

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

**METAL 3-KLOROBENZOATLARIN NİKOTİNAMİD VE
DİETİLNİKOTİNAMİD KOMPLEKSLERİNİN SENTEZİ VE ÖZELLİKLERİ**

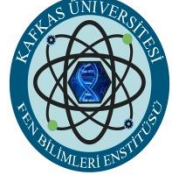
**Nihat BOZKURT
YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**DANIŞMAN
Prof. Dr. Hacali NECEFOĞLU**

**HAZİRAN - 2017
KARS**



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



**METAL 3-KLOROBENZOATLARIN NİKOTİNAMİD VE
DİETİLNİKOTİNAMİD KOMPLEKSLERİNİN SENTEZİ VE ÖZELLİKLERİ**

Nihat BOZKURT

YÜKSEK LİSANS TEZİ

DANIŞMAN

Prof. Dr. Hacali NECEFOĞLU

HAZİRAN - 2017

KARS

T.C. Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalı Yüksek Lisans Öğrencisi Nihat BOZKURT 'un, Prof. Dr. Hacali NECEFOĞLU danışmanlığında Yüksek Lisans Tezi olarak hazırladığı “**Metal 3-klorobenzoatların nikotinamid ve dietilnikotinamid komplekslerinin sentezi ve özellikleri**” adlı bu çalışma, yapılan tez savunması sınavı sonunda Jüri tarafından Lisansüstü Yönetmeliği uyarınca değerlendirilerek ...*ay. birliği*.....ile kabul edilmiştir.

19/06/2017

Adı ve Soyadı

İmza

Başkan : Prof.Dr.Hacali NECEFOĞLU



(Tez Danışmanı)

Üye : Yrd.Doç.Dr.F.Elif ÖZBEK



Üye : Yrd.Doç.Dr.Ümit YILDIKO



Bu tezin kabulü, Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu' nun/...../2017 gün ve/..... sayılı kararı ile onaylanmıştır.

Doç.Dr.Özlem GÜRSOY KOL

Enstitü Müdürü

ÖNSÖZ

Tez çalışmamda desteklerinden dolayı Prof. Dr. Tuncer HÖKELEK, Doç. Dr. Dursun Ali KÖSE, Yrd. Doç. Dr. Füreya Elif ÖZTÜRKKAN, Yrd. Doç. Dr. Mustafa SERTÇELİK ve Yrd. Doç. Dr. Murat BEYTUR'a, ayrıca en büyük emeği geçen, yoğun çalışmalarından bana zaman ayırarak derin bilgilerinden faydalanma fırsatı veren ve öğrencisi olmaktan her zaman gururduyduğum değerli bilim adamı Prof. Dr. Hacali NECEFOĞLU'na en içten teşekkürlerimi sunarım.



ÖZET

Bu çalışmada Zn(II), Cu(II), Co(II) ve Cd(II) 3-klorobenzoatların nikotinamid ve N,N'-dietilnikotinamid kompleksleri sentezlenmiştir. Sentezlenen komplekslerin genel formülleri aşağıda verilmiştir:

$[\text{Zn}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})]$	I
$[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$	II
$[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$	III
$[\text{Cd}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$	IV
$[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2 (\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}]$	V
$[\text{Cd} (\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2 (\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O}) \cdot \text{H}_2\text{O}]$	VI

Sentezlenen komplekslerin yapıları elemental analiz, IR ve UV Spektroskopisi yöntemleriyle karakterize edilmiştir. Ayrıca komplekslerin termik davranışları TGA/DTA metodu ile incelenmiştir. Komplekslerin kristal yapıları tek kristal x-ışını yöntemi ile belirlenmiştir. Termik bozunma neticesinde komplekslerden geriye ilgili metal(II) oksitlerin kaldığı belirlenmiştir.

ABSTRACT

Zn(II), Cu(II), Co(II) and Cd(II) 3-chlorobenzoate with nicotinamide and N,N'-diethynicotinamide complexes have been synthesized. The general formulas of the synthesized complexes are given below:

$[\text{Zn}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})]$	I
$[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$	II
$[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$	III
$[\text{Cd}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$	IV
$[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2 (\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}]$	V
$[\text{Cd} (\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2 (\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O}) \cdot \text{H}_2\text{O}]$	VI

The prepared complexes were characterized by elemental analysis, spectral studies (IR and UV-vis). Thermal stabilities of the complexes have been studied by TGA/TDA method. The crystal structures of the complexes were determined by single-crystal XRD method. The final products of the thermal decomposition for all synthesized compounds are related metal(II) oxide.

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ	iii
ÖZET.....	iv
ABSTRACT.....	v
SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ	viii
ŞEKİLLER LİSTESİ	ix
TABLolar LİSTESİ.....	xiii
1.GİRİŞ	1
1.1. 3-Klorobenzoik asit ve Özellikleri	1
1.2. 3-Klorobenzoik Asidin Moleküler Kompleksleri	3
1.3. 3-Klorobenzoik Asidin Metal Kompleksleri.....	12
1.4. Metal Halojenobenzoatların Nikotinamid ve Dietilnikotinamid Kompleksleri... 14	
1.4.1. Metal Halojenobenzoatların Nikotinamid Kompleksleri	14
1.4.2. Metal Halojenobenzoatların Dietilnikotinamid Kompleksleri.....	26
2. MATERYAL, METOT VE SENTEZ	35
2.1. Materyal	35
2.1.1. Kullanılan Kimyasal Maddeler	35
2.1.2. Kullanılan Aletler.....	35
2.2. Metot	35
2.2.1. Elemental Analiz.....	35
2.2.2. Infrared Spektrum	36
2.2.3. Termik Analiz	36
2.2.4. X-Ray Yapı Analizi.....	37
2.3. Sentez	38
2.3.1 [Zn(C ₇ H ₄ ClO ₂) ₂ (H ₂ O)].....	38
2.3.2 [Cu(C ₇ H ₄ ClO ₂) ₂ (C ₆ H ₆ N ₂ O) ₂].....	38
2.3.3 [Co(C ₇ H ₄ ClO ₂) ₂ (C ₆ H ₆ N ₂ O) ₂ (H ₂ O) ₂].....	38
2.3.4 [Cd ₂ (C ₇ H ₄ ClO ₂) ₄ (C ₆ H ₆ N ₂ O) ₂ (H ₂ O) ₂]	39
2.3.5 [Cu(C ₇ H ₄ ClO ₂) ₂ (C ₁₀ H ₁₄ N ₂ O) ₂ .H ₂ O] ve [Cu ₂ (C ₇ H ₄ ClO ₂) ₄ (C ₁₀ H ₁₄ N ₂ O) ₂] ..	39
2.3.6 [Cd(C ₇ H ₄ ClO ₂) ₂ (C ₁₀ H ₁₄ N ₂ O)H ₂ O].....	39
3. Bulgular ve Tartışma.....	40

3.1. Elemental Analiz.....	40
3.2. Infrared Spektrum	40
3.3. UV Görünür Bölge Spektrumu	48
3.4. Termik Analiz	50
3.5. X Ray Yapı Analizi.....	54
4. TARTIŞMA	56
SONUÇ	69
KAYNAKLAR	70
EKLER.....	81
ÖZGEÇMİŞ	105



SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ

3-KBz:	3-Klorobenzoik asit
3-KB :	3-Klorobenzoat anyonu
NA	: Nikotinamid
DENA	: N,N'-Dietilnikotinamid
DTA	: Diferansiyel Termik Analiz
TGA	: Termogravimetri
DTG	: Diferansiyel Termogravimetri
IR	: İnfrared Spektroskopisi
UV	: Ultraviyole Görünür Bölge Spektroskopisi
°C	: Derece Santigrat
g	: Gram
ml	: Mililitre
M.A.	: Molekül ağırlığı
E.N.	: Erime Noktası
K.N.	: Kaynama Noktası

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 1.2.1.	2, 4-diamino-5-(4-klorofenil)-6-etilprimidin-1-ium 3-klorobenzoat [32]	.3
Şekil 1.2.2.	$C_{18}H_{15}OP.C_7H_5ClO_2$ Trifenilfosfin oksit – 3-klorobenzoik asit [34]4
Şekil 1.2.3.	2-Pikolin N-oksit – 3-klorobenzoik asit kompleksi [35]5
Şekil 1.2.4.	9-aminoakridinium 3-klorobenzoat'ın kristal şebekesi ve H-bağları [36]	..5
Şekil 1.2.5.	$C_6H_9N_2^+C_7H_4ClO_2^-$ Kompleksinin Molekül Yapısı [38]6
Şekil 1.2.6.	$C_6H_9N_2^+C_7H_4ClO_2^-$ Kompleksinin Kristal Yapısı [38]7
Şekil 1.2.7.	$C_5H_8N_3^+C_7H_4ClO_2^-C_7H_5ClO_2$ Kompleksinin Molekül Yapısı [39]8
Şekil 1.2.8.	$C_5H_8N_3^+C_7H_4ClO_2^- C_7H_5ClO_2$ Kompleksinin Kristal Yapısı [39]9
Şekil 1.2.9.	$C_{16}H_{12}Cl_2N_3^+$ Katyonunun Molekül Yapısı [40] 10
Şekil 1.2.10.	20 Üyeli $\{...OCO...HNC_3NH\}_2$ Hidrojen Bağı Görünümü [40] 11
Şekil 1.2.11.	$C_{16}H_{12}Cl_2N_3^+C_7H_4ClO_2$ Kompleksinde Çizgisel Süpamoleküler Zincirin Görünümü [40] 11
Şekil 1.3.1.	$Cu_4(C_7H_4ClO_2)_4(C_4H_{10}NO)_4$ Kompleksinin Molekül Yapısı [42] 12
Şekil 1.3.2.	$Ag_2C_{28}H_{20}Cl_2N_4O_4 [Ag(abn)(4-cba)]_2$ Kompleksinin Molekül Yapısı [50] 13
Şekil 1.4.1.1.	$[Co(C_6H_6N_2O)_2(H_2O)_4](C_7H_4FO_2)_2$ Kompleksinin Molekül Yapısı [68] 15
Şekil 1.4.1.2.	$[Co(C_6H_6N_2O)_2(H_2O)_4](C_7H_4FO_2)_2$ Kompleksinin Kristal Yapısı [68] 15
Şekil 1.4.1.3.	$[Co(C_7H_4FO_2)_2(C_6H_6N_2O)_2(H_2O)_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [69] 16
Şekil 1.4.1.4.	$[Co(C_7H_4FO_2)_2(C_6H_6N_2O)_2(H_2O)_2]$ Kompleksinin Kristal Yapısı [69]	16
Şekil 1.4.1.5.	$[Co(C_7H_4FO_2)_2(C_6H_6N_2O)_2(H_2O)_2]$ Kompleksinin Üç Boyutlu Yapısı [69] 17
Şekil 1.4.1.6.	$[Co(C_7H_4ClO_2)_2(C_6H_6N_2O)_2(H_2O)_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [70] 17
Şekil 1.4.1.7.	$[Co(C_7H_4ClO_2)_2(C_6H_6N_2O)_2(H_2O)_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [71] 18

Şekil 1.4.1.8. $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Kristal Yapısı [71]	18
Şekil 1.4.1.9. $[\text{Ni}(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_4]$ $(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2$ iyonik yapısı [72]	19
Şekil 1.4.1.10. $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [73]	20
Şekil 1.4.1.11. $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Kristal Yapısı [74]	20
Şekil 1.4.1.12. $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [75]	21
Şekil 1.4.1.13. $[\text{Mn}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [76]	22
Şekil 1.4.1.14. $[\text{Mn}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Kristal Yapısı [76]	22
Şekil 1.4.1.16. $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [78]	24
Şekil 1.4.1.17. $[\text{Zn}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2] \cdot \text{C}_7\text{H}_5\text{FO}_2$ Kompleksinin Molekül Yapısı [79]	25
Şekil 1.4.1.18. $[\text{Zn}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Kristal Yapısı [80]	25
Şekil 1.4.2.1. $[\text{Co}(4\text{-XC}_6\text{H}_4\text{COO})_2(\text{DNA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Komplekslerinin Yapısı [81]	26
Şekil 1.4.2.2. $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Kristal Yapısı [82]	27
Şekil 1.4.2.3. $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [83]	28
Şekil 1.4.2.4 $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül yapısı [84]	28
Şekil 1.4.2.5. $[\text{Mn}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [85]	29
Şekil 1.4.2.6. $[\text{Mn}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [86]	29

Şekil 1.4.2.7. $[\text{Mn}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Kristal Yapısı [87]	30
Şekil 1.4.2.8. $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [88]	31
Şekil 1.4.2.9. $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [89]	31
Şekil 1.4.2.10. $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Kristal Yapısı [89]	32
Şekil 1.4.2.11. $[\text{Zn}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [90].	33
Şekil 1.4.2.12. $[\text{Zn}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [91]	33
Şekil 1.4.2.13. $[\text{Zn}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Kristal Yapısı [92]	34
Şekil 3.2.1 $[\text{Zn}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})]$ Kompleksinin (I) IR Spektrumu	42
Şekil 3.2.2 $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin (II) IR Spektrumu	43
Şekil 3.2.3 $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin (III) IR Spektrumu	44
Şekil 3.2.4 $[\text{Cd}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin (IV) IR Spektrumu	45
Şekil 3.2.5 $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})]$ Kompleksinin IR Spektrumu (V)	46
Şekil 3.2.6 $[\text{Cd}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})]$ Kompleksinin (VI) IR Spektrumu	47
Şekil 3.3.1 $[\text{Zn}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})]$ Kompleksinin UV Spektrumu	48
Şekil 3.3.2 $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin UV Spektrumu	49
Şekil 3.3.3 $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin UV Spektrumu	49
Şekil 3.3.4 $[\text{Cd}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin UV Spektrumu	49
Şekil 3.3.5 $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})]$ Kompleksinin UV Spektrumu	50
Şekil 3.4.1 $[\text{Zn}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})]$ kompleksinin termik analiz eğrisi	52
Şekil 3.4.2 $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$ kompleksinin termik analiz eğrisi	52
Şekil 3.4.3 $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin termik analiz eğrisi	53
Şekil 3.4.4 $[\text{Cd}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin termik analiz eğrisi	53

Şekil 3.4.5 [Cu(C ₇ H ₄ ClO ₂)(C ₁₀ H ₁₄ N ₂ O) ₂ .H ₂ O] kompleksinin termik analiz eğrisi.....	54
Şekil 4.1. I Kompleksinin Molekül Yapısı [93].	59
Şekil 4.2. I Kompleksinin Polimer Zincirinin Bir Kısmı [93].....	60
Şekil 4.3. I Kompleksinin Kristal Yapısı [93].	60
Şekil 4.4. II Kompleksinin Molekül Yapısı [94].....	61
Şekil 4.5. II Kompleksinin Kristal Yapısı [94].	62
Şekil 4.6. III Kompleksinin Molekül Diyagramı [95]	63
Şekil 4.7. III Kompleksinin Molekül Yapısı [95]	63
Şekil 4.8. IV Kompleksinin Moleküler Diyagramı [96].....	64
Şekil 4.9. IV Kompleksinin Molekül Yapısı [96].....	65
Şekil 4.10. V Kompleksinin Molekül Diyagramı [97].	66
Şekil 4.11. V Kompleksinin Molekül Yapısı [97].	66
Şekil 4.12. VI Kompleksinin Molekül Diyagramı [98].....	67
Şekil 4.13. VI Kompleksinin Kristal Yapısı [98].	68
Şekil 4.14. VI Kompleksinin Molekül Yapısı [98].	68

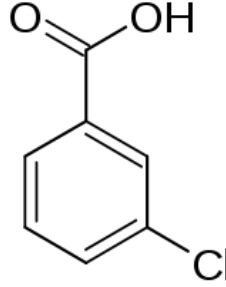
TABLÖLAR LİSTESİ

Tablo 3.1. Elemental Analiz Sonuçları	40
Tablo 3.2. Komplekslerinin IR spektrum verileri	41
Tablo 3.3. Sentezlenen komplekslerin UV görünür bölge değerleri $\lambda_{\max}(\text{nm})$	48
Tablo 3.4. Termik Analiz Sonuçları	51
Tablo 3.5. Komplekslerin Kristal Verileri.....	55



1.GİRİŞ

1.1. 3-Klorobenzoik asit ve Özellikleri



Yukarıda açık formülü verilen 3-klorobenzoik asit (m-klorobenzoik asit, Moleküler formülü: $C_7H_5ClO_2$, Molekül ağırlığı: 156.57, E.N 153-157°C. K.N. 274-276°C, Yoğunluk: 1.496 g/cm^3 , FP: 150 °C, çözünürlük: suda 19.5 °C'de 0,1 g/100 Ml) benzoik asidin halojen türevlerinden biridir. Benzoik asit ve halojenobenzoik asitlerin metallerle kompleksleri çevresel [1,2], mikrobiyolojik [3-6] ve tıbbi problemlerin çözümü açısından geniş olarak incelenmektedir [7-14]. Günümüzde klorobenzoik asit çok kullanılan organik bir ajandır [15]. Bu bileşik boya hammaddesi olarak kullanılmaktadır [16,17]. Önemli bir reaktif olarak bu bileşiğin termodinamik özellikleri sadece ilgili teorik araştırma çalışmalarından dolayı değil uygulamalarının pratikliğinden dolayı da önemlidir.

Sabbah ve arkadaşları, süblimasyon kalorimetri ve diferansiyel termal analiz yöntemleri ile 3-klorobenzoit asidin süblimasyon ve füzyon entalpilerini ve onların üstün noktalarının sıcaklığını belirlemişler [18].

Sabbah ve arkadaşları, klorbenzoik asit izomerlerinin gaz fazda oluşum entalpilerini tayin etmişler. Atomlaşma entalpileri deneysel yolla belirlenmiş, atomlaşma entalpilerinin değerlerinden C-Cl bağları için entalpi değeri tayin edilmiştir [19].

2-, 3- ve 4 -Klorobenzoik asitlerin 298,15 K sıcaklığında gaz halinde oluşum entalpileri Emelyanenko ve arkadaşları [20] tarafından belirlenmiştir. G3(MP2) teorisi

kullanılarak klorobenzoik asitlerin *ab-initio* hesaplamaları yapılmıştır. Ayrıca alınan asitlerin gerilim entalpileri de belirlenmiştir.

Klorobenzoik asit izomerlerinin buhar basınçları çeşitli sıcaklıklarda Knudsen yöntemi ile belirlenmiştir: 2-klorobenzoik asit 320,16 ve 339,15 K, 3-Klorobenzoik asit 320,13 ve 340,13 K aralığında, 4-Klorobenzoik asit 333,15 ve 356,14 K aralığında belirlenmiştir [21].

Johnson ve Prosen tarafından [22] monoklorobenzoik asitlerin yanma ve oluşum entalpileri belirlenmiştir.

Gelb konduktometrik yöntemi ile benzoik (HBz), 3-klorobenzoik (ClHBz), 3-bromobenzoik (BrHBz), 3-nitrobenzoik (NHBz) ve 3,5-dinitrobenzoik (dNHBz) asitlerinin su +2-propanol ortamında 25 derece disosiyasyon sabitleri belirlenmiştir [23]. Disosiyasyonun (dNHBz > NHBz < > BrHBz ve ClHBz > HBz sırasında değiştiği görülür.

Li ve arkadaşları [24] Ti üzerinde siklik halkalı voltammetri kullanarak PdCl₂ içeren hidroflorik asitle Pd/Ti elektrodu hazırlayarak 3-klorobenzoik asidin Cu, Ag, Ti ve Pd/Ti elektrotlarında elektrokimyasal indirgenmesini incelemişler. Diğer elektrotlara nazaran Pd/Ti elektrotlarının NaOH çözeltisinde 3-klorobenzoik asidin yüksek elektrokimyasal aktiflik gösterdiği görülmüştür. Sonuçlar 3-klorobenzoik asidin bir elektron aldıktan sonra elektro indirgenerek serbest radikal oluşturduğunun sonra bu serbest radikalın klorür iyonuna bırakarak benzoik asidin serbest radikalini oluşturduğunu, başka bir elektron ve proton aldıktan sonra benzoik asidin oluştuğunu gösteriyor.

Halojenobenzoik asitlerin geçiş aromatik radikal anyonlarının parçalanma oranları ($k_c=10^3-10^9 s^{-1}$) suda fotoelektro kimyasal yöntemi kullanılarak ölçülmüştür [25]. Sonuçlar k_c 'nin halojenin doğasına ve onun halkadaki karboksil grubu pozisyonuna bağlı olup F < Cl < Br ve *meta* < *para* < *orto* (Cl, Br) ve *meta* < *orto* < *para* (F) sırasında artmaktadır.

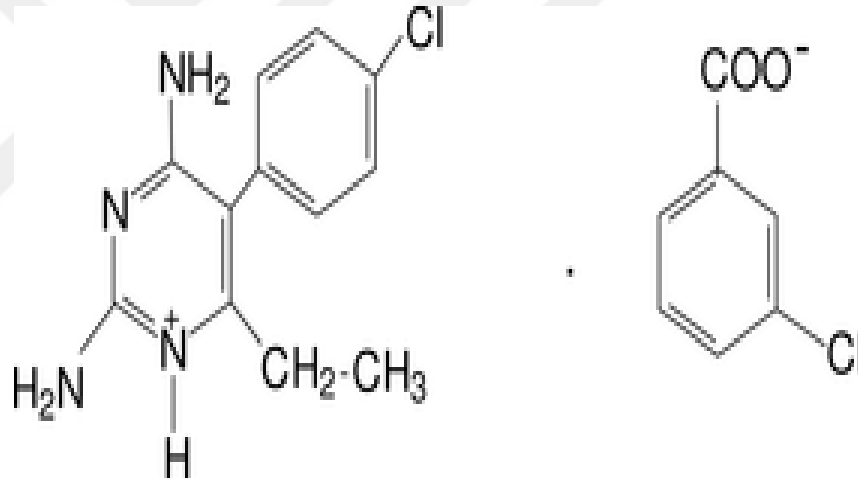
Hidrojen atomların klorobenzoik asit izomerleri ile reaktiviteleri Zona ve arkadaşları tarafından [26] incelenmiştir. Bozulma etkinliği 4-klorobenzoikasit > 3-klorobenzoik asit > 2-klorobenzoik asit sırasında değişmektedir. Tüm reaksiyonların sonuç ürünü benzoik asittir.

3-klorobenzoik asidin çeşitli organik çözücülerde çözünürlüğü Hoover ve arkadaşları tarafından incelenmiştir [27]. Literatürde 3-klorobenzoik asidin biyolojik özellikleri ile ilgili çalışmalar yapılmaktadır [28-30].

1.2. 3-Klorobenzoik Asidin Moleküler Kompleksleri

Aakeroy ve arkadaşları tarafından 2-amino-4-metoksi-6- metilpridinyum 3-klorobenzoat ve 2-amino-4-metilpridinyum 3- klorobenzoat tuzları sentezlenerek yapısal özellikleri incelenmiştir [31].

2,4-diamino-5-(4-klorofenil)-6-etilprimidin-1-ium 3-klorobenzoat $C_{12}H_{14}ClN_4^+$ $C_7H_4ClO_2^-$ bileşiğinin (Şekil 1.2.1) kristal yapısında katyon, anyonun karboksilat grubu ile N-H ... O hidrojen bağı çiftleri vasıtasıyla etkileşerek halkalı hidrojen bağı motifi oluşturuyor [32].

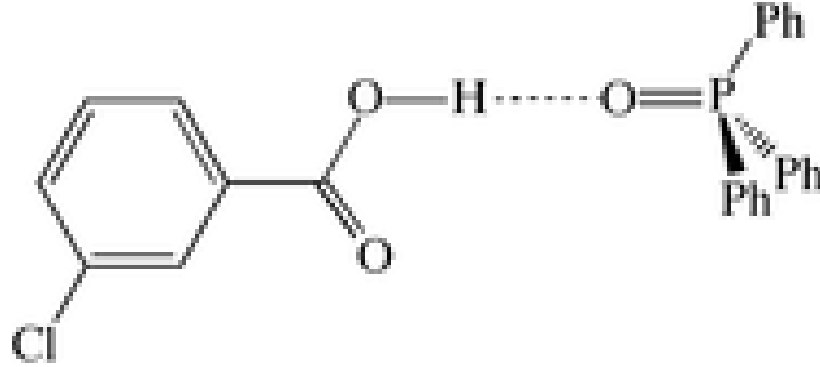


Şekil 1.2.1. 2, 4-diamino-5-(4-klorofenil)-6-etilprimidin-1-ium 3-klorobenzoat [32]

Grech ve arkadaşları [33] klorobenzoik asitlerin aminler ile katı komplekslerinde hidrojen bağlarını nükleer kuadripol rezonans yöntemi ile incelenmişlerdir.

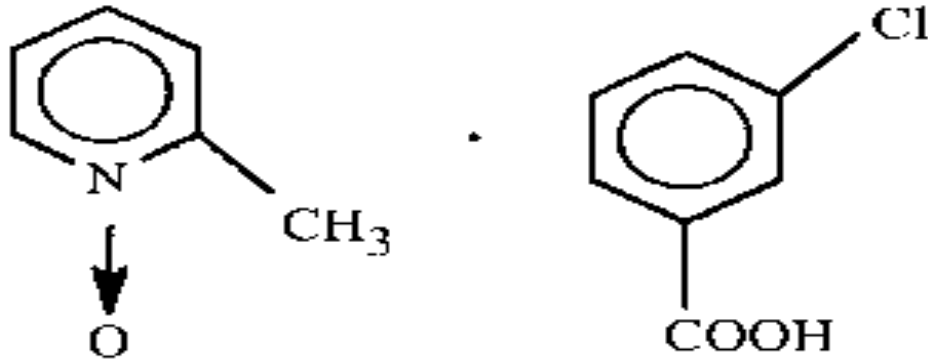
Trifenilfosfin oksit ile 3-klorobenzoik asidin moleküler kompleksi (1:1) Al-Farhan tarafından [34] sentezlenerek yapısı çözülmüştür. Yapıda trifenilfosfinoksit

molekülü 3-klorobenzoik asit molekülü ile O...O=P hidrojen bağı oluşturuyor (2.607(2) Å) (Şekil 1.2.2).



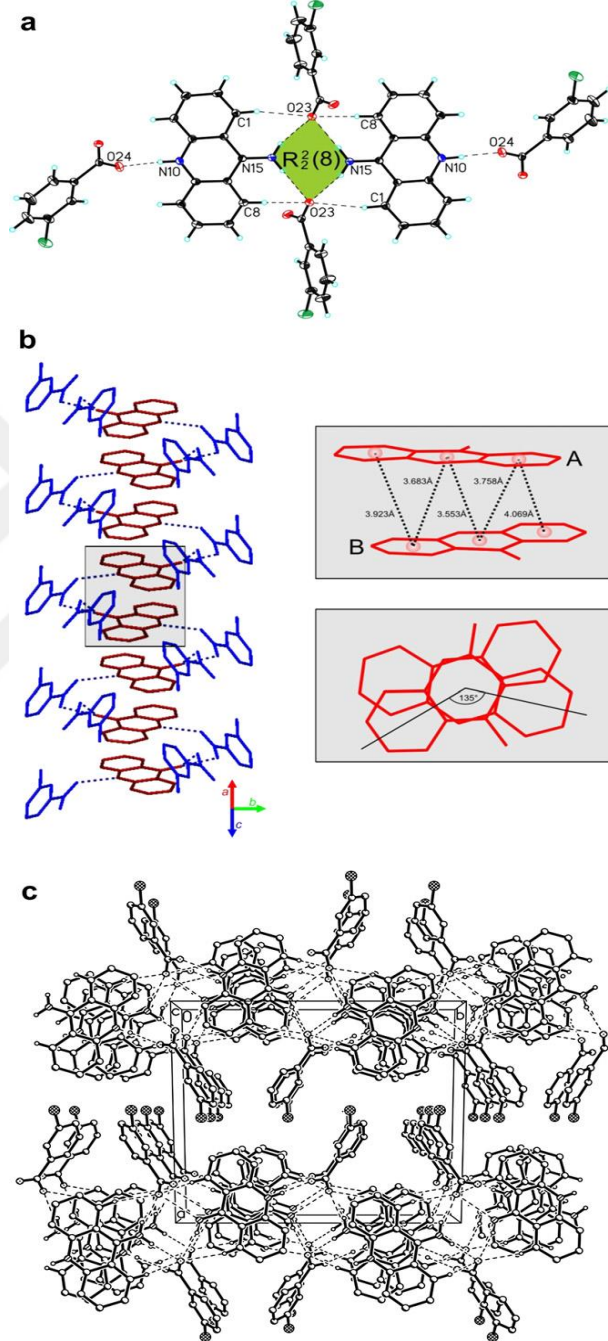
Şekil 1.2.2. $C_{18}H_{15}OP \cdot C_7H_5ClO_2$ Trifenilfosfin oksit – 3-klorobenzoik asit [34]

3-Klorobenzoik asidin 2-pikolin N-oksit ile 1:1 kompleksi Moreno Fuquen ve arkadaşları tarafından sentezlenerek kristal yapısı incelenmiştir [35]. Kristalleri görünür alanda saydamlık gösteren bu bileşiğin muhtemel nonlineer optik özelliğe sahip olduğu düşünülmektedir. Komplekste N–O ve O–H grupları arasında hidrojen bağları görülmektedir (Şekil 1.2.3).



Şekil 1.2.3. 2-Pikolin N-oksit – 3-klorobenzoik asit kompleksi [35]

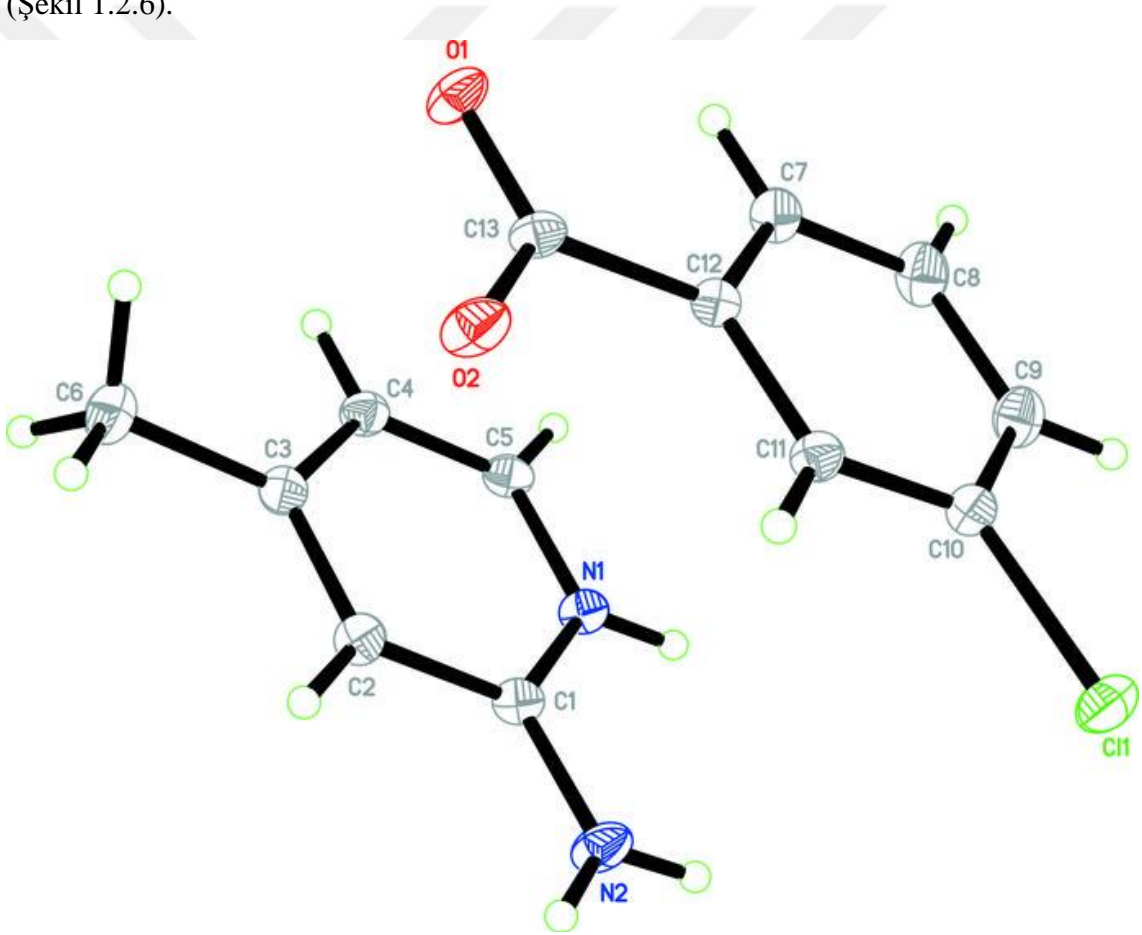
9-aminoakridinin, 3-klorobenzoik,4-klorobenzoik ve 3-hidroksibenzoik yapıdaki asit ile tuzları sentezlenerek benzoat anyonu substituentlerinin kristal oluşumuna ve hidrojen bağlarının ağ oluşumuna etkisi incelenmiştir (Şekil 1.2.4) [36] .



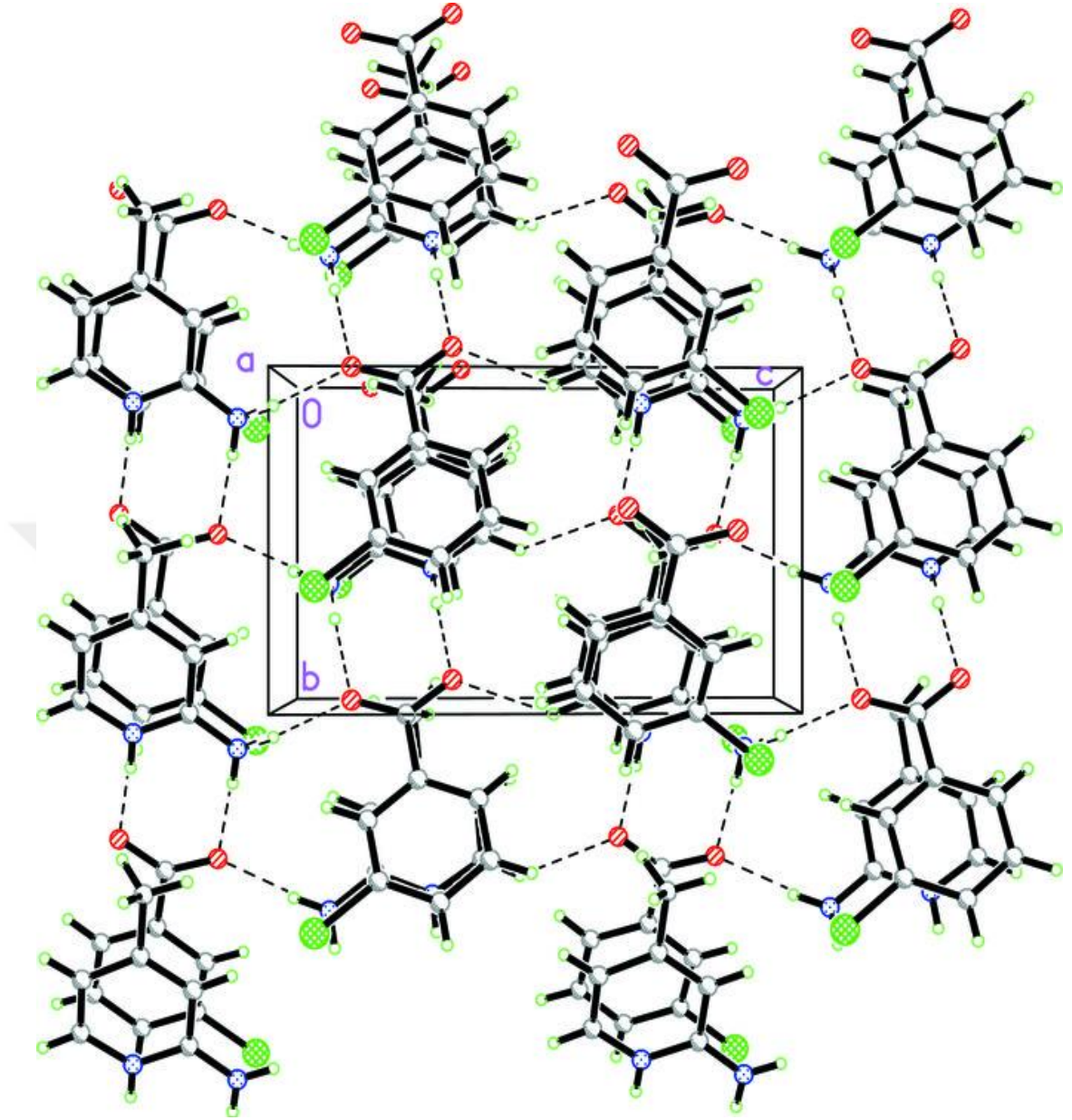
Şekil 1.2.4. 9-aminoakridinium 3-klorobenzoat'ın kristal şebekesi ve H-bağları [36]

Wattenbach ve arkadaşları tarafından [37] sentezlenen 3-klorobenzoik asit 2-tert-bütül-5-hidroksi-5-metil-1,3-dioksan-4-il $C_{16}H_{21}ClO_5$ esteri ile moleküler kompleksin kristal yapısı çözülmüştür: $a=5,986(1) \text{ \AA}$, $b=24551(1) \text{ \AA}$, $c=11,574(1) \text{ \AA}$, $\beta=100,50(1)^\circ$, $V=1672,5 \text{ \AA}^3$, $Z=4$, $R=gt(F) = 0.027$, $wR(\text{ref})(F=2) = 0,069$, $T= 297\text{K}$.

$C_6H_9N_2^+C_7H_4ClO_2^-$ (2-Amino-4-methylpyridinium 3-klorobenzoat) kompleksinin molekül yapısı Hemamalini ve arkadaşları tarafından [38] incelenmiştir. 2-amino-4-metilpiridinyum kationu düzlemseldir. (şekil 1.2.5). Kristalde protonlaşmış azot atomu ve iki kationun iki amino grubu anyon karboksilat oksijen atomları arasında çift N-H...O hidrojen bağları ile $R_2^2(8)$ halkası oluşturuyor. İyon çiftleri N-H...O ve C-H...O hidrojen bağları vasıtası ile bc düzlemine paralel iki boyutlu şebeke oluşturuyor (Şekil 1.2.6).

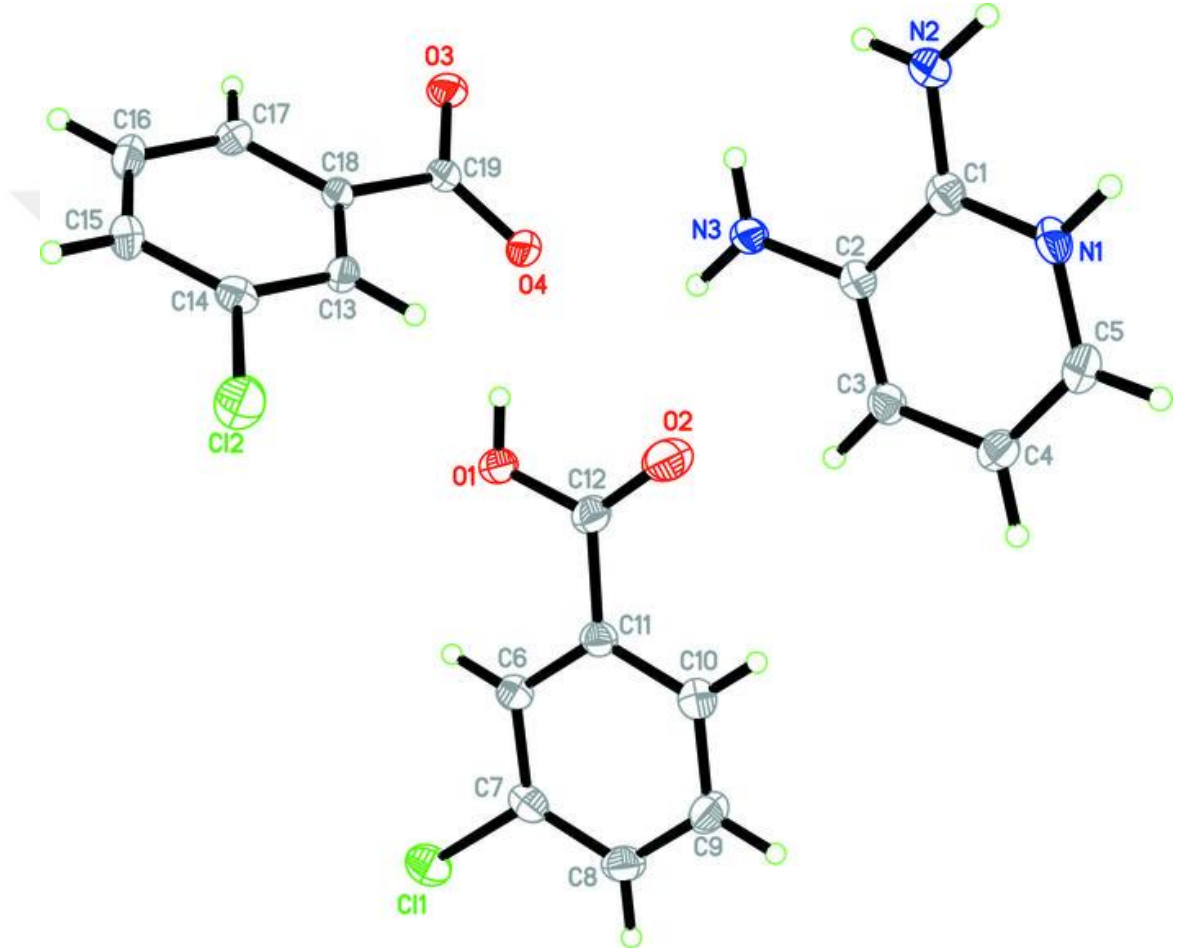


Şekil 1.2.5. $C_6H_9N_2^+C_7H_4ClO_2^-$ Kompleksinin Molekül Yapısı [38]

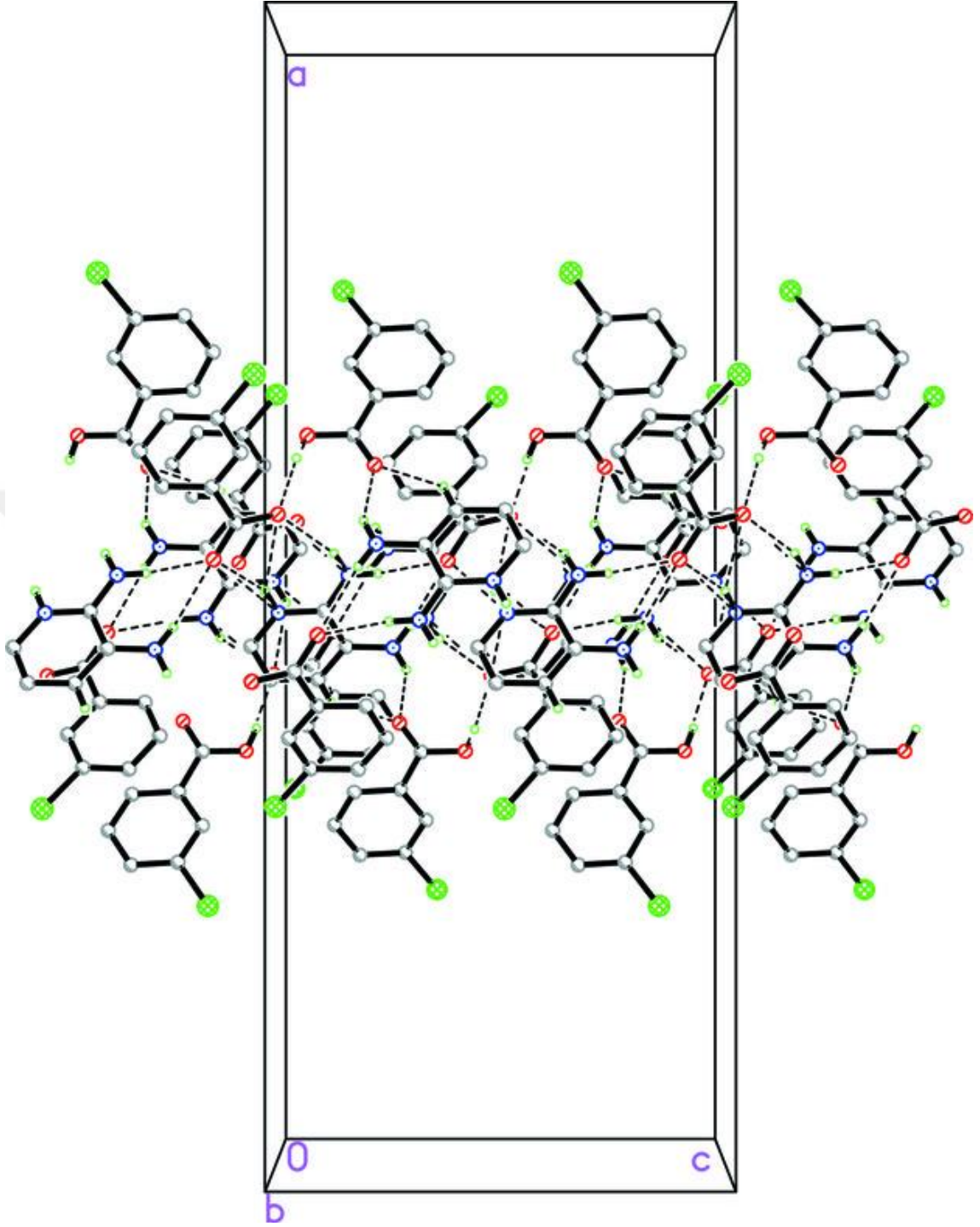


Şekil 1.2.6. $C_6H_9N_2^+ C_7H_4ClO_2^-$ Kompleksinin Kristal Yapısı [38]

$C_5H_8N_3^+C_7H_4ClO_2^-$ 2,3-Diaminopyridinium 3-klorobenzoat – 3-klorobenzoik asit molekül yapısı Hemamalini ve arkadaşları [39] tarafından incelenmiştir. Kompleks, iyon çiftlerini ve 3-klorobenzoik molekülünü içermektedir. Katyonda piridin azot atomu protonlaşmıştır. Kristalde iyon ve moleküller N-H...O, O-H...O ve C-H...O hidrojen bağları ile (100) düzlemine paralel tabakalar oluşturmaktadır (Şekil 1.2.7 ve 1.2.8).

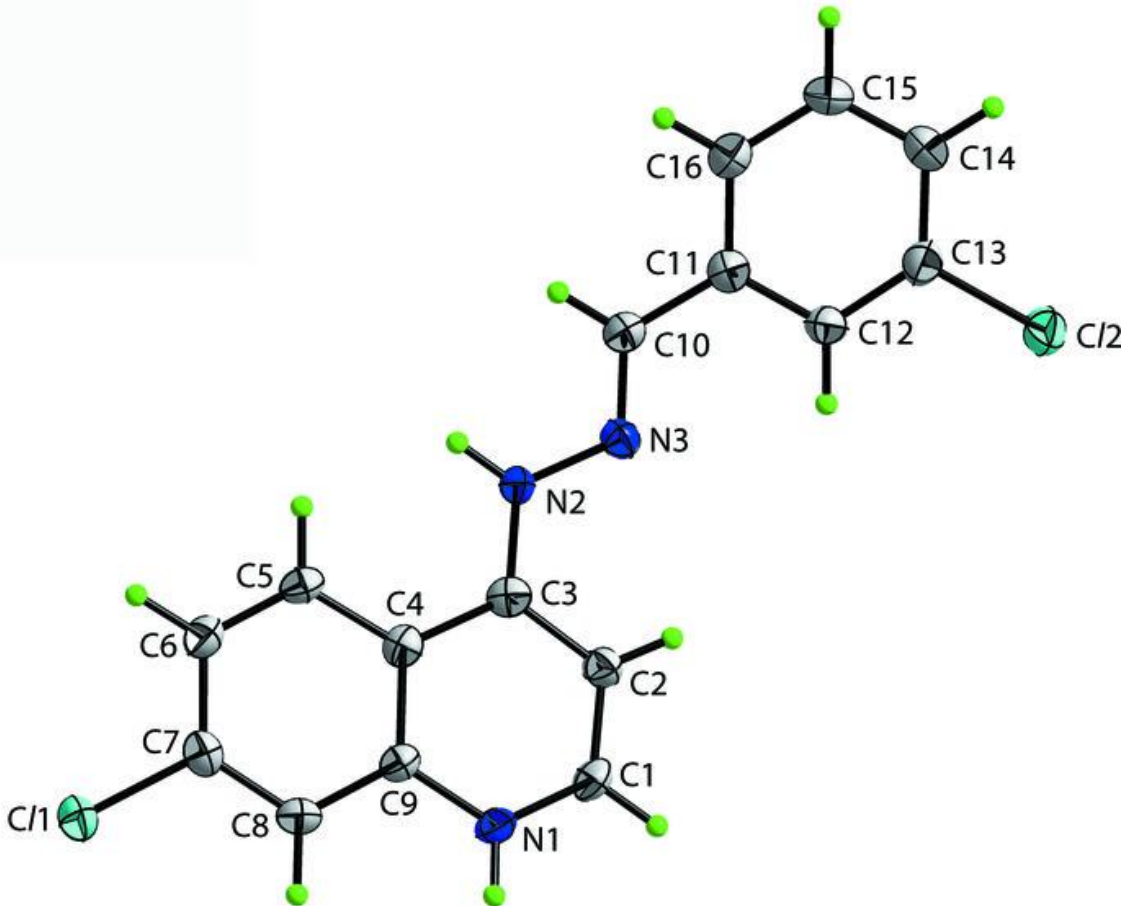


Şekil 1.2.7. $C_5H_8N_3^+C_7H_4ClO_2^-C_7H_5ClO_2$ Kompleksinin Molekül Yapısı [39]

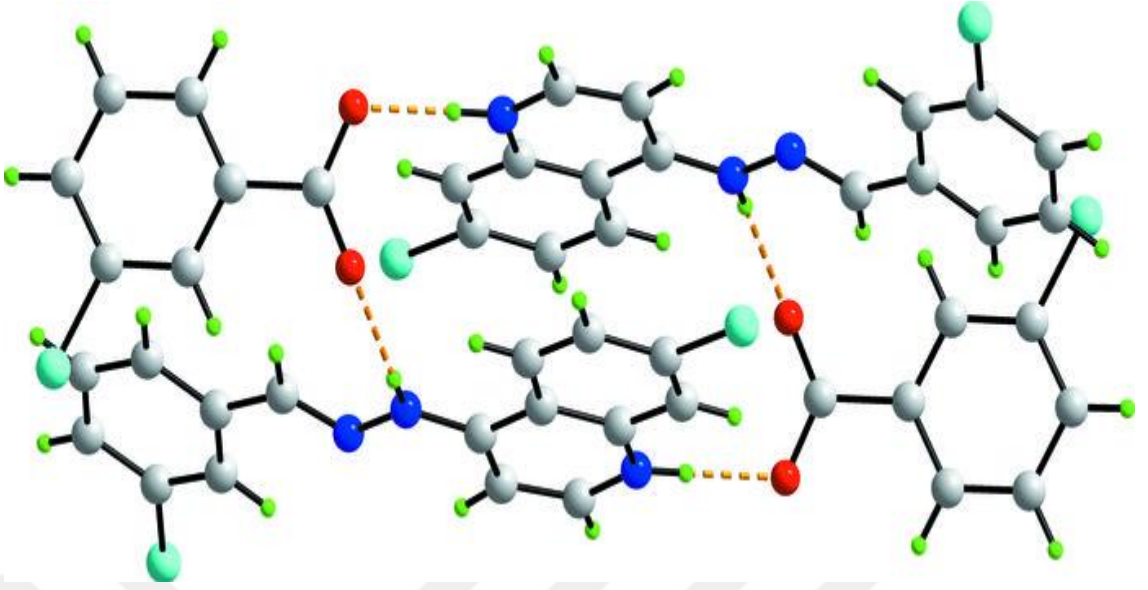


Şekil 1.2.8. $C_5H_8N_3^+ C_7H_4ClO_2^- C_7H_5ClO_2$ Kompleksinin Kristal Yapısı [39]

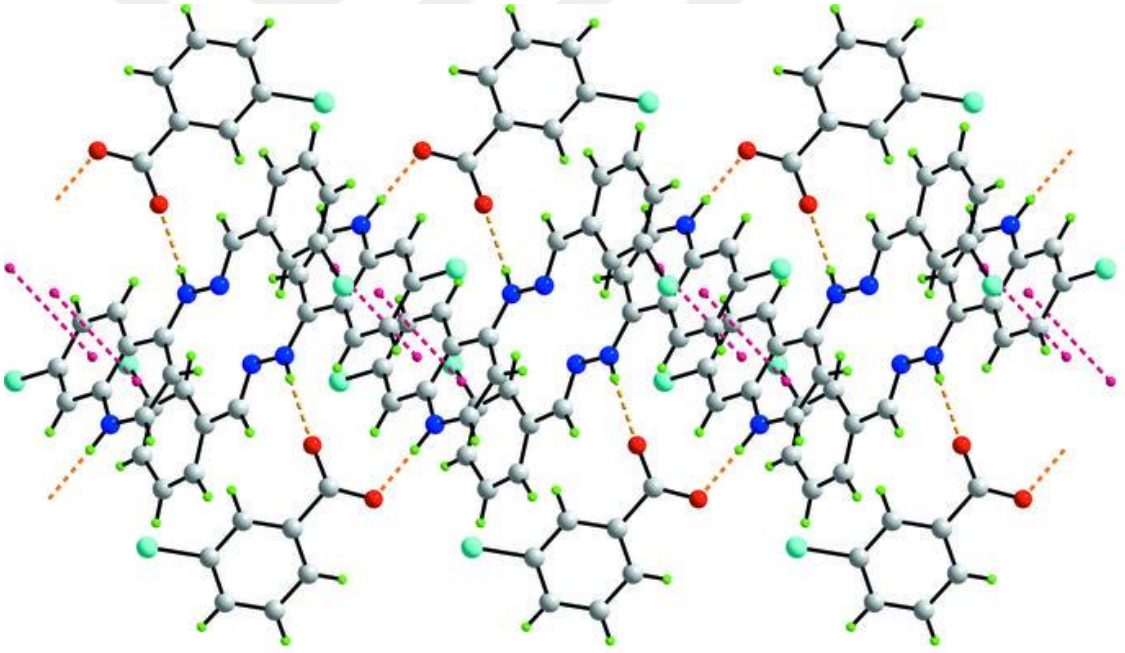
$C_{16}H_{12}Cl_2N_3^+ C_7H_4ClO_2^-$ 7-Chloro-4-[(E)-(3-chlorobenzylidene)hydrazinyl]-1- λ^4 -quinolinium 3-klorobenzoat kompleksinin molekül yapısı Souza ve arkadaşları tarafından [40] incelenmiştir. Kompleksteki katyon düzlemsel olmayıp, quinolinium ve benzen halkası arasındaki dihedral açı $18,98(10)^\circ$ dir. (Şekil 1.2.9). Kristalde N-H...O hidrojen bağları iki katyonu iki anyon ile birleştirerek yirmi üyeli $\{...OCO...HNC_3NH\}_2$ sinton oluşturuyor (şekil 1.2.10). Dimerik birimler $\pi \dots \pi$ etkileşim vasıtası ile $[3,5625(13) \text{ \AA}]$ [100] düzlemi boyunca çizgisel supramoleküler zincir oluşturuyorlar (Şekil 1.2.11).



Şekil 1.2.9. $C_{16}H_{12}Cl_2N_3^+$ Katyonunun Molekül Yapısı [40]



Şekil 1.2.10. 20 Üyeli {...OCO...HNC₃NH}₂ Hidrojen Bağı Görünümü [40]

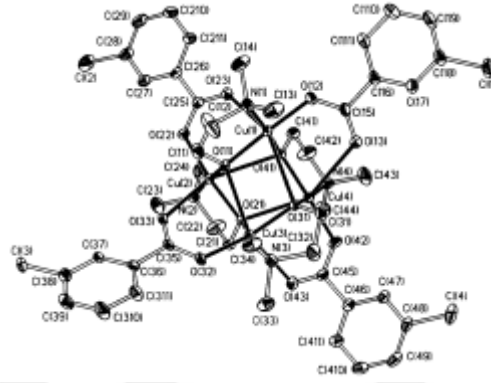


Şekil 1.2.11. C₁₆H₁₂Cl₂N₃⁺C₇H₄ClO₂ Kompleksinde Çizgisel Süpramoleküler Zincirin Görünümü [40]

1.3. 3-Klorobenzoik Asidin Metal Kompleksleri

Tetraaquabis(3-klorobenzoato) nikel(II) kompleksinin kristal yapısı Pavkovic ve arkadaşları tarafından [41] çözülmüştür. Triklirik singoniye sahