

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

METAL(II) 4-KLOROFENİLASETATLARIN *N,N'*-DİETİLNİKOTİNAMİD VE  
İZONİKOTİNAMİD İLE KARIŞIK LİGAND KOMPLEKSLERİNİN SENTEZ  
VE ÖZELLİKLERİ

Ali Murat TONBUL  
Yüksel Lisans Tezi

DANIŞMAN  
Dr. Öğr. Üyesi Füreya Elif ÖZBEK

TEMMUZ-2018  
KARS



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



**METAL(II) 4-KLOROFENİLASETATLARIN *N,N*-DİETİLNİKOTİNAMİD VE İZONİKOTİNAMİD İLE KARIŞIK LİGAND KOMPLEKSLERİNİN SENTEZ VE ÖZELLİKLERİ**

**Ali Murat TONBUL**

**Yüksek Lisans Tezi**

**DANIŞMAN**

**Dr. Öğr. Üyesi Füreya Elif ÖZBEK**




Bu tez çalışması 2015-FM-22 nolu proje ile Kafkas Üniversitesi tarafından desteklenmiştir.

**TEMMUZ–2018**

**KARS**

T.C. Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalı Yüksek Lisans öğrencisi Ali Murat Tonbul'un Dr. Öğr. Üyesi Füreya Elif Özbek danışmanlığında Yüksek Lisans Tezi olarak hazırladığı "Metal(II) 4-Klorofenilasetatların *N,N'*-Dietilnikotinamid ve İzonikotinamid ile Karışık Ligand Komplekslerinin Sentez ve Özellikleri" adlı bu çalışma, yapılan tez savunması sınavı sonunda jüri tarafından Lisansüstü Eğitim Öğretim Yönetmeliği uyarınca değerlendirilerek oy . . . *birliği* . . . ile kabul edilmiştir.

20.07.2018

	Adı ve Soyadı	İmza
Başkan	: Prof. Dr. Hacali NECEFOĞLU	
Üye	: Dr. Öğr. Üyesi Füreya Elif ÖZBEK	
Üye	: Dr. Öğr. Üyesi Rövsen GULİYEV	

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

Doç. Dr. Fikret AKDENİZ  
Enstitü Müdürü

## ETİK BEYAN

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

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

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

**Ali Murat TONBUL**

**20.07.2018**

## ÖZET

(Yüksek Lisans Tezi)

### METAL(II) 4-KLOROFENİLASETATLARIN *N,N*-DİETİLNİKOTİNAMİD VE İZONİKOTİNAMİD İLE KARIŞIK LİGAND KOMPLEKSLERİNİN SENTEZ VE ÖZELLİKLERİ

Ali Murat TONBUL

Kafkas Üniversitesi  
Fen Bilimleri Enstitüsü  
Kimya Anabilim Dalı

**Danışman:** Dr. Öğr. Üyesi. F. Elif ÖZBEK

Bu çalışmada  $[M(4\text{-Cl-phenac})_2(\text{isona})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  genel formüllü ( $M= \text{Co, Ni ve Mn}$ ; 4-Cl-phenac=4-klorofenilasetat; isona=izonikotinamid) ve çinko(II),  $[M(4\text{-Cl-phenac})_2(\text{isona})_2]$  genel formüllü ( $M= \text{Zn ve Cu}$ ; 4-Cl-phenac=4-klorofenilasetat; isona=izonikotinamid) Metal (II) 4-Klorofenilasetatların izonikotinamid ile beş adet yeni kompleksi ilk defa sentezlenmiştir. Komplekslerin yapılarını aydınlatmak için elementel analiz, FT-IR spektroskopisi ve tek kristal ve toz X-ışını diffraksiyonu yöntemleri kullanılmış ve komplekslerin termal kararlılıkları TGA/DTA analizi ile incelenmiştir. Komplekslerin optik özellikleri ve floresans davranışları UV-Vis and Floresans Spektroskopisi yöntemleri ile incelenmiştir.

**Anahtar Kelimeler:** 4-Klorofenilasetik asit, izoniotinamid ve X ışını kırınım metodu.

## ABSTRACT

(M. Sc. Thesis)

SYNTHESIS AND PROPERTIES OF METAL(II) 4-CHLOROPHENYLACETATES  
LIGAND COMPLEXES WITH *N,N'*-DIETHYNICOTINAMIDE AND  
ISONICOTINAMIDE

Ali Murat TONBUL

Kafkas University

Graduate School of Applied and Natural Sciences

Department of chemistry

**Supervisor:** Dr. F. Elif ÖZBEK

Five novel complexes, namely,  $[M(4\text{-Cl-phenac})_2(\text{isona})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  (where:  $M = \text{Co, Ni}$  and  $\text{Mn}$ ; 4-Cl-phenac=4-chlorophenylacetate; isona=isonicotinamide) and  $[M(4\text{-Cl-phenac})_2(\text{isona})_2]$  (where:  $M = \text{Zn}$  and  $\text{Cu}$ ) have been synthesized and characterized by elemental analysis, single crystal and powder X-ray diffraction and FT-IR Spectroscopy. We investigated the thermal behavior of these complexes that are stable at room temperature, by TGA/DTA analysis. We also studied the optical absorption and fluorescence properties of the complexes with help of UV-Vis and fluorescence spectrophotometers.

**Keywords:** 4-Chlorophenylacetic acid, isonicotinamide, X-ray diffraction.

## ÖNSÖZ

Bu çalışma Kafkas Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü Anorganik Anabilim Dalı yüksek lisans tezi olarak hazırlanmıştır.

Kafkas Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü'nde yüksek lisans tezimin araştırmalarını yapabilmem için gerekli imkânları sağlayan ve çalışmalarımın bütün aşamalarında bana yol gösteren tez danışmanım Sayın Dr. Öğretim Üyesi F. Elif ÖZBEK'e

Tek kristal X ışını Tuncay HÖKELEK, toz X ışını Diffraksiyonu analizlerin alınmasında yardımcı olan Yusuf TUNCEL ve grafiklerin geçirilmesinde yardımcı olan Prof. Dr. İmameddin AMİRASLANOV'a komplekslerin optik ve floresans çalışmalarında büyük katkı sunan Doç. Dr. Mustafa YÜKSEK'e

Tez çalışmamın çeşitli aşamalarında yardımlarını esirgemeyen sayın hocalarım Prof. Dr. Hacı NECEFOĞLU'na, Dr. Öğr. Üyesi Mustafa SERTÇELİK'e,

Yüksek lisans yapmış olduğum sürede benden yardımlarını ve desteklerini esirgemeyen aileme ve değerli arkadaşlarım doktora öğrencileri Azer ÖZEN ve Ahmet Çağrı ATA'ya teşekkür ederim.

Temmuz 2018

Ali Murat TONBUL

## İÇİNDEKİLER

	Sayfa
<b>ETİK BEYANI</b>	<b>iii</b>
<b>ÖZET</b>	<b>iv</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>v</b>
<b>ÖNSÖZ</b>	<b>vi</b>
<b>İÇİNDEKİLER</b>	<b>vii</b>
<b>ŞEKİLLER DİZİNİ</b>	<b>viii</b>
<b>TABLolar DİZİNİ</b>	<b>x</b>
<b>SİMGELER VE KISALTMALAR</b>	<b>xi</b>
<b>1. GENEL BİLGİLER</b>	<b>1</b>
<b>1.1. Giriş</b>	<b>1</b>
1.1.1. 4-Klorofenilasetik Asit ve Kompleksleri	1
1.1.2. İzonikotinamid	6
<b>2. MATERYAL VE METOT</b>	<b>9</b>
2.1. Kullanılan Kimyasal Maddeler	9
2.2. Kullanılan Cihazlar	9
2.3. Komplekslerin Sentezi	10
2.4. Komplekslerin Absorpsiyon ve Emisyon Özellikleri Çalışmaları	10
<b>3. BULGULAR</b>	<b>14</b>
3.1. Elementel Analiz	14
3.2. Sentezlenen Komplekslerin Yapı İncelemeleri	14
3.3. Infrared Spektroskopisi	19
3.4. Komplekslerin Farklı Çözücülerdeki Çözünürlükleri	22
3.5. Termik Analiz	23
3.6. Komplekslerin Absorpsiyon ve Emisyon Özellikleri	29
<b>4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA</b>	<b>34</b>
4.1. Sonuç ve Öneriler	34
<b>5. KAYNAKLAR</b>	<b>36</b>
<b>ÖZGEÇMİŞ</b>	<b>70</b>



## ŞEKİLLER DİZİNİ

	Sayfa
Şekil 1.1. $[\text{Sn}(\text{CH}_3)_3(\text{C}_8\text{H}_6\text{ClO}_2)]_n$ Kompleksinin Yapısı.	1
Şekil 1.2. $\text{C}_{42}\text{H}_{38}\text{Cu}_2\text{N}_2\text{O}_8$ Kompleksinin Yapısı.	2
Şekil 1.3. $\text{C}_{46}\text{H}_{46}\text{Cu}_2\text{N}_2\text{O}_{12}$ Kompleksinin Yapısı.	2
Şekil 1.4. $\text{C}_{42}\text{H}_{34}\text{Cl}_4\text{Cu}_2\text{N}_2\text{O}_8$ Kompleksinin Yapısı.	3
Şekil 1.5. Tri- <i>N</i> -Butilkalay 2-( <i>p</i> -Klorofenil)-3-Metilbutiratın Yapısı.	4
Şekil 1.6. 2-(Solda) ve 3-(Sağda)klorofenilasetik asidin antimon (V) Komplekslerinin Yapıları.	4
Şekil 1.7. İzonikotinamidin Yapısal Formülü.	6
Şekil 1.8. $[\text{Co}(\text{C}_9\text{H}_{10}\text{NO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2)_2(\text{HO})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı.	7
Şekil 1.9. $[\text{Ni}(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ Moleküler Yapısı.	7
Şekil 2.1. Işığın Madde İçinden Geçerken Çizgisel Soğurulması.	11
Şekil 2.2. Soğurma (Absorpsiyon) Ve Floresansın Gerçekleşme Hali.	12
Şekil 2.3. Florimetreler ve Spektroflorimetrelerin Şeması.	13
Şekil 3.1. $[\text{Co}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Kristal Yapısı.	15
Şekil 3.2. $[\text{Ni}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Kristal Yapısı.	15
Şekil 3.3. $[\text{Mn}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Yapısı.	16
Şekil 3.4. Kompleks 1-3'ün toz X-Işını Diffraktogramları.	16
Şekil 3.5. $[\text{Zn}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Kristal Yapısı.	17
Şekil 3.6. $[\text{Zn}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$ Molekül Yapısı.	18
Şekil 3.7. $[\text{Cu}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Yapısı.	18
Şekil 3.8. Kompleks 5'in toz X ışını Diffraktogramı.	19
Şekil 3.9. $[\text{Co}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin FT-IR Spektrumları.	20
Şekil 3.10. $[\text{Ni}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin FT-IR Spektrumları.	21
Şekil 3.11. $[\text{Mn}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin FT-IR Spektrumları.	21
Şekil 3.12. $[\text{Zn}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin FT-IR Spektrumları.	21
Şekil 3.13. $[\text{Cu}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin FT-IR Spektrumları.	22
Şekil 3.14. $[\text{Co}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin TGA/DTA	

Eğrileri.	23
<b>Şekil 3.15.</b> $[\text{Ni}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2 \cdot (\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin TGA/DTA Eğrileri.	24
<b>Şekil 3.16.</b> $[\text{Mn}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2 \cdot (\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin TGA/DTA Eğrileri.	25
<b>Şekil 3.17.</b> $[\text{Zn}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2 \cdot (\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin TGA/DTA Eğrileri.	26
<b>Şekil 3.18.</b> $[\text{Cu}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2 \cdot (\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin TGA/DTA Eğrileri.	27
<b>Şekil 3.19.</b> Kompleks 1-3'ün Soğurma Spektrumları.	29
<b>Şekil 3.20.</b> Kompleks 4'ün Soğurma Spektrumları.	29
<b>Şekil 3.21.</b> Kompleks 5'ün Soğurma Spektrumları.	30
<b>Şekil 3.22.</b> Kompleks 1-3'in 200 Nm Dalga Boyundaki Işık ile Uyarılmaları Durumunda Elde Edilen Floresans Spektrumları.	31
<b>Şekil 3.23.</b> Kompleks 4'in 200 nm Dalga Boyundaki Işık ile Uyarılmaları Durumunda Elde Edilen Floresans Spektrumları.	31
<b>Şekil 3.24.</b> Kompleks 5'in 225 nm Dalga Boyundaki Işık ile Uyarılmaları Durumunda Elde Edilen Floresans Spektrumları.	32

## TABLULAR DİZİNİ

	<b>Sayfa</b>
<b>Tablo 3.1.</b> Sentezlenen Komplekslerin Elementel Analiz Verileri.	14
<b>Tablo 3.2.</b> Sentezlenen Komplekslerin Farklı Çözücülerdeki Çözünürlükleri.	22
<b>Tablo 3.3.</b> Sentezlenen Komplekslerin TGA/DTA Verileri	28
<b>Tablo 3.4.</b> Sentezlenen Komplekslerin Floresans Şiddetleri.	30
<b>Ek Tablo 1.</b> Kompleks I II ve IV'ün Yapısal Aydınlatma Verileri	40
<b>Ek Tablo 2.</b> [C <sub>28</sub> H <sub>32</sub> C <sub>12</sub> CoN <sub>4</sub> O <sub>9</sub> ] Kompleksinin Atom Koordinatları ve İzotropik yer Değişirme Parametreleri	41
<b>Ek Tablo 3.</b> [C <sub>28</sub> H <sub>32</sub> C <sub>12</sub> CoN <sub>4</sub> O <sub>9</sub> ] Molekülünün Geometrik Parametreleri	43
<b>Ek Tablo 4.</b> [C <sub>28</sub> H <sub>28</sub> C <sub>12</sub> N <sub>4</sub> NiO <sub>9</sub> ] Kompleksinin Atom Koordinatları ve İzotropik yer Değişirme Parametreleri	52
<b>Ek Tablo 5.</b> [C <sub>28</sub> H <sub>28</sub> C <sub>12</sub> N <sub>4</sub> NiO <sub>9</sub> ] Molekülünün Geometrik Parametreleri	53
<b>Ek Tablo 6.</b> [C <sub>28</sub> H <sub>24</sub> C <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>6</sub> Zn] Kompleksinin Atom Koordinatları ve İzotropik yer Değişirme Parametreleri	58
<b>Ek Tablo 7.</b> [C <sub>28</sub> H <sub>24</sub> C <sub>12</sub> N <sub>4</sub> O <sub>6</sub> Zn] Molekülünün Geometrik Parametreleri	61

## SİMGELER VE KISALTMALAR

KFFA	:4-Klorofenilasetik Asit
İNA	:İzonikotinamid
TG	:Termogravimetri
TGA	:Termogravimetrik Analiz
DMF	:Dimetilformamid
DMSO	:Dimetilsülfoksit
a, b, c, $\alpha$ , $\beta$ , $\gamma$ , $\theta$	:Birim Hücre Parametreleri
$D_x$	:Kristalin Yoğunluğu
Å	:Angström
Z	:Birim Hücredeki Asimetrik Birim Sayısı
Den	:Deneysel
Teo	:Teorik

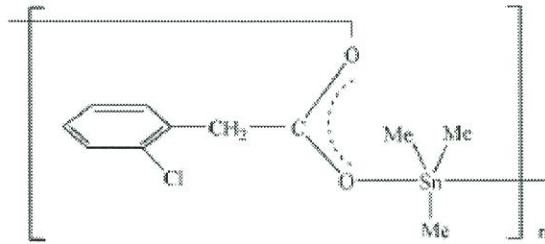
## 1. GENEL BİLGİLER

### 1.1. Giriş

#### 1.1.1. 4-Klorofenilasetik Asit ve Kompleksleri

Fenilasetik asit son yıllarda klinik araştırmalarda hayvanlar üzerinde yapılan deneylerde anti tümör ajanı olarak kullanılmaya başlanmıştır. Kanserli yetişkinlerin tedavisinde ilaç konsantrasyonlarında önemli bir etkiye sahiptir ve herhangi toksik etkisi bulunmadığı saptanmıştır. Ayrıca yapılan çalışmada prostat kanseri tedavisinde kullanılmıştır [1, 2]. Fenilasetik asidin biyolojik öneminin vurgulandığı bir başka çalışmalarda ise meme kanseri üzerine etkileri araştırılmıştır. Deneysel verilere göre östrojene duyarlı meme kanserinin tedavisi ve önlenmesinde terapötik madde olarak kullanılması önerilmiştir [3-5]. Fenilasetik asit ve türevlerinin metal kompleksleri ile ilgili literatüre bakıldığında kaynakların sınırlı olduğu göze çarpmaktadır.

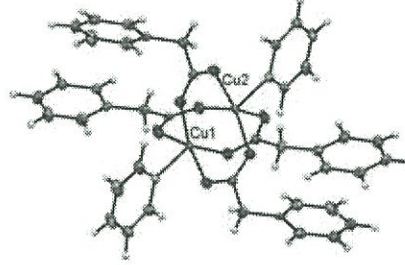
Wen ve arkadaşları tarafından sentezlenen ve kristal yapısı aydınlatılan,  $[\text{Sn}(\text{CH}_3)_3(\text{C}_8\text{H}_6\text{ClO}_2)]_n$ , genel formüllü polimerik koordinasyon bileşiğinde Kalay atomları ekvatorial düzlemde bulunan üç metil grubu ve eksen pozisyonundaki 2-klorofenil asetat ligantlarının karboksilat oksijen atomlarıyla hafif bozulmuş üçgen bi piramit geometriye sahiptir. Kalay atomları her bir 2-klorofenil asetatlarının iki oksijen atomuyla köprü oluşturmaktadır. Kompleksin yapısı aşağıda görülmektedir [6].



Şekil 1.1.  $[\text{Sn}(\text{CH}_3)_3(\text{C}_8\text{H}_6\text{ClO}_2)]_n$  Kompleksinin Yapısı.

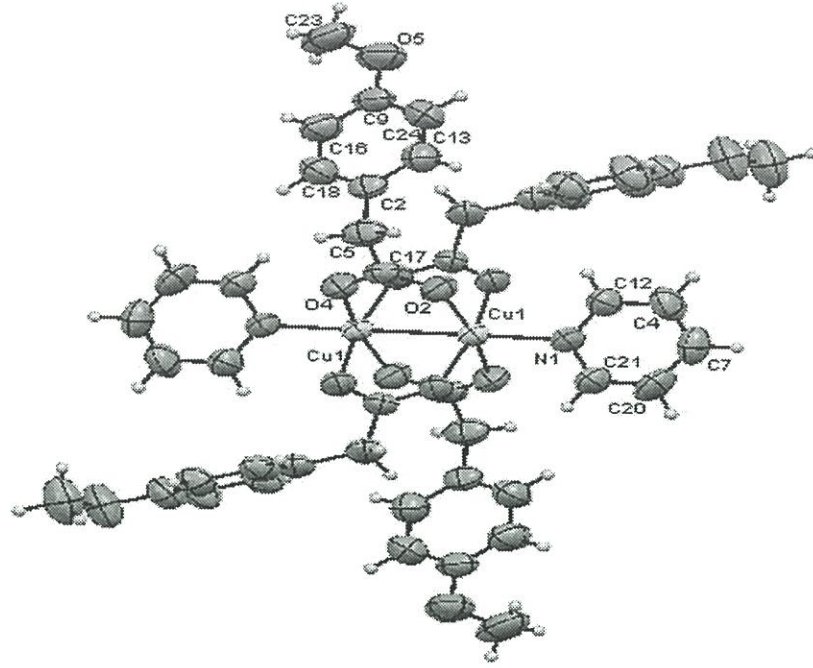
Iqbal ve arkadaşları tarafından fenilasetatin piridin ile dimerik bakır(II) kompleksi sentezlenmiş ve XRD ile kristal yapısı belirlenmiştir. Her bir bakır(II) atomu etrafında eksen pozisyonunda bir monodentat piridin ve ekvatorial pozisyon düzlemde bidentat

karboksilatlarla oluřan kare piramidal geometri grlmektedir. Kompleksin supramolekler yapısı C-H...C ve C-H...O etkileřimlerinin, c eksenini boyunca bymektedir. Kristalin kompleksin saflığı toz XRD incelemeleriyle doęrulanmıřtır. Ayrıca kompleksin DMSO da zlerek zeltisiyle elektrokimyasal incelemeleri ve UV-Vis ve viskozite lmleri yapılmıřtır [7]. Kompleksin yapısı Őekil 1.2’de verilmiřtir.

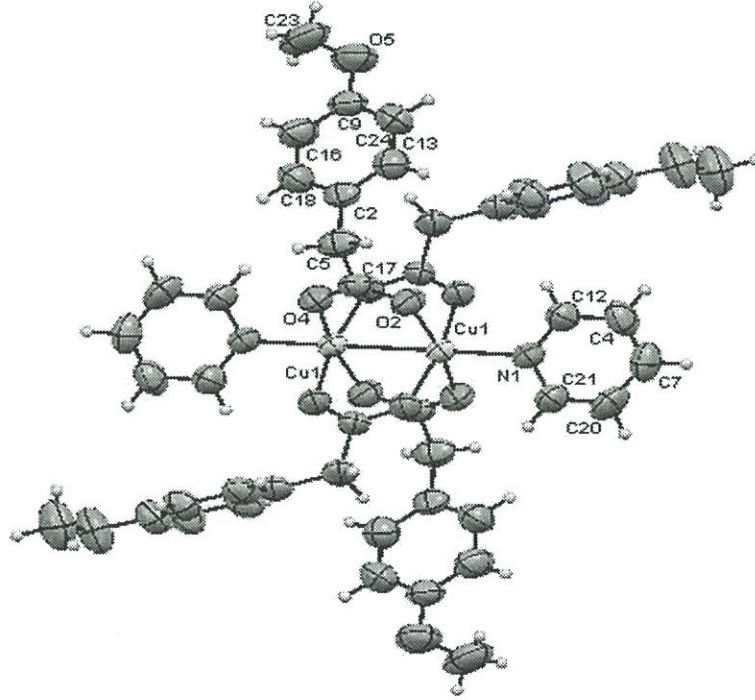


**Őekil 1.2.**  $C_{42}H_{38}Cu_2N_2O_8$  Kompleksinin Yapısı.

Yine Iqbal ve arkadařları tarafından 4-metoksi- ve 4-klorofenilasetik asitin piridin ile bakır (II) kompleksleri sentezlenmiř ve her iki kompleksin yapıları tek kristal XRD analizi ile aydınlatılmıřtır. Komplekslerin her birinde ekvatorial pozisyonda 4 kpr oluřturmuř karboksilat ligandı ve eksen pozisyonunda 2 piridin molekl ve bakır-bakır baęları bulunmaktadır. Kompleksler hafif bozulmuř oktahedral koordinasyonuna sahiptirler. Sentezlenen komplekslerin yapıları Őekil 1.3 ve 1.4’te verilmiřtir [8].



Şekil 1.3.  $C_{46}H_{46}Cu_2N_2O_{12}$  Kompleksinin Yapısı.

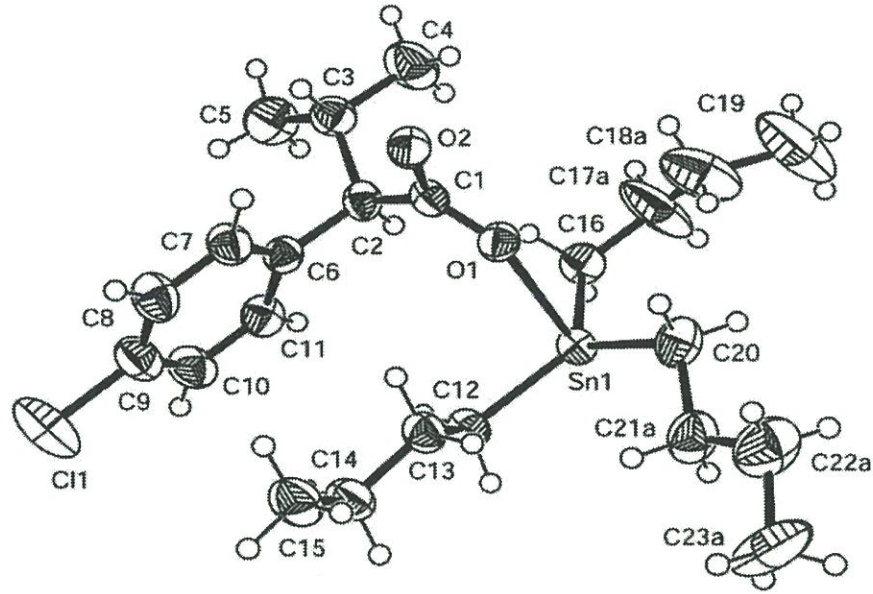


Şekil 1.4.  $C_{42}H_{34}Cl_4Cu_2N_2O_8$  Kompleksinin Yapısı.

