektedir.

**1** nolu kompleks ortorombik, **3** nolu kompleks triklinik, **4** ve **6** nolu kompleksler ise monoklinik sistemde kristallenmişlerdir.

## 5. KAYNAKLAR

- [1] Zhavoronkov, N. (1981) The Use of Coordination Chemistry in Industry, Agricultural and Medical Sciences. *Kem. Kozlemenyek* 55, 1–12.
- [2] Sertçelik, M., Sugeçti, S., Büyükgüzel, E., Necefoğlu, H. and Büyükgüzel, K. (2018) Diaquabis(N,N-dietilnikotinamid- N1)bis(4-formilbenzoato- O)kobalt(II) Kompleksinin Model Organizma *Galleria mellonella* L. (Lepidoptera: Pyralidae) Üzerindeki Toksikolojik ve Fizyolojik Etkileri. *Karaelmas Fen Ve Mühendis. Derg.* 8, 359-364–364.
- [3] Lin, J.-R., Yao, J.-Y., Wang, W.-X. and Zhao, H. (2011) Synthesis, Structural, and Electrical Characterization of two Novel Coordination Polymers based on a [1,2,3]-Triazole Carboxylic Acid Derivative Ligand. *Z. Anorg. Allg. Chem.* 637, 462–466.
- [4] Dulcevscaia, G. M., Kravtsov, V. C., Macaev, F. Z., Duca, G. G., Stingachi, E. P., Pogrebnoi, S. I., Boldescu, V. V., Clapco, S. F., Tiurina, J. P., Deseatnic-Ciloci, A. A., et al. (2013) New copper(II) complexes with isoconazole: Synthesis, structures and biological properties. *Polyhedron* 52, 106–114.
- [5] Gondolova, G., Taslimi, P., Medjidov, A., Farzaliyev, V., Sujayev, A., Huseynova, M., Sahin, O., Yalcin, B., Turkan, F. and Gulcin, I. (2018) Synthesis, crystal structure and biological evaluation of spectroscopic characterization of Ni(II) and Co(II) complexes with N-salicyloil-N-maleoil-hydrazine as anticholinergic and antidiabetic agents. *J. Biochem. Mol. Toxicol.* 32, e22197.
- [6] Ramaiah, K., Srishailam, K., Reddy, K. L., Reddy, B. V. and Rao, G. R. (2019) Synthesis, crystal and molecular structure, and characterization of 2-((2-aminopyridin-3-yl)methylene)-N-ethylhydrazinecarbothioamide using spectroscopic (H-1 and C-13 NMR, FT-IR, FT-Raman, UV-Vis) and DFT methods and evaluation of its anticancer activity. *J. Mol. Struct.* 1184, 405–417.
- [7] Nazirkar, B., Mandewale, M. and Yamgar, R. (2019) Synthesis, characterization and antibacterial activity of Cu (II) and Zn (II) complexes of 5-aminobenzofuran-2-carboxylate Schiff base ligands. *J. Taibah Univ. Sci.* 13, 440–449.



- [8] Kaplanis, M., Stamatakis, G., Papakonstantinou, V. D., Paravatou-Petsotas, M., Demopoulos, C. A. and Mitsopoulou, C. A. (2014) Re(I) tricarbonyl complex of 1,10-phenanthroline-5,6-dione: DNA binding, cytotoxicity, anti-inflammatory, and anti-coagulant effects towards platelet activating factor. *J. Inorg. Biochem.* 135, 1–9.
- [9] Antonijevic-Nikolic, M., Antic-Stankovic, J., Drazic, B. and Tanaskovic, S. (2019) New macrocyclic Cu(II) complex with bridge terephthalate: Synthesis, spectral properties, in vitro cytotoxic and antimicrobial activity. Comparison with related complexes. *J. Mol. Struct.* 1184, 41–48.
- [10] Talukdar, M. I. A., Akram, M. K., Singh, T., Malik, M. A., Dar, O. A. and Hashmi, A. A. (2019) In-situ modification of castor oil with divalent metal ions like Zn (II), Cu (II), Co (II) and Ba (II) and their comparative antioxidant study by in-vitro methods. *Food Chem.* 284, 213–218.
- [11] Sen, B., Kalhan, H. K., Demir, V., Guler, E. E., Kayali, H. A. and Subasi, E. (2019) Crystal structures, spectroscopic properties of new cobalt(II), nickel(II), zinc (II) and palladium(II) complexes derived from 2-acetyl-5-chloro thiophene thiosemicarbazone: Anticancer evaluation. *Mater. Sci. Eng. C-Mater. Biol. Appl.* 98, 550–559.
- [12] Li, X., Ju, Y.-L. and Zou, Y.-Q. (2007) Synthesis, crystal structure and luminescence of three europium complexes with 2-iodobenzoic acid. *J. Coord. Chem.* 60, 1513–1526.
- [13] Koczoń, P., Piekut, J., Borawska, M., Świsłocka, R. and Lewandowski, W. (2006) Vibrational and microbiological study on alkaline metal picolines and o-iodobenzoates. *Anal. Bioanal. Chem.* 384, 302–308.
- [14] Zhang, B.-S. (2007) Crystal structure of bis(bis(1,10-phenanthroline-N,N')(μ-2-iodobenzoato)manganese(II)) diiodide dihydrate, [Mn-2(C<sub>7</sub>H<sub>4</sub>O<sub>2</sub>I)(2)(C<sub>12</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>)(4)][I](2) center dot 2H(2)O. *Z. Krist.-New Cryst. Struct.* 222, 274–276.
- [15] Singh, A., Sharma, R. P., Aree, T. and Venugopalan, P. (2013) Water-mediated supramolecular architecture of Co(III)-phenanthroline complexes: organizational control to 2D-layers and 3D-square cavities through substituted aryl carboxylate anions. *Crystengcomm* 15, 1153–1163.

- [16] Valach, F., Tokarcik, M., Maris, T., Watkin, D. J. and Prout, C. K. (2001) Bond-valence approach to the copper-copper and copper-nitrogen bonding in binuclear copper(II) complexes: Structure of tetrakis(2-iodobenzoato)bis(caffeine)dicopper(II) at 210 K. *J. Organomet. Chem.* 622, 166–171.
- [17] Li, X., Ju, Y.-L. and Zhang, T.-T. (2007) Synthesis and crystal structure of two praseodymium 2-iodobenzoic acid complexes. *J. Coord. Chem.* 60, 1527–1535.
- [18] Lijuan, X., Yanqiu, L. and Xia, L. (2009) Synthesis, crystal structure and characterization of one-dimension complex constructed by terbium(III) and 2-iodobenzoate. *J. Rare Earths* 27, 372–375.
- [19] Li, X., Ju, Y.-L. and Li, Y.-Q. (2008) Synthesis, crystal structure and properties of two terbium complexes with 2,2'-bipyridine. *J. Coord. Chem.* 61, 692–704.
- [20] Altun, O. and Suozer, M. (2017) Synthesis, spectral analysis, stability constants, antioxidant and biological activities of Co (II), Ni (II) and Cu (II) mixed ligand complexes of nicotinamide, theophylline and thiocyanate. *J. Mol. Struct.* 1149, 307–314.
- [21] Tella, A. C., Owalude, S. O., Ajibade, P. A., Simon, N., Olatunji, S. J., Abdelbaky, M. S. M. and Garcia-Granda, S. (2016) Synthesis, characterization, crystal structure and antimicrobial studies of a novel Cu(II) complex based on itaconic acid and nicotinamide. *J. Mol. Struct.* 1125, 570–575.
- [22] Sertçelik, M., Çaylak Delibaş, N., Necefoğlu, H. and Hökelek, T. (2012) Diaqua-bis-(4-formyl-benzoato-κO1)bis-(nicotinamide-κN 1)copper(II). *Acta Crystallogr. Sect. E Struct. Rep. Online* 68, 1010–1011.
- [23] Najafpour, M. M., Lis, T. and Hołyńska, M. (2007) Complexation of lead(II) by nicotinamide (nia): Crystal structure of polymeric Pb(nia)(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>. *Inorganica Chim. Acta* 360, 3452–3455.
- [24] Necefoğlu, H., Ozbek, F. E., Oztürk, V., Adıgüzel, V. and Hökelek, T. (2011) Di-μ-nicotinamide-κN:O;κO:N-bis-[aqua-bis-(4-bromo-benzoato)-κO;κO,O'-manganese(II)]. *Acta Crystallogr. Sect. E Struct. Rep. Online* 67, 1128-1129.
- [25] Necefoğlu, H., Cimen, E., Tercan, B., Dal, H. and Hökelek, T. (2010) Diaqua-bis(4-methyl-benzoato-κO)bis-(nicotinamide-κN)manganese(II). *Acta Crystallogr. Sect. E Struct. Rep. Online* 66, 490-491.

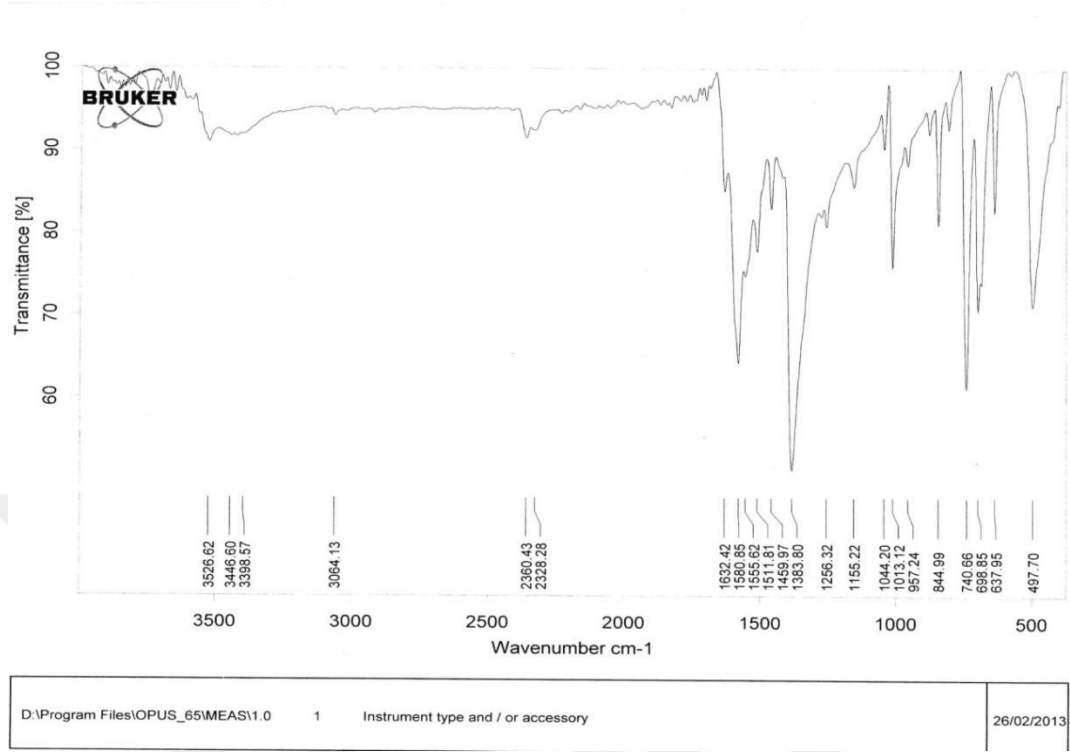
- [26] Necefoğlu, H., Çimen, E., Tercan, B., Ermiş, E. and Hökelek, T. (2010) Diaqua-bis(4-methyl-benzoato-κO)bis-(nicotinamide-κN1)nickel(II). *Acta Crystallogr. Sect. E Struct. Rep. Online* 66, 361–362.
- [27] Necefoğlu, H., Özbek, F. E., Aktaş, V., Tercan, B. and Hökelek, T. (2011) Bis(4-ethyl-benzoato-κO)bis-(nicotinamide-κN1)zinc(II). *Acta Crystallogr. Sect. E Struct. Rep. Online* 67, 382–383.
- [28] Hokelek, T., Dal, H., Tercan, B., Cimen, E. and Necefolu, H. (2010) catena-Poly[[bis(4-methylbenzoato-kappa 2 O:O')lead(II)]-mu-nicotinamide-kappa 2 N 1:O]. *Acta Crystallogr. Sect. E-Struct. Rep. Online* 66, 953-954.
- [29] Hokelek, T., Tercan, B., Sahin, E., Aktas, V. and Necefoglu, H. (2011) catena-Poly[[[bis(4-ethylbenzoato-kappa O-2,O')lead(II)]-mu-nicotinamide-kappa N-2(1):O] monohydrate]. *Acta Crystallogr. Sect. E-Struct. Rep. Online* 67, 1057-1058.
- [30] Hokelek, T., Dal, H., Tercan, B., Tenlik, E. and Necefoglu, H. (2010) Diaquabis(4-methoxybenzoato-kappa O 1)bis(nicotinamide-kappa N 1)cobalt(II) dihydrate. *Acta Crystallogr. Sect. E-Struct. Rep. Online* 66, 910-911.
- [31] Ozbek, F. E., Tercan, B., Sahin, E., Necefoglu, H. and Hokelek, T. (2009) Tetraaquabis(nicotinamide-kappa N-1)cobalt(II) bis(2-fluorobenzoate). *Acta Crystallogr. Sect. E-Crystallogr. Commun.* 65, 341-342.
- [32] Necefoglu, H., Aybirdi, O., Tercan, B., Ermis, E. and Hokelek, T. (2010) Diaquabis(4-methylaminobenzoato-kappa O)bis(nicotinamide-kappa N-1)cobalt(II). *Acta Crystallogr. Sect. E-Struct. Rep. Online* 66, 448-449.
- [33] Hokelek, T., Dal, H., Tercan, B., Aybirdi, O. and Necefoglu, H. (2009) Diaquabis(4-methylaminobenzoato-kappa O)bis(nicotinamide-kappa N-1)nickel(II). *Acta Crystallogr. Sect. E-Crystallogr. Commun.* 65, 605-606.
- [34] Hokelek, T., Yilmaz, F., Tercan, B., Ozbek, F. E. and Necefoglu, H. (2009) Diaquabis(2-bromobenzoato-kappa O)bis(nicotinamide-kappa N-1)nickel(II). *Acta Crystallogr. Sect. E-Crystallogr. Commun.* 65, 768-769.
- [35] Hokelek, T., Dal, H., Tercan, B., Ozbek, F. E. and Necefoglu, H. (2009) Tetraaquabis(nicotinamide-kappa N-1)nickel(II) bis(2-fluorobenzoate). *Acta Crystallogr. Sect. E-Crystallogr. Commun.* 65, 1330-1331.

- [36] Necefoglu, H., Cimen, E., Tercan, B., Ermis, E. and Hokelek, T. (2010) Diaquabis(4-methylbenzoato-kappa O)bis(nicotinamide-kappa N-1)nickel(II). *Acta Crystallogr. Sect. E-Struct. Rep. Online* 66, 361-362.
- [37] Necefoglu, H., Ozturk, V., Ozbek, F. E., Adiguzel, V. and Hokelek, T. (2011) trans-Diaquabis(4-fluorobenzoato-kappa O)bis(nicotinamide-kappa N-1)nickel(II). *Acta Crystallogr. Sect. E-Struct. Rep. Online* 67, 1638-1639.
- [38] Hokelek, T., Suzen, Y., Tercan, B., Tenlik, E. and Necefoglu, H. (2010) Di-mu-nicotinamide-kappa O-2:N-1;kappa N-2(1):O-bis[aquabis(4-methoxybenzoato-kappa O)copper(II)]. *Acta Crystallogr. Sect. E-Struct. Rep. Online* 66, 807-808.
- [39] Necefoglu, H., Ozbek, F. E., Ozturk, V., Adiguzel, V. and Hokelek, T. (2012) Aquabis(4-fluorobenzoato-kappa O)bis(nicotinamide-kappa N-1)copper(II) nicotinamide hemisolvate trihydrate. *Acta Crystallogr. Sect. E-Struct. Rep. Online* 68, 52-53.
- [40] Necefoglu, H., Ozbek, F. E., Ozturk, V., Tercan, B. and Hokelek, T. (2011) Diaquabis(4-bromobenzoato-kappa O)bis(nicotinamide-kappa N-1)copper(II). *Acta Crystallogr. Sect. E-Struct. Rep. Online* 67, 900-901.
- [41] Necefoglu, H., Özbek, F. E., Öztürk, V., Tercan, B. and Hökelek, T. (2011) Bis-(4-fluoro-benzoato)- $\kappa$ 2O,O'; $\kappa$ O-(4-fluoro-benzoic acid- $\kappa$ O)bis-(nico-tinamide- $\kappa$ N1)copper(II). *Acta Crystallogr. Sect. E Struct. Rep. Online* 67, 887–888.
- [42] Hokelek, T., Caylak, N. and Necefoglu, H. (2008) Bis(4-fluorobenzoato-kappa O-2,O ')bis-(nicotinamide-kappa N-1)zinc(II)monohydrate. *Acta Crystallogr. Sect. E-Crystallogr. Commun.* 64, 460-462.
- [43] Tercan, B., Hoেকেlek, T., Aybirdi, O. and Necefoglu, H. (2009) Bis[4-(methylamino)benzoato-kappa O]bis(nicotinamide-kappa N)zinc(II). *Acta Crystallogr. Sect. E-Crystallogr. Commun.* 65, 109-110.
- [44] Necefoglu, H., Ozbek, F. E., Aktas, V., Tercan, B. and Hokelek, T. (2011) Bis(4-ethylbenzoato-kappa O)bis(nicotinamide-kappa N-1)zinc(II). *Acta Crystallogr. Sect. E-Struct. Rep. Online* 67, 382-383.
- [45] Hokelek, T., Dal, H., Tercan, B., Ozbek, F. E. and Necefoglu, H. (2009) Diaquabis(2-bromobenzoato-kappa O)bis(nicotinamide-kappa N-1)zinc(II). *Acta Crystallogr. Sect. E-Crystallogr. Commun.* 65, 607-608.

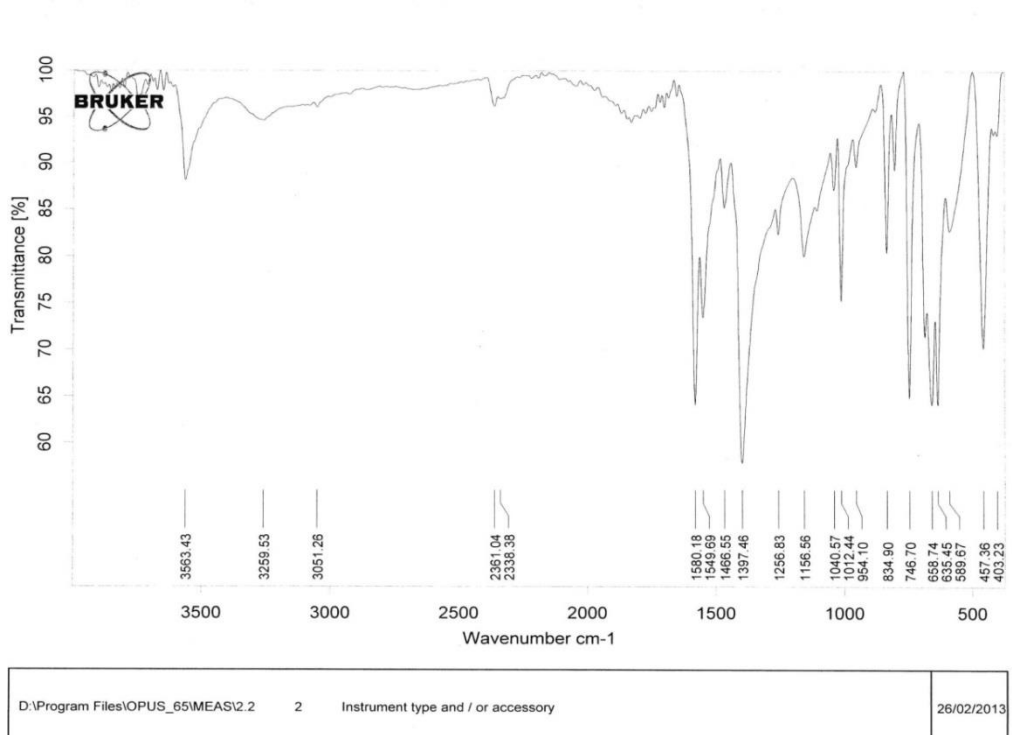
- [46] Hökelek, T., Yılmaz, F., Tercan, B., Özbek, F. E. and Necefoglu, H. (2009) Bis( $\mu$ -2-fluoro-benzoato-1:2 $\kappa$ 2O:O')(2-fluoro-benzoato-1 $\kappa$ 2O,O')(2-fluoro-benzoato-2 $\kappa$ O)dinicotinamide-1 $\kappa$ N1,2 $\kappa$ N1-dizinc(II)-2-fluoro-benzoic acid (1/1). *Acta Crystallogr. Sect. E Struct. Rep. Online* 65, 1608–1609.
- [47] Hokelek, T., Ermis, E., Tercan, B., Cimen, E. and Necefoglu, H. (2010) Bis( $\mu$ -4-methylbenzoato-kappa O-2:O')bis[aqua(4-methylbenzoato-kappa O-2,O')zinc(II)]-bis( $\mu$ -4-methylbenzoato-kappa O-2:O')bis[(4-methylbenzoato-kappa O)(nicotinamide-kappa N)zinc(II)]-water (1/1/2). *Acta Crystallogr. Sect. E-Struct. Rep. Online* 66, 841-842.
- [48] Hoekerek, T., Saka, G., Tercan, B., Tenlik, E. and Necefoglu, H. (2010) Bis(4-methoxybenzoato)-kappa O-2,O';kappa O-bis(nicotinamide-kappa N-1)zinc(II). *Acta Crystallogr. Sect. E-Struct. Rep. Online* 66, 1135-1136.
- [49] Hokelek, T., Saglam, E. G., Tercan, B., Aybirdi, O. and Necefoglu, H. (2010) Diaquabis[4-(dimethylamino)benzoato-kappa O]bis(nicotinamide-kappa N-1)zinc(II) dihydrate. *Acta Crystallogr. Sect. E-Struct. Rep. Online* 66, 1636-1637.
- [50] Hokelek, T., Suzen, Y., Tercan, B., Aybirdi, O. and Necefoglu, H. (2010) Bis[ $\mu$ -4-(dimethylamino)benzoato]-kappa O-3,O':O;kappa O-3:O,O'-bis{aqua[4-(dimethylamino)benzoato-kappa O-2,O']}(nicotinamide-kappa N-1)cadmium(II)}. *Acta Crystallogr. Sect. E-Struct. Rep. Online* 66, 782-783.
- [51] Hokelek, T., Saglam, E. G., Tercan, B., Aybirdi, O. and Necefoglu, H. (2010) Bis[ $\mu$ -4-(methylamino)benzoato]-kappa O-3,O':O;kappa O-3:O,O'-bis{aqua[4-(methylamino)benzoato-kappa O-2,O']}(nicotinamide-kappa N)cadmium(II)}. *Acta Crystallogr. Sect. E-Struct. Rep. Online* 66, 1559-1560.
- [52] Regulska, E., Świsłocka, R. and Lewandowski, W. (2010) Theoretical and experimental study of alkali metal o-amino-, o-halogeno-, o-hydroxy-, o-methoxy- and o-nitrobenzoates. *J. Mol. Struct.* 984, 194–203.
- [53] Silverstein, R. M. and Webster, F. X. (1997) *Spectroscopic Identification of Organic Compounds*, Canada.
- [54] Bayarı, S., Ataç, A. and Yurdakul, Ş. (2003) Coordination behaviour of nicotinamide: an infrared spectroscopic study. *J. Mol. Struct.* 655, 163–170.

- [55] Aydın, Ö., Çaylak Delibaş, N., Necefoğlu, H. and Hökelek, T. (2012) catena-Poly[[aqua-(2-iodo-benzoato-κO)cobalt(II)]-μ-aqua-μ-2-iodo-benzoato-κ2O:O']. Acta Crystallogr. Sect. E Struct. Rep. Online 68, 601–602.
- [56] Aydın, Ö., Çaylak Delibaş, N., Necefoğlu, H. and Hökelek, T. (2012) Tetra-kis(μ-2-iodo-benzoato-κ2O:O')bis-[aqua-copper(II)]. Acta Crystallogr. Sect. E Struct. Rep. Online 68, 409–410.
- [57] Aydın, Ö., Çaylak Delibaş, N., Necefoğlu, H. and Hökelek, T. (2012) Diaqua-bis-(2-iodo-benzoato-κO)bis-(nicotinamide-κN1)cobalt(II). Acta Crystallogr. Sect. E Struct. Rep. Online 68, 521–522.
- [58] Aydın, Ö., Çaylak Delibaş, N., Necefoğlu, H. and Hökelek, T. (2012) Diaqua-bis-(2-iodo-benzoato-κO)bis-(nicotinamide-κN1)copper(II). Acta Crystallogr. Sect. E Struct. Rep. Online 68, 1162–1163.

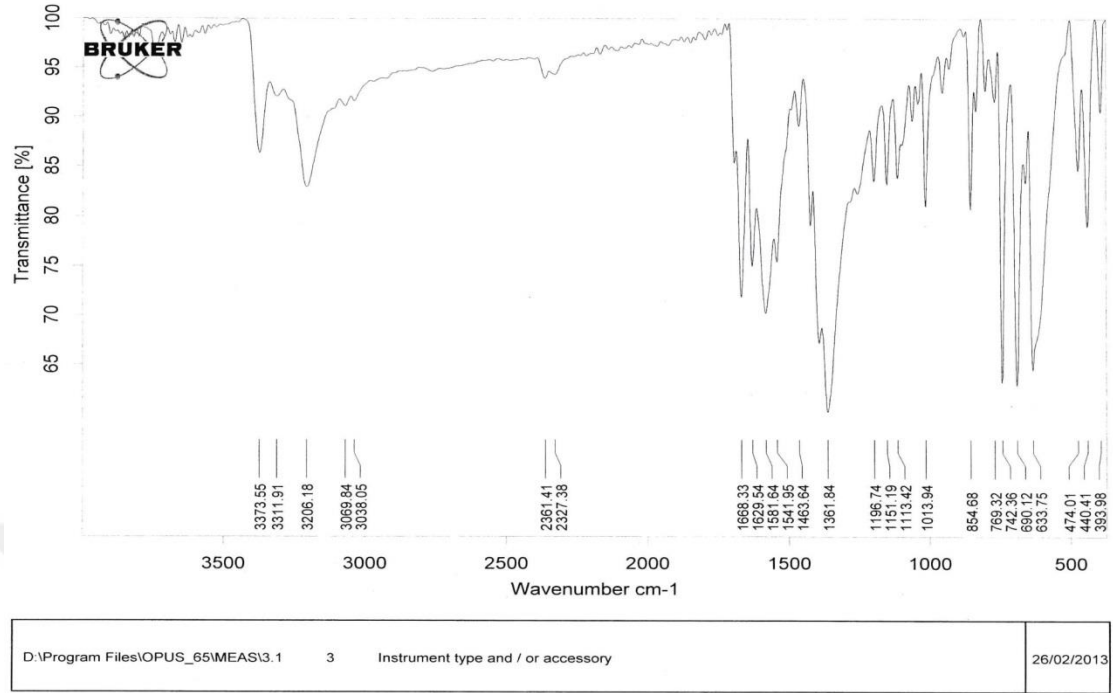
## 6. EKLER



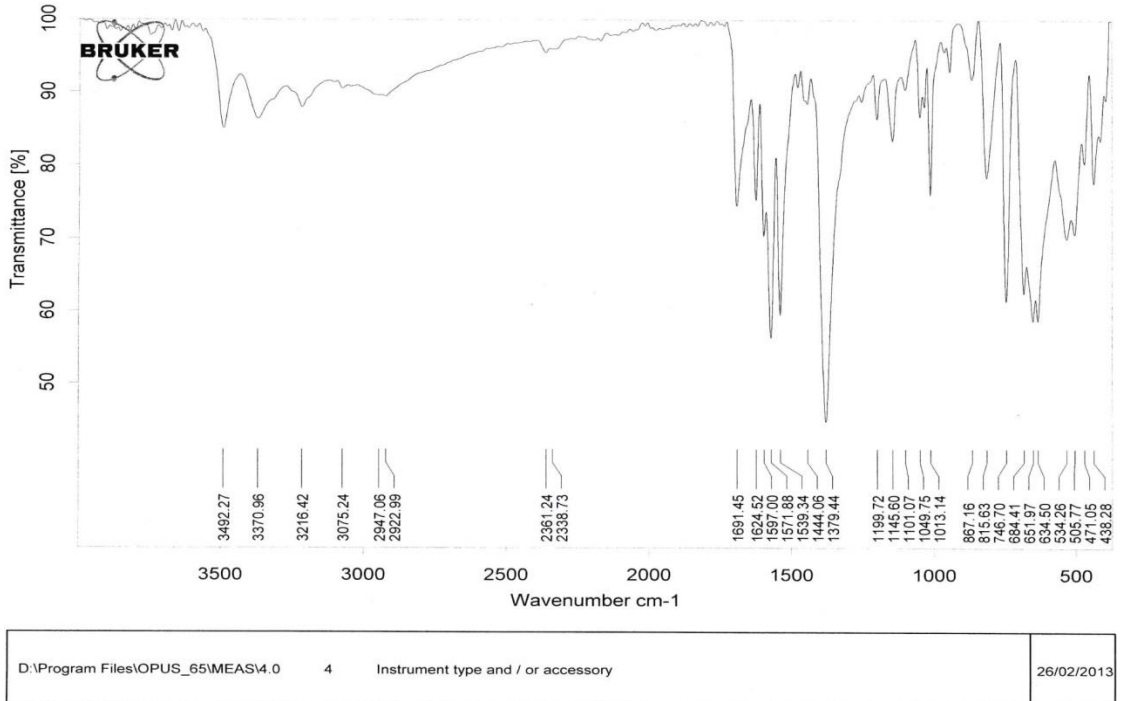
Ek Şekil 1. (1) Kompleksinin FT-IR Spektrumu



Ek Şekil 2. (2) Kompleksinin FT-IR Spektrumu

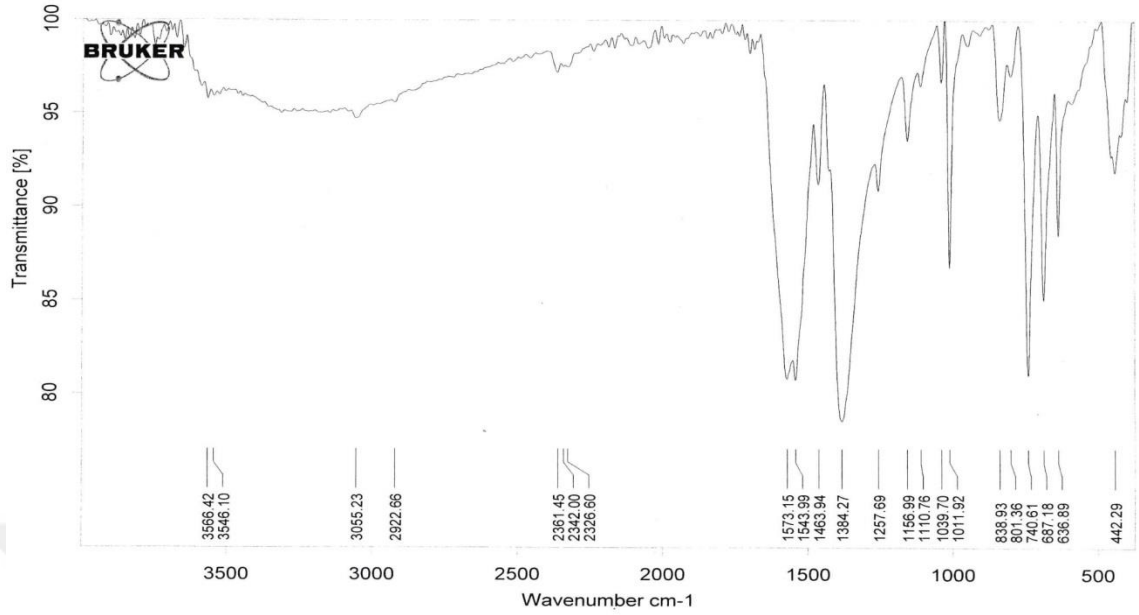


Ek Şekil 3. (3) Kompleksinin FT-IR Spektrumu



Ek Şekil 4. (4) Kompleksinin FT-IR Spektrumu





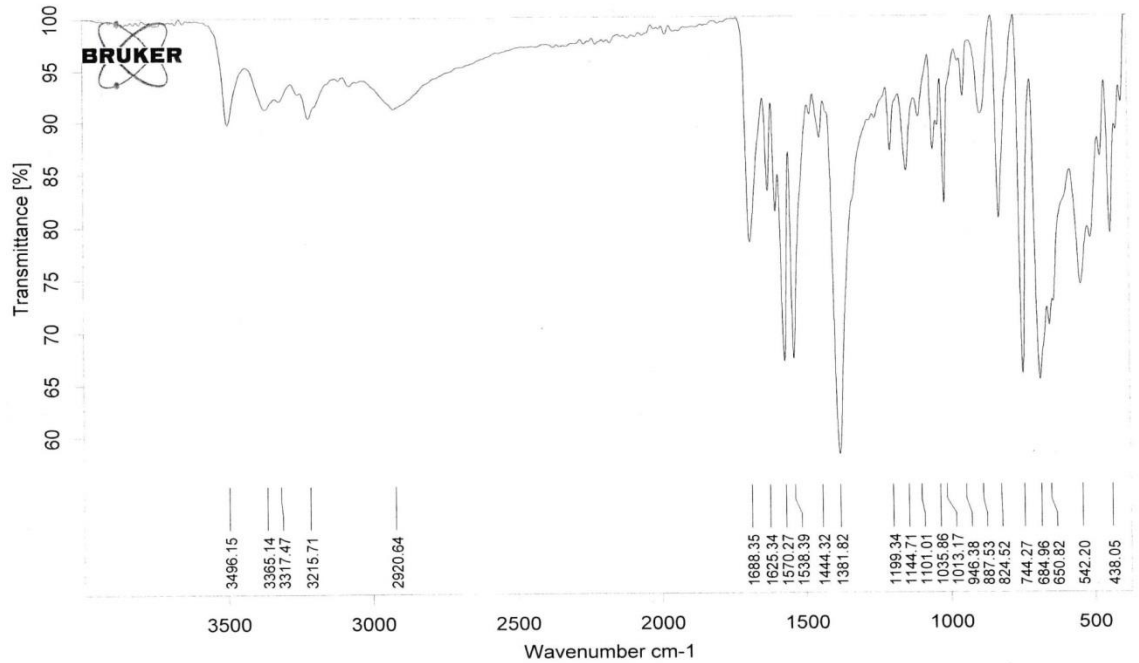
D:\Program Files\OPUS\_65\MEAS\5.0

5

Instrument type and / or accessory

26/02/2013

Ek Şekil 5. (5) Kompleksinin FT-IR Spektrumu



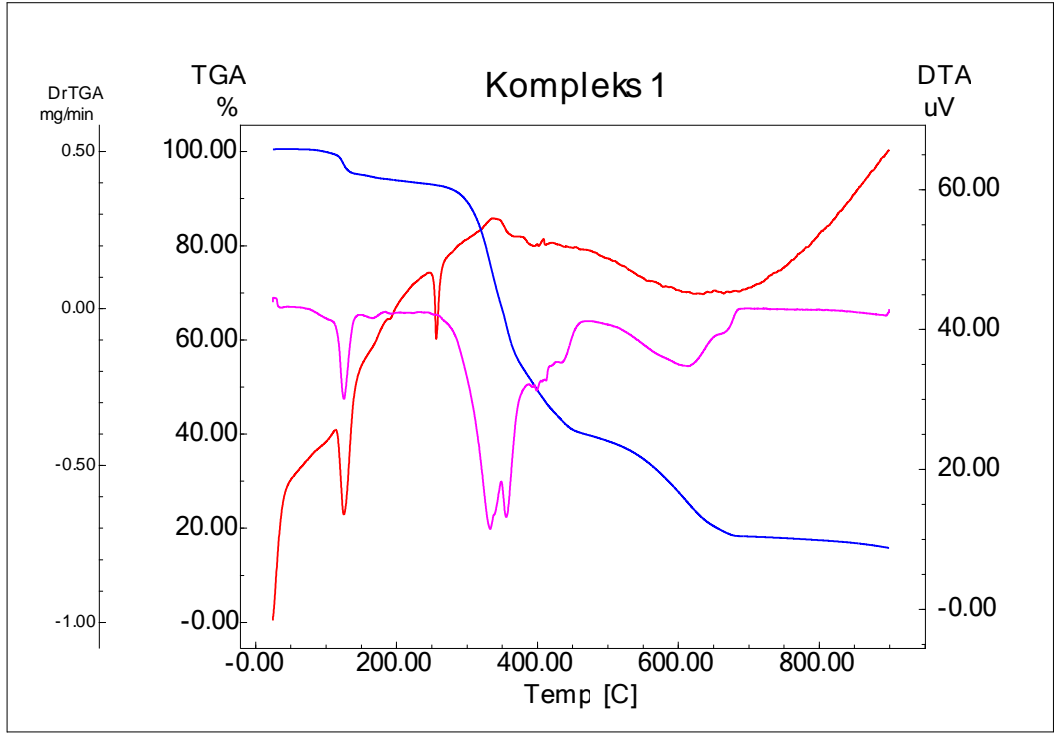
D:\Program Files\OPUS\_65\MEAS\6.0

6

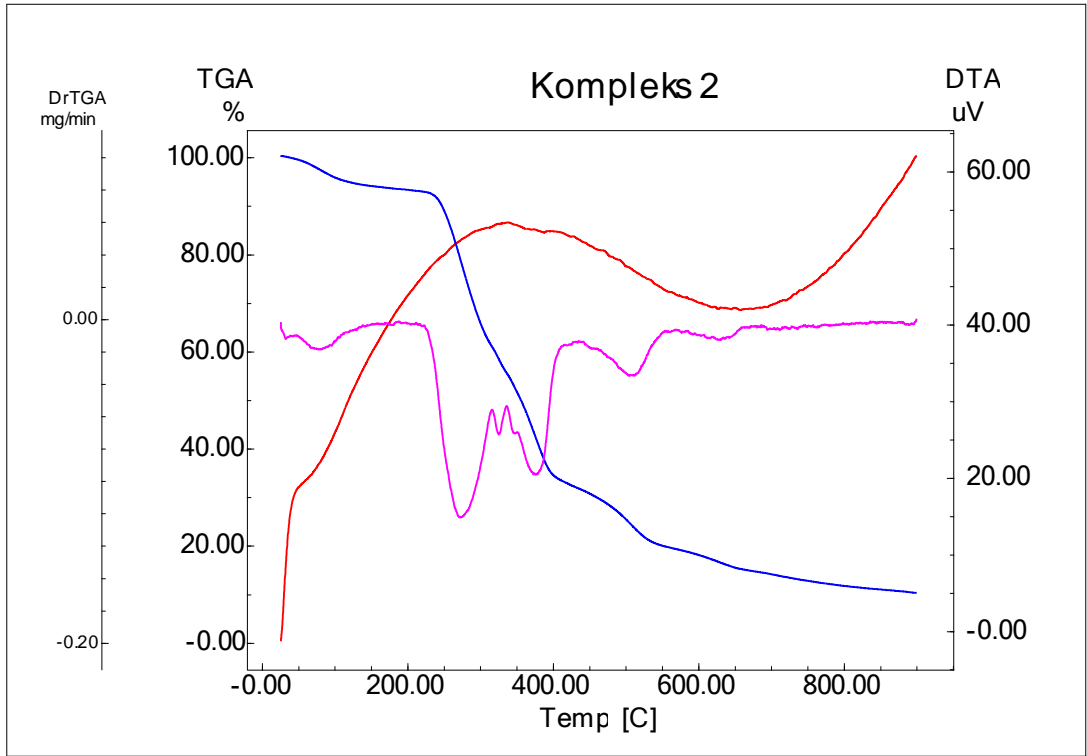
Instrument type and / or accessory

26/02/2013

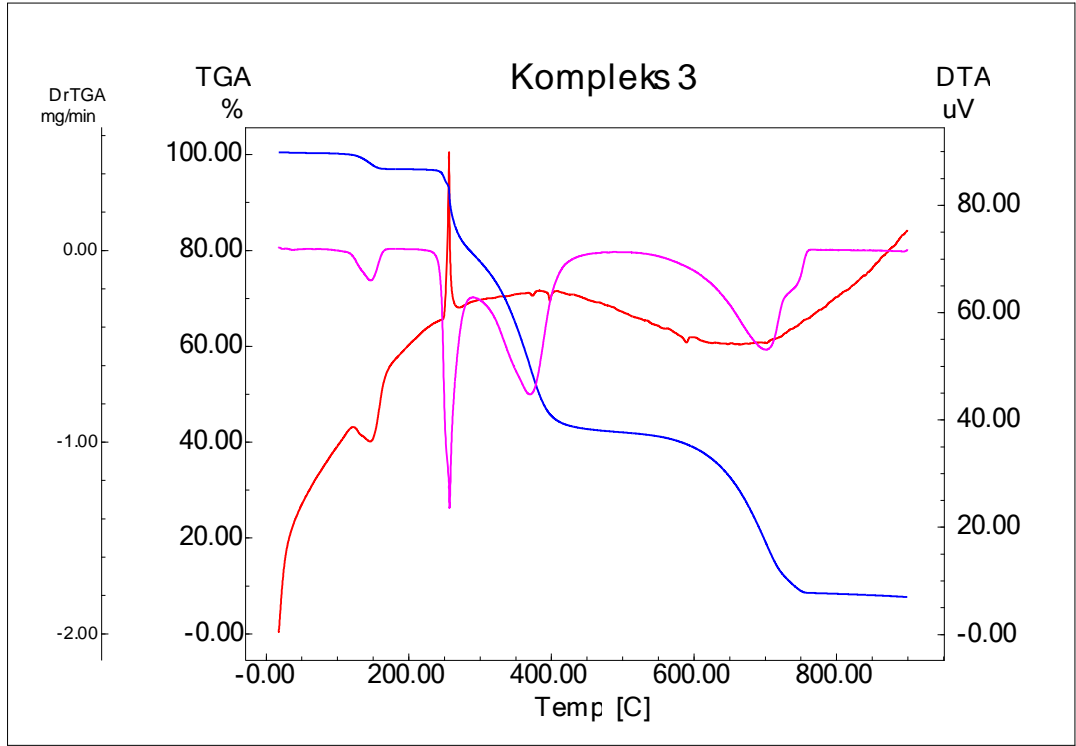
Ek Şekil 6. (6) Kompleksinin FT-IR Spektrumu



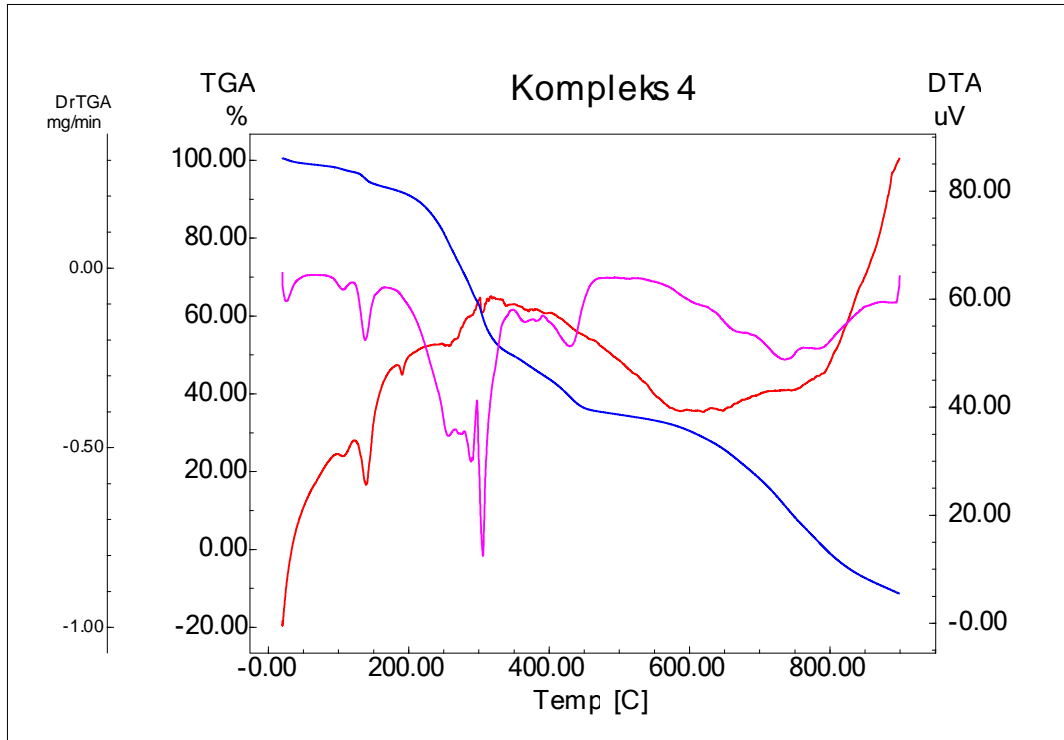
Ek Şekil 7. (1) Kompleksinin TGA/DTA eğrileri



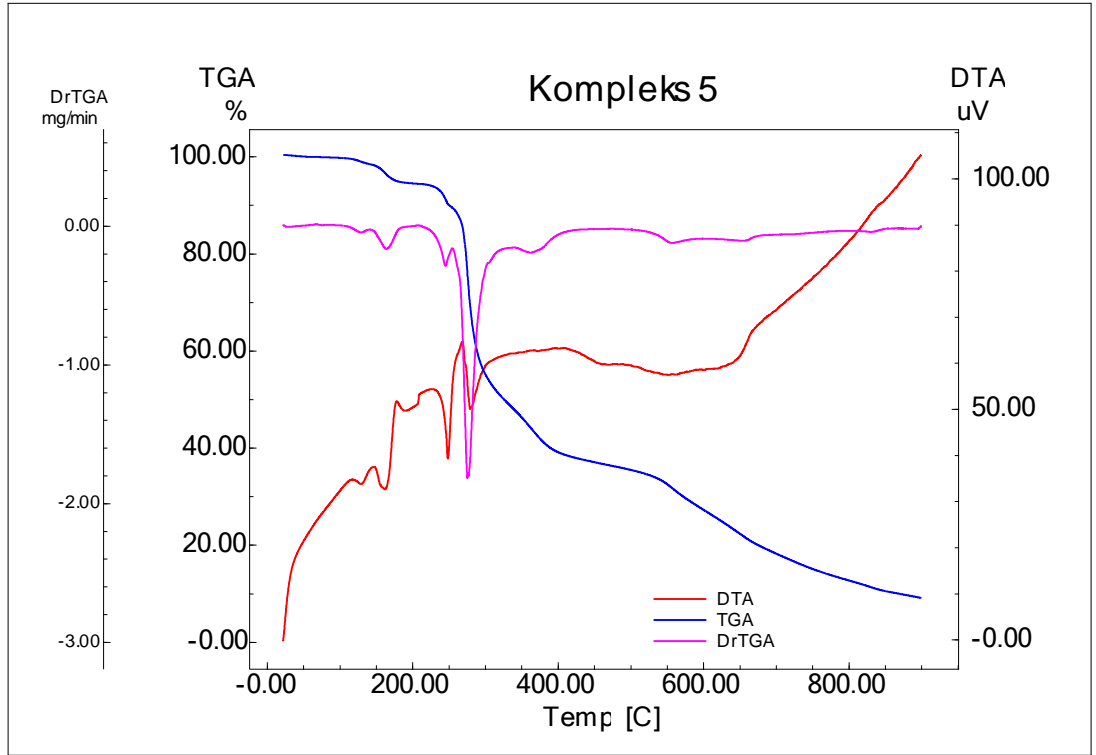
Ek Şekil 8. (2) Kompleksinin TGA/DTA eğrileri



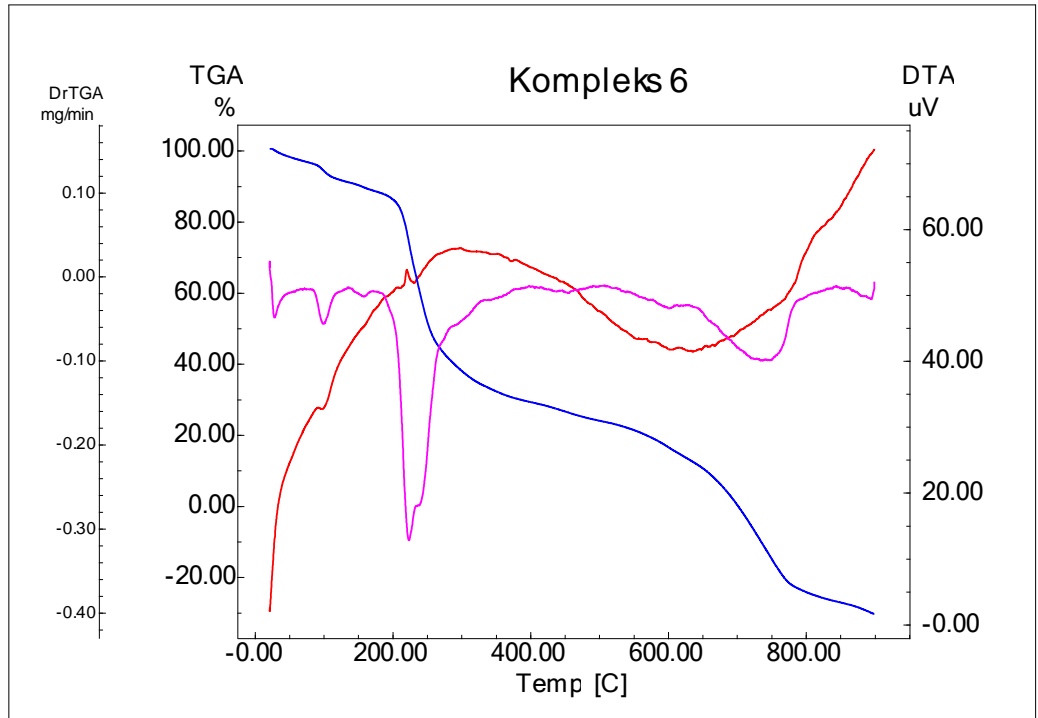
**Ek Şekil 9. (3) Kompleksinin TGA/DTA eğrileri**



**Ek Şekil 10. (4) Kompleksinin TGA/DTA eğrileri**



Ek Şekil 11. (5) Kompleksinin TGA/DTA eğrileri



Ek Şekil 12. (6) Kompleksinin TGA/DTA eğrileri

**Ek Tablo 1. (1)** kristalinin geometrik parametreleri (Å, °)

|                                      |             |          |           |
|--------------------------------------|-------------|----------|-----------|
| I1—C3                                | 2.102 (4)   | C3—C4    | 1.395 (5) |
| I2—C10                               | 2.100 (3)   | C4—C5    | 1.381 (7) |
| Co1—O2                               | 2.118 (2)   | C4—H4    | 0.9500    |
| Co1—O3 <sup>i</sup>                  | 2.021 (2)   | C5—C6    | 1.387 (7) |
| Co1—O4                               | 2.016 (2)   | C5—H5    | 0.9500    |
| Co1—O5                               | 2.124 (2)   | C6—C7    | 1.377 (5) |
| Co1—O5 <sup>i</sup>                  | 2.151 (2)   | C6—H6    | 0.9500    |
| Co1—O6                               | 2.110 (2)   | C7—C2    | 1.400 (5) |
| O1—C1                                | 1.252 (4)   | C7—H7    | 0.9500    |
| O2—C1                                | 1.267 (4)   | C8—C9    | 1.506 (4) |
| O3—Co1 <sup>ii</sup>                 | 2.021 (2)   | C9—C10   | 1.393 (4) |
| O3—C8                                | 1.251 (4)   | C9—C14   | 1.397 (4) |
| O4—C8                                | 1.260 (4)   | C11—C10  | 1.382 (4) |
| O5—Co1 <sup>ii</sup>                 | 2.151 (2)   | C11—H11  | 0.9500    |
| O5—H51                               | 0.855 (19)  | C12—C11  | 1.385 (5) |
| O5—H52                               | 0.855 (18)  | C12—H12  | 0.9500    |
| O6—H61                               | 0.854 (18)  | C13—C12  | 1.385 (5) |
| O6—H62                               | 0.86 (2)    | C13—H13  | 0.9500    |
| C2—C1                                | 1.499 (4)   | C14—C13  | 1.385 (4) |
| O2—Co1—O5                            | 91.32 (9)   | C4—C3—I1 | 116.5 (3) |
| O2—Co1—O5 <sup>i</sup>               | 91.88 (9)   | C5—C4—C3 | 119.5 (4) |
| O3 <sup>i</sup> —Co1—O6              | 88.28 (10)  | C5—C4—H4 | 120.2     |
| O3 <sup>i</sup> —Co1—O2              | 88.37 (10)  | C3—C4—H4 | 120.2     |
| O3 <sup>i</sup> —Co1—O5              | 86.32 (9)   | C4—C5—C6 | 120.5 (3) |
| O3 <sup>i</sup> —Co1—O5 <sup>i</sup> | 93.32 (9)   | C4—C5—H5 | 119.8     |
| O4—Co1—O2                            | 92.32 (9)   | C6—C5—H5 | 119.8     |
| O4—Co1—O3 <sup>i</sup>               | 178.57 (10) | C7—C6—C5 | 119.8 (4) |
| O4—Co1—O5                            | 92.41 (9)   | C7—C6—H6 | 120.1     |
| O4—Co1—O5 <sup>i</sup>               | 87.92 (9)   | C5—C6—H6 | 120.1     |
| O4—Co1—O6                            | 91.04 (10)  | C6—C7—C2 | 120.9 (4) |
| O5—Co1—O5 <sup>i</sup>               | 176.77 (4)  | C6—C7—H7 | 119.5     |
| O6—Co1—O2                            | 176.58 (10) | C2—C7—H7 | 119.5     |
| O6—Co1—O5                            | 89.15 (9)   | O3—C8—O4 | 127.2 (3) |
| O6—Co1—O5 <sup>i</sup>               | 87.63 (9)   | O3—C8—C9 | 116.0 (3) |

|   |              |               |            |
|---|--------------|---------------|------------|
| C1—O2—Co1                                 | 122.7 (2)    | O4—C8—C9      | 116.8 (3)  |
| C8—O3—Co1 <sup>ii</sup>                   | 136.6 (2)    | C10—C9—C8     | 124.7 (3)  |
| C8—O4—Co1                                 | 139.0 (2)    | C10—C9—C14    | 117.9 (3)  |
| Co1—O5—Co1 <sup>ii</sup>                  | 122.81 (10)  | C14—C9—C8     | 117.3 (3)  |
| Co1—O5—H51                                | 103 (3)      | C9—C10—I2     | 124.6 (2)  |
| Co1 <sup>ii</sup> —O5—H51                 | 97 (4)       | C11—C10—I2    | 114.6 (2)  |
| Co1—O5—H52                                | 115 (4)      | C11—C10—C9    | 120.8 (3)  |
| Co1 <sup>ii</sup> —O5—H52                 | 110 (4)      | C10—C11—C12   | 120.5 (3)  |
| H51—O5—H52                                | 106 (4)      | C10—C11—H11   | 119.8      |
| Co1—O6—H61                                | 123 (3))     | C12—C11—H11   | 119.8      |
| Co1—O6—H62                                | 127 (4)      | C11—C12—H12   | 120.2      |
| H61—O6—H62                                | 106 (4)      | C13—C12—C11   | 119.6 (3)  |
| O1—C1—O2                                  | 125.1 (3)    | C13—C12—H12   | 120.2      |
| O1—C1—C2                                  | 117.8 (3)    | C12—C13—H13   | 120.1      |
| O2—C1—C2                                  | 117.2 (3)    | C14—C13—C12   | 119.7 (3)  |
| C3—C2—C1                                  | 123.5 (3)    | C14—C13—H13   | 120.1      |
| C3—C2—C7                                  | 118.5 (3)    | C9—C14—H14    | 119.3      |
| C7—C2—C1                                  | 118.0 (3)    | C13—C14—C9    | 121.4 (3)  |
| C2—C3—I1                                  | 122.7 (2)    | C13—C14—H14   | 119.3      |
| C2—C3—C4                                  | 120.7 (4)    |               |            |
| O3 <sup>i</sup> —Co1—O2—C1                | 72.6 (2)     | C4—C3—C2—C1   | -177.9 (3) |
| O4—Co1—O2—C1                              | -108.6 (2)   | C4—C3—C2—C7   | 2.4 (5)    |
| O5—Co1—O2—C1                              | 158.9 (2)    | I1—C3—C4—C5   | -179.4 (3) |
| O5 <sup>i</sup> —Co1—O2—C1                | -20.6 (2)    | C2—C3—C4—C5   | -3.3 (5)   |
| O2—Co1—O4—C8                              | -70.4 (3)    | C3—C4—C5—C6   | 1.6 (6)    |
| O5—Co1—O4—C8                              | 21.0 (3)     | C4—C5—C6—C7   | 0.9 (6)    |
| O5 <sup>i</sup> —Co1—O4—C8                | -162.2 (3)   | C5—C6—C7—C2   | -1.7 (6)   |
| O6—Co1—O4—C8                              | 110.2 (3)    | C6—C7—C2—C1   | -179.6 (3) |
| O2—Co1—O5—Co1 <sup>ii</sup>               | 63.36 (13)   | C6—C7—C2—C3   | 0.1 (5)    |
| O3 <sup>i</sup> —Co1—O5—Co1 <sup>ii</sup> | 151.65 (14)  | O3—C8—C9—C10  | 142.8 (3)  |
| O4—Co1—O5—Co1 <sup>ii</sup>               | -29.01 (13)  | O3—C8—C9—C14  | -38.8 (4)  |
| O6—Co1—O5—Co1 <sup>ii</sup>               | -120.02 (13) | O4—C8—C9—C10  | -39.0 (4)  |
| Co1—O2—C1—O1                              | 16.8 (4)     | O4—C8—C9—C14  | 139.4 (3)  |
| Co1—O2—C1—C2                              | -164.0 (2)   | C8—C9—C10—I2  | -2.7 (4)   |
| Co1 <sup>ii</sup> —O3—C8—O4               | 14.0 (5)     | C8—C9—C10—C11 | 179.7 (3)  |

|                             |            |                     |            |
|-----------------------------|------------|---------------------|------------|
| Co1 <sup>ii</sup> —O3—C8—C9 | -168.0 (2) | C14—C9—C10—I2       | 178.9 (2)  |
| Co1—O4—C8—O3                | -13.8 (5)  | C14—C9—C10—<br>C11  | 1.4 (5)    |
| Co1—O4—C8—C9                | 168.2 (2)  | C8—C9—C14—C13       | -176.5 (3) |
| C3—C2—C1—O1                 | -51.1 (4)  | C10—C9—C14—<br>C13  | 2.0 (5)    |
| C3—C2—C1—O2                 | 129.7 (3)  | C12—C11—C10—<br>I2  | 178.7 (3)  |
| C7—C2—C1—O1                 | 128.6 (3)  | C12—C11—C10—<br>C9  | -3.5 (5)   |
| C7—C2—C1—O2                 | -50.7 (4)  | C13—C12—C11—<br>C10 | 2.2 (5)    |
| I1—C3—C2—C1                 | -2.0 (4)   | C14—C13—C12—<br>C11 | 1.1 (6)    |
| I1—C3—C2—C7                 | 178.3 (2)  | C9—C14—C13—<br>C12  | -3.2 (6)   |

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

**Ek Tablo 2. (1) kristalinin hidrojen bağı geometrisi (Å, °)**

| $D-H \cdots A$                 | $D-H$       | $H \cdots A$ | $D \cdots A$ | $D-H \cdots A$ |
|--------------------------------|-------------|--------------|--------------|----------------|
| O5—H51 · · · O1 <sup>ii</sup>  | 0.86<br>(3) | 1.64 (3)     | 2.486 (3)    | 167 (5)        |
| O6—H61 · · · O2 <sup>i</sup>   | 0.86<br>(2) | 1.92 (2)     | 2.742<br>(3) | 161 (4)        |
| C4—H4 · · · O1 <sup>iii</sup>  | 0.95        | 2.56         | 3.364 (4)    | 142            |
| C13—H13 · · · O4 <sup>iv</sup> | 0.95        | 2.58         | 3.495 (4)    | 162            |

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

**Ek Tablo 3. (3)** kristalinin geometrik parametreleri (Å, °)

|                                       |             |                    |           |
|---------------------------------------|-------------|--------------------|-----------|
| I1—C3                                 | 2.100(2)    | C4—H4              | 0.9500    |
| I2—C10                                | 2.102 (2)   | C5—C4              | 1.388 (4) |
| Cu1—Cu1 <sup>i</sup>                  | 2.6009 (5)  | C5—H5              | 0.9500    |
| Cu1—O1                                | 1.9814 (16) | C6—C5              | 1.386 (4) |
| Cu1—O2 <sup>i</sup>                   | 1.9577 (16) | C6—H6              | 0.9500    |
| Cu1—O3                                | 1.9533 (16) | C7—C6              | 1.374 (3) |
| Cu1—O4                                | 1.9610 (16) | C7—H7              | 0.9500    |
| Cu1—O5                                | 2.1525 (16) | C8—O4 <sup>i</sup> | 1.260 (3) |
| O1—C1                                 | 1.272 (3)   | C8—C9              | 1.498 (3) |
| O2—Cu1 <sup>i</sup>                   | 1.9577 (16) | C9—C10             | 1.403 (3) |
| O2—C1                                 | 1.247 (3)   | C9—C14             | 1.397 (3) |
| O3—C8                                 | 1.260 (3)   | C10—C11            | 1.388 (3) |
| O4—C8 <sup>i</sup>                    | 1.260 (3)   | C11—C12            | 1.387 (3) |
| O5—H51                                | 0.828 (18)  | C11—H11            | 0.9500    |
| O5—H52                                | 0.828 (19)  | C12—C13            | 1.384 (3) |
| C2—C1                                 | 1.499 (3)   | C12—H12            | 0.9500    |
| C2—C7                                 | 1.397 (3)   | C13—C14            | 1.384 (3) |
| C3—C2                                 | 1.404 (3)   | C13—H13            | 0.9500    |
| C3—C4                                 | 1.389 (3)   | C14—H14            | 0.9500    |
| O1—Cu1—Cu1 <sup>i</sup>               | 86.36 (5)   | C5—C4—C3           | 120.5 (2) |
| O1—Cu1—O5                             | 95.68 (7)   | C5—C4—H4           | 119.8     |
| O2 <sup>i</sup> —Cu1—Cu1 <sup>i</sup> | 82.79 (5)   | C4—C5—H5           | 120.1     |
| O2 <sup>i</sup> —Cu1—O1               | 168.98 (7)  | C6—C5—C4           | 119.8 (2) |



|                         |             |                        |             |
|-------------------------|-------------|------------------------|-------------|
| O2 <sup>i</sup> —Cu1—O4 | 90.09 (8)   | C6—C5—H5               | 120.1       |
| O2 <sup>i</sup> —Cu1—O5 | 95.26 (7)   | C5—C6—H6               | 120.1       |
| O3—Cu1—Cu1 <sup>i</sup> | 83.11 (5)   | C7—C6—C5               | 119.7 (2)   |
| O3—Cu1—O1               | 89.93 (7)   | C7—C6—H6               | 120.1       |
| O3—Cu1—O2 <sup>i</sup>  | 90.68 (7)   | C2—C7—H7               | 119.1       |
| O3—Cu1—O4               | 168.90 (7)  | C6—C7—C2               | 121.7 (2)   |
| O3—Cu1—O5               | 93.88 (6)   | C6—C7—H7               | 119.1       |
| O4—Cu1—Cu1 <sup>i</sup> | 86.00 (5)   | O3—C8—O4 <sup>i</sup>  | 124.6 (2)   |
| O4—Cu1—O1               | 87.22 (8)   | O3—C8—C9               | 116.33 (18) |
| O4—Cu1—O5               | 97.08 (7)   | O4 <sup>i</sup> —C8—C9 | 119.06 (19) |
| O5—Cu1—Cu1 <sup>i</sup> | 176.38 (5)  | C10—C9—C8              | 125.79 (19) |
| C1—O1—Cu1               | 119.86 (14) | C14—C9—C8              | 116.50 (19) |
| C1—O2—Cu1 <sup>i</sup>  | 125.63 (15) | C14—C9—C10             | 117.66 (19) |
| C8—O3—Cu1               | 124.96 (14) | C9—C10—I2              | 125.52 (16) |
| C8 <sup>i</sup> —O4—Cu1 | 121.09 (15) | C11—C10—I2             | 113.88 (16) |
| Cu1—O5—H51              | 123 (2)     | C11—C10—C9             | 120.6 (2)   |
| Cu1—O5—H52              | 117 (3)     | C10—C11—H1             | 119.8       |
| H51—O5—H52              | 108 (4)     | C12—C11—C10            | 120.3 (2)   |
| O1—C1—C2                | 116.23 (19) | C12—C11—H11            | 119.8       |
| O2—C1—O1                | 124.6 (2)   | C11—C12—H12            | 120.0       |
| O2—C1—C2                | 119.2 (2)   | C13—C12—C11            | 120.1 (2)   |
| C3—C2—C1                | 124.2 (2)   | C13—C12—H12            | 120.0       |
| C7—C2—C1                | 117.6 (2)   | C12—C13—H13            | 120.3       |
| C7—C2—C3                | 118.1 (2)   | C14—C13—C12            | 119.4 (2)   |

|  |              |                            |              |
|--|--------------|----------------------------|--------------|
| C2—C3—I1                                 | 125.24 (17)  | C14—C13—H13                | 120.3        |
| C4—C3—I1                                 | 114.73 (17)  | C9—C14—H14                 | 119.0        |
| C4—C3—C2                                 | 120.0 (2)    | C13—C14—C9                 | 121.9 (2)    |
| C3—C4—H4                                 | 119.8        | C13—C14—H14                | 119.0        |
| O2 <sup>i</sup> —Cu1—O1—C1               | 7.9 (5)      | I1—C3—C2—C1                | 5.4 (3)      |
| O3—Cu1—O1—C1                             | -85.32 (17)  | I1—C3—C2—C7                | -177.62 (17) |
| O4—Cu1—O1—C1                             | 83.95 (17)   | C4—C3—C2—C1                | -174.1 (2)   |
| O5—Cu1—O1—C1                             | -179.21 (16) | C4—C3—C2—C7                | 2.9 (3)      |
| Cu1 <sup>i</sup> —Cu1—O3—C8              | 0.27 (18)    | I1—C3—C4—C5                | 177.2 (2)    |
| O1—Cu1—O3—C8                             | 86.62 (19)   | C2—C3—C4—C5                | -3.3 (4)     |
| O2 <sup>i</sup> —Cu1—O3—C8               | -82.38 (19)  | C6—C5—C4—C3                | 0.6 (4)      |
| O4—Cu1—O3—C8                             | 11.6 (5)     | C7—C6—C5—C4                | 2.3 (4)      |
| O5—Cu1—O3—C8                             | -177.70 (18) | C2—C7—C6—C5                | -2.7 (4)     |
| Cu1 <sup>i</sup> —Cu1—O4—C8 <sup>i</sup> | -4.82 (18)   | O3—C8—C9—C10               | 173.4 (2)    |
| O1—Cu1—O4—C8 <sup>i</sup>                | -91.37 (18)  | O3—C8—C9—C14               | -3.7 (3)     |
| O2 <sup>i</sup> —Cu1—O4—C8 <sup>i</sup>  | 77.94 (18)   | O4 <sup>i</sup> —C8—C9—C10 | -5.2 (3)     |
| O3—Cu1—O4—C8 <sup>i</sup>                | -16.0 (5)    | O4 <sup>i</sup> —C8—C9—C14 | 177.7 (2)    |
| O5—Cu1—O4—C8 <sup>i</sup>                | 173.25 (18)  | C8—C9—C10—C11              | -175.2 (2)   |
| Cu1—O1—C1—O2                             | 8.5 (3)      | C8—C9—C10—I2               | 3.2 (3)      |
| Cu1—O1—C1—C2                             | -170.57 (14) | C14—C9—C10—I2              | -179.69 (16) |
| Cu1 <sup>i</sup> —O2—C1—O1               | -11.8 (3)    | C14—C9—C10—C11             | 1.9 (3)      |
| Cu1 <sup>i</sup> —O2—C1—C2               | 167.28 (15)  | C8—C9—C14—C13              | 176.4 (2)    |
| Cu1—O3—C8—O4 <sup>i</sup>                | 3.5 (3)      | C10—C9—C14—C13             | -1.0 (3)     |
| Cu1—O3—C8—C9                             | -175.06 (14) | I2—C10—C11—C12             | 179.93 (19)  |

|             |           |                     |          |
|-------------|-----------|---------------------|----------|
| C3—C2—C1—O1 | 153.2 (2) | C9—C10—C11—C12      | -1.5 (4) |
| C3—C2—C1—O2 | -25.9 (3) | C10—C11—C12—<br>C13 | 0.1 (4)  |
| C7—C2—C1—O1 | -23.8 (3) | C11—C12—C13—<br>C14 | 0.8 (4)  |
| C7—C2—C1—O2 | 157.1 (2) | C12—C13—C14—C9      | -0.4 (4) |
| C1—C2—C7—C6 | 177.3 (2) |                     |          |

Simetri Kodları: (i)  $-x+1, -y+1, -z+1$

**Ek Tablo 4. (3)** kristalinin hidrojen bağı geometrisi (Å, °)

| $D-H\cdots A$                 | $D-H$    | $H\cdots A$ | $D\cdots A$ | $D-H\cdots A$ |
|-------------------------------|----------|-------------|-------------|---------------|
| O5—H51 · · · O1 <sup>ii</sup> | 0.83 (3) | 2.09 (3))   | 2.839 (2)   | 152 (3)       |
| O5—H52 · · · O4 <sup>ii</sup> | 0.83 (3) | 2.56 (4)    | 3.171 (2)   | 132 (3)       |

Simetri Kodları: (ii)  $-x+2, -y+1, -z+1$

**Ek Tablo 5. (4)** kristalinin geometrik parametreleri (Å, °)

|                     |           |       |           |
|---------------------|-----------|-------|-----------|
| I1—C3               | 2.102 (5) | C2—C7 | 1.397 (7) |
| Co1—O2              | 2.077 (3) | C3—C4 | 1.393 (7) |
| Co1—O2 <sup>1</sup> | 2.077 (3) | C4—H4 | 0.9300    |
| Co1—O4              | 2.135 (4) | C5—C4 | 1.383 (8) |
| Co1—O4 <sup>1</sup> | 2.135 (4) | C5—C6 | 1.383 (8) |
| Co1—N1              | 2.134 (4) | C5—H5 | 0.9300    |
| Co1—N1 <sup>1</sup> | 2.134 (4) | C6—H6 | 0.9300    |
| O1—C1               | 1.253 (6) | C7—C6 | 1.384 (7) |

|                                      |             |          |           |
|--------------------------------------|-------------|----------|-----------|
| O2—C1                                | 1.263 (6)   | C7—H7    | 0.9300    |
| O3—C13                               | 1.235 (6)   | C8—C9    | 1.390 (6) |
| O4—H41                               | 0.855 (18)  | C8—H8    | 0.9300    |
| O4—H42                               | 0.86 (2)    | C9—C13   | 1.497 (7) |
| N1—C8                                | 1.335 (7)   | C10—C9   | 1.386 (7) |
| N1—C12                               | 1.345 (6)   | C10—C11  | 1.389 (7) |
| N2—C13                               | 1.328 (6)   | C10—H10  | 0.9300    |
| N2—H21                               | 0.86 (2)    | C11—C12  | 1.381 (7) |
| N2—H22                               | 0.86 (2)    | C11—H11  | 0.9300    |
| C2—C1                                | 1.510 (7)   | C12—H12  | 0.9300    |
| C2—C3                                | 1.396 (7)   |          |           |
| O2 <sup>l</sup> —Co1—O2              | 180.0       | C4—C3—H1 | 113.6 (4) |
| O2—Co1—N1                            | 89.86 (14)  | C4—C3—C2 | 121.3 (5) |
| O2 <sup>i</sup> —Co1—N1              | 90.14 (14)  | C3—C4—H4 | 120.3     |
| O2—Co1—N1 <sup>l</sup>               | 90.14 (14)  | C5—C4—C3 | 119.4 (5) |
| O2 <sup>i</sup> —Co1—N1 <sup>l</sup> | 89.86 (14)  | C5—C4—H4 | 120.3     |
| N1 <sup>i</sup> —Co1—N1              | 180.0       | C4—C5—H5 | 119.6     |
| O2—Co1—O4                            | 92.53 (14)  | C6—C5—C4 | 120.8 (5) |
| O2 <sup>i</sup> —Co1—O4              | 87.47 (14)  | C6—C5—H5 | 119.6     |
| O2—Co1—O4 <sup>i</sup>               | 87.47 (14)  | C5—C6—C7 | 119.0 (5) |
| O2 <sup>i</sup> —Co1—O4 <sup>i</sup> | 92.53 (14)  | C5—C6—H6 | 120.5     |
| O4 <sup>i</sup> —Co1—O4              | 180.00 (18) | C7—C6—H6 | 120.5     |
| N1—Co1—O4                            | 87.66 (15)  | C2—C7—H7 | 119.0     |
| N1 <sup>i</sup> —Co1—O4              | 92.34 (15)  | C6—C7—C2 | 122.1 (5) |

|                                      |            |             |            |
|--------------------------------------|------------|-------------|------------|
| N1—Co1—O4 <sup>i</sup>               | 92.34 (15) | C6—C7—H7    | 119.0      |
| N1 <sup>i</sup> —Co1—O4 <sup>i</sup> | 87.66 (15) | N1—C8—C9    | 123.4 (5)  |
| C1—O2—Co1                            | 123.9 (3)  | N1—C8—H8    | 118.3      |
| Co1—O4—H41                           | 120 (5)    | C9—C8—H8    | 118.3      |
| Co1—O4—H42                           | 98 (5)     | C8—C9—C13   | 117.9 (4)  |
| H42—O4—H41                           | 106 (4)    | C10—C9—C8   | 117.8 (5)  |
| C8—N1—Co1                            | 119.2 (3)  | C10—C9—C13  | 124.2 (4)  |
| C8—N1—C12                            | 118.2 (4)  | C9—C10—C11  | 119.3 (5)  |
| C12—N1—Co1                           | 122.6 (3)  | C9—C10—H10  | 120.3      |
| C13—N2—H21                           | 126 (5)    | C11—C10—H10 | 120.3      |
| C13—N2—H22                           | 116 (5)    | C10—C11—H11 | 120.5      |
| H21—N2—H22                           | 116 (7)    | C12—C11—C10 | 118.9 (5)  |
| O1—C1—O2                             | 124.6 (5)  | C12—C11—H11 | 120.5      |
| O1—C1—C2                             | 118.8 (4)  | N1—C12—C11  | 122.3 (5)  |
| O2—C1—C2                             | 116.5 (4)  | N1—C12—H12  | 118.8      |
| C3—C2—C1                             | 125.0 (4)  | C11—C12—H12 | 118.8      |
| C3—C2—C7                             | 117.4 (5)  | O3—C13—N2   | 122.6 (5)  |
| C7—C2—C1                             | 117.5 (4)  | O3—C13—C9   | 120.0 (4)  |
| C2—C3—H1                             | 125.1 (4)  | N2—C13—C9   | 117.4 (4)  |
| N1—Co1—O2—C1                         | 121.0 (4)  | C1—C2—C3—H1 | -0.8 (7)   |
| N1 <sup>i</sup> —Co1—O2—C1           | -59.0 (4)  | C1—C2—C3—C4 | 178.6 (5)  |
| O4—Co1—O2—C1                         | 33.4 (4)   | C7—C2—C3—H1 | -177.7 (3) |
| O4 <sup>i</sup> —Co1—O2—C1           | -146.6 (4) | C7—C2—C3—C4 | 1.7 (7)    |
| O2—Co1—N1—C8                         | -135.9 (4) | C1—C2—C7—C6 | -177.2 (5) |

|                             |            |                    |            |
|-----------------------------|------------|--------------------|------------|
| O2 <sup>i</sup> —Co1—N1—C8  | 44.1 (4)   | C3—C2—C7—C6        | -0.1 (7)   |
| O2—Co1—N1—C12               | 41.5 (4)   | I1—C3—C4—C5        | 177.8 (4)  |
| O2 <sup>i</sup> —Co1—N1—C12 | -138.5 (4) | C2—C3—C4—C5        | -1.6 (8)   |
| O4—Co1—N1—C8                | -43.3 (4)  | C6—C5—C4—C3        | -0.1 (8)   |
| O4 <sup>i</sup> —Co1—N1—C8  | 136.7 (4)  | C4—C5—C6—C7        | 1.7 (8)    |
| O4—Co1—N1—C12               | 134.1 (4)  | C2—C7—C6—C5        | -1.6 (8)   |
| O4 <sup>i</sup> —Co1—N1—C12 | -45.9 (4)  | N1—C8—C9—C10       | -0.4 (7)   |
| Co1—O2—C1—O1                | -19.5 (7)  | N1—C8—C9—C13       | 176.6 (4)  |
| Co1—O2—C1—C2                | 158.0 (3)  | C8—C9—C13—O3       | -6.2 (7)   |
| Co1—N1—C8—C9                | 177.4 (4)  | C8—C9—C13—N2       | 175.6 (5)  |
| C12—N1—C8—C9                | -0.2 (7)   | C10—C9—C13—O3      | 170.7 (5)  |
| Co1—N1—C12—C11              | -176.4 (4) | C10—C9—C13—N2      | -7.6 (8)   |
| C8—N1—C12—C11               | 1.1 (7)    | C11—C10—C9—C8      | 0.2 (7)    |
| C3—C2—C1—O1                 | -21.1 (7)  | C11—C10—C9—<br>C13 | -176.7 (5) |
| C3—C2—C1—O2                 | 161.2 (5)  | C9—C10—C11—<br>C12 | 0.6 (8)    |
| C7—C2—C1—O1                 | 155.8 (5)  | C10—C11—C12—<br>N1 | -1.3 (8)   |
| C7—C2—C1—O2                 | -21.9 (6)  |                    |            |

Simetri Kodları: (i) -x, -y+1, -z.

**Ek Tablo 6. (4)** kristalinin hidrojen bağı geometrisi (Å, °)

| $D-H\cdots A$                  | $D-H$    | $H\cdots A$ | $D\cdots A$ | $D-H\cdots A$ |
|--------------------------------|----------|-------------|-------------|---------------|
| N2—H21 · · · O1 <sup>ii</sup>  | 0.86 (6) | 2.02 (6)    | 2.837 (6)   | 158 (5)       |
| N2—H22 · · · O3 <sup>iii</sup> | 0.86 (6) | 2.21 (7)    | 2.984 (7)   | 151 (7)       |
| O4—H41 · · · O3 <sup>iv</sup>  | 0.86 (5) | 2.00 (5)    | 2.827 (5)   | 162 (5)       |
| O4—H42 · · · O1                | 0.86 (5) | 1.80 (6)    | 2.631 (5)   | 161 (7)       |
| C10—H10 · · · O1 <sup>ii</sup> | 0.93     | 2.51        | 3.400 (6)   | 160           |

Simetri Kodları: (ii)  $x, y, z-1$ ; (iii)  $-x+1, -y+1, -z-1$ ; (iv)  $-x+1, -y+1, -z$

**Ek Tablo 7. (6)** kristalinin geometrik parametreleri (Å, °)

|                     |             |        |           |
|---------------------|-------------|--------|-----------|
| Cu1—O1              | 1.9937 (14) | C3—C2  | 1.397 (3) |
| Cu1—O1 <sup>i</sup> | 1.9937 (14) | C4—C3  | 1.394 (3) |
| Cu1—O4              | 2.5078 (16) | C4—C5  | 1.387 (3) |
| Cu1—O4 <sup>i</sup> | 2.5078 (16) | C4—H4  | 0.9300    |
| Cu1—N1              | 1.9984 (16) | C5—C6  | 1.388 (3) |
| Cu1—N1 <sup>i</sup> | 1.9984 (16) | C5—H5  | 0.9300    |
| I1—C3               | 2.0942 (19) | C6—H6  | 0.9300    |
| O1—C1               | 1.275 (2)   | C7—C6  | 1.389 (3) |
| O2—C1               | 1.245 (2)   | C7—H7  | 0.9300    |
| O3—C13              | 1.238 (3)   | C8—H8  | 0.9300    |
| O4—H41              | 0.87 (4)    | C9—C8  | 1.390 (2) |
| O4—H42              | 0.80 (4)    | C9—C10 | 1.391 (3) |
| N1—C8               | 1.337 (2)   | C9—C13 | 1.496 (3) |

|                                      |             |             |             |
|--------------------------------------|-------------|-------------|-------------|
| N1—C12                               | 1.343 (3)   | C10—C11     | 1.390 (3)   |
| N2—C13                               | 1.331 (3)   | C10—H10     | 0.9300      |
| N2—H22                               | 0.83 (3)    | C11—H11     | 0.9300      |
| N2—H21                               | 0.84 (3)    | C12—C11     | 1.387 (3)   |
| C1—C2                                | 1.513 (3)   | C12—H12     | 0.9300      |
| C2—C7                                | 1.403 (3)   |             |             |
| O1 <sup>i</sup> —Cu1—O1              | 180.00 (7)  | C4—C5—C6    | 119.99 (19) |
| O1—Cu1—N1                            | 89.98 (6)   | C4—C5—H5    | 120.0       |
| O1 <sup>i</sup> —Cu1—N1              | 90.02 (6)   | C6—C5—H5    | 120.0       |
| O1—Cu1—N1 <sup>i</sup>               | 90.02 (6)   | C5—C6—C7    | 119.8 (2)   |
| O1 <sup>i</sup> —Cu1—N1 <sup>i</sup> | 89.98 (6)   | C5—C6—H6    | 120.1       |
| O4—Cu1—O1                            | 84.56 (6)   | C7—C6—H6    | 120.1       |
| O4—Cu1—N1                            | 93.70 (6)   | C2—C7—H7    | 119.3       |
| N1—Cu1—N1 <sup>i</sup>               | 180.00 (9)  | C6—C7—C2    | 121.42 (19) |
| H41—O4—H42                           | 106 (4)     | C6—C7—H7    | 119.3       |
| C1—O1—Cu1                            | 121.16 (13) | N1—C8—C9    | 122.62 (18) |
| C8—N1—Cu1                            | 120.11 (13) | N1—C8—H8    | 118.7       |
| C12—N1—Cu1                           | 121.13 (13) | C9—C8—H8    | 118.7       |
| C8—N1—C12                            | 118.74 (16) | C8—C9—C10   | 118.26 (18) |
| C13—N2—H21                           | 116 (2)     | C8—C9—C13   | 117.39 (17) |
| C13—N2—H22                           | 122 (2)     | C10—C9—C13  | 124.23 (17) |
| H22—N2—H21                           | 120 (3)     | C9—C10—H10  | 120.3       |
| O1—C1—C2                             | 116.35 (17) | C11—C10—C9  | 119.46 (18) |
| O2—C1—O1                             | 125.16 (18) | C11—C10—H10 | 120.3       |



|                             |              |                |              |
|-----------------------------|--------------|----------------|--------------|
| O2—C1—C2                    | 118.39 (17)  | C10—C11—H11    | 120.8        |
| C3—C2—C1                    | 123.79 (18)  | C12—C11—C10    | 118.33 (19)  |
| C3—C2—C7                    | 117.57 (18)  | C12—C11—H11    | 120.8        |
| C7—C2—C1                    | 118.51 (17)  | N1—C12—C11     | 122.56 (19)  |
| C2—C3—H1                    | 123.71 (14)  | N1—C12—H12     | 118.7        |
| C4—C3—H1                    | 114.92 (15)  | C11—C12—H12    | 118.7        |
| C4—C3—C2                    | 121.30 (18)  | O3—C13—N2      | 122.34 (19)  |
| C3—C4—H4                    | 120.1        | O3—C13—C9      | 120.19 (17)  |
| C5—C4—C3                    | 119.83 (19)  | N2—C13—C9      | 117.45 (18)  |
| C5—C4—H4                    | 120.1        |                |              |
| N1—Cu1—O1—C1                | 123.90 (15)  | I1—C3—C2—C7    | 173.86 (14)  |
| N1i—Cu1—O1—C1               | -56.10 (15)  | C4—C3—C2—C1    | 172.78 (18)  |
| O1—Cu1—N1—C8                | -133.41 (15) | C4—C3—C2—C7    | -3.0 (3)     |
| O1 <sup>i</sup> —Cu1—N1—C8  | 46.59 (15)   | C5—C4—C3—H1    | -176.15 (16) |
| O1—Cu1—N1—C12               | 48.21 (16)   | C5—C4—C3—C2    | 1.0 (3)      |
| O1 <sup>i</sup> —Cu1—N1—C12 | -131.79 (16) | C3—C4—C5—C6    | 1.5 (3)      |
| Cu1—O1—C1—O2                | -20.6 (3)    | C4—C5—C6—C7    | -1.8 (3)     |
| Cu1—O1—C1—C2                | 155.73 (13)  | C2—C7—C6—C5    | -0.4 (3)     |
| Cu1—N1—C8—C9                | -178.46 (15) | C10—C9—C8—N1   | -1.5 (3)     |
| C12—N1—C8—C9                | 0.0 (3)      | C13—C9—C8—N1   | 174.79 (18)  |
| Cu1—N1—C12—C11              | 179.89 (16)  | C8—C9—C10—C11  | 1.6 (3)      |
| C8—N1—C12—C11               | 1.5 (3)      | C13—C9—C10—C11 | -174.41 (19) |
| O1—C1—C2—C3                 | 153.14 (18)  | C8—C9—C13—O3   | -4.3 (3)     |
| O1—C1—C2—C7                 | -31.1 (3)    | C8—C9—C13—N2   | 177.18 (19)  |

|             |              |                |           |
|-------------|--------------|----------------|-----------|
| O2—C1—C2—C3 | -30.3 (3)    | C10—C9—C13—O3  | 171.8 (2) |
| O2—C1—C2—C7 | 145.49 (19)  | C10—C9—C13—N2  | -6.8 (3)  |
| C1—C2—C7—C6 | -173.32 (18) | C9—C10—C11—C12 | -0.3 (3)  |
| C3—C2—C7—C6 | 2.7 (3)      | N1—C12—C11—C10 | -1.3 (3)  |
| I1—C3—C2—C1 | -10.3 (3)    |                |           |

Simetri Kodları: (i)  $-x$ ,  $-y+1$ ,  $-z$ .



**Ek Tablo 8.** (6) kristalinin hidrojen bađı geometrisi (Å, °)

| <i>D—H···A</i>                  | <i>D—H</i> | <i>H···A</i> | <i>D···A</i> | <i>D—H···A</i> |
|---------------------------------|------------|--------------|--------------|----------------|
| N2—H21 · · · O3 <sup>ii</sup>   | 0.84 (3)   | 2.17 (3)     | 2.942 (3)    | 154 (3)        |
| N2—H22 · · · O2 <sup>iii</sup>  | 0.83 (3)   | 2.11 (3)     | 2.881 (2)    | 154 (3)        |
| O4—H41 · · · O2 <sup>i</sup>    | 0.87 (4)   | 1.87 (4)     | 2.720 (2)    | 165 (4)        |
| O4—H42 · · · O3 <sup>iv</sup>   | 0.80 (4)   | 2.16 (4)     | 2.923 (2)    | 160 (4)        |
| C10—H10 · · · O2 <sup>iii</sup> | 0.93       | 2.49         | 3.368 (2)    | 158            |

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

## ÖZGEÇMİŞ

**Adı Soyadı:** Ömür AYDIN

**Doğum Yeri:** ARDAHAN

**Doğum Tarihi:** 07.07.1989

**Medeni Hali:** Evli

**Yabancı Dili:** İngilizce

### Eğitim Durumu (Kurum ve Yıl)

**Lise:** Ardahan Lisesi 2006

**Lisans:** Kafkas Üniversitesi Fen- Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü-2011

**Yüksek Lisans** Kafkas Üniversitesi Fen- Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü-2012-  
Halen

### Çalıştığı Kurum/Kurumlar ve Yıl

1. Ardahan Devlet Hastanesi 2011- 2016
2. Bilecik İl Sağlık Müdürlüğü 2016-2017
3. İstanbul Üsküdar Devlet Hastanesi 2017- Halen devam ediyor.

### Yayımları

**Uluslararası Hakemli Dergilerde Yayımlanan Makaleler**  
(SCI-Expanded kapsamında yer alan dergilerdeki makaleler)

1. Tetrakis( $\mu$ -2-iodobenzoato- $\kappa^2$ O:O')bis-[aquacopper (II)] Ömür Aydın, Nagihan Çaylak Delibaş, Hacali Necefoğlu and Tuncer Hökelek (2012). Acta Cryst. E58, 409-410
2. Diaquabis(2-iodobenzoato-  $\kappa$ O)bis-(nicotinamide-  $\kappa$ N<sup>1</sup>)cobalt(II) Ömür Aydın, Nagihan Çaylak Delibaş, Hacali Necefoğlu and Tuncer Hökelek (2012) Acta Cryst. 521-522
3. Catena-Poly[[aqua(2-iodobenzoato- $\kappa$ O)-cobalt(II)]- $\mu$ -aqua- $\mu$ -2-iodobenzoato- $\kappa^2$ O:O'] Ömür Aydın, Nagihan Çaylak Delibaş, Hacali Necefoğlu and Tuncer Hökelek (2012) Acta Cryst. 601-602

4. Diaquabis(2-iodobenzoato- $\kappa$ O)bis-(nicotinamide- $\kappa$ N<sup>1</sup>)copper(II)  $\ddot{O}$ mür Aydın,  
Nagihan  $\mathcal{C}$ aylak Delibař, Hacali Necefođlu and Tuncer H $\ddot{o}$ kelek (2012) Acta  
Cryst.1162-1163