Eng ve arkadaşları bir seri trimetilorganokalay 2-(p-klorofenil)-3-metil bütirat  $[(R_3SnO_2CCH(CH(CH_3)_2)C_6H_4Cl)_4]$ , R = metil, etil, n-propil, n-butil, fenilandsiklohekzil] sentezlenmiştir. Elementel analiz, Mossbauer, IR ve NMR spektroskopileri ile

yapıların karakterizasyonu yapılmıştır. Tri-n-butil kalay 2-(p-klorofenil)-3-metil butirat kompleksinin kristal yapısı aydınlatılmıştır (Şekil 1.5). Komplekslerin sivrisineklerine karşı değerlendirilmiş ve sivrisinek türlerine karşı önemli bir toksisite verisi gösterdiği belirlenmiştir [9].

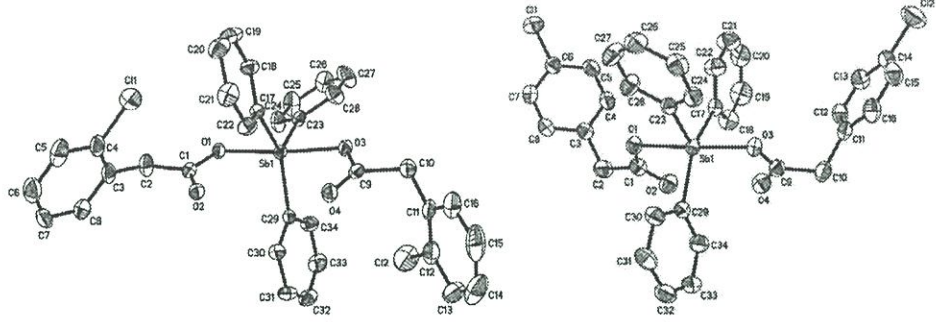
Aragon- Muriel ve arkadaşları tarafından 11 lantanit bileşiği, [Y(cinn)<sub>3</sub>], [La(cinn)<sub>3</sub>], [La(4-OMecinn)<sub>3</sub>]<sub>2</sub>H<sub>2</sub>O, [La(4-Clcinn)<sub>3</sub>]<sub>2</sub>H<sub>2</sub>O, [La(4-OMephac)<sub>3</sub>]<sub>4</sub>H<sub>2</sub>O, [La(4-Clphac)<sub>3</sub>]<sub>3</sub>H<sub>2</sub>O, [Ce(cinn)<sub>3</sub>], [Nd(cinn)<sub>3</sub>], [Sm(cinn)<sub>3</sub>]<sub>2</sub>H<sub>2</sub>O, [Yb(cinn)<sub>3</sub>] and [Sm(4-OMephac)<sub>3</sub>]<sub>2</sub>H<sub>2</sub>O, sentezlenmiş ve yapıları IR, <sup>1</sup>H ve <sup>13</sup>C NMR spektroskopisi termal analiz ve toz XRD ile yapıları belirlenmiştir. Komplekslerin sitotoksik aktiviteleri incelenmiştir [10].



Şekil 1.5. Tri-N-Butilkalay 2-(N-Klorofenil)-3-Metilbutiratın Yapısı.

Bir seri yeni organoantimon(V) kompleksi klorofenilasetik asit izomerleri ve trifenilantimon(V) ve tetrafenilantimon(V) bromür ün reaksiyonuyla sentezlenmiştir. Yapıları elementel analiz IR ve NMR (<sup>1</sup>H,<sup>13</sup>C) ve tek kristal XRD analizi ile belirlenmiştir komplekslerin yapılarına bakıldığında beş koordine ve altı koordine olmuş antimon(V) atomları üçgen bipiramit ve oktahedral yapıya sahiptir. Şekil 1.6'da klorofenilasetik asit türevlerinin yapıları ve antimon komplekslerinin yapıları verilmiştir [11].





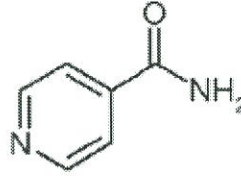
**Şekil 1.6.** 2-(Solda) ve 3-(Sağda) klorofenilasetik Asidin Antimon(V) Komplekslerinin Yapıları.

Bikshandarkoil R. Srinivasan ve arkadaşları tarafından 2-klorofenil asetat ve 4 metoksifetil asetatın kalsiyum kompleksleri sentezlenmiş, kristal yapıları ve termal özellikleri incelenmiştir. Kompleksler iki mol koordinasyon suyu içermektedir. Esnek fenilasetat ligantlarının karboksilatlarının köprü oluşturduğu saptanmıştır [12].

Ma ve arkadaşları tarafından iki yeni eş yapılı çift çekirdekli  $Ln_2(4-cpa)_6(bpy)_2$  ( $Ln = Eu, Tb$ , 4-cpa = 4-klorofenilasetat, bpy = 2,2'-bipiridin) kompleksleri hidrotermal yöntemle sentezlenmiş ve IR spektroskopisi, elemental analiz, termogravimetrik analiz, toz XRD ve tek kristal XRD ile karakterizasyonları yapılmıştır. Lüminesans ve komplekslerin parlak kırmızı ve yeşil floresans yaydığı ve lüminesansmateryali olarak klonlanması önerilmiştir. 4-klorofenilasetik aside göre asetil ile kıyaslandığında komplekslerin serbest asitten daha yüksek herbisidal aktivite gösterdiği saptanmıştır [13]. Yine benzer bir çalışma 2,2-bipiridin ligandı yerine 1,10-fenantrolin ligandı ile gerçekleştirilmiştir. Komplekslerin herbisidal aktivitesi yüksek bulunmuş, zayıf lüminesans özellik göstermiştir [14].

### 1.1.2. İzonikotinamid

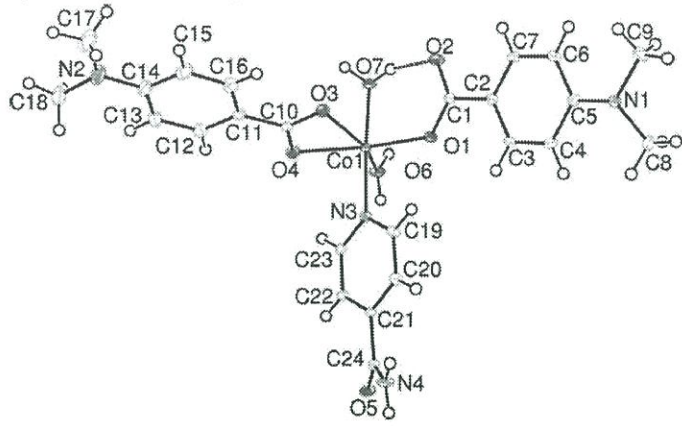
İzonikotinamid, izonikotinik asidin amidi olup, IUPAC ismi 4-piridinkarboksamittir [15]. Kimyasal formülü  $C_6H_6N_2O$ , molekül ağırlığı 122,12 g/mol'dür. Bu madde, canlı doğada yaygın olarak istifade edilen, biyokimyasal özelliklere sahip olan, çeşitli fizyolojik işlevlere katılan vitamin olarak tıpta kullanılan nikotinamid'in izomerlerinden biridir [16]. İzonikotinamid piridin halkası üzerinde  $\gamma$  pozisyonunda amid grubu ( $-CONH_2$ ) içeren bir bileşiktir. Metallerle oluşturduğu komplekslerde piridin halkası üzerinde bulunan azot atomu üzerinden koordine olan donör bir ligand olmasının yanısıra yapısındaki karboksamid grubu vasıtasıyla hidrojen bağları oluşumunu sağlaması nedeniyle akseptör özelliği de bulunmaktadır. Antitüberküloz, antibakteriyel ve ateş düşürücü özellikleri vardır. İzonikotinamid tuzlarının ilaç endüstrisinde geniş kullanım alanları vardır. Metal kompleksleri biyolojik açıdan serbest ligandlarda göre daha etkilidirler [17].



Şekil 1.7. İzonikotinamid Yapısal Formülü.

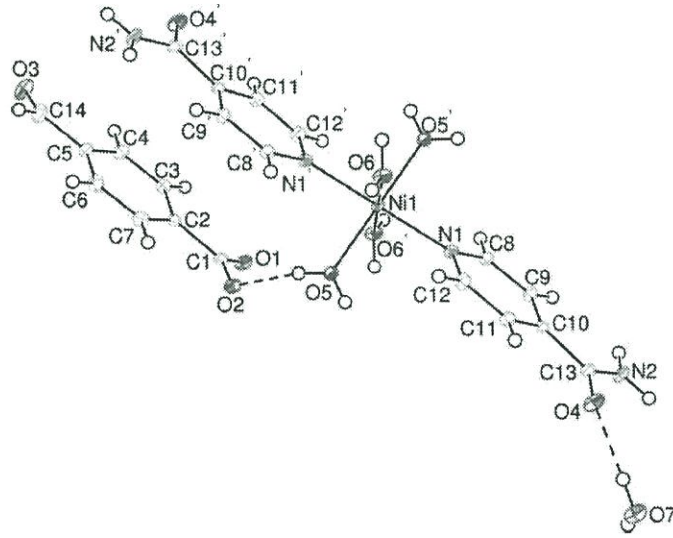
Hökelek ve arkadaşları molekül formülü  $[Co(C_9H_{10}NO_2)_2(C_6H_6N_2O)(H_2O)_2]$  olan bileşiği sentezlemişlerdir. Bu bileşik iki 4-dimetilaminobenzoat (DMAB) anyonu, bir izonikotinamid (INA) ligandı ve iki koordine su molekülü içerir. DMAB anyonlarından biri bidentat ligand olarak davranırken diğeri monodentattır.

Burada Co atomu etrafındaki ekvator düzlemindeki dört oksijen atomu, oldukça yüksek oktahedral koordinasyon geometrisinde INA ligandının azot atomu ve ikinci su molekülünün oksijen atomu eksen pozisyonundadır. Monodentat koordine olan karboksil grubu ile koordine bir su molekülü arasındaki molekül içi O-H...O hidrojen bağı ile altı üyeli bir halka oluşur [18] (Şekil 1.8).



**Şekil 1.8.**  $[\text{Co}(\text{C}_9\text{H}_{10}\text{NO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2)_2(\text{HO})_2]$  Kompleksinin Molekül Yapısı.

Hökelek ve arkadaşları molekül formülü  $[\text{Ni}(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  olan bileşiği sentezlemiştirler. İnversiyon merkezi üzerinde Ni(II) atomu çevresinde iki 4-formilbenzoat (FB) anyonu, iki izonikotinamid ligandı ve koordine olmayan iki su molekülünü bulunmaktadır. Piridin ve benzen halkaları arasındaki dihedral açı  $3.46^\circ$ 'dir [19].



**Şekil 1.9.**  $[\text{Ni}(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_8\text{H}_5\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  Kompleksinin Moleküler Yapısı.

Francoise M ve arkadaşları Akridin, kafein, izonikotinamid ve nikotinamid içeren fenilasetik asidin ko-kristalleri, tek kristal X ışını difraksiyonu, FTIR spektroskopisi, termal analiz ve Hirshfeld yüzey analizi ile başarılı bir şekilde hazırlamışlardır. Karboksilik asit-piridin heterosikonu sergilemektedir. Ayrıca amid-amid supramoleküler homosikon, INM ve NAM ile birlikte ko-kristallerinde gözlenmiştir. Asit ve ilgili baz arasındaki etkileşimleri. CAF ko-kristali, imidazol azot ve PAA'nın COOH grubu arasında hidrojen bağı göstermiştir.[20]

Tze Shyang Chia ve arkadaşı Isonikotinamid-4-metoksibenzoik asit ko-kristali  $C_6H_6N_2O.C_8H_8O_3$  molekülünü sentezlemişler. Metanol çözeltisinden yavaş buharlaşarak oluşur ve birinci dereceden izosimetri yapısal faz geçişinde  $T_c = 142.5$  (5) K, değişken sıcaklıkta tek kristal XRD'den kristalografik interaksyonel açının ani sıçraması ve diferansiyel tarama kalorimetresi ölçümünde küçük ısı histerезisi ile doğrulanmıştır.

Düşük sıcaklıkta üç boyutlu X-ışını kristal yapıları faz (100, 140 ve 142 K) ve yüksek sıcaklık fazı (143, 150, 200, 250 ve 300 K) basit bir nondisordered olarak çözülmüş ve rafine edilmiştir. Son R  $[F^2 > 2\alpha (F^2)]$  '0,05 olan model. Asimetrik birim, her iki enantiyotropik fazda kristalografik olarak bağımsız 4-metoksibenzoik asit (A) ve izonikotinamid (B) moleküllerinden oluşur. Molekül A benimser hidroksil ve metoksi gruplarının olduğu bir "hidroksil" konformasyonu aynı tarafta konumlandırılmış.[21]

## 1. MATERYAL VE METOT

### 1.1. Kullanılan Kimyasal Maddeler

Bu çalışma Kafkas Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Anorganik Kimya Araştırma Laboratuvarında gerçekleştirilmiştir. Komplekslerin sentezinde, sodyum bikarbonat  $\text{NaHCO}_3$ (Merck), nikel(II)sülfat heksahidrat ( $\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ) (Merck), kobalt(II)sülfat heptahidrat ( $\text{CoSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ ) (Sigma Aldrich), mangan(II)sülfat monohidrat ( $\text{MnSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ) (Sigma Aldrich), çinko sülfat heptahidrat ( $\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ ) (Merck), bakır(II)sülfat pentahidrat ( $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ ) (Merck) metal tuzları kullanılmıştır. Ligand olarak, 4-klorofenilasetik asit ve izonikotinamid (Sigma Aldrich) ticari olarak satın alınmış ve herhangi bir saflaştırma yapılmadan kullanılmıştır.

### 1.2. Kullanılan Cihazlar

Komplekslerin elementel bileşimleri LECO CHNS 932 cihazı ile belirlendi. FT-IR spektrumları Perkin Elmer Frontier™ FT-IR Spektrometresi ile katı numunelerden  $4000\text{-}600\text{ cm}^{-1}$  aralığında ölçüm alınarak yapıldı. TGA/DTA ölçümleri için Shimadzu TG-50 ve Shimadzu DTG 60 termal analiz cihazı kullanıldı. Deneyler, 10 mg örnek ile dakikada  $10^\circ\text{C}$  ısıtma hızında, azot atmosferinde, referans madde olarak  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  kullanılarak,  $25\text{-}1000^\circ\text{C}$  arasında yapıldı. Toz X Işınları Analizi, GNR Analytical Instruments Group (Model: EXPLORER) XRD diffraktometresi kullanılarak alındı. Örnekler  $5^\circ\text{-}75^\circ$  ( $2^\circ\theta$ ) arasında ölçüldü ve tek Kristal X-Işını Analizleri Bruker Kappa APEX 2 CCD cihazı yardımıyla alındı. UV-Vis ve floresans spektrumları sırasıyla Shimadzu UV-1800 ve Perkin Elmer LS55 Floresans Spektrofotometre cihazları ile kaydedildi.

### 1.3. Komplekslerin Sentezi

Sodyum 4-klorofenilasetat eldesi için 10 mmol 4-klorofenilasetik asit, 10 mmol sodyum bikarbonatın sudaki çözeltisine eklendi ve aşağıdaki reaksiyon gerçekleştirildi. Tepkime esnasında oluşan karbondioksit ortamdan tamamen uzaklaşınca kadar karıştırılıp ısıtılmaya devam edildi.



Ayrı beherlerde 5 mmol metal(II) sülfatların sudaki çözeltisi 10 mmol izonikotinamidin sudaki çözeltisi üzerine eklenmiştir. Oluşan karışımın üzerine de daha önceden hazırlanan 10 mmol sodyum 4-fenilasetik asit çözeltisi ilave edilmiştir. Elde edilen çözeltiler oda sıcaklığında kristallenene kadar bekletilmiştir. 7 gün içerisinde pembe renkli kobalt kompleksi, yeşil renkli nikel kompleksi, beyaz renkli magan kompleksi, beyaz renkli çinko kompleksi ve mavi renkli bakır kompleksi elde edilmiştir.

Dietilnikotinamid ile kobalt(II) nikel(II) çinko ve bakır(II) kompleksleri için sentezler yapılmıştır. Ancak karakterizasyon aşamasına gelindiğinde elde edilen analiz sonuçlarından maddelerin yapıları aydınlatılmaya uygun karışık ligand kompleksleri olmadığı belirlenmiş ve bu tez çalışmasında yer verilmemiştir.

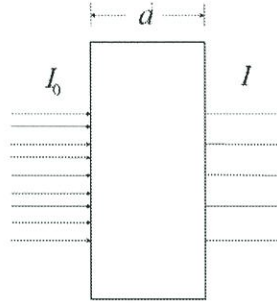
### 2.4. Komplekslerin Absorpsiyon ve Emisyon Özellikleri Çalışmaları

Kompleks 1-5 bileşiklerinin dimetilformamid (DMF) çözücüsü içerisinde 0,01g/mL derişiminde çözeltileri hazırlandı. Çözeltiler 5 mm kalınlıklı kuarz hücrelere doldurularak doğrusal soğurma spektrumları ve değişik uyarılma dalga boylarındaki floresans spektrumları sırasıyla UV-Vis ve floresans spektrometreleriyle ölçüldü.

Hazırlanan çözeltilerin doğrusal soğurma spektrumları UV-Vis spektrofotometresi yardımıyla kaydedildiler (Bu Analizler Ankara Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Fizik Mühendisliği Bölümü Optik Malzemeler Araştırma Laboratuvarı'nda alındılar).

Kalınlığı  $d$  olan saydam bir ortam üzerine enerjisi, birinci uyarılmış seviye ile taban seviyesi arasındaki enerji farkı kadar ya da ondan daha büyük (yarıiletkenler için  $h\nu \geq E_g$ ) bir ışık demeti gönderildiğinde çizgisel soğurma gerçekleşir.

Şiddeti  $I_0$  olan  $\nu$  frekanslı ışık demeti gönderilirse (Şekil 2.1) bu ortamda bir soğrulma meydana geleceğinden (sadece soğrulma göz önüne alındığından ışığın yüzeyden yansımaları ve saçılması göz önüne alınmayacaktır) çıkan ışığın şiddetinde bir azalma olur, yani  $I < I_0$  olur [22]. Burada malzemeye gönderilen ışığın şiddeti  $I_0$  malzemede çizgisel olmayan optik tepkiler gerçekleştiremeyecek kadar düşüktür.

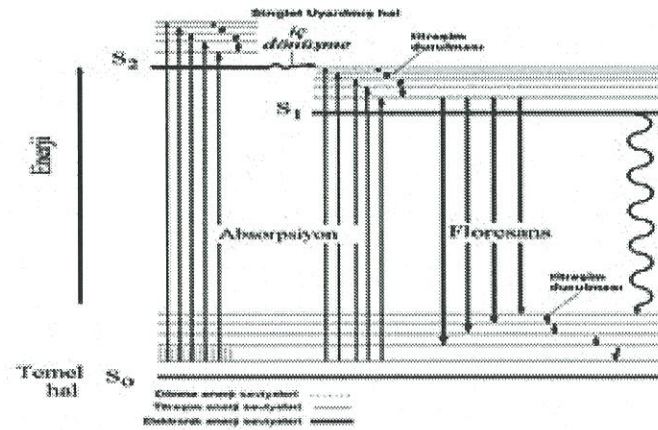


**Şekil 2.1.** Işığın Madde İçinden Geçerken Çizgisel Soğurulması.

Bu soğurulma elektronların taban seviyesinden birinci uyarılmış seviyeye tek foton yardımıyla çıkarılmaları sonucunda gerçekleşir. Ayrıca çalışılan malzemelerin çözeltilerinin floresans özellikleri incelendi. Bu deneyler de Ankara Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Fizik Mühendisliği Bölümü Optik Malzemeler Araştırma Laboratuvarı'nda yapıldı. Uyarılmış singlet bir sistemden temel haldeki singlet bir sisteme geçiş sırasında yayılan ışığa floresans denir. Floresans basit veya karmaşık gaz, sıvı ve katı kimyasal sistemlerde meydana gelir. Bu yöntemde, analit molekülleri, emisyon (floresans) spektrumları kalitatif veya kantitatif bilgiler sağlayacak şekilde uyarılır. Floresans hemen yok olan ( $<10^{-5}$  s) bir lüminesans olup, kısa ömürlüdür.

Bütün elektron spinlerinin eşleşmiş olduğu bir moleküler elektronik hal; bir singlet hal olarak adlandırılır ve molekül bir manyetik alana maruz bırakıldığında elektronik enerji seviyelerinde hiçbir yarıma meydana gelmez. Diğer taraftan, bir serbest radikal için temel hal bir dublet halidir. Çünkü tek elektronun bir manyetik alan içinde, sisteme çok az farklı enerjilerde katkı yapan iki yönlene sahip olduğu kabul edilebilir.

Bir molekülün bir çift elektronundan biri daha yüksek bir enerji seviyesine uyarılırsa ya bir singlet ya da bir triplet hal meydana gelir. Uyarılmış singlet halde, uyarılmış elektronun spini hala temel haldeki elektron ile eşleşmiş durumda, bununla beraber, triplet halde, iki elektronun spinleri eşleşmemiş durumda ve Uyarılmış triplet haldeki bir molekülün özellikleri, uyarılmış singlet halindeki önemli derecede farklıdır. Örneğin, bir molekül triplet halde paramanyetik iken, singlet halde diamanyetikdir. Bununla beraber, daha da önemlisi, elektronun halindeki bir değişmeyi de kapsayan, singlet triplet geçişinin, karşı gelen, singlet singlet geçişine göre önemli derecede daha az mümkün olması gerçeğidir. Bunun sonucu olarak uyarılmış triplet halinin ortalama ömrü  $10^{-4}$  s den birkaç saniyeye kadar uzayabilir. Bir uyarılmış singlet halin ortalama ömrü ise  $10^{-5}$  -  $10^{-8}$  s kadardır. Ayrıca, temel haldeki bir molekülün ışınla, bir uyarılmış triplet hale uyarılması, düşük olasılığa sahiptir ve bu işlem sonucu oluşan absorpsiyon piklerinin şiddeti, benzer şekilde singlet-singlet geçişine karşı gelenlerinden bir kaç kat ondalık mertebesi daha düşüktür. Soğurma (absorpsiyon) ve floresansın gerçekleşme hali Şekil 2.2.'de verilmektedir.

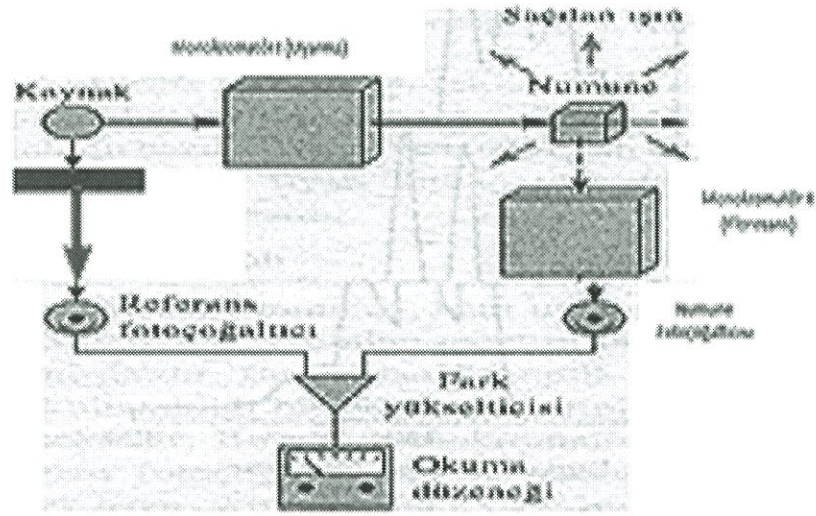


Şekil 2. Soğurma (absorpsiyon) ve Floresansın Gerçekleşme Hali

Şekil 2.2. Soğurma (absorpsiyon) ve Floresansın Gerçekleşme Hali.



Floresans ölçülmesi için kullanılan cihazların çeşitli bileşenleri, ultraviyole, görünür bölge fotometreleri veya spektrofotometrelerinde bulunanlarla benzerdir. Şekilde 2.3’de florimetreler ve spektrofluorometrelerdeki bu bileşenlerin tipik bir dizilişi görülmektedir. Hemen hemen bütün floresans cihazlarında güç kaynağındaki dalgalanmaları dengelemek (etkisini gidermek) için çift-ışınlı optik sistem kullanılır. Kaynaktan gelen ışın, önce floresans uyuracak ışınları geçiren fakat floresans emisyonunun dalga boyundaki ışınları dışarıda tutan veya sınırlayan bir uyarılma filtresinden veya bir monokromatörden geçer. Floresans numuneden bütün yönlerde doğru olur, fakat en uygun şekilde floresans uyarma ışınına dik açıdan gözlenir; diğer açılarda çözeltiden ve hücre duvarlarından oluşan saçılma, şiddet ölçümünde büyük hatalara sebep olabilir. Yayılan ışın, ölçme için floresansı ayıran ikinci bir filtreden veya monokromatörden geçtikten sonra bir dedektöre ulaşır. Referans ışın demeti ise, ışığın gücünü yaklaşık olarak floresans ışınlarına azaltan bir azaltıcıdan geçer (güç azaltılması ekseriya 100 kat veya daha fazladır). Referans ve numune foto çoğaltıcı tüplerden gelen sinyaller, çıktıyı bir metreye veya kaydedici ile gösteren bir fark yükselticisine gönderilir.



Şekil 2.3. Florimetreler ve Spektrofluorimetrelerin Şeması

### 3. BULGULAR

#### 3.1. Elementel Analiz

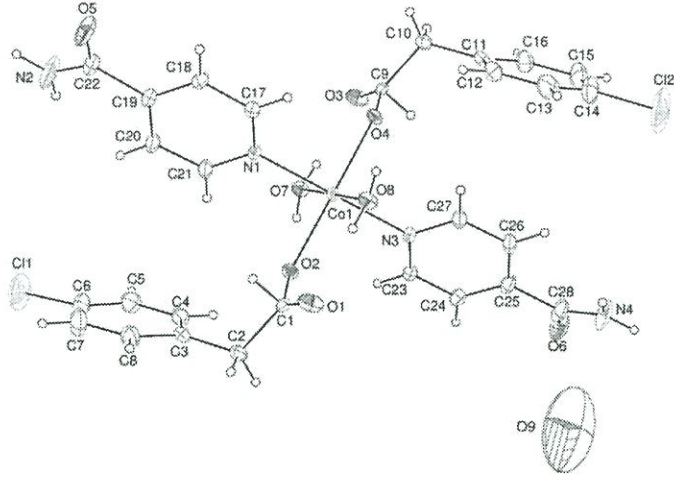
Sentezlenen komplekslerin elementel analiz sonuçları Tablo 3.1’ de verilmiştir. Teorik ve deneysel verilerin uyumlu olduğu görülmüştür.

**Tablo 3.1.** Sentezlenen Komplekslerin Elementel Analiz Verileri.

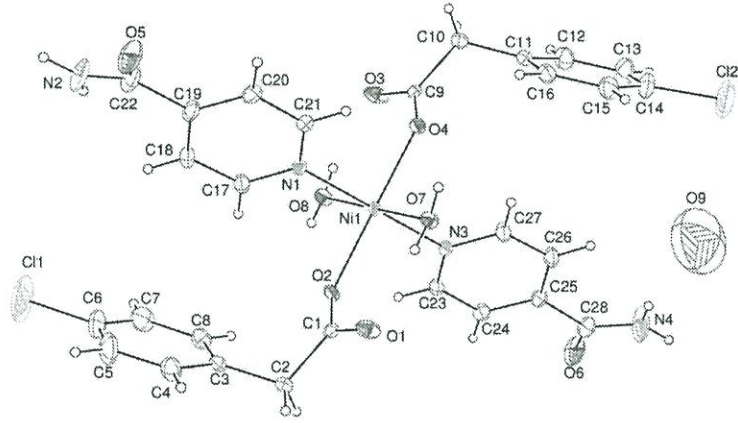
KOMPLEKSLER	% C	% H	% N
	Deneysel- Teorik	Deneysel- Teorik	Deneysel- Teorik
[Co(4-C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> ClO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> .(C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> .(H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	48.40-49.57	3,56-4,16	8.5-8.26
[Ni(4-C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> ClO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> .(C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> .(H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	47,24-49,59	3,60-4,16	7,89-8,66
[Mn(4C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> ClO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> .(C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> .(H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	50,85-49,87	3.28-4.18	8.54-8.31
[Zn(4-C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> ClO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> .(C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	47.24-49.59	3.13-3.73	8.82-8.84
[Cu(4-C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> ClO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> .(C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	51,26-49,24	8,45-8,20	3.54-3.13

#### 3.2. Sentezlenen Komplekslerin Yapı İncelemeleri

Kompleks 1, 2 ve 3 eş yapılıdır. Diaquabis(4-klorofenilasetat) bis(izonikotinamid) kobalt, Diaquabis(4-klorofenilasetat)bis(izonikotinamid) nikel(II) ve Diaquabis(4-klorofenilasetat)bis(izonikotinamid) mangan komplekslerinde metal atomu simetri merkezinde bulunmaktadır. Kompleksler bir metal atomu iki 4-klorofenilasetat, iki izonikotinamid ve iki su molekülünden oluşmaktadır. Tüm ligandlar tek dişlidir. Metal atomu ekvator düzleminde bulunan dört oksijen atomu ile bozulmuş kare düzlemde bulunmaktayken eksen pozisyonunda bulunan izonikotinamid ligandlarının azot atomları ile hafif bozulmuş oktahedral geometrisini tamamlamaktadır. Molekül içi O-H...O hidrojen bağları su molekülleri ile 4-klorofenilasetat ligandlarını birbirine bağlamaktadır. Kristal yapıda molekül içi O-H...O ve N-H...O hidrojen bağları sınırsız zincirler oluşturmaktadır. (Şekil 3.1-3.2)

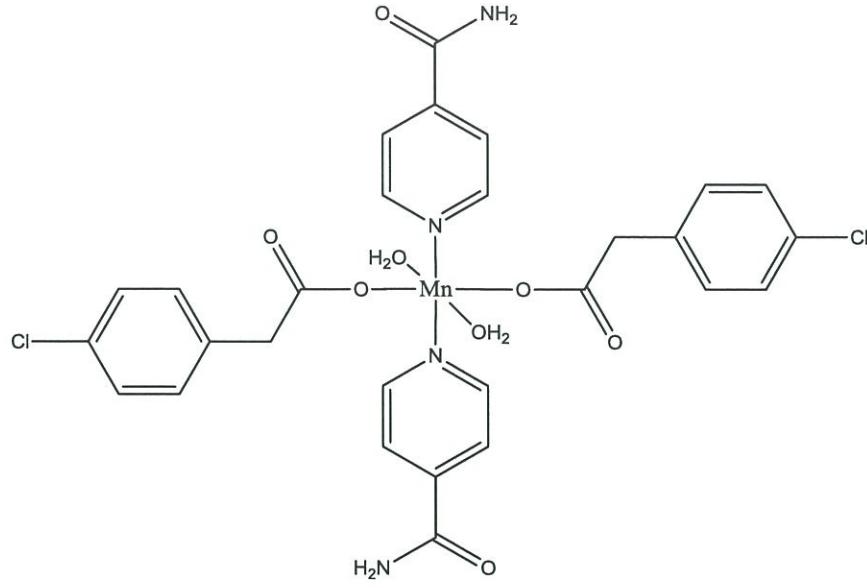


**Şekil 3.1.**  $[\text{Co}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2 \cdot (\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$  Kompleksinin Kristal Yapısı.

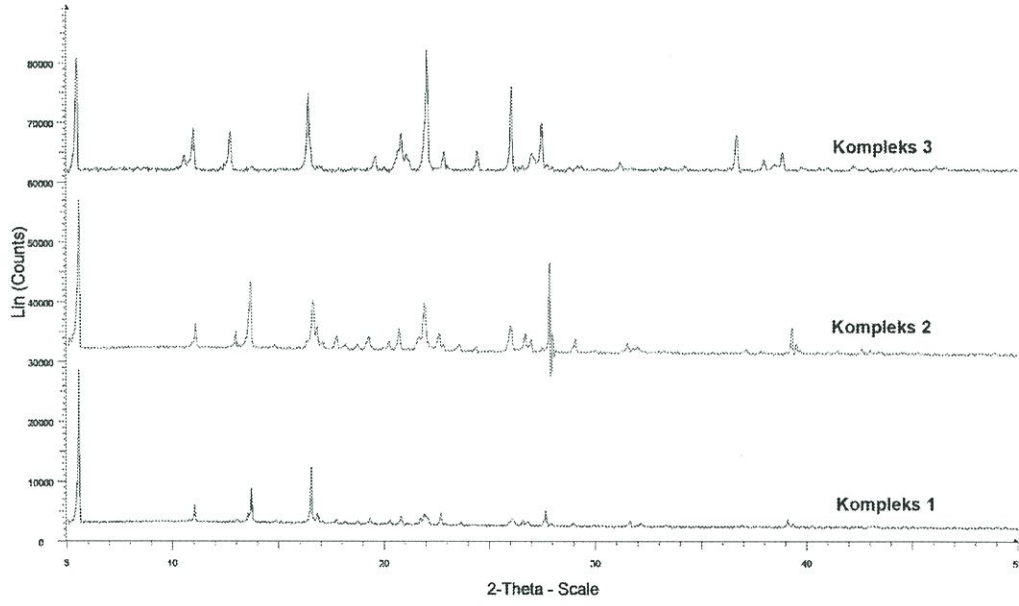


**Şekil 3.2.**  $[\text{Ni}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2 \cdot (\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$  Kompleksinin Kristal Yapısı.

Kristal yapısı tek kristal X-ışını difraksiyonu ile belirlenemeyen Kompleks 3'ün bahsedilen yapıda olduğu (Şekil 15) toz X-ışını difraksiyon analizi ile Kompleks 1, 2 ve 3'ün diffraktogramları kıyaslanarak belirlenmiştir (Şekil 3.4).

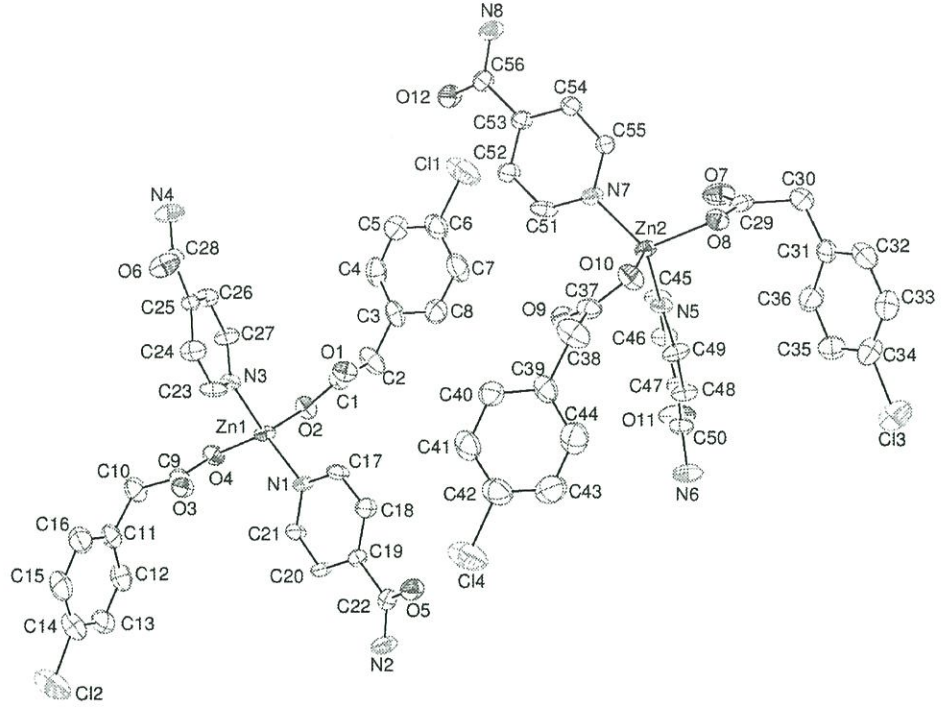


Şekil 3.3.  $[Mn(4-C_8H_7ClO_2)_2.(C_6H_6N_2O)_2.(H_2O)_2]$  Kompleksinin Yapısı.



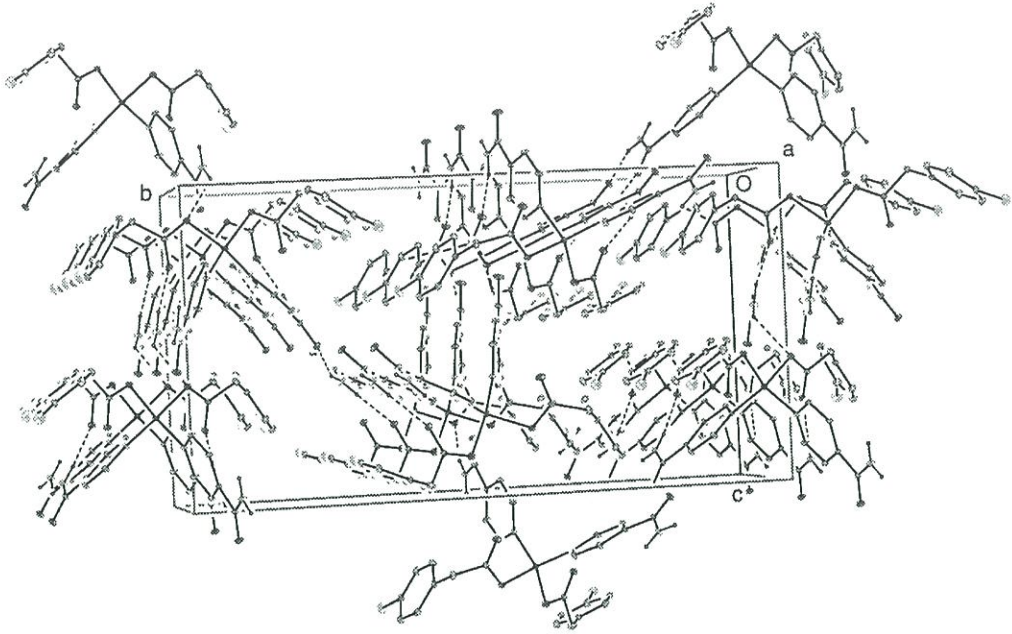
Şekil 3.4. Kompleks 1-3'ün toz X-ışını Diffraktogramları.

Literatürde sentezlenen 1-3 komplekslerinin yapılarına benzer olarak 2 ve 4-klorobenzoatların nikotinamid ve *N,N'*-dietilnikotinamid ile metal kompleksleri bulunmaktadır [23-27].

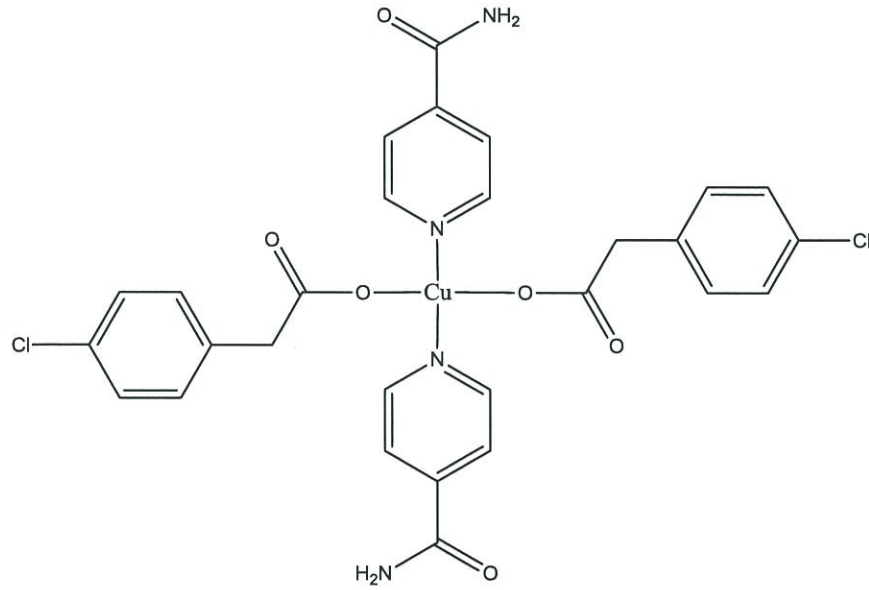


**Şekil 3.5.**  $[Zn(4-C_8H_7ClO_2)_2.(C_6H_6N_2O)_2]$  Kompleksinin Kristal Yapısı.

Kompleks 4'ün tek kristal X-ışını analiz metodu ile belirlenen yapısı Şekil 3.5'de verilmiştir. (4-klorofenilasetat) bis(izonikotinamid) çinko kompleksinde asimetrik birimde iki molekül görülmektedir. Çinko atomu simetri merkezinde bulunmaktadır. Kompleksler bir metal atomu iki 4-klorofenilasetat ve iki izonikotinamid ligandından oluşmaktadır. Tüm ligandlar tek dişlidir. Metal atomu çevresinde bulunan iki karboksilat oksijen atomu ve iki izonikotinamid ligandlarının piridin azot atomları ile hafif bozulmuş tetrahedral geometri oluşturmaktadır. Yapıda bulunan molekül içi ve moleküller arası hidrojen bağları üç boyutlu ağda molekülleri bir arada tutmaktadır. Yapıya literatürdeki benzer bir örnek 4-etilbenzoatın nikotinamidli çinko kompleksidir [28].

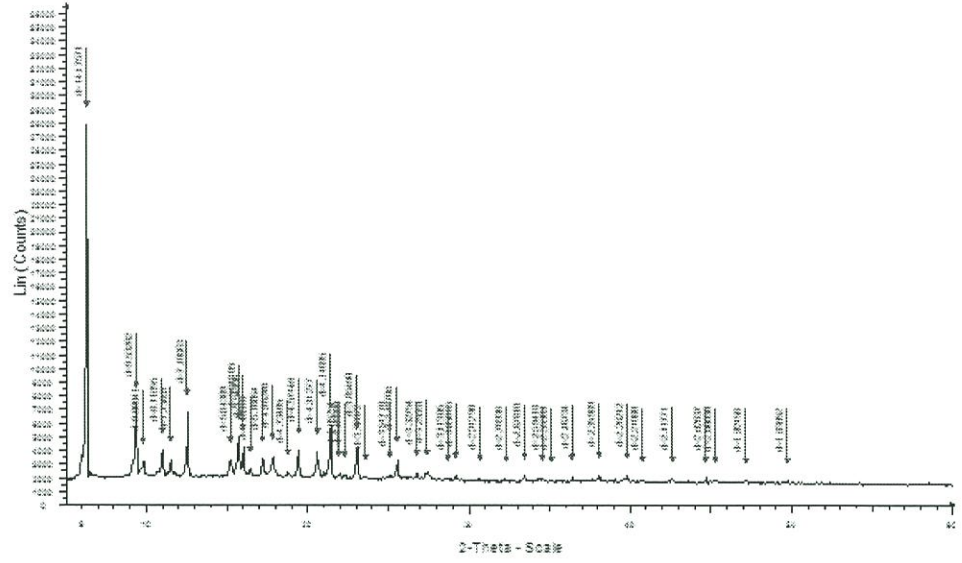


Şekil 3.6.  $[Zn(4-C_8H_7ClO_2)_2.(C_6H_6N_2O)_2]$  Kompleksinin Kristal Yapısı.



Şekil 3.7.  $[Cu(4-C_8H_7ClO_2)_2.(C_6H_6N_2O)_2]$  Kompleksinin Molekül Yapısı.

Kompleks 5'in yapısı elementel analiz ve FT-IR spektroskopisi verilerine dayanılarak belirlenmiş, yapısında su moleküllerinin bulunmadığı termik analiz verileri ile desteklenmiştir.(Şekil 3.7) Kompleksin toz X-ışını diffraktogramları da Kompleks 1, 2 ve 3'ün diffraktogram değerlerinden farklı olduğunu göstermektedir (Şekil 3.8).



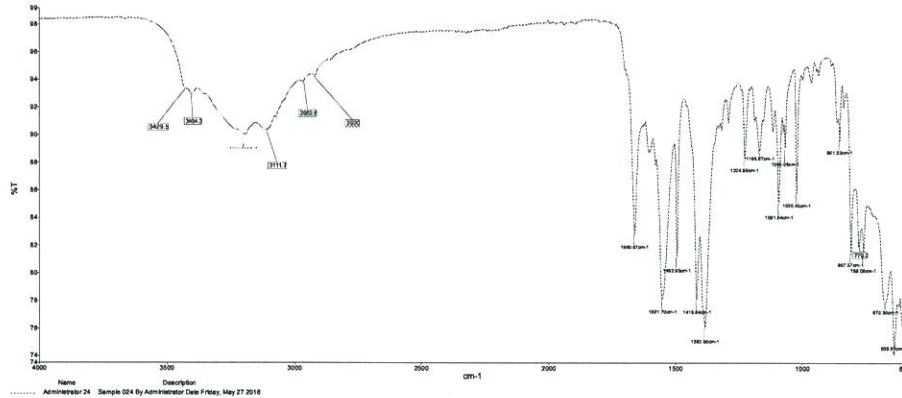
**Şekil 3.8.** Kompleks 5'in toz X-ışını Diffraktogramı.

(4-klorofenilasetat) bis(izonikotinamid) bakır kompleksinde asimetrik birimde Çinko atomu simetri merkezinde bulunmaktadır. Kompleks bir metal atomu, karboksilat oksijen atomları üzerinden monodentat bağlanmış iki 4-klorofenil asetat ve piridin halkası azot atomları üzerinden monodentat bağlanmış iki izonikotinamid ligandından oluşmaktadır. Metal atomu çevresinde hafif bozulmuş tetrahedral geometri oluşmaktadır. Yapıya literatürdekien benzer örneklerden birisi bakır nikotinatin antranilik asitlikarışık ligand kompleksidir. [29].

#### 1.4. Infrared Spektroskopisi

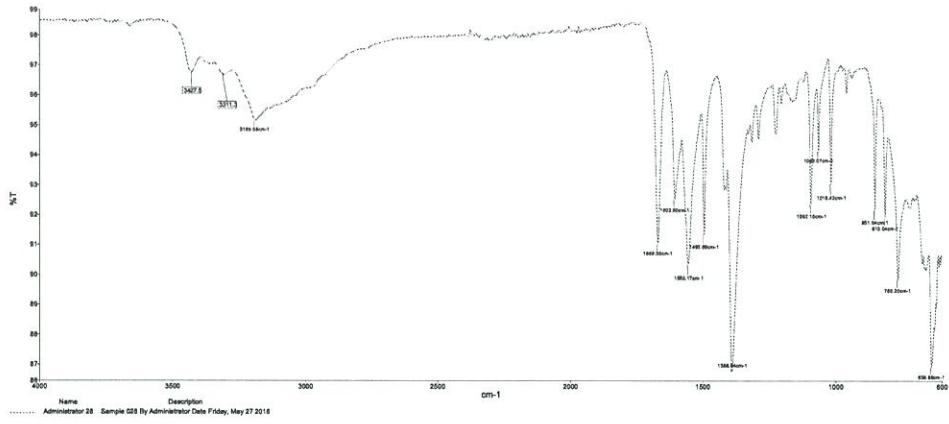
Sentezlenen komplekslerin İnfrared spektrumları Şekil 3.9-3.13 gösterilirken, Komplekslerin yapısındaki su moleküllerinin O-H grubundan oluşan pikler 3600-3300  $\text{cm}^{-1}$  aralığında kaydedilmiştir. Bu alandaki bant genişlemeleri N-H ve O-H gruplarının etkileşiminden kaynaklanmaktadır. Keskin pikler ise molekül içi ve moleküller arası hidrojen bağları varlığını göstermektedir. Komplekslerde (O-H) gerilme titreşimleri sırasıyla 3429  $\text{cm}^{-1}$  komplek 1, 3427  $\text{cm}^{-1}$  komplek 2 3414  $\text{cm}^{-1}$  kompleks 3 de gözlemlenmiştir [30,31]. Piridin halkaları C-N grupları için absorpsiyon bantları 1051-1062  $\text{cm}^{-1}$ 'de görülmektedir. İzonikotinamid ligandlarının  $\text{NH}_2$  gruplarına ait N-H gerilme titreşimleri 3396-3111  $\text{cm}^{-1}$ , kompleks1, 3311-3199  $\text{cm}^{-1}$ , kompleks 2, 3301-

3193  $\text{cm}^{-1}$ , kompleks 3 , 3313-3107 $\text{cm}^{-1}$ , kompleks 4'de 3303-3190  $\text{cm}^{-1}$  kompleks 5'de gözlemlenmektedir. Komplekslerin karboksil grubu  $\text{COO}^-$  asimetrik ve simetrik titreşimleri sırasıyla 1551-1382  $\text{cm}^{-1}$  kompleks 1, 1553-1388  $\text{cm}^{-1}$  kompleks 2, 1548-1371  $\text{cm}^{-1}$  kompleks 3, 1547-1375  $\text{cm}^{-1}$  kompleks 4, 1552-1370  $\text{cm}^{-1}$  kompleks 5'de gözlemlenmektedir.  $\text{COO}^-$  asimetrik ve simetrik titreşimleri arasındaki fark ( $\Delta\nu$ ) ligandın koordinasyon şekli hakkında bilgi vermektedir. Sentezlenen komplekslerin tamamının ( $\Delta\nu$ ) değerleri asidin sodyum tuzu ( $\Delta\nu$ ) değerinden büyük olduğundan 4-klorofenilasetik asidin monodentat olarak koordinasyona katıldığı FT-IR spektroskopisi sonuçları ile desteklenmiştir. Literatüre göre nikotinamid/izonikotinamid amid grubu  $\text{C}=\text{O}$  titreşimleri 1660  $\text{cm}^{-1}$ 'de görülmektedir. Sentezlenen komplekslerinin amid gruplarına ait olan  $\text{C}=\text{O}$  titreşimleri 1660  $\text{cm}^{-1}$  kompleks 1, 1669  $\text{cm}^{-1}$  kompleks 2, 1668  $\text{cm}^{-1}$  kompleks 3, 1689  $\text{cm}^{-1}$  kompleks 4, 1661  $\text{cm}^{-1}$  kompleks 5'de görülmüştür. Titreşimlerden anlaşılacağı üzere çok büyük bir kayma görülmemekte ve amid  $\text{C}=\text{O}$  grubunun koordinasyona katılmadığını göstermektedir [32,33].

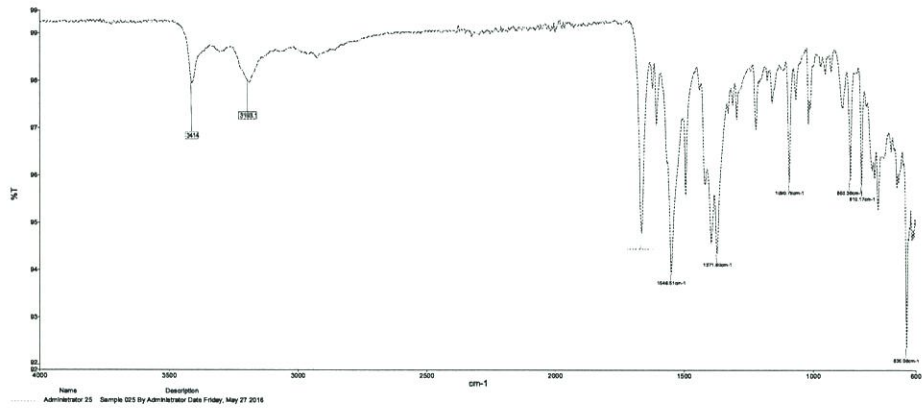


**Şekil 3.9.**  $[\text{Co}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2.(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2.(\text{H}_2\text{O})_2]$  Kompleksinin FT-IR Spektrumları.

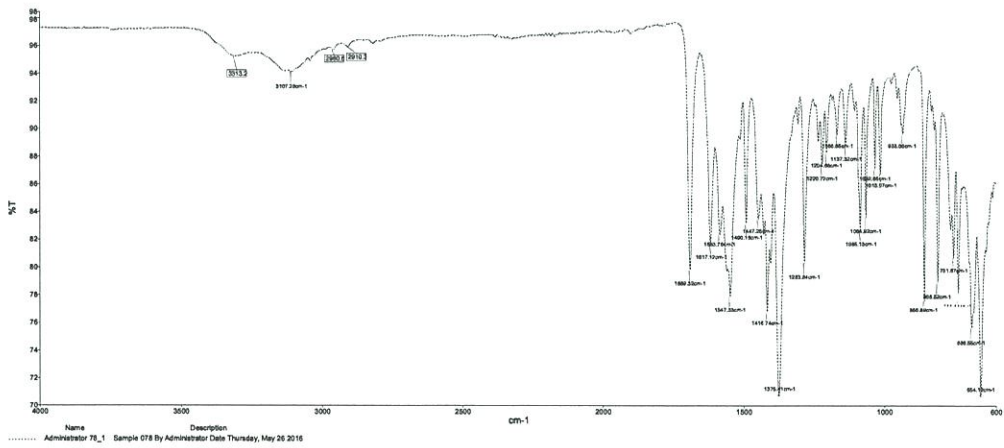




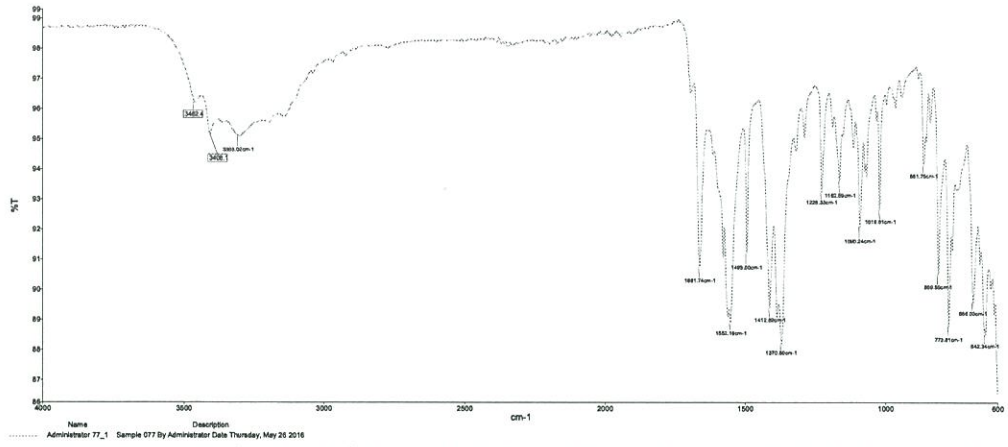
Şekil 3.10.  $[\text{Ni}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2 \cdot (\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$  Kompleksinin FT-IR Spektrumları.



Şekil 3.11.  $[\text{Mn}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2 \cdot (\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$  Kompleksinin FT-IR Spektrumları.



Şekil 3.12.  $[\text{Zn}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2 \cdot (\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$  Kompleksinin FT-IR Spektrumları.



Şekil 3.13.  $[\text{Cu}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2 \cdot (\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$  Kompleksinin FT-IR Spektrumları.

### 3.4. Komplekslerin Farklı Çözücülerdeki Çözünürlükleri

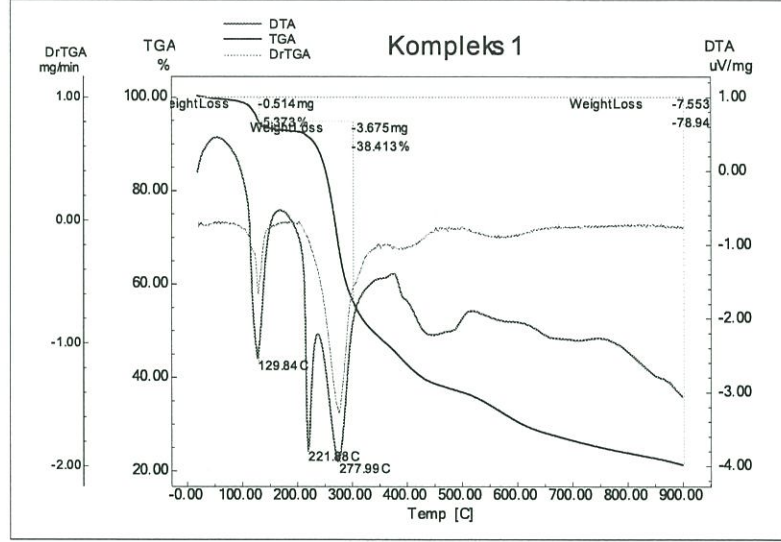
Komplekslerin farklı çözücülerdeki çözünme durumları aşağıdaki Tablo 3.2’de gösterilmiştir.

Tablo 3.2. Sentezlenen Komplekslerin Farklı Çözücülerdeki Çözünürlükleri.

Bileşik	Çözücüler						
	Metanol	Aseton	Etanol	DMSO	DMF	Kloroform	Su
Kompleks 1	İyi	Yok	Az	İyi	İyi	Yok	İyi
Kompleks 2	İyi	İyi	İyi	İyi	İyi	Yok	İyi
Kompleks 3	İyi	Az	Az	İyi	İyi	Yok	İyi
Kompleks 4	Az	Az	Az	İyi	Az	Yok	İyi
Kompleks 5	Az	Az	Az	Az	Az	Yok	İyi

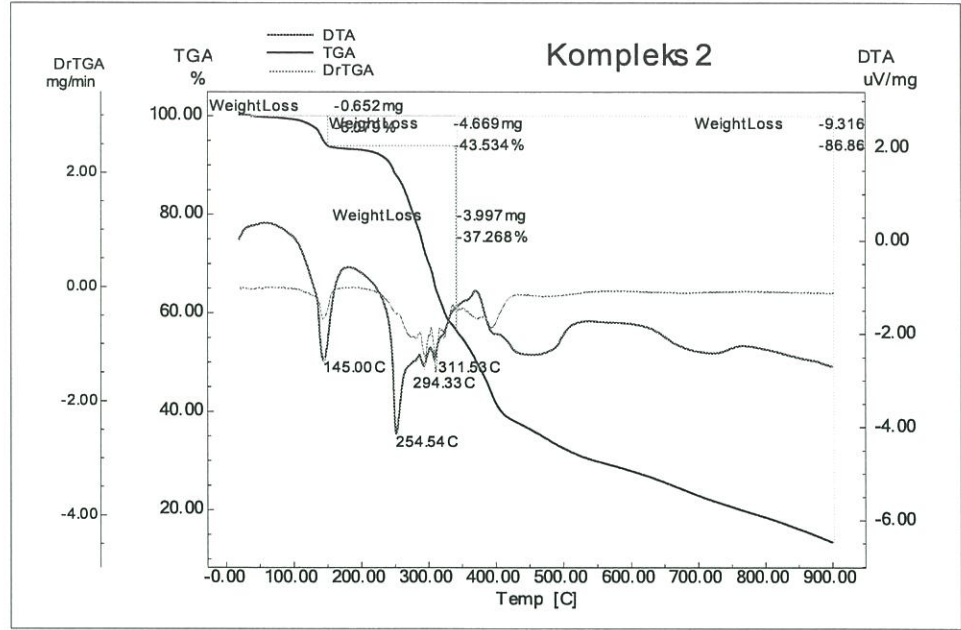
### 3.5. Termik Analiz

Komplekslerin termik analiz eğrileri Şekil 3.14-3.18'de gösterilirken termik analiz verileri Çizelge 4' de verilmiştir.



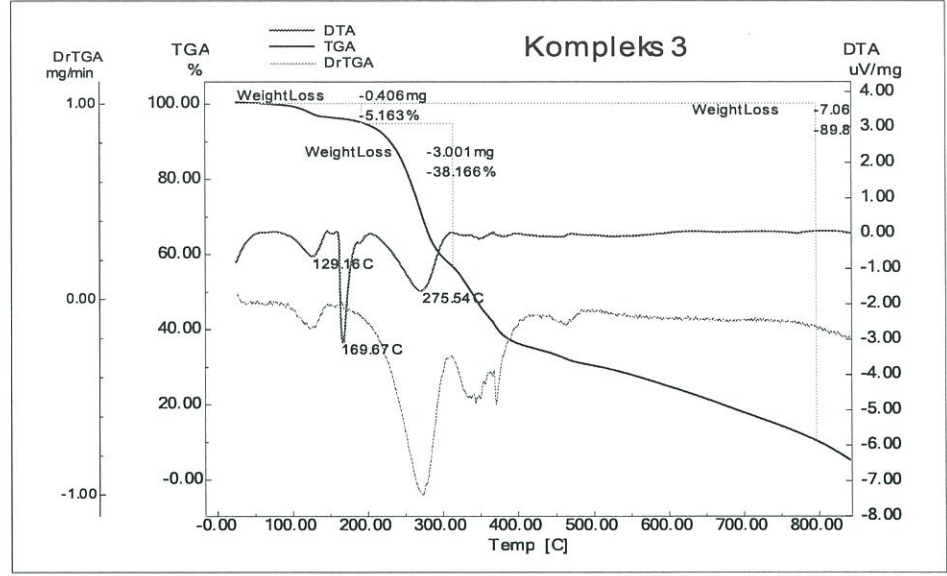
Şekil 3.14.  $[\text{Co}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2 \cdot (\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$  Kompleksinin TGA/DTA Eğrileri.

TGA/DTA değerleri incelendiğinde kompleksin 3 basamakta bozunduğu görülmektedir. 184 °C sıcaklıkta 2 mol koordinasyon suyunun yapıdan uzaklaştığı (den. % 5,37 teo. % 5,31) , 253-271°C sıcaklık aralığında ise yapıdan izonikotinamid ligandının ayrıldığı tahmin edilmektedir. Kütle kayıplarının deneysel ve teorik verileri arasındaki uyum da bunu göstermektedir. (den. % 38,41 teo. % 38,02). Pembe renkli kompleksten geriye CoO, kaldığı belirlenmiştir (den. % 10,91 teo. % 10,91).



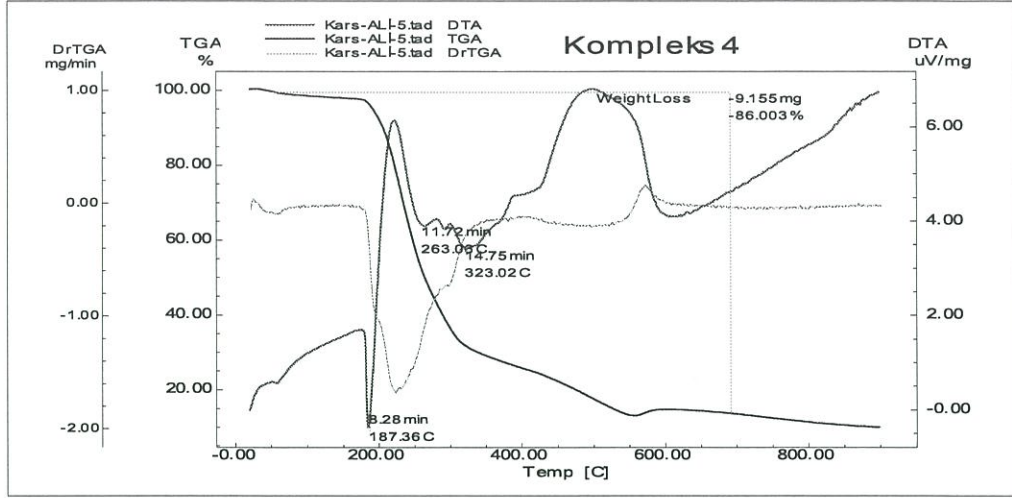
Şekil 3.15.  $[\text{Ni}(\text{4-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2 \cdot (\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$  Kompleksinin TGA/DTA Eğrileri.

TGA/DTA değerleri incelendiğinde kompleksin 3 basamakta bozunduğu görülmektedir. 60 °C sıcaklıkta 2 mol koordinasyon suyunun yapıdan uzaklaştığı (den. % 6,07 teo. % 5,31) , 140-280°C sıcaklık aralığında ise yapıdan izonikotinamid ligandının ayrıldığı tahmin edilmektedir. Kütle kayıplarının deneysel ve teorik verileri arasındaki uyum da bunu göstermektedir. (den. % 37,26 teo. % 38,03). Yeşil renkli kompleksten geriye NiO, kaldığı belirlenmiştir (den. % 13,14 teo. % 10,92).



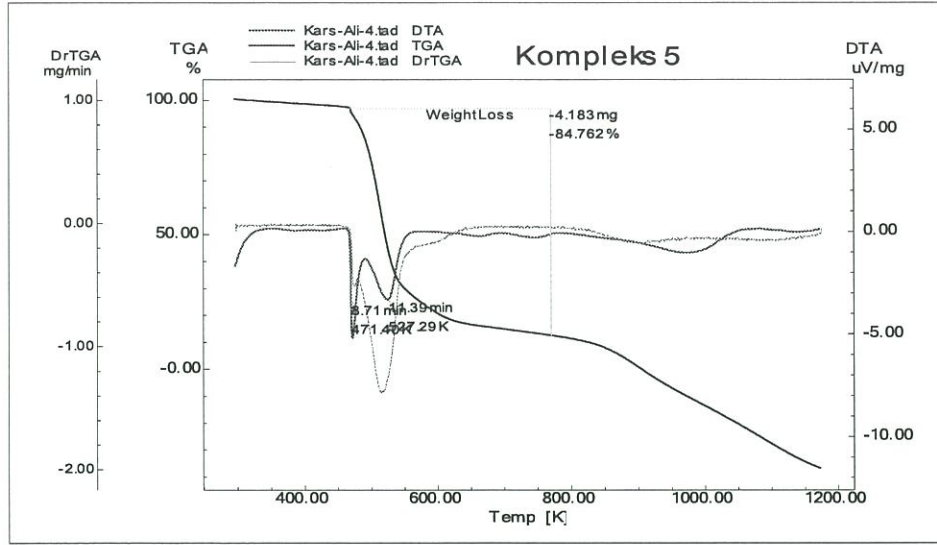
Şekil 3.16.  $[\text{Mn}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2 \cdot (\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$  Kompleksinin TGA/DTA Eğrileri.

TGA/DTA değerleri incelendiğinde kompleksin 3 basamakta bozunduğu görülmektedir. 95 °C sıcaklıkta 2 mol koordinasyon suyunun yapıdan uzaklaştığı (den. % 5,16 teo. % 5,34) , 150-200°C sıcaklık aralığında ise yapıdan izonikotinamid ligandının ayrıldığı tahmin edilmektedir. Kütle kayıplarının deneysel ve teorik verileri arasındaki uyum da bunu göstermektedir. (den. % 38,16 teo. % 38,26). Beyaz renkli kompleksten geriye MnO, kaldığı belirlenmiştir (den. % 10,20 teo. % 10,52).



Şekil 3.17.  $[Zn(4-C_8H_7ClO_2)_2.(C_6H_6N_2O)_2]$  Kompleksinin TGA/DTA Eğrileri.

TGA/DTA değerleri incelendiğinde kompleksin yapısında su molekülü bulunmayan kompleks 200°C’de bozunmaya başlamıştır. Tek basamakta bozunan komplekste geriye ZnO (den. % 14,00 teo. % 12,54) kaldığı tahmin edilmektedir.



Şekil 3.18.  $[\text{Cu}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2 \cdot (\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$  Kompleksinin TGA/DTA Eğrileri.

TGA/DTA değerleri incelendiğinde kompleksin yapısında su molekülü bulunmayan kompleks 450 °C’de bozunmaya başlamıştır. Tek basamakta bozunan kompleksten geriye CuO (den. % 15,24, teo. % 12,29) kaldığı tahmin edilmektedir.

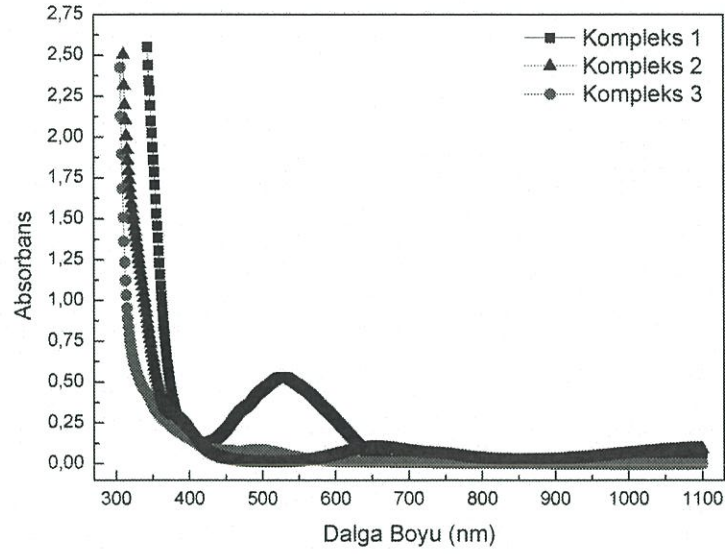
**Tablo 3.3.** Sentezlenen komplekslerin TGA/DTA verileri

Kompleks (Molekül Ağırlığı)	Sıcaklık Aralığı (°C)	DTA <sub>max</sub> (°C)	Ayrılan Grup	Ağırlık Kaybı (%)	Kalıntı		Bozunma Ürünü	Renk
					Deney.	Teorik		
[[Co(4-C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> ClO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> .(C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> .(H <sub>2</sub> O)] 677,06 g/mol	1. 184-371	184, 253	2 H <sub>2</sub> O	5,37	38,42			Pembe
	2. 150-240	371	(C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O)	5,37	38,02			
	3. 320-670				10,91	10,91	CoO	Siyah
[Ni(4-C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> ClO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> .(C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> .(H <sub>2</sub> O)] 676,06 g/mol	1. 184-371	140	2 H <sub>2</sub> O	6,07	37,26			Yeşil
	2. 150-240	280	(C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O)	5,31	38,03			
	3. 320-670				13,14	10,92	NiO	Siyah
[[Mn(4-C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> ClO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> .(C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> .(H <sub>2</sub> O)] 673,07 g/mol	1. 184-371	150, 200	2 H <sub>2</sub> O	5,16				Beyaz
	2. 150-240	210	(C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O)	5,34	38,16			
	3. 320-670				10,20	10,52	MnO	Siyah
[Zn(4-C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> ClO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> .(C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O)] 646,04 g/mol	1. 184-371	81		6,6	3,6			Beyaz
	2. 150-240	248, 280	(C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O)	58,44	51,08			
	3. 320-670				86,003	12,54	ZnO	Siyah
[Cu(4-C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> ClO <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> .(C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O)] 645,04 g/mol	1. 184-371	462, 473	(C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O)	7,02	6,53			Mavi
	2. 150-240	525		22,06	23,71			
	3. 320-670				84,76	12,29	CuO	Siyah

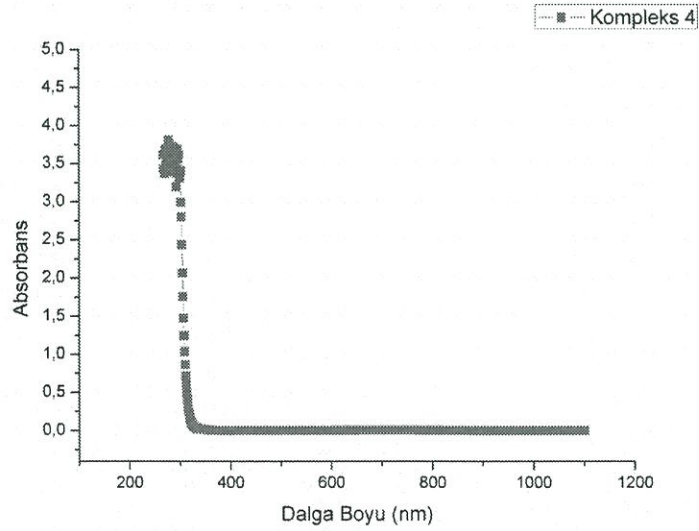


### 3.6. Komplekslerin Absorpsiyon ve Emisyon Özellikleri

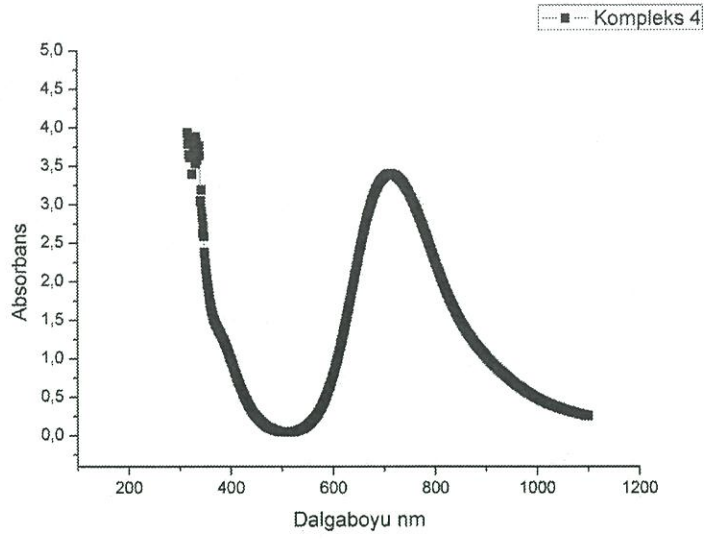
1, 2, 3, 4 ve 5 komplekslerinin UV-Vis spektrometresi (Shimadzu UV-1800) yardımıyla kaydedilen soğurma spektrumları Şekil 3.19,3.20 ve 3.21’de verilmektedir.



Şekil 3.19. Kompleks 1-3’ün Soğurma Spektrumları.



Şekil 3.20. Kompleks 4’ün Soğurma Spektrumları.

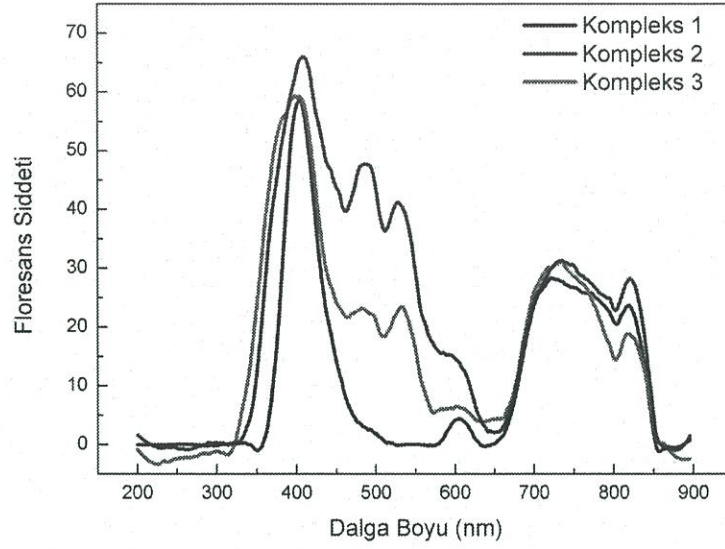


**Şekil 3.21.** Kompleks 5'ün Soğurma Spektrumu

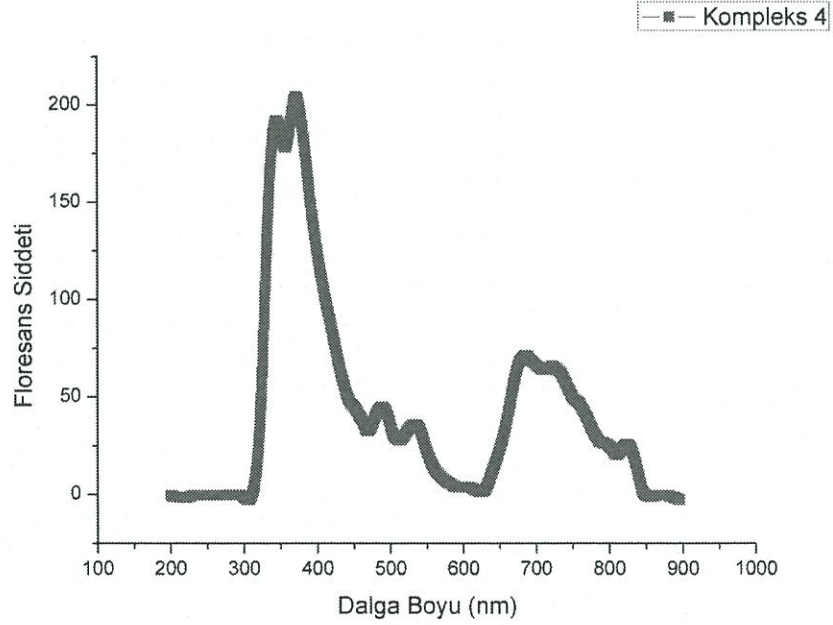
Yukarıda soğurma spektrumları bulunan 1, 2, 3 ve 4 komplekslerinin floresans spektrometresi ile 200 nm dalga boyunda ve Kompleks 5'in floresans spektrometresi ile 225 nm dalga boyunda ışık ile uyarılmaları durumunda elde edilen floresans spektrumları Şekil 3.22, 3.23 ve 3.24'de verilmektedir. Sentezlenen komplekslerin floresans şiddetleri Tablo 3.4'de verilmiştir.

**Tablo 3.4.** Sentezlenen Komplekslerin Floresans Şiddetleri.

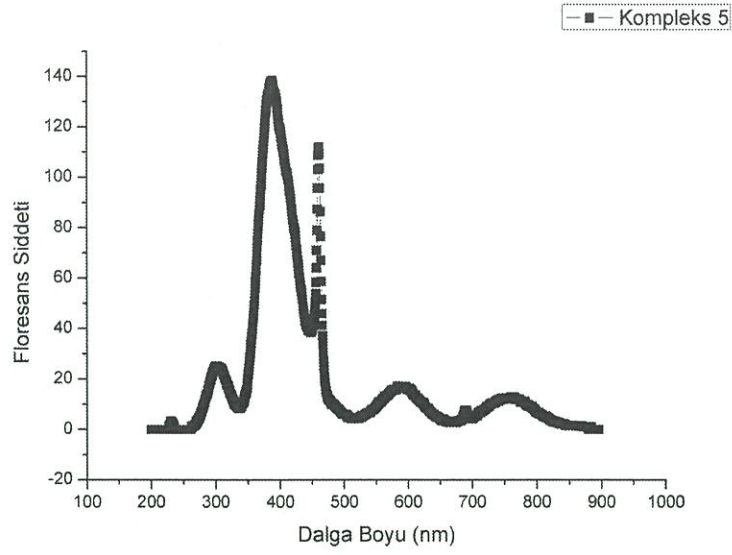
<b>Kompleksler</b>	<b>Uyarılma Dalga Boyu (nm)</b>	<b>Floresans Şiddeti</b>
Kompleks 1	200 nm	66
Kompleks 2	200 nm	71
Kompleks 3	200 nm	65
Kompleks 4	200 nm	212
Kompleks 5	225 nm	138



**Şekil 3.22.** Kompleks 1-3'in 200 nm Dalga Boyundaki Işık İle Uyarılmaları Durumunda Elde Edilen Floresans Spektrumları.



**Şekil 3.23.** Kompleks 4'ün 200 nm Dalga Boyundaki Işık İle Uyarılmaları Durumunda Elde Edilen Floresans Spektrumları.



**Şekil 3.24.** Kompleks 5'in 225 nm Dalga Boyundaki Işık İle Uyarılmaları Durumunda Elde Edilen Floresans Spektrumları.

Doğrusal soğurma spektrumları çalışılan maddelerin enerji bant yapıları ve yasak enerji aralıkları hakkında bilgi vermek açısından yararlıdır. Şekil 3.18-3.19 ve 3.21'da 1, 2, 3, 4 ve 5 komplekslerinin soğurma spektrumları verilmektedir. Şekil 3.18 ve 3.20'den 1, 2 ve 5 komplekslerinin sırasıyla 529 nm, 669 nm ve 717 nm civarında çok güçlü Q bantlarına sahip olduğu görülmektedir. Bu bantlar en yüksek dolu moleküler orbitaldeki atomik orbital katsayılarının doğrusal (lineer) kombinasyonundan meydana gelirler [34,35]. Şekilden 3.18 ve 3.19'dan 3 ve 4 komplekslerinin böyle bantlara sahip olmadığı ve yarıiletken kristaller gibi keskin bir soğurma kenarına sahip oldukları görülmektedir. Doğrusal soğurma spektrumunda Q bantlarının varlığından kaynaklanan piklere neden olan  $n \rightarrow \pi^*$  veya  $\pi \rightarrow \pi^*$  geçişleridir. Aynı zamanda 30, 31 ve 32'den 1, 2, 3, 4 ve 5 komplekslerinin sırasıyla yaklaşık 382 nm, 366 nm, 330 nm, 313 ve 439 nm dalga boylarındaki ışıkların altını soğurdukları görülmektedir. Buradaki soğurma da B bantlarında elektron yönünden zengin metallere elektron yönünden fakir metallere elektron transferi sonucunda gerçekleşir. Doğrusal soğurma spektrumunda bu piklere neden olan  $n \rightarrow \sigma^*$  veya  $\sigma \rightarrow \sigma^*$  geçişleridir.

Ayrıca bu tez kapsamında komplekslerin floresans özellikleri de çalışıldı. Şekil 34 ve 35’de 200 nm dalga boyunda uyarılan 1, 2, 3 ve 4 komplekslerinin floresans spektrumları verilmektedir. Eş yapılı olan 1, 2 ve 3 komplekslerinin benzer floresans davranış sergiledikleri ve yaklaşık 350 – 850 nm dalga boyları arasındaki geniş bir spektrumda ışımaya yaptıkları görülmektedir (Şekil 3.22). Bu özellikleri, söz konusu komplekslerin optik ve optoelektronik alanlarında geniş uygulama potansiyellerinin olduğunu göstermektedir. Diğer tarafta 4 kompleksinin 320-550 ve 650-850 nm aralığında ve 5 komplekslerinin de yaklaşık 350 – 475 nm arasındaki bölgede ışımaya yaptıkları görülmektedir (Şekil 3.23 ve 3.24). Buradaki ışımaların benzen ve piridin halkaları ile karboksilat, karboksamid ve fenil fonksiyonel grupların yer aldığı ligandlar içerisindeki  $\pi^* \rightarrow \pi$  ve  $\pi^* \rightarrow n$  geçişlerinden kaynaklandığı düşünülmektedir [36]. Floresans özellikleri olan yani ışımaya yapan maddelerin; immünilojide biyosensör, protein etkileşimleri çalışmaları, DNA sönümlenme, nitroaromatik patlayıcıların tespit edilmesi için optik ve kimyasal sensör gibi uygulama alanları bulunmaktadır [34-38].

## 2. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

### 2.1. Sonuç ve Öneriler

Bu tez çalışmasında,

- ❖ Bu çalışmada Co(II), Ni(II), Mn(II), Zn(II), Cu(II) metallerinin 4-klorofenilasetik asidin izonikotinamid ile beş yeni kompleks sentezlendi.  
[Co(4-C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>ClO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>.(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>.(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (1)  
[Ni(4-C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>ClO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>.(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>.(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (2)  
[Mn(4-C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>ClO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>.(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>.(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (3)  
[Zn(4-C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>ClO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>.(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (4)  
Cu(4-C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>ClO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>.(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (5)
- ❖ Sentezlenen komplekslerinin yapıları elementel analiz (Tablo 3.1), FT-IR spektroskopisi (Şekil 3.9-3.13) teknikleri kullanılarak incelenmiştir.
- ❖ Sentezler sonucu 1, 2, ve 4 komplekslerinden X-ışınları tek kristal kırınım tekniğine uygun kristaller seçilerek molekül yapıları X-ışınları tek kristal kırınım tekniği kullanılarak aydınlatıldı (Şekil 3.1-3.3,3.5-3.7).
- ❖ X-ışınları tek kristal kırınım tekniği analiz sonuçlarına göre 4-klorofenilasetik asit ligandı karboksilat oksijen atomları üzerinden koordine olduğu belirlenmiştir. İzonikotinamid ligandları ise piridin halkasında bulunan azot atomu üzerinden metal atomu ile koordine olmakta ve sentezlenen komplekslerin tamamında monodentat ligand olarak bulunduğu görülmüştür. 1, 2 ve 4 Kompleksleri koordinasyon suyu içermektedir.
- ❖ Sentezlenen bileşiklerin X-ışını kristal yapı analizi sonucunda, molekül ve kristal yapısının kararlılığını arttıran molekül içi ve moleküller arası hidrojen bağları bulunduğu görülmektedir. Bu bağların, üç boyutlu ağlarda moleküllerin bir arada tutunmasına ve kristal yapıya kararlılık sağladığı belirlenmiştir.

- ❖ 1, 2, 3 ve 5 nolu kompleksler için toz X-ışını diffraktogramları alınmış ve 1, 2, 3 komplekslerinin eş yapılı olduğu 4 ve 5 komplekslerinin ise farklı yapılara sahip olduğu teyit edilmiştir.
- ❖ FT-IR spektroskopisi sonuçları belirlenen yapılarda bulunan fonksiyonel grupların tamamını görmemize yardımcı olmuştur (Şekil 3.9-3.13).
- ❖ Sentezlenen komplekslerin termal davranışları TGA/DTA metodu ile incelenmiş ve sonuçlara göre koordine su molekülü içeren  $[\text{Co}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2 \cdot (\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ,  $[\text{Ni}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2 \cdot (\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$  ve  $[\text{Mn}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2 \cdot (\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$  komplekslerinden ilk olarak su moleküllerinin ayrıldığı görülmektedir. Su içermeyen kompleksler ( $[\text{Zn}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2 \cdot (\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$  ve  $[\text{Cu}(4\text{-C}_8\text{H}_7\text{ClO}_2)_2 \cdot (\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$ ) yaklaşık  $200^\circ\text{C}$ 'den itibaren bozunmaya başlamaktadır. Su moleküllerinin ayrılmasından sonra organik ligandların parçalamaya başlamaktadır. Organik ligandların da yapıdan parçalanarak uzaklaşması neticesinde komplekslerden geriye için sırasıyla CoO, NiO, MnO, ZnO ve CuO kaldığı belirlenmiştir (Şekil 3.14-3.18). (Tablo 3.3)
- ❖ Komplekslerin soğurma ve floresans spektrumları sırasıyla UV-Vis ve Floresans spektrofotometreleri yardımıyla kaydedilmiştir (Şekil 3.19-3.24). (Tablo 3.4) Sentezlenen komplekslerinin yaklaşık 350 – 850 nm dalga boyları arasındaki geniş bir spektrumda ışımaya yaptıkları görülmektedir. Buradan, bu komplekslerin çok iyi optik ve optoelektronik uygulama potansiyellerine sahip oldukları söylenebilir. Floresans özellikleri olan yani ışımaya yapan bu maddelerin; immünilojide biyosensör, protein etkileşimleri çalışmaları, DNA sönümleme, nitroaromatik patlayıcıların tespit edilmesi için optik ve kimyasal sensör gibi uygulama alanları bulunmaktadır.

## 5. KAYNAKLAR

- [1]. Pineau, T.W., Hudgins, R., Liu, L., Li-Chuan, C., S., Talia, F.J.G., Dvorit, S., (1996). Activation of a Human Peroxisome Proliferator-Activated Receptor By the Antitumor Agent Phenyl acetate and Its Analogs. *Biochemical Pharmacology*, 52, 659-667.
- [2]. Cohen, B.I., Raicht, R.F., S. Sheferand., Mosbach, E.H ., (1974). Effects Of Clofibrate On Sterol Metabolism In Therat. *Biochimbiophysacta*, 369, 79-85.
- [3]. Neil, S., K., Nameer, M., Eddie, T., Hareesh, N., RajeshwarRao, T., (2007). Inhibition Of Estrogen-induced Mammary Tumor Formation in MMTV-Aromatase Transgenic Mice by 4-Chlorophenylacetate, Published in Final Edited Form as, 251(2), 302-310.
- [4]. Samid, D., Shack, S., Sherman, L.T., (1992). Phenylacetate: a novel non toxic inducer of tumor cell differentiation. *CancerRes*, 52(7), 1988-92.
- [5]. Sawatsri, S., Samid, D., Malkapuram, S., Sidell, N., (2001). Inhibition of estrogen-dependent breast cell responses with phenyl acetate. *Int J Cancer*, 93(5):687-92.
- [6]. Liyuan, W., HandongY., Wenkuan, L., (2009). Catena-Poly[[Trimethyltin(IV)]- $\mu$ -2-(2 Chlorophenyl)Acetato]. *ActaCryst*, E65, m1261.
- [7]. Muhammad, I., Saqib, A.S.R., Zia-Ur.,M., NiazMuhammad, P., Sohail & Vedapriya., (2014). Synthesis, Crystal Structure Description, Electrochemical, and DNA-Binding Studies of "Paddlewheel" Copper(II) Carboxylate. *Journal of Coordination Chemistry*, 67, (10), 1731–1745.
- [8]. Muhammad, I., Saqib, A., Niaz, S., M., Safeer, A., Manzar, S., (2013). Dimeric "Paddle-Wheel Carboxylates of Copper(II): Synthesis, Crystal Structure and Electro chemical Studies, 50, 524-531.
- [9]. George, E., Xueqing, S., Alejandra, Z., Angel, C., Dios, Leah, C., Robert,D. P., (2007). Synthesis, Structural and Larvicidal Studies of some Triorganotin 2-(p-chlorophenyl)-3-methylbutyrates. *Journal of Organometallic Chemistry*, 692, 1398-1404.
- [10]. Alberto, A. M., Maria, C. R., Elena, G. R., Alfonso, S.-C., Antonio, R.-D., Santiago, G.-R.,P.-C.,D. (2014). Dual investigation of lanthanide complexes with cinnamate and phenyl acetate ligands: Study of the cytotoxic properties and the Catalytic oxidation of Styrene Polyhedron 80, 117–128.



- [11]. Liyuan, Wen., Handong, Yin., Wenkuan, Li., Daqi, Wang., (2010). New Organo antimony complexes with the isomers of chloro phenyl acetic acid: Syntheses, Characterization and crystal structures of 1D polymeric chain, 2D network Structure and 3D framework *Inorganica Chimica Acta*, 363, 676–684.
- [12]. Bikshandarkoil, R., Srinivasan, Santosh, Y., Shetgaonkar And Narendra Nath Ghoshz., (2011). Synthesis and Characterization of calcium (II) coordination polymers based on phenylacetic acid. *Journal of Coordination Chemistry*, 64, No. 7, 1113–1124.
- [13]. De-Yun, Ma, Hai-Fu, Guo, Liang Qin, and Jun Xu., (2013). Synthesis, Characterization, Luminescence and Biological Activity of Two Lanthanide Complexes Involving Mixed Ligands. *Bull. Korean Chem. Soc.* 34, (9), 2774-2780.
- [14]. Liang Qin, De-Yun Ma., Rong, Deng And Jun, Xu., (2014). Construction of two lanthanide complexes based on N- and O-donors: synthesis, luminescence, and Biological activities. *Journal of Coordination Chemistry*, 67, (6), 1032–1045.
- [15]. Madden R. J. , Strong, F. M., and Woolle D. W., (1937). Relation of nicotinic acid and nicotinic acid amid to canine blacktongue. *Journal of the American Chemical Society*, 59, 1767-1768.
- [16]. Goldberger, J., Wheeler, GA. et al., 1928, *Publ. Health Rep. Wash.* 43, (23), 1385-1454
- [17]. Ahuja I., Prasat I., (1976). *Inorg. Nucl. Chem. Lett*, 12, 777-784
- [18]. Hökelek, T., Dal, H., Tercan, B., Ozgur, ve Necefoglu, H., (2009). Diaquabis[4-(dimethylamino)benzoato]-k<sub>2</sub>O, O1; kO-(isonicotinamide-kN1) Cobalt (II). *Acta Crystallographica Section*, E65, m627–m628.
- [19]. Hökelek, T., Yılmaz, F., Tercan, B., Gürgen, F. ve Necefoglu, H., (2009). Tetraaquabis(isonicotinamide-jN1)-nickel(II) bis(4-formylbenzoate) dihydrate. *Acta Crystallographica Section* E65, m1101-m1102.
- [20]. Francoise, M., Amombo, N., Ayesha, Jacobs., (2017). Phenylacetic acid co-crystals with acridine, caffeine, isonicotinamide and nicotinamide: Crystal structures, thermal analysis, FTIR spectroscopy and Hirshfeld surface analysis. *Journal of Molecular Structure* 1139 60-66

- [21]. Chia, T.S., Quah, C.K., (2016). Temperature-induced first-order displacive phase transition of isonicotinamide-4-methoxybenzoic acid co-crystal. *Acta Cryst*, B73, 285–295.
- [22]. Ateş, A., (2002). Doktora tezi, Atatürk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Erzurum.
- [23]. Hökelek, T., Çaylak, N., Necefoğlu, H., (2008). Diaquabis(4-chlorobenzoato-O)bis(N,N-diethylnicotinamide-K1)manganese(II). *Acta Cryst*, E64, 505-506.
- [24]. Çaylak, N., Hökelek, T., Öztürkan F. E. ve Necefoğlu H., (2007). Diaquabis(4-chlorobenzoato- O)bis(nicotinamide- K)cobalt(II). *Acta Cryst.*, E63, 1344-1346.
- [25]. Hökelek, T., Dal, H., Tercan, B., Özbek, F. E., Necefoğlu, H., (2009). Diaquabis(2-chlorobenzoato- O)bis(nicotinamide- K1) nickel(II). *Acta Cryst.*, E65, 466–467.
- [26]. Hökelek, T., Dal, H., Tercan, B., Özbek, F. E., Necefoğlu, H., (2009). Diaquabis(2-chlorobenzoato-O)bis(N,N-diethylnicotinamide-N1)nickel(II). *Acta Cryst.*, E65, 545–546.
- [27]. Hökelek, T., Dal, H., Tercan, B., Özbek, F. E., Necefoğlu, H., (2009). Diaquabis(2-chlorobenzoato- O)bis(N,N-diethylnicotinamide-K1) manganese(II). *Acta Cryst.*, E65, 513–514.
- [28]. Necefoğlu, H., Özbek, F. E., Aktaş, V., Tercan, B. ve Hökelek T., (2011). Bis(4-ethylbenzoato  $\kappa$ O)bis(nicotinamide-  $\kappa$ N1)zinc(II). *Acta Cryst*. E67, m382–m383.
- [29]. Nakamoto, 20. K., (1986). *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds*. 4. ed Wiley, New York.
- [30]. Bayarı, S., Ataç, A ve Yurdakul, Ş., (2003). *J. Mol. Struct.* 655, 163-170.
- [31]. Pavia, D. L., Lampman, G. M. and Kriz, G. S., (2001). *Introduction to Spectroscopy: A Guide for Students of Organic Chemistry*. 3. ed Brooks/Cole, South Melbourne.
- [32]. Bellamy, L. J., (1986). *The Infrared Spectra of Complex Molecules*. Vol. 1: 3. Aufl., Repr Chapman and Hall, London.
- [33]. Engelkamp, H., Nolte, R. J. M., (2000). Molecular materials based on crown ether functionalized phthalocyanines. *J. Porphyr. Phthalocya*, 4, 454.

- [34]. Yüksek, M., Elmali, A., Durmuş, M., Yaglioglu, H. G., Ünver, H., Nyokong, T., (2010). Good optical limiting performance of indium and gallium phthalocyanines in a solution and co-polymer host., *Journal of Optics*, 12, 1.
- [35]. Mandal, A., Patel, B. K., (2017). Molecular structure and fluorescence property of Zn(II), Cd(II) complexes of 3-pyridyl-5-aryl-(1H)-1,2,4-triazoles. *Polyhedron*, 132, 112-122
- [36]. Desmots, L. B., Reinholdt, D. N., Mercedes, C.-C., (2007). Design of fluorescent materials for chemical sensing, *Chem. Soc. Rev.*, 36 993 – 1017. Materials for Chemical sensing. *Chem. Soc. Rev.*, 36, 993 – 1017.
- [37]. Lakowicz, J. R., (2006). Principles of fluorescence spectroscopy, 3rded. New York, Springer, 530 – 566.
- [38]. Caron, T., Guillemont, M., Veignal, F., Montmeat, P., Pasquinet, E., Prene, P., Perraut, F., Porte, J.-P L., Françoise, S.-S., (2009). Optical sensor for the detection of explosives: Example of a fluorescent material, *AIP Conf. Proc.* 1137, 83 – 85.

**Ek Tablo 1.** Kompleks I, II ve IV'ün Yapısal Aydınlatma Verileri Aşağıda Sunulmuştur.

	I	II	IV
	[C <sub>28</sub> H <sub>32</sub> Cl <sub>2</sub> CoN <sub>4</sub> O <sub>9</sub> ]	[C <sub>28</sub> H <sub>28</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>4</sub> NiO <sub>9</sub> ]	[C <sub>28</sub> H <sub>24</sub> Cl <sub>2</sub> N <sub>4</sub> O <sub>6</sub> Zn]
M <sub>r</sub>	698.41	694,15	648.80
a	10.8096 (17) Å	10.822 (2) Å	8.329(2) Å
b	8.8570 (16) Å	8.907 (2) Å	25.6530(4) Å
c	32.445 (6) Å	32.0583 (2) Å	13.5048(3) Å
α	90°		
β	97.347 (5) °	97.51 (7)°	91.703(3)
γ	90°		
V	3080.8 (9) Å <sup>3</sup>	3078.8 (13) Å <sup>3</sup>	2885.56(10) Å <sup>3</sup>
Z	4	4	4
D <sub>x</sub>	1.506 Mg m <sup>-3</sup>	1.6498 Mg m <sup>-3</sup>	1.493 Mg m <sup>-3</sup>
Radyasyon		MoKα	
λ		0.668 Å	
θ	3.0–28.5°	3.0–28.2°	2.9–26.4°
μ	0.79 mm <sup>-1</sup>	0.86 mm <sup>-1</sup>	1.09 mm <sup>-1</sup>
T		296 K	

**Ek Tablo 2.** [C<sub>28</sub>H<sub>32</sub>C<sub>12</sub>CoN<sub>4</sub>O<sub>9</sub>] Kompleksinin Atom Koordinatları ve İzotropik Yer Değişirme Parametreleri

Co1	0.25264 (5)	0.70118 (6)	0.252343 (14)	0.02541 (16)
Cl1	0.0618 (3)	0.3786 (4)	0.46632 (7)	0.1482 (12)
O4	0.2724 (3)	0.9187 (3)	0.22890 (8)	0.0331 (6)
O7	0.0755 (3)	0.7473 (4)	0.26809 (10)	0.0375 (7)
O2	0.2325 (3)	0.4859 (3)	0.27631 (9)	0.0355 (6)
O8	0.4292 (3)	0.6536 (4)	0.23668 (10)	0.0398 (7)
O3	0.0869 (3)	1.0194 (4)	0.23315 (12)	0.0504 (9)
O1	0.4116 (3)	0.3779 (4)	0.26808 (12)	0.0536 (9)
N1	0.3272 (3)	0.7710 (4)	0.31537 (9)	0.0322 (7)
N3	0.1808 (3)	0.6311 (4)	0.18913 (9)	0.0323 (7)
Cl2	0.4079 (4)	0.9832 (5)	0.03489 (8)	0.2012 (18)
C1	0.3101 (4)	0.3818 (4)	0.28254 (11)	0.0297 (8)
H1	0.3502	0.4333	0.3075	0.036*
C9	0.1927 (4)	1.0202 (4)	0.22103 (11)	0.0284 (8)
H9	0.1587	0.9673	0.1956	0.034*
C3	0.2273 (4)	0.2874 (5)	0.34831 (13)	0.0389 (10)
C27	0.2440 (4)	0.6746 (6)	0.15819 (13)	0.0425 (11)
H27	0.3136	0.7361	0.1644	0.051*
C11	0.2724 (4)	1.1118 (5)	0.15495 (13)	0.0371 (9)
C23	0.0791 (4)	0.5470 (5)	0.17922 (12)	0.0371 (9)
H23	0.0340	0.5169	0.2004	0.044*
C17	0.4287 (4)	0.8562 (5)	0.32409 (12)	0.0370 (9)
H17	0.4722	0.8855	0.3025	0.044*
C4	0.1108 (5)	0.3519 (6)	0.34768 (15)	0.0470 (11)
H4	0.0645	0.3744	0.3223	0.056*
O6	-0.0508 (4)	0.4709 (6)	0.05283 (12)	0.0867 (15)
C21	0.2672 (5)	0.7271 (6)	0.34689 (12)	0.0444 (11)
H21	0.1977	0.6650	0.3412	0.053*
C19	0.4078 (5)	0.8613 (6)	0.39648 (12)	0.0447 (11)

---

C25	0.1049 (5)	0.5428 (6)	0.10742 (13)	0.0462 (11)
C24	0.0374 (5)	0.5023 (6)	0.13903 (13)	0.0443 (11)
H24	-0.0352	0.4456	0.1334	0.053*
C26	0.2092 (5)	0.6312 (6)	0.11735 (13)	0.0475 (12)
H26	0.2562	0.6615	0.0967	0.057*
C18	0.4719 (5)	0.9029 (5)	0.36407 (13)	0.0443 (11)
H18	0.5435	0.9618	0.3691	0.053*
C2	0.2786 (6)	0.2486 (5)	0.30869 (15)	0.0505 (13)
H2A	0.2181	0.1859	0.2919	0.061*
H2B	0.3535	0.1887	0.3156	0.061*
C10	0.2270 (5)	1.1534 (5)	0.19549 (14)	0.0462 (11)
H10A	0.1545	1.2181	0.1897	0.055*
H10B	0.2916	1.2113	0.2120	0.055*
C12	0.3866 (5)	1.0433 (6)	0.15442 (16)	0.0498 (12)
H12	0.4360	1.0228	0.1794	0.060*
C20	0.3042 (5)	0.7704 (6)	0.38759 (13)	0.0510 (13)
H20	0.2597	0.7386	0.4087	0.061*
N4	0.1465 (5)	0.4797 (7)	0.03840 (13)	0.0845 (18)
H4A	0.1261	0.4518	0.0131	0.101*
H4B	0.2233	0.4978	0.0475	0.101*
C16	0.2008 (5)	1.1417 (7)	0.11753 (15)	0.0575 (14)
H16	0.1236	1.1884	0.1172	0.069*
C22	0.4536 (6)	0.9175 (7)	0.43970 (14)	0.0601 (15)
C5	0.0618 (5)	0.3833 (7)	0.38376 (18)	0.0600 (14)
H5	-0.0166	0.4274	0.3829	0.072*
C8	0.2942 (5)	0.2579 (6)	0.38655 (16)	0.0566 (13)
H8	0.3738	0.2168	0.3878	0.068*
N2	0.3749 (7)	0.9072 (9)	0.46724 (15)	0.128 (3)
H2C	0.3961	0.9391	0.4922	0.154*
H2D	0.3023	0.8685	0.4604	0.154*
C28	0.0596 (6)	0.4945 (8)	0.06343 (15)	0.0649 (16)
C13	0.4287 (6)	1.0049 (8)	0.1178 (2)	0.0711 (17)

---

H13	0.5065	0.9601	0.1178	0.085*
C6	0.1298 (7)	0.3489 (8)	0.42067 (17)	0.0764 (19)
C7	0.2456 (7)	0.2882 (9)	0.42301 (17)	0.080 (2)
H7	0.2914	0.2673	0.4486	0.096*
C14	0.3551 (9)	1.0335 (9)	0.0815 (2)	0.090 (2)
C15	0.2429 (8)	1.1026 (9)	0.08048 (18)	0.089 (2)
H15	0.1949	1.1234	0.0552	0.106*
O9	-0.157 (2)	0.197 (5)	0.0295 (8)	0.66 (3)
H81	0.483 (4)	0.718 (5)	0.2363 (16)	0.057 (16)*
H82	0.452 (5)	0.572 (4)	0.2463 (18)	0.072 (18)*
H72	0.053 (5)	0.828 (4)	0.2567 (17)	0.072 (19)*
H71	0.024 (4)	0.678 (4)	0.2663 (15)	0.050 (15)*

**Ek Tablo 3.** [C<sub>28</sub>H<sub>32</sub>C<sub>12</sub>CoN<sub>4</sub>O<sub>9</sub>] Molekülünün Geometrik Parametreleri

Co1—O8	2.080 (3)	C4—H4	0.9300
Co1—O2	2.081 (3)	O6—C28	1.217 (7)
Co1—O7	2.085 (3)	C21—C20	1.384 (6)
Co1—O4	2.092 (3)	C21—H21	0.9300
Co1—N3	2.188 (3)	C19—C18	1.381 (6)
Co1—N1	2.189 (3)	C19—C20	1.379 (7)
C11—C6	1.755 (6)	C19—C22	1.510 (6)
O4—C9	1.249 (5)	C25—C26	1.377 (7)
O7—H72	0.82 (2)	C25—C24	1.380 (7)
O7—H71	0.824 (19)	C25—C28	1.510 (6)
O2—C1	1.246 (5)	C24—H24	0.9300
O8—H81	0.819 (19)	C26—H26	0.9300
O8—H82	0.81 (2)	C18—H18	0.9300
O3—C9	1.256 (5)	C2—H2A	0.9700
O1—C1	1.248 (5)	C2—H2B	0.9700
N1—C17	1.332 (5)	C10—H10A	0.9700
N1—C21	1.337 (5)	C10—H10B	0.9700

N3—C23	1.333 (5)	C12—C13	1.368 (7)
N3—C27	1.341 (5)	C12—H12	0.9300
C12—C14	1.741 (6)	C20—H20	0.9300
C1—C2	1.517 (6)	N4—C28	1.324 (7)
C1—H1	0.9800	N4—H4A	0.8600
C9—C10	1.515 (6)	N4—H4B	0.8600
C9—H9	0.9800	C16—C15	1.383 (8)
C3—C8	1.379 (6)	C16—H16	0.9300
C3—C4	1.380 (7)	C22—N2	1.313 (8)
C3—C2	1.504 (6)	C5—C6	1.357 (9)
C27—C26	1.385 (6)	C5—H5	0.9300
C27—H27	0.9300	C8—C7	1.381 (8)
C11—C12	1.377 (7)	C8—H8	0.9300
C11—C16	1.379 (6)	N2—H2C	0.8600
C11—C10	1.507 (6)	N2—H2D	0.8600
O5—C22	1.215 (7)	C13—C14	1.360 (10)
C23—C24	1.382 (6)	C13—H13	0.9300
C23—H23	0.9300	C6—C7	1.356 (9)
C17—C18	1.384 (6)	C7—H7	0.9300
C17—H17	0.9300	C14—C15	1.355 (10)
C4—C5	1.374 (7)	C15—H15	0.9300
O8—Co1—O2	92.79 (12)	C26—C25—C28	122.6 (5)
O8—Co1—O7	179.59 (14)	C24—C25—C28	119.4 (5)
O2—Co1—O7	86.82 (12)	C25—C24—C23	119.2 (4)
O8—Co1—O4	87.61 (12)	C25—C24—H24	120.4
O2—Co1—O4	179.33 (11)	C23—C24—H24	120.4
O7—Co1—O4	92.79 (12)	C25—C26—C27	119.7 (4)
O8—Co1—N3	86.57 (13)	C25—C26—H26	120.1
O2—Co1—N3	92.79 (12)	C27—C26—H26	120.1
O7—Co1—N3	93.34 (13)	C19—C18—C17	119.4 (4)
O4—Co1—N3	87.77 (12)	C19—C18—H18	120.3
O8—Co1—N1	92.64 (13)	C17—C18—H18	120.3



O2—Co1—N1	87.33 (12)	C3—C2—C1	115.7 (4)
O7—Co1—N1	87.45 (13)	C3—C2—H2A	108.4
O4—Co1—N1	92.12 (12)	C1—C2—H2A	108.4
N3—Co1—N1	179.20 (13)	C3—C2—H2B	108.4
C9—O4—Co1	129.6 (3)	C1—C2—H2B	108.4
Co1—O7—H72	107 (4)	H2A—C2—H2B	107.4
Co1—O7—H71	118 (4)	C11—C10—C9	114.6 (4)
H72—O7—H71	117 (5)	C11—C10—H10A	108.6
C1—O2—Co1	129.7 (3)	C9—C10—H10A	108.6
Co1—O8—H81	123 (4)	C11—C10—H10B	108.6
Co1—O8—H82	109 (4)	C9—C10—H10B	108.6
H81—O8—H82	116 (6)	H10A—C10—H10B	107.6
C17—N1—C21	118.0 (3)	C13—C12—C11	121.2(5)
C17—N1—Co1	123.6 (3)	C13—C12—H12	119.4
C21—N1—Co1	118.4 (3)	C11—C12—H12	119.4
C23—N3—C27	117.6 (3)	C19—C20—C21	119.3 (4)
C23—N3—Co1	124.6 (3)	C19—C20—H20	120.3
C27—N3—Co1	117.8 (3)	C21—C20—H20	120.3
O2—C1—O1	124.5 (4)	C28—N4—H4A	120.0
O2—C1—C2	118.1 (4)	C28—N4—H4B	120.0
O1—C1—C2	117.4 (4)	H4A—N4—H4B	120.0
O2—C1—H1	90.4	C11—C16—C15	120.5 (6)
O1—C1—H1	90.4	C11—C16—H16	119.8
C2—C1—H1	90.4	C15—C16—H16	119.8
O4—C9—O3	124.3 (4)	O5—C22—N2	122.4 (5)
O4—C9—C10	117.5 (4)	O5—C22—C19	121.1 (5)
O3—C9—C10	118.2 (4)	N2—C22—C19	116.4 (5)
O4—C9—H9	90.2	C6—C5—C4	118.8 (6)
O3—C9—H9	90.2	C6—C5—H5	120.6
C10—C9—H9	90.2	C4—C5—H5	120.6
C8—C3—C4	117.7 (4)	C7—C8—C3	121.4 (5)
C8—C3—C2	121.1 (5)	C7—C8—H8	119.3

C4—C3—C2	121.2 (4)	C3—C8—H8	119.3
N3—C27—C26	122.3 (4)	C22—N2—H2C	120.0
N3—C27—H27	118.9	C22—N2—H2D	120.0
C26—C27—H27	118.9	H2C—N2—H2D	120.0
C12—C11—C16	118.5 (4)	O6—C28—N4	123.8 (5)
C12—C11—C10	120.7 (4)	O6—C28—C25	120.2 (5)
C16—C11—C10	120.8 (5)	N4—C28—C25	116.0 (5)
N3—C23—C24	123.1 (4)	C14—C13—C12	118.9 (6)
N3—C23—H23	118.4	C14—C13—H13	120.5
C24—C23—H23	118.4	C12—C13—H13	120.5
N1—C17—C18	122.6 (4)	C5—C6—C7	122.0 (5)
N1—C17—H17	118.7	C5—C6—C11	118.3 (6)
C18—C17—H17	118.7	C7—C6—C11	119.7 (5)
C5—C4—C3	121.4 (5)	C6—C7—C8	118.6 (5)
C5—C4—H4	119.3	C6—C7—H7	120.7
C3—C4—H4	119.3	C8—C7—H7	120.7
N1—C21—C20	122.7 (4)	C15—C14—C13	121.9 (6)
N1—C21—H21	118.7	C15—C14—C12	119.1 (6)
C20—C21—H21	118.7	C13—C14—C12	119.0 (7)
C18—C19—C20	118.0 (4)	C14—C15—C16	119.0 (6)
C18—C19—C22	118.8 (4)	C14—C15—H15	120.5
C20—C19—C22	123.2 (4)	C16—C15—H15	120.5
C26—C25—C24	118.0 (4)		
O8—Co1—O4—C9	168.0 (3)	C28—C25—C24—C23	-179.9 (5)
O2—Co1—O4—C9	-66 (11)	N3—C23—C24—C25	1.6 (7)
O7—Co1—O4—C9	-11.9 (3)	C24—C25—C26—C27	0.8 (7)
N3—Co1—O4—C9	81.4 (3)	C28—C25—C26—C27	178.4 (5)
N1—Co1—O4—C9	-99.4 (3)	N3—C27—C26—C25	1.4 (8)
O8—Co1—O2—C1	7.9 (3)	C20—C19—C18—C17	1.8 (8)
O7—Co1—O2—C1	-172.2 (3)	C22—C19—C18—C17	-177.9 (5)
O4—Co1—O2—C1	-118 (10)	N1—C17—C18—C19	-0.5 (8)
N3—Co1—O2—C1	94.6 (3)	C8—C3—C2—C1	-112.6 (5)

N1—Co1—O2—C1	-84.6 (3)	C4—C3—C2—C1	68.3 (6)
O8—Co1—N1—C17	42.3 (4)	O2—C1—C2—C3	-46.2 (6)
O2—Co1—N1—C17	135.0 (4)	O1—C1—C2—C3	135.1 (5)
O7—Co1—N1—C17	-138.1 (4)	C12—C11—C10—C9	-70.0 (6)
O4—Co1—N1—C17	-45.4 (4)	C16—C11—C10—C9	110.1 (5)
N3—Co1—N1—C17	36 (10)	O4—C9—C10—C11	53.2 (6)
O8—Co1—N1—C21	-138.3 (4)	O3—C9—C10—C11	-127.3 (4)
O2—Co1—N1—C21	-45.6 (4)	C16—C11—C12—C13	-0.2 (8)
O7—Co1—N1—C21	41.3 (4)	C10—C11—C12—C13	179.9 (5)
O4—Co1—N1—C21	134.0 (4)	C18—C19—C20—C21	-1.3 (8)
N3—Co1—N1—C21	-144 (9)	C22—C19—C20—C21	178.5 (5)
O8—Co1—N3—C23	138.6 (4)	N1—C21—C20—C19	-0.6 (8)
O2—Co1—N3—C23	45.9 (3)	C12—C11—C16—C15	0.4 (8)
O7—Co1—N3—C23	-41.0 (4)	C10—C11—C16—C15	-179.7 (6)
O4—Co1—N3—C23	-133.7 (3)	C18—C19—C22—O5	-15.1 (9)
N1—Co1—N3—C23	145 (9)	C20—C19—C22—O5	165.2 (6)
O8—Co1—N3—C27	-40.9 (3)	C18—C19—C22—N2	163.8 (6)
O2—Co1—N3—C27	-133.5 (3)	C20—C19—C22—N2	-15.9 (9)
O7—Co1—N3—C27	139.5 (3)	C3—C4—C5—C6	-0.5 (9)
O4—Co1—N3—C27	46.9 (3)	C4—C3—C8—C7	1.5 (8)
N1—Co1—N3—C27	-35 (10)	C2—C3—C8—C7	-177.5 (6)
Co1—O2—C1—O1	-14.1 (6)	C26—C25—C28—O6	-151.1 (6)
Co1—O2—C1—C2	167.3 (3)	C24—C25—C28—O6	26.5 (9)
Co1—O4—C9—O3	13.8 (6)	C26—C25—C28—N4	29.3 (8)
Co1—O4—C9—C10	-166.7 (3)	C24—C25—C28—N4	-153.1 (6)
C23—N3—C27—C26	-2.1 (7)	C11—C12—C13—C14	-1.0 (10)
Co1—N3—C27—C26	177.3 (4)	C4—C5—C6—C7	1.7 (11)
C27—N3—C23—C24	0.6 (7)	C4—C5—C6—C11	-176.0 (5)
Co1—N3—C23—C24	-178.8 (3)	C5—C6—C7—C8	-1.3 (12)
C21—N1—C17—C18	-1.4 (7)	C11—C6—C7—C8	176.3 (5)
Co1—N1—C17—C18	178.0 (4)	C3—C8—C7—C6	-0.4 (11)
C8—C3—C4—C5	-1.1 (7)	C12—C13—C14—C15	1.9 (12)

C2—C3—C4—C5	178.0 (5)	C12—C13—C14—C12	-179.4 (5)
C17—N1—C21—C20	2.0 (7)	C13—C14—C15—C16	-1.7 (13)
Co1—N1—C21—C20	-177.4 (4)	C12—C14—C15—C16	179.6 (6)
C26—C25—C24—C23	-2.2 (7)	C11—C16—C15—C14	0.5 (11)
C3—C4	1.380 (7)	C22—N2	1.313 (8)
C3—C2	1.504 (6)	C5—C6	1.357 (9)
C27—C26	1.385 (6)	C5—H5	0.9300
C27—H27	0.9300	C8—C7	1.381 (8)
C11—C12	1.377 (7)	C8—H8	0.9300
C11—C16	1.379 (6)	N2—H2C	0.8600
C11—C10	1.507 (6)	N2—H2D	0.8600
O5—C22	1.215 (7)	C13—C14	1.360 (10)
C23—C24	1.382 (6)	C13—H13	0.9300
C23—H23	0.9300	C6—C7	1.356 (9)
C17—C18	1.384 (6)	C7—H7	0.9300
C17—H17	0.9300	C14—C15	1.355 (10)
C4—C5	1.374 (7)	C15—H15	0.9300
O8—Co1—O2	92.79 (12)	C26—C25—C28	122.6 (5)
O8—Co1—O7	179.59 (14)	C24—C25—C28	119.4 (5)
O2—Co1—O7	86.82 (12)	C25—C24—C23	119.2 (4)
O8—Co1—O4	87.61 (12)	C25—C24—H24	120.4
O2—Co1—O4	179.33 (11)	C23—C24—H24	120.4
O7—Co1—O4	92.79 (12)	C25—C26—C27	119.7 (4)
O8—Co1—N3	86.57 (13)	C25—C26—H26	120.1
O2—Co1—N3	92.79 (12)	C27—C26—H26	120.1
O7—Co1—N3	93.34 (13)	C19—C18—C17	119.4 (4)
O4—Co1—N3	87.77 (12)	C19—C18—H18	120.3
O8—Co1—N1	92.64 (13)	C17—C18—H18	120.3
O2—Co1—N1	87.33 (12)	C3—C2—C1	115.7 (4)
O7—Co1—N1	87.45 (13)	C3—C2—H2A	108.4
O4—Co1—N1	92.12 (12)	C1—C2—H2A	108.4
N3—Co1—N1	179.20 (13)	C3—C2—H2B	108.4

C9—O4—Co1	129.6 (3)	C1—C2—H2B	108.4
Co1—O7—H72	107 (4)	H2A—C2—H2B	107.4
Co1—O7—H71	118 (4)	C11—C10—C9	114.6 (4)
H72—O7—H71	117 (5)	C11—C10—H10A	108.6
C1—O2—Co1	129.7 (3)	C9—C10—H10A	108.6
Co1—O8—H81	123 (4)	C11—C10—H10B	108.6
Co1—O8—H82	109 (4)	C9—C10—H10B	108.6
H81—O8—H82	116 (6)	H10A—C10—H10B	107.6
C17—N1—C21	118.0 (3)	C13—C12—C11	121.2 (5)
C17—N1—Co1	123.6 (3)	C13—C12—H12	119.4
C21—N1—Co1	118.4 (3)	C11—C12—H12	119.4
C23—N3—C27	117.6 (3)	C19—C20—C21	119.3 (4)
C23—N3—Co1	124.6 (3)	C19—C20—H20	120.3
C27—N3—Co1	117.8 (3)	C21—C20—H20	120.3
O2—C1—O1	124.5 (4)	C28—N4—H4A	120.0
O2—C1—C2	118.1 (4)	C28—N4—H4B	120.0
O1—C1—C2	117.4 (4)	H4A—N4—H4B	120.0
O2—C1—H1	90.4	C11—C16—C15	120.5 (6)
O1—C1—H1	90.4	C11—C16—H16	119.8
C2—C1—H1	90.4	C15—C16—H16	119.8
O4—C9—O3	124.3 (4)	O5—C22—N2	122.4 (5)
O4—C9—C10	117.5 (4)	O5—C22—C19	121.1 (5)
O3—C9—C10	118.2 (4)	N2—C22—C19	116.4 (5)
O4—C9—H9	90.2	C6—C5—C4	118.8 (6)
O3—C9—H9	90.2	C6—C5—H5	120.6
C10—C9—H9	90.2	C4—C5—H5	120.6
C8—C3—C4	117.7 (4)	C7—C8—C3	121.4 (5)
C8—C3—C2	121.1 (5)	C7—C8—H8	119.3
C4—C3—C2	121.2 (4)	C3—C8—H8	119.3
N3—C27—C26	122.3 (4)	C22—N2—H2C	120.0
N3—C27—H27	118.9	C22—N2—H2D	120.0
C26—C27—H27	118.9	H2C—N2—H2D	120.0

C12—C11—C16	118.5 (4)	O6—C28—N4	123.8 (5)
C12—C11—C10	120.7 (4)	O6—C28—C25	120.2 (5)
C16—C11—C10	120.8 (5)	N4—C28—C25	116.0 (5)
N3—C23—C24	123.1 (4)	C14—C13—C12	118.9 (6)
N3—C23—H23	118.4	C14—C13—H13	120.5
C24—C23—H23	118.4	C12—C13—H13	120.5
N1—C17—C18	122.6 (4)	C5—C6—C7	122.0 (5)
C18—C17—H17	118.7	C7—C6—C11	119.7 (5)
C5—C4—C3	121.4 (5)	C6—C7—C8	118.6 (5)
C5—C4—H4	119.3	C6—C7—H7	120.7
C3—C4—H4	119.3	C8—C7—H7	120.7
N1—C21—C20	122.7 (4)	C15—C14—C13	121.9 (6)
N1—C21—H21	118.7	C15—C14—C12	119.1 (6)
C20—C21—H21	118.7	C13—C14—C12	119.0 (7)
C18—C19—C20	118.0 (4)	C14—C15—C16	119.0 (6)
C18—C19—C22	118.8 (4)	C14—C15—H15	120.5
C20—C19—C22	123.2 (4)	C16—C15—H15	120.5
C26—C25—C24	118.0 (4)		
O8—Co1—O4—C9	168.0 (3)	C28—C25—C24—C23	-179.9 (5)
O2—Co1—O4—C9	-66 (11)	N3—C23—C24—C25	1.6 (7)
O7—Co1—O4—C9	-11.9 (3)	C24—C25—C26—C27	0.8 (7)
N3—Co1—O4—C9	81.4 (3)	C28—C25—C26—C27	178.4 (5)
N1—Co1—O4—C9	-99.4 (3)	N3—C27—C26—C25	1.4 (8)
O8—Co1—O2—C1	7.9 (3)	C20—C19—C18—C17	1.8 (8)
O7—Co1—O2—C1	-172.2 (3)	C22—C19—C18—C17	-177.9 (5)
O4—Co1—O2—C1	-118 (10)	N1—C17—C18—C19	-0.5 (8)
N3—Co1—O2—C1	94.6 (3)	C8—C3—C2—C1	-112.6 (5)
N1—Co1—O2—C1	-84.6 (3)	C4—C3—C2—C1	68.3 (6)
O8—Co1—N1—C17	42.3 (4)	O2—C1—C2—C3	-46.2 (6)
O2—Co1—N1—C17	135.0 (4)	O1—C1—C2—C3	135.1 (5)
O7—Co1—N1—C17	-138.1 (4)	C12—C11—C10—C9	-70.0 (6)
O4—Co1—N1—C17	-45.4 (4)	C16—C11—C10—C9	110.1 (5)

N3—Co1—N1—C17	36 (10)	O4—C9—C10—C11	53.2 (6)
O8—Co1—N1—C21	-138.3 (4)	O3—C9—C10—C11	-127.3 (4)
O2—Co1—N1—C21	-45.6 (4)	C16—C11—C12—C13	-0.2 (8)
O7—Co1—N1—C21	41.3 (4)	C10—C11—C12—C13	179.9 (5)
O4—Co1—N1—C21	134.0 (4)	C18—C19—C20—C21	-1.3 (8)
N3—Co1—N1—C21	-144 (9)	C22—C19—C20—C21	178.5 (5)
O8—Co1—N3—C23	138.6 (4)	N1—C21—C20—C19	-0.6 (8)
O2—Co1—N3—C23	45.9 (3)	C12—C11—C16—C15	0.4 (8)
O7—Co1—N3—C23	-41.0 (4)	C10—C11—C16—C15	-179.7 (6)
O4—Co1—N3—C23	-133.7 (3)	C18—C19—C22—O5	-15.1 (9)
N1—Co1—N3—C23	145 (9)	C20—C19—C22—O5	165.2 (6)
O8—Co1—N3—C27	-40.9 (3)	C18—C19—C22—N2	163.8 (6)
O2—Co1—N3—C27	-133.5 (3)	C20—C19—C22—N2	-15.9 (9)
O7—Co1—N3—C27	139.5 (3)	C3—C4—C5—C6	-0.5 (9)
O4—Co1—N3—C27	46.9 (3)	C4—C3—C8—C7	1.5 (8)
N1—Co1—N3—C27	-35 (10)	C2—C3—C8—C7	-177.5 (6)
Co1—O2—C1—O1	-14.1 (6)	C26—C25—C28—O6	-151.1 (6)
Co1—O2—C1—C2	167.3 (3)	C24—C25—C28—O6	26.5 (9)
Co1—O4—C9—O3	13.8 (6)	C26—C25—C28—N4	29.3 (8)
Co1—O4—C9—C10	-166.7 (3)	C24—C25—C28—N4	-153.1 (6)
C23—N3—C27—C26	-2.1 (7)	C11—C12—C13—C14	-1.0 (10)
Co1—N3—C27—C26	177.3 (4)	C4—C5—C6—C7	1.7 (11)
C27—N3—C23—C24	0.6 (7)	C4—C5—C6—C11	-176.0 (5)
Co1—N3—C23—C24	-178.8 (3)	C5—C6—C7—C8	-1.3 (12)
C21—N1—C17—C18	-1.4 (7)	C11—C6—C7—C8	176.3 (5)
Co1—N1—C17—C18	178.0 (4)	C3—C8—C7—C6	-0.4 (11)
C8—C3—C4—C5	-1.1 (7)	C12—C13—C14—C15	1.9 (12)
C2—C3—C4—C5	178.0 (5)	C12—C13—C14—C12	-179.4 (5)
C17—N1—C21—C20	2.0 (7)	C13—C14—C15—C16	-1.7 (13)
Co1—N1—C21—C20	-177.4 (4)	C12—C14—C15—C16	179.6 (6)
C26—C25—C24—C23	-2.2 (7)	C11—C16—C15—C14	0.5 (11)

**Ek Tablo 4.** [C<sub>28</sub>H<sub>28</sub>C<sub>12</sub>N<sub>4</sub>NiO<sub>9</sub>] Kompleksinin Atom Koordinatları ve İzotropik Yer Değişirme Parametreleri

Ni1	0.74734 (4)	0.29975 (5)	0.747568 (12)	0.02236 (13)
Cl2	0.9387 (3)	0.6278 (3)	0.53331 (6)	0.1346 (10)
O2	0.7284 (2)	0.0856 (3)	0.77076 (7)	0.0305 (5)
O4	0.7666 (2)	0.5122 (3)	0.72396 (8)	0.0321 (5)
O7	0.9223 (2)	0.2569 (3)	0.73158 (9)	0.0332 (6)
O8	0.5728 (3)	0.3445 (3)	0.76321 (9)	0.0369 (6)
O1	0.9145 (3)	-0.0140 (3)	0.76664 (10)	0.0477 (7)
O3	0.5869 (3)	0.6187 (3)	0.73242 (11)	0.0515 (8)
N3	0.6752 (3)	0.2312 (3)	0.68598 (8)	0.0286 (6)
N1	0.8169 (3)	0.3689 (3)	0.80937 (8)	0.0297 (6)
Cl1	0.5959 (4)	0.0140 (5)	0.96613 (7)	0.2000 (17)
C1	0.8089 (3)	-0.0146 (4)	0.77855 (10)	0.0258 (7)
C9	0.6878 (3)	0.6155 (4)	0.71781 (10)	0.0263 (7)
C11	0.7712 (4)	0.7133 (4)	0.65192 (11)	0.0359 (8)
C3	0.7290 (4)	-0.1102 (4)	0.84451 (11)	0.0351 (8)
C21	0.9185 (4)	0.4549 (4)	0.81893 (11)	0.0350 (8)
H21	0.9627	0.4849	0.7975	0.042*
C17	0.7554 (4)	0.3245 (5)	0.84068 (11)	0.0383 (9)
H17	0.6869	0.2616	0.8345	0.046*
O6	0.4430 (4)	0.0276 (6)	0.55276 (10)	0.0819 (13)
C27	0.7329 (4)	0.2770 (5)	0.65392 (11)	0.0401 (9)
H27	0.8009	0.3411	0.6594	0.048*
C23	0.5743 (4)	0.1442 (4)	0.67738 (11)	0.0345 (8)
H23	0.5316	0.1150	0.6993	0.041*
C16	0.8886 (4)	0.6510 (5)	0.65279 (13)	0.0429 (9)
H16	0.9350	0.6286	0.6784	0.051*
O5	1.0499 (4)	0.5324 (6)	0.94650 (11)	0.0853 (14)
C25	0.5929 (4)	0.1393 (5)	0.60425 (11)	0.0427 (10)
C10	0.7190 (5)	0.7504 (4)	0.69188 (13)	0.0475 (11)



H10A	0.6439	0.8095	0.6848	0.057*
H10B	0.7790	0.8126	0.7091	0.057*
C20	0.9599 (4)	0.5007 (5)	0.85939 (12)	0.0428 (9)
H20	1.0315	0.5590	0.8650	0.051*
C8	0.6142 (4)	-0.0449 (5)	0.84545 (14)	0.0474 (10)
H8	0.5634	-0.0263	0.8204	0.057*
C18	0.7897 (4)	0.3684 (5)	0.88189 (12)	0.0438 (10)
H18	0.7437	0.3375	0.9027	0.053*
C24	0.5308 (4)	0.0959 (5)	0.63731 (12)	0.0417 (9)
H24	0.4606	0.0348	0.6326	0.050*
C2	0.7741 (5)	-0.1507 (4)	0.80372 (12)	0.0436 (10)

**Ek Tablo 5.** [C<sub>28</sub>H<sub>28</sub>C<sub>12</sub>N<sub>4</sub>NiO<sub>9</sub>] Kompleksinin Geometrik Parametreleri

Ni1—O8	2.058 (3)	C16—C15	1.378 (6)
Ni1—O4	2.060 (3)	C16—H16	0.9300
Ni1—O7	2.063 (3)	O5—C22	1.222 (7)
Ni1—O2	2.069 (2)	C25—C26	1.386 (6)
Ni1—N3	2.123 (3)	C25—C24	1.388 (6)
Ni1—N1	2.125 (3)	C25—C28	1.512 (5)
C12—C14	1.748 (5)	C10—H10A	0.9700
O2—C1	1.249 (4)	C10—H10B	0.9700
O4—C9	1.253 (4)	C20—C19	1.386 (6)
O7—H71	0.836 (19)	C20—H20	0.9300
O7—H72	0.834 (19)	C8—C7	1.375 (7)
O8—H82	0.823 (19)	C8—H8	0.9300
O8—H81	0.817 (19)	C18—C19	1.385 (6)
O1—C1	1.254 (4)	C18—H18	0.9300
O3—C9	1.245 (4)	C24—H24	0.9300
N3—C23	1.338 (5)	C2—H2A	0.9700
N3—C27	1.340 (5)	C2—H2B	0.9700
N1—C17	1.340 (5)	C19—C22	1.510 (5)
N1—C21	1.342 (5)	C26—H26	0.9300

C11—C6	1.738 (5)	C4—C5	1.392 (7)
C1—C2	1.533 (5)	C4—H4	0.9300
C9—C10	1.526 (5)	N2—C22	1.325 (7)
C11—C12	1.383 (6)	N2—H2C	0.8600
C11—C16	1.384 (6)	N2—H2D	0.8600
C11—C10	1.510 (5)	C12—C13	1.389 (7)
C3—C4	1.374 (6)	C12—H12	0.9300
C3—C8	1.375 (6)	C28—N4	1.325 (7)
C3—C2	1.506 (5)	C15—C14	1.363 (7)
C21—C20	1.383 (5)	C15—H15	0.9300
C21—H21	0.9300	C14—C13	1.363 (8)
C17—C18	1.387 (5)	N4—H4A	0.8600
C17—H17	0.9300	N4—H4B	0.8600
O6—C28	1.216 (6)	C13—H13	0.9300
C27—C26	1.388 (5)	C7—C6	1.358 (9)
C27—H27	0.9300	C7—H7	0.9300
C23—C24	1.383 (5)	C6—C5	1.358 (9)
C23—H23	0.9300	C5—H5	0.9300
O8—Ni1—	O4 93.11 (11)	C9—C10—H10B	108.4
O8—Ni1—O7	179.44 (12)	H10A—C10—H10B	107.5
O4—Ni1—O7	86.34 (10)	C21—C20—C19	119.3 (4)
O8—Ni1—O2	87.22 (11)	C21—C20—H20	120.3
O4—Ni1—O2	179.47 (10)	C19—C20—H20	120.3
O7—Ni1—O2	93.33 (10)	C3—C8—C7	121.6 (5)
O8—Ni1—N3	92.83 (12)	C3—C8—H8	119.2
O4—Ni1—N3	87.79 (11)	C7—C8—H8	119.2
O7—Ni1—N3	87.07 (11)	C19—C18—C17	119.0 (4)
O2—Ni1—N3	91.78 (11)	C19—C18—H18	120.5
O8—Ni1—N1	86.35 (12)	C17—C18—H18	120.5
O4—Ni1—N1	92.24 (11)	C23—C24—C25	119.4 (4)
O7—Ni1—N1	93.75 (12)	C23—C24—H24	120.3

O2—Ni1—N1	88.19 (11)	C25—C24—H24	120.3
N3—Ni1—N1	179.18 (12)	C3—C2—C1	113.8 (3)
C1—O2—Ni1	129.1 (2)	C3—C2—H2A	108.8
C9—O4—Ni1	129.3 (2)	C1—C2—H2A	108.8
Ni1—O7—H71	117 (3)	C3—C2—H2B	108.8
Ni1—O7—H72	109 (4)	C1—C2—H2B	108.8
H71—O7—H72	113 (5)	H2A—C2—H2B	107.7
Ni1—O8—H82	128 (4)	C18—C19—C20	118.3 (3)
Ni1—O8—H81	114 (4)	C18—C19—C22	122.2 (4)
H82—O8—H81	109 (5)	C20—C19—C22	119.4 (4)
C23—N3—C27	117.9 (3)	C25—C26—C27	119.0 (4)
C23—N3—Ni1	123.3 (2)	C25—C26—H26	120.5
C27—N3—Ni1	118.8 (2)	C27—C26—H26	120.5
C17—N1—C21	118.0 (3)	C3—C4—C5	120.8 (5)
C17—N1—Ni1	118.1 (3)	C3—C4—H4	119.6
C21—N1—Ni1	123.9 (2)	C5—C4—H4	119.6
O2—C1—O1	125.2 (3)	C22—N2—H2C	120.0
O2—C1—C2	117.2 (3)	C22—N2—H2D	120.0
O1—C1—C2	117.6 (3)	H2C—N2—H2D	120.0
O3—C9—O4	124.7 (3)	C11—C12—C13	121.0 (5)
O3—C9—C10	117.3 (3)	C11—C12—H12	119.5
O4—C9—C10	118.0 (3)	C13—C12—H12	119.5
C12—C11—C16	117.9(4)	O6—C28—N4	123.1 (4)
C12—C11—C10	120.9 (4)	O6—C28—C25	121.0 (4)
C16—C11—C10	121.1 (4)	N4—C28—C25	115.9 (5)
C4—C3—C8	118.1 (4)	C14—C15—C16	119.2 (5)
C4—C3—C2	120.6 (4)	C14—C15—H15	120.4
C8—C3—C2	121.3 (4)	C16—C15—H15	120.4
N1—C21—C20	122.5 (4)	C13—C14—C15	121.5 (5)
N1—C21—H21	118.7	C13—C14—Cl2	120.1 (4)
C20—C21—H21	118.7	C15—C14—Cl2	118.4 (5)
N1—C17—C18	122.8 (4)	C28—N4—H4A	120.0

N1—C17—H17	118.6	C28—N4—H4B	120.0
C18—C17—H17	118.6	H4A—N4—H4B	120.0
N3—C27—C26	122.8 (4)	C14—C13—C12	119.0 (5)
N3—C27—H27	118.6	C14—C13—H13	120.5
C26—C27—H27	118.6	C12—C13—H13	120.5
N3—C23—C24	122.7 (3)	O5—C22—N2	123.5 (4)
N3—C23—H23	118.6	O5—C22—C19	120.3 (5)
C24—C23—H23	118.6	N2—C22—C19	116.2 (5)
C15—C16—C11	121.3 (4)	C6—C7—C8	118.9 (5)
C15—C16—H16	119.3	C6—C7—H7	120.6
C11—C16—H16	119.3	C8—C7—H7	120.6
C26—C25—C24	118.1 (3)	C5—C6—C7	121.7 (5)
C26—C25—C28	123.1 (4)	C5—C6—C11	119.2 (6)
C24—C25—C28	118.8 (4)	C7—C6—C11	119.2 (6)
C11—C10—C9	115.5 (3)	C6—C5—C4	118.9 (5)
C11—C10—H10A	108.4	C6—C5—H5	120.5
C9—C10—H10A	108.4	C4—C5—H5	120.5
C11—C10—H10B	108.4		
O8—Ni1—O2—C1	-168.1 (3)	C16—C11—C10—C9	-68.8 (6)
O4—Ni1—O2—C1	64 (12)	O3—C9—C10—C11	-135.9 (4)
O7—Ni1—O2—C1	12.0 (3)	O4—C9—C10—C11	46.2 (5)
N3—Ni1—O2—C1	99.1 (3)	N1—C21—C20—C19	-1.0 (6)
N1—Ni1—O2—C1	-81.7 (3)	C4—C3—C8—C7	1.1 (7)
O8—Ni1—O4—C9	-7.9 (3)	C2—C3—C8—C7	-179.4 (4)
O7—Ni1—O4—C9	172.0 (3)	N1—C17—C18—C19	-1.7 (7)
O2—Ni1—O4—C9	120 (12)	N3—C23—C24—C25	-0.5 (7)
N3—Ni1—O4—C9	84.8 (3)	C26—C25—C24—C23	-1.2 (7)
N1—Ni1—O4—C9	-94.4 (3)	C28—C25—C24—C23	178.3 (4)
O8—Ni1—N3—C23	-42.6 (3)	C4—C3—C2—C1	-108.9 (5)
O4—Ni1—N3—C23	-135.6 (3)	C8—C3—C2—C1	71.6 (5)
O7—Ni1—N3—C23	138.0 (3)	O2—C1—C2—C3	-54.0 (5)
O2—Ni1—N3—C23	44.7 (3)	O1—C1—C2—C3	127.6 (4)

N1—Ni1—N3—C23	-43 (8)	C17—C18—C19—C20	-0.6 (7)
O8—Ni1—N3—C27	137.4 (3)	C17—C18—C19—C22	-178.3 (4)
O4—Ni1—N3—C27	44.4 (3)	C21—C20—C19—C18	1.9 (7)
O7—Ni1—N3—C27	-42.1 (3)	C21—C20—C19—C22	179.6 (4)
O2—Ni1—N3—C27	-135.3 (3)	C24—C25—C26—C27	0.9 (7)
N1—Ni1—N3—C27	137 (8)	C28—C25—C26—C27	-178.6 (5)
O8—Ni1—N1—C17	41.3 (3)	N3—C27—C26—C25	1.1 (7)
O4—Ni1—N1—C17	134.3 (3)	C8—C3—C4—C5	-0.9 (8)
O7—Ni1—N1—C17	-139.2 (3)	C2—C3—C4—C5	179.6 (5)
O2—Ni1—N1—C17	-46.0 (3)	C16—C11—C12—C13	-1.3 (7)
N3—Ni1—N1—C17	42 (8)	C10—C11—C12—C13	177.8 (5)
O8—Ni1—N1—C21	-138.4 (3)	C26—C25—C28—O6	-164.3 (5)
O4—Ni1—N1—C21	-45.5 (3)	C24—C25—C28—O6	16.2 (8)
O7—Ni1—N1—C21	41.0 (3)	C26—C25—C28—N4	16.1 (8)
O2—Ni1—N1—C21	134.2 (3)	C24—C25—C28—N4	-163.4 (6)
N3—Ni1—N1—C21	-138 (8)	C11—C16—C15—C14	0.5 (8)
Ni1—O2—C1—O1	-13.7 (5)	C16—C15—C14—C13	-2.1 (9)
Ni1—O2—C1—C2	168.0 (2)	C16—C15—C14—C12	176.0 (4)
Ni1—O4—C9—O3	14.4 (5)	C15—C14—C13—C12	2.0 (10)
Ni1—O4—C9—C10	-167.9 (3)	C12—C14—C13—C12	-176.1 (5)
C17—N1—C21—C20	-1.2 (6)	C11—C12—C13—C14	-0.3 (9)
Ni1—N1—C21—C20	178.6 (3)	C18—C19—C22—O5	150.4 (6)
C21—N1—C17—C18	2.5 (6)	C20—C19—C22—O5	-27.3 (8)
Ni1—N1—C17—C18	-177.2 (3)	C18—C19—C22—N2	-29.4 (8)
C23—N3—C27—C26	-2.8 (6)	C20—C19—C22—N2	152.9 (5)
Ni1—N3—C27—C26	177.2 (4)	C3—C8—C7—C6	-0.7 (9)
C27—N3—C23—C24	2.5 (6)	C8—C7—C6—C5	0.1 (11)
Ni1—N3—C23—C24	-177.6 (3)	C8—C7—C6—C11	179.6 (5)
C12—C11—C16—C15	1.2 (7)	C7—C6—C5—C4	0.0 (12)
C10—C11—C16—C15	-177.9 (4)	C11—C6—C5—C4	-179.5(5)
C12—C11—C10—C9	112.1 (5)	C3—C4—C5—C6	0.4 (10)

**Ek Tablo 6.** [C<sub>28</sub>H<sub>24</sub>C<sub>12</sub>N<sub>4</sub>O<sub>6</sub>Zn] Kompleksinin Atom Koordinatları ve İzotropik Yer Değiştirme Parametreleri

Zn1	0.0239 (4)	0.0462 (4)	0.0268 (4) -0.0057 (4)	0.0000 (3) 0.0063 (4)
Zn2	0.0235 (4)	0.0433 (4)	0.0340 (5) -0.0069 (4)	-0.0048 (3) 0.0095 (4)
C11	0.0750(18)	0.125 (3)	0.130 (3) 0.0454(18)	-0.0124 (19) -0.019 (2)
C12	0.087 (2)	0.135 (3)	0.165 (4) 0.045 (2)	0.036 (2) -0.014 (3)
C13	0.0738 (17)	0.094 (2)	0.132 (3) -0.0257 (15)	0.0130(18)0.0253 (19)
C14	0.0590 (15)	0.122 (2)	0.124 (3) 0.0227 (15)	-0.0073(16)-0.052 (2)
O1	0.040 (3)	0.062 (3)	0.032 (3) 0.004 (2)	0.005 (2) 0.005 (3)
O2	0.053 (3)	0.048 (3)	0.033 (3) 0.010 (3)	0.005 (2) 0.001 (2)
O3	0.038 (3)	0.048 (3)	0.046 (3) 0.003 (2)	0.005 (3) 0.014 (3)
O4	0.040 (3)	0.049 (3)	0.037 (3) 0.008 (2)	0.000 (2) 0.001 (2)
O5	0.042 (3)	0.052 (3)	0.053 (3) -0.004 (2)	0.003 (2) 0.023 (3)
O6	0.052 (3)	0.080 (4)	0.032 (3) -0.021 (3)	0.005 (2) -0.013 (3)
O7	0.040 (3)	0.093 (5)	0.047 (4) -0.008 (3)	0.011 (3) 0.009 (3)
O8	0.037 (3)	0.047 (3)	0.032 (3) 0.004 (2)	-0.002 (2) 0.005 (2)
O9	0.042 (3)	0.054 (3)	0.049 (4) 0.001 (2)	-0.001 (3) 0.012 (3)
O10	0.050 (3)	0.056 (3)	0.046 (3) 0.014 (3)	0.003 (3) 0.006 (3)
O11	0.038 (3)	0.134 (6)	0.029 (3) -0.009 (3)	0.004 (2) -0.018 (3)
O12	0.046 (3)	0.053 (3)	0.056 (3) -0.006 (2)	0.001 (3) 0.027 (3)
N1	0.024 (3)	0.042 (3)	0.029 (3) -0.008 (2)	0.009 (2) 0.004 (2)
N2	0.030 (3)	0.067 (5)	0.063 (5) -0.013 (3)	0.001 (3) 0.027 (4)
N3	0.024 (3)	0.040 (3)	0.031 (3) 0.005 (2)	0.001 (2) -0.002 (3)
N4	0.034 (3)	0.080 (5)	0.037 (4) -0.009 (3)	-0.004 (3) -0.010 (3)
N5	0.021 (3)	0.046 (3)	0.032 (3) -0.001 (2)	-0.004 (2) 0.004 (3)
N6	0.030 (3)	0.086 (5)	0.028 (3) -0.008 (3)	-0.002 (3) -0.007 (3)
N7	0.026 (3)	0.043 (3)	0.036 (3) -0.007 (3)	-0.005 (2) 0.010 (3)
N8	0.034 (3)	0.056 (4)	0.059 (5) -0.015 (3)	-0.003 (3) 0.030 (3)
C1	0.040 (4)	0.042 (4)	0.036 (4) 0.002 (3)	0.006 (3) -0.001 (3)
C2	0.076 (6)	0.071 (6)	0.046 (5) 0.033 (5)	-0.008 (5) -0.022 (5)
C3	0.070 (6)	0.041 (4)	0.041 (5) 0.019 (4)	0.003 (4) -0.005 (4)

---

C4	0.091 (7)	0.046 (5)	0.059 (6) 0.006 (5)	0.022 (5) 0.007 (4)
C5	0.062 (6)	0.063 (6)	0.093 (8) -0.001 (5)	0.005 (6) -0.008 (6)
C6	0.062 (6)	0.057 (6)	0.069 (6) 0.014 (4)	0.000 (5) -0.019 (5)
C7	0.077 (7)	0.056 (6)	0.081 (7) 0.019 (5)	0.019 (6) 0.022 (5)
C8	0.061 (6)	0.052 (5)	0.079 (7) -0.002 (4)	0.015 (5) 0.004 (5)
C9	0.028 (3)	0.041 (4)	0.031 (4) 0.004 (3)	0.003 (3) 0.007 (3)
C10	0.063 (5)	0.052 (5)	0.056 (5) 0.014 (4)	0.006 (4) 0.016 (4)
C11	0.057 (5)	0.041 (4)	0.052 (5) 0.013 (4)	0.003 (4) 0.011 (4)
C12	0.076 (6)	0.048 (5)	0.045 (5) 0.013 (4)	-0.004 (4) -0.001 (4)
C13	0.052 (5)	0.061 (6)	0.098 (8) 0.011 (4)	-0.015 (5) -0.011 (6)
C14	0.073 (7)	0.063 (6)	0.075 (7) 0.026 (5)	0.004 (6) -0.005 (5)
C15	0.086 (7)	0.058 (6)	0.070 (7) 0.019 (5)	0.003 (6) -0.020 (5)
C16	0.067 (5)	0.054 (5)	0.071 (6) 0.009 (5)	-0.010 (5) -0.007 (5)
C17	0.021 (3)	0.051 (4)	0.043 (4) 0.004 (3)	-0.002 (3) 0.014 (4)
C18	0.037 (4)	0.043 (4)	0.042 (4) 0.000 (3)	0.002 (3) 0.019 (3)
C19	0.030 (3)	0.033 (3)	0.026 (3) -0.003 (3)	0.003 (3) 0.002 (3)
C20	0.019 (3)	0.046 (4)	0.045 (4) -0.007 (3)	-0.001 (3) 0.017 (3)
C21	0.026 (4)	0.041 (4)	0.045 (4) 0.004 (3)	0.000 (3) 0.024 (3)
C22	0.041 (4)	0.033 (4)	0.044 (4) -0.004 (3)	0.002 (3) 0.003 (3)
C23	0.021 (3)	0.072 (5)	0.030 (4) -0.003 (3)	0.014 (3) -0.002 (4)
C24	0.039 (4)	0.064 (5)	0.034 (4) -0.005 (4)	0.006 (3) -0.012 (4)
C25	0.027 (3)	0.032 (3)	0.027 (3) -0.002 (3)	0.000 (3) -0.001 (3)
C26	0.031 (3)	0.047 (4)	0.026 (4) -0.003 (3)	0.006 (3) -0.001 (3)
C27	0.030 (4)	0.060 (5)	0.024 (4) -0.009 (3)	-0.001 (3) -0.005 (3)
C28	0.034 (4)	0.042 (4)	0.031 (4) -0.005 (3)	0.000 (3) 0.001 (3)
C29	0.026 (4)	0.052 (5)	0.044 (5) -0.011 (3)	-0.001 (3) 0.008 (4)
C30	0.041 (4)	0.046 (5)	0.077 (7) 0.008 (4)	0.008 (4) -0.006 (4)
C31	0.044 (4)	0.030 (4)	0.056 (5) 0.003 (3)	-0.004 (4) -0.007 (3)
C32	0.057 (5)	0.051 (5)	0.059 (6) 0.016 (4)	-0.014 (4) -0.008 (4)
C33	0.070 (6)	0.047 (5)	0.066 (6) -0.002 (4)	0.002 (5) 0.008 (4)
C34	0.066 (6)	0.048 (5)	0.066 (6) -0.014 (4)	0.002 (5) 0.002 (4)
C35	0.046 (5)	0.061 (6)	0.079 (7) -0.005 (4)	-0.015 (5) 0.001 (5)

---

C36	0.060 (5)	0.053 (5)	0.062 (5) -0.011 (5)	-0.008 (4) 0.011 (5)
C37	0.032 (4)	0.050 (5)	0.041 (5) 0.000 (3)	-0.006 (3) -0.005 (4)
C38	0.064 (6)	0.085 (7)	0.044 (5) 0.022 (5)	0.001 (4) -0.009 (5)
C39	0.057 (5)	0.044 (4)	0.049 (5) 0.012 (4)	0.001 (4) -0.014 (4)
C40	0.047 (5)	0.051 (5)	0.068 (6) -0.003 (4)	0.003 (4) -0.014 (4)
C41	0.071 (6)	0.052 (5)	0.067 (6) 0.012 (5)	0.003 (5) -0.019 (5)
C42	0.054 (6)	0.072 (7)	0.085 (8) 0.008 (5)	0.000 (5) -0.029 (6)
C43	0.061 (6)	0.074 (7)	0.080 (7) -0.010 (5)	0.012 (5) -0.010 (6)
C44	0.081 (7)	0.059 (6)	0.068 (7) 0.003 (5)	0.022 (5) -0.005 (5)
C45	0.023 (3)	0.066 (5)	0.028 (4) -0.002 (3)	0.001 (3) 0.003 (3)
C46	0.034 (4)	0.063 (5)	0.026 (4) -0.002 (3)	0.003 (3) -0.004 (3)
C47	0.025 (3)	0.038 (4)	0.027 (3) 0.000 (3)	0.001 (3) 0.001 (3)
C48	0.025 (3)	0.062 (5)	0.035 (4) -0.008 (3)	0.004 (3) -0.003 (4)
C49	0.029 (4)	0.064 (5)	0.015 (3) -0.015 (3)	0.003 (3) 0.006 (3)
C50	0.027 (3)	0.053 (4)	0.033 (4) 0.002 (3)	0.009 (3) -0.010 (3)
C51	0.021 (3)	0.068 (5)	0.033 (4) 0.004 (3)	0.005 (3) 0.008 (4)
C52	0.033 (4)	0.047 (4)	0.046 (5) -0.003 (3)	0.002 (3) 0.019 (4)
C53	0.028 (3)	0.041 (4)	0.031 (4) -0.002 (3)	0.006 (3) 0.007 (3)
C54	0.030 (4)	0.040 (4)	0.051 (5) 0.002 (3)	0.001 (3) 0.013 (4)
C55	0.030 (4)	0.035 (4)	0.063 (5) -0.003 (3)	-0.006 (4) 0.017 (4)
C56	0.037 (4)	0.040 (4)	0.044 (4) -0.005 (3)	0.009 (3) 0.012 (3)

**Ek Tablo 7.** [C<sub>28</sub>H<sub>24</sub>C<sub>12</sub>N<sub>4</sub>O<sub>6</sub>Zn] Kompleksinin Geometrik Parametreleri

Zn1—O2	1.949 (5)	C14—C15	1.358 (13)
Zn1—O4	1.984 (5)	C15—H15	0.9300
Zn1—N1	2.046 (5)	C16—C15	1.387 (14)
Zn1—N3	2.026 (5)	C16—H16	0.9300
Zn2—O8	1.956 (5)	C17—C18	1.371 (9)
Zn2—O10	1.943 (6)	C17—H17	0.9300
Zn2—N5	2.045 (5)	C18—H18	0.9300
Zn2—N7	2.011 (6)	C19—C18	1.371 (9)



C11—C6	1.751 (9)	C19—C20	1.382 (9)
C12—C14	1.743 (11)	C20—H20	0.9300
C13—C34	1.739 (9)	C21—C20	1.374 (9)
C14—C42	1.753 (10)	C21—H21	0.9300
O1—C1	1.217 (9)	C22—C19	1.518 (9)
O2—C1	1.289 (9)	C23—C24	1.386 (10)
O3—C9	1.211 (8)	C23—H23	0.9300
O4—C9	1.273 (8)	C24—H24	0.9300
O5—C22	1.232 (8)	C25—C24	1.376 (10)
O6—C28	1.217 (8)	C25—C26	1.361 (9)
O7—C29	1.204 (9)	C25—C28	1.512 (8)
O8—C29	1.285 (9)	C26—H26	0.9300
O9—C37	1.236 (9)	C27—C26	1.378 (9)
O10—C37	1.270 (9)	C27—H27	0.9300
O11—C50	1.218 (8)	C29—C30	1.507 (11)
O12—C56	1.220 (8)	C30—H30A	0.9700
N1—C17	1.323 (9)	C30—H30B	0.9700
N1—C21	1.352 (9)	C31—C30	1.491 (11)
N2—C22	1.320 (9)	C31—C32	1.379 (12)
N2—H2C	0.8600	C31—C36	1.408 (11)
N2—H2D	0.8600	C32—C33	1.368 (12)
N3—C23	1.309 (8)	C32—H32	0.9300
N3—C27	1.340 (9)	C33—H33	0.9300
N4—C28	1.322 (9)	C34—C33	1.380 (12)
N4—H4C	0.8600	C34—C35	1.362 (12)
N4—H4D	0.8600	C35—H35	0.9300
N5—C45	1.341 (9)	C36—C35	1.387 (12)
N5—C49	1.321 (8)	C36—H36	0.9300
N6—C50	1.328 (9)	C37—C38	1.530 (11)
N6—H6C	0.8600	C38—C39	1.501 (11)
N6—H6D	0.8600	C38—H38A	0.9700
N7—C51	1.340 (9)	C38—H38B	0.9700

N7—C55	1.334 (9)	C39—C44	1.389 (13)
N8—C56	1.334 (9)	C40—C39	1.386 (11)
N8—H8C	0.8600	C40—H40	0.9300
N8—H8D	0.8600	C41—C40	1.390 (12)
C1—C2	1.518 (11)	C41—C42	1.359 (14)
C2—H2A	0.9700	C41—H41	0.9300
C2—H2B	0.9700	C42—C43	1.356 (14)
C3—C2	1.513 (11)	C43—H43	0.9300
C3—C4	1.375 (12)	C44—C43	1.361 (13)
C3—C8	1.362 (12)	C44—H44	0.9300
C4—C5	1.385 (13)	C45—C46	1.367 (9)
C4—H4	0.9300	C45—H45	0.9300
C5—H5	0.9300	C46—H46	0.9300
C6—C5	1.355 (14)	C47—C46	1.375 (9)
C6—C7	1.363 (13)	C47—C48	1.380 (10)
C7—H7	0.9300	C47—C50	1.501 (9)
C8—C7	1.381 (12)	C48—H48	0.9300
C8—H8 0.	9300	C49—C48	1.368 (9)
C9—C10	1.516 (10)	C49—H49	0.9300
C10—H10A	0.9700	C51—H51	0.9300
C10—H10B	0.9700	C52—C51	1.375 (10)
C11—C10	1.501 (11)	C52—H52	0.9300
C11—C16	1.410 (12)	C53—C52	1.384 (9)
C12—C11	1.375 (11)	C53—C54	1.383 (9)
C12—C13	1.381 (13)	C53—C56	1.506 (9)
C12—H12	0.9300	C54—C55	1.372 (10)
C13—C14	1.363 (14)	C54—H54	0.9300
C13—H13	0.9300	C55—H55	0.9300
O2—Zn1—O4	95.0 (2)	O5—C22—C19	19.4 (6)
O2—Zn1—N1	110.0 (2)	N2—C22—C19	116.4 (6)
O2—Zn1—N3	114.6 (2)	N3—C23—C24	123.4 (6)
O4—Zn1—N1	120.5 (2)	N3—C23—H23	118.3

O4—Zn1—N3	104.2 (2)	C24—C23—H23	118.3
N3—Zn1—N1	111.7 (2)	C23—C24—H24	120.4
O8—Zn2—N5	102.8 (2)	C25—C24—C23	119.2 (7)
O8—Zn2—N7	115.4 (2)	C25—C24—H24	120.4
O10—Zn2—O8	96.8 (2)	C24—C25—C28	118.9 (6)
O10—Zn2—N5	114.3 (2)	C26—C25—C24	116.7 (6)
O10—Zn2—N7	114.1 (3)	C26—C25—C28	124.3 (6)
N7—Zn2—N5	112.0 (2)	C25—C26—C27	121.6 (6)
C1—O2—Zn1	112.1 (5)	C25—C26—H26	119.2
C9—O4—Zn1	109.8 (4)	C27—C26—H26	119.2
C29—O8—Zn2	114.3 (5)	N3—C27—C26	120.9 (7)
C37—O10—Zn2	112.1 (5)	N3—C27—H27	119.5
C17—N1—Zn1	124.3 (5)	C26—C27—H27	119.5
C17—N1—C21	118.3 (6)	O6—C28—N4	123.3 (6)
C21—N1—Zn1	117.2 (5)	O6—C28—C25	119.2 (6)
C22—N2—H2C	120.0	N4—C28—C25	117.5 (6)
C22—N2—H2D	120.0	O7—C29—O8	122.3 (8)
H2C—N2—H2D	120.0	O7—C29—C30	122.4 (8)
C23—N3—Zn1	124.6 (5)	O8—C29—C30	115.2 (7)
C23—N3—C27	118.0 (6)	C29—C30—H30A	109.2
C27—N3—Zn1	117.3 (5)	C29—C30—H30B	109.2
C28—N4—H4C	120.0	C31—C30—C29	111.8 (6)
C28—N4—H4D	120.0	C31—C30—H30A	109.2
H4C—N4—H4D	120.0	C31—C30—H30B	109.2
C45—N5—Zn2	124.9 (4)	H30A—C30—H30B	107.9
C49—N5—Zn2	117.2 (5)	C32—C31—C30	123.6 (7)
C49—N5—C45	118.0 (6)	C32—C31—C36	116.8 (8)
C50—N6—H6C	120.0	C36—C31—C30	119.5 (8)
C50—N6—H6D	120.0	C31—C32—H32	118.8
H6C—N6—H6D	120.0	C33—C32—C31	122.4 (8)
C51—N7—Zn2	124.1 (5)	C33—C32—H32	118.8
C55—N7—Zn2	118.7 (5)	C32—C33—C34	119.2 (8)

C55—N7—C51	117.1 (6)	C32—C33—H33	120.4
C56—N8—H8C	120.0	C34—C33—H33	120.4
C56—N8—H8D	120.0	C33—C34—Cl3	119.8 (7)
H8C—N8—H8D	120.0	C35—C34—Cl3	119.1 (7)
O1—C1—O2	122.9 (7)	C35—C34—C33	121.1 (8)
O1—C1—C2	122.6 (7)	C34—C35—C36	119.1 (8)
O2—C1—C2	114.3 (7)	C34—C35—H35	120.4
C1—C2—H2A	108.9	C36—C35—H35	120.4
C1—C2—H2B	108.9	C31—C36—H36	119.3
C3—C2—C1	113.2 (7)	C35—C36—C31	121.3 (9)
C3—C2—H2A	108.9	C35—C36—H36	119.3
C3—C2—H2B	108.9	O9—C37—O10	122.8 (8)
H2A—C2—H2B	107.7	O9—C37—C38	122.6 (7)
C4—C3—C2	121.0 (8)	O10—C37—C38	114.7 (7)
C8—C3—C2	121.4 (9)	C37—C38—H38A	108.7
C8—C3—C4	117.6 (8)	C37—C38—H38B	108.7
C3—C4—C5	122.7 (9)	C39—C38—C37	114.2 (7)
C3—C4—H4	118.7	C39—C38—H38A	108.7
C5—C4—H4	118.7	C39—C38—H38B	108.7
C4—C5—H5	121.3	H38A—C38—H38B	107.6
C6—C5—C4	117.4 (10)	C40—C39—C38	121.7 (8)
C6—C5—H5	121.3	C40—C39—C44	117.3 (8)
C5—C6—Cl1	120.0 (8)	C44—C39—C38	121.0 (8)
C5—C6—C7	121.9 (9)	C39—C40—C41	120.2 (9)
C7—C6—Cl1	118.1 (8)	C39—C40—H40	119.9
C6—C7—C8	119.1 (9)	C41—C40—H40	119.9
C6—C7—H7	120.4	C40—C41—H41	120.3
C8—C7—H7	120.4	C42—C41—C40	119.4 (9)
C3—C8—C7	121.1 (9)	C42—C41—H41	120.3
C3—C8—H8	119.4	C41—C42—Cl4	118.7 (9)
C7—C8—H8	119.4	C43—C42—Cl4	119.2 (8)
O3—C9—O4	121.6 (6)	C43—C42—C41	122.0 (9)

---

O3—C9—C10	122.6 (7)	C42—C43—C44	118.3 (9)
O4—C9—C10	115.8 (7)	C42—C43—H43	120.9
C9—C10—H10A	108.9	C44—C43—H43	120.9
C9—C10—H10B	108.9	C39—C44—H44	118.6
C11—C10—C9	113.6 (7)	C43—C44—C39	122.8 (9)
C11—C10—H10A	108.9	C43—C44—H44	118.6
C11—C10—H10B	108.9	N5—C45—C46	121.4 (6)
H10A—C10—H10B	107.7	N5—C45—H45	119.3
C12—C11—C10	120.3 (8)	C46—C45—H45	119.3
C12—C11—C16	118.4 (8)	C45—C46—C47	120.9 (7)
C16—C11—C10	121.2 (8)	C45—C46—H46	119.5
C11—C12—C13	121.0 (9)	C47—C46—H46	119.5
C11—C12—H12	119.5	C46—C47—C48	116.8 (6)
C13—C12—H12	119.5	C46—C47—C50	119.8 (6)
C12—C13—H13	120.1	C48—C47—C50	123.4 (6)
C14—C13—C12	119.7 (9)	C47—C48—H48	120.3
C14—C13—H13	120.1	C49—C48—C47	119.5 (6)
C13—C14—C12	119.9 (8)	C49—C48—H48	120.3
C15—C14—C12	119.0 (8)	N5—C49—C48	123.2 (6)
C15—C14—C13	121.1 (9)	N5—C49—H49	118.4
C14—C15—C16	120.0 (9)	C48—C49—H49	118.4
C14—C15—H15	120.0	O11—C50—N6	123.4 (6)
C16—C15—H15	120.0	O11—C50—C47	119.4 (6)
C11—C16—H16	120.1	N6—C50—C47	117.1 (6)
C15—C16—C11	119.7 (9)	N7—C51—C52	123.0 (6)
C15—C16—H16	120.1	N7—C51—H51	118.5
N1—C17—C18	122.8 (6)	C52—C51—H51	118.5
N1—C17—H17	118.6	C51—C52—C53	119.6 (6)
C18—C17—H17	118.6	C51—C52—H52	120.2
C17—C18—H18	120.4	C53—C52—H52	120.2
C19—C18—C17	119.2 (6)	C52—C53—C56	119.6 (6)
C19—C18—H18	120.4	C54—C53—C52	117.2 (6)

---

C18—C19—C20	118.7 (6)	C54—C53—C56	123.2 (6)
C18—C19—C22	120.5 (6)	C53—C54—H54	120.1
C20—C19—C22	120.8 (6)	C55—C54—C53	119.8 (6)
C19—C20—H20	120.5	C55—C54—H54	120.1
C21—C20—C19	119.0 (6)	N7—C55—C54	123.2 (7)
C21—C20—H20	120.5	N7—C55—H55	118.4
N1—C21—C20	121.8 (6)	C54—C55—H55	118.4
N1—C21—H21	119.1	O12—C56—N8	124.6 (7)
C20—C21—H21	119.1	O12—C56—C53	119.0 (6)
O5—C22—N2	124.1 (7)	N8—C56—C53	116.3 (6)
O4—Zn1—O2—C1	164.8 (5)	C10—C11—C16—C15	-174.6 (8)
N1—Zn1—O2—C1	-70.1 (5)	C12—C11—C16—C15	0.7 (13)
N3—Zn1—O2—C1	56.7 (6)	C13—C12—C11—C10	174.1 (8)
O2—Zn1—O4—C9	177.2 (5)	C13—C12—C11—C16	-1.3 (13)
N1—Zn1—O4—C9	60.5 (5)	C11—C12—C13—C14	-0.5 (14)
N3—Zn1—O4—C9	-65.8 (5)	C12—C13—C14—C12	-176.0 (8)
O2—Zn1—N1—C17	74.3 (6)	C12—C13—C14—C15	3.0 (16)
O2—Zn1—N1—C21	-100.4 (6)	C12—C14—C15—C16	175.4 (8)
O4—Zn1—N1—C17	-176.9 (5)	C13—C14—C15—C16	-3.6 (16)
O4—Zn1—N1—C21	8.5 (6)	C11—C16—C15—C14	1.7 (15)
N3—Zn1—N1—C17	-54.2 (6)	N1—C17—C18—C19	0.2 (12)
N3—Zn1—N1—C21	131.2 (5)	C20—C19—C18—C17	0.6 (11)
O2—Zn1—N3—C23	-156.0 (6)	C22—C19—C18—C17	-178.3 (7)
O2—Zn1—N3—C27	21.0 (6)	C18—C19—C20—C21	0.5 (11)
O4—Zn1—N3—C23	101.6 (6)	C22—C19—C20—C21	179.4 (7)
O4—Zn1—N3—C27	-81.4 (5)	N1—C21—C20—C19	-2.4 (12)
N1—Zn1—N3—C23	-30.1 (6)	O5—C22—C19—C18	14.8 (11)
N1—Zn1—N3—C27	147.0 (5)	O5—C22—C19—C20	-164.1 (7)
O10—Zn2—O8—C29	172.2 (5)	N2—C22—C19—C18	-166.5 (7)
N5—Zn2—O8—C29	55.3 (5)	N2—C22—C19—C20	14.6 (10)
N7—Zn2—O8—C29	-67.0 (5)	N3—C23—C24—C25	0.7 (12)
O8—Zn2—O10—C37	-167.8 (5)	C26—C25—C24—C23	2.0 (11)

N5—Zn2—O10—C37	-60.4 (6)	C28—C25—C24—C23	-173.9 (7)
N7—Zn2—O10—C37	70.4 (5)	C24—C25—C26—C27	-2.6 (11)
O8—Zn2—N5—C45	-96.1 (6)	C28—C25—C26—C27	173.1 (7)
O8—Zn2—N5—C49	83.9 (6)	C24—C25—C28—O6	4.8 (10)
O10—Zn2—N5—C45	160.2 (6)	C24—C25—C28—N4	-178.1 (7)
O10—Zn2—N5—C49	-19.8 (6)	C26—C25—C28—O6	-170.8 (7)
N7—Zn2—N5—C45	28.4 (7)	C26—C25—C28—N4	6.3 (10)
N7—Zn2—N5—C49	-151.6 (5)	N3—C27—C26—C25	0.4 (11)
O8—Zn2—N7—C51	174.7 (5)	O7—C29—C30—C31	-122.6 (8)
O8—Zn2—N7—C55	-7.1 (7)	O8—C29—C30—C31	54.6 (9)
O10—Zn2—N7—C51	-74.3 (6)	C32—C31—C30—C29	-129.2 (8)
O10—Zn2—N7—C55	103.8 (6)	C36—C31—C30—C29	49.6 (10)
N5—Zn2—N7—C51	57.6 (6)	C30—C31—C32—C33	179.0 (8)
N5—Zn2—N7—C55	-124.2 (6)	C36—C31—C32—C33	0.2 (12)
Zn1—O2—C1—O1	2.0 (10)	C30—C31—C36—C35	-177.5 (8)
Zn1—O2—C1—C2	177.5 (6)	C32—C31—C36—C35	1.3 (12)
Zn1—O4—C9—O3	-7.0 (8)	C31—C32—C33—C34	-0.9 (13)
Zn1—O4—C9—C10	172.1 (5)	C13—C34—C33—C32	-177.0 (7)
Zn2—O8—C29—O7	18.3 (9)	C35—C34—C33—C32	0.1 (14)
Zn2—O8—C29—C30	-159.0 (5)	C13—C34—C35—C36	178.5 (7)
Zn2—O10—C37—O9	-0.3 (9)	C33—C34—C35—C36	1.4 (14)
Zn2—O10—C37—C38	-179.3 (6)	C31—C36—C35—C34	-2.1 (14)
Zn1—N1—C17—C18	-176.6 (6)	O9—C37—C38—C39	30.0 (12)
C21—N1—C17—C18	-2.0 (11)	O10—C37—C38—C39	-151.0 (8)
Zn1—N1—C21—C20	178.2 (6)	C37—C38—C39—C40	-74.4 (11)
C17—N1—C21—C20	3.2 (11)	C37—C38—C39—C44	104.1 (10)
Zn1—N3—C23—C24	174.1 (6)	C38—C39—C44—C43	-178.0 (9)
C27—N3—C23—C24	-2.9 (11)	C40—C39—C44—C43	0.5 (14)
Zn1—N3—C27—C26	-174.8 (5)	C41—C40—C39—C38	178.8 (8)
C23—N3—C27—C26	2.4 (11)	C41—C40—C39—C44	0.3 (13)
Zn2—N5—C45—C46	-175.1 (6)	C42—C41—C40—C39	-0.8 (14)
C49—N5—C45—C46	4.8 (11)	C40—C41—C42—C14	-176.9 (7)

Zn2—N5—C49—C48	176.1 (6)	C40—C41—C42—C43	0.6 (16)
C45—N5—C49—C48	-3.8 (11)	C14—C42—C43—C44	177.7 (8)
Zn2—N7—C51—C52	178.5 (6)	C41—C42—C43—C44	0.1 (16)
C55—N7—C51—C52	0.3 (11)	C39—C44—C43—C42	-0.7 (16)
Zn2—N7—C55—C54	-178.0 (7)	N5—C45—C46—C47	-1.6 (12)
C51—N7—C55—C54	0.3 (12)	C48—C47—C46—C45	-2.6 (11)
O1—C1—C2—C3	-30.1 (13)	C50—C47—C46—C45	176.9 (7)
O2—C1—C2—C3	154.3 (8)	C46—C47—C48—C49	3.6 (11)
C4—C3—C2—C1	-96.6 (10)	C50—C47—C48—C49	-175.9 (7)
C8—C3—C2—C1	84.4 (11)	C46—C47—C50—O11	4.3 (11)
C2—C3—C4—C5	-180.0 (9)	C46—C47—C50—N6	-172.7 (8)
C8—C3—C4—C5	-0.9 (14)	C48—C47—C50—O11	-176.3 (8)
C2—C3—C8—C7	178.7 (9)	C48—C47—C50—N6	6.7 (11)
C4—C3—C8—C7	-0.4 (14)	N5—C49—C48—C47	-0.4 (12)
C3—C4—C5—C6	-0.5 (15)	C53—C52—C51—N7	-0.9 (12)
C11—C6—C5—C4	-179.0 (7)	C54—C53—C52—C51	0.7 (11)
C7—C6—C5—C4	3.2 (16)	C56—C53—C52—C51	-179.2 (7)
C11—C6—C7—C8	177.6 (8)	C52—C53—C54—C55	-0.1 (11)
C5—C6—C7—C8	-4.5 (16)	C56—C53—C54—C55	179.8 (7)
C3—C8—C7—C6	3.1 (16)	C52—C53—C56—O12	-20.9 (11)
O3—C9—C10—C11	-34.4 (11)	C52—C53—C56—N8	161.6 (7)
O4—C9—C10—C11	146.5 (7)	C54—C53—C56—O12	159.2 (8)
C12—C11—C10—C9	-98.6 (9)	C54—C53—C56—N8	-18.3 (11)
C16—C11—C10—C9	76.6 (10)	C53—C54—C55—N7	-0.4 (13)



## **ÖZGEÇMİŞ**

**Adı Soyadı:** Ali Murat Tonbul

**Doğum Yeri:** KARS

**Doğum Tarihi:** 18.03.1989

**Medeni Hali:** Bekar

**Yabancı Dili:** İngilizce

### **Eğitim Durumu (Kurum ve Yıl)**

**Lise:** Alpaslan Lisesi - 2008

**Lisans:** Kafkas Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü – 2014

**Yüksek Lisans:** Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalı  
Anorganik Kimya Anabilim Dalı – 2014-Halen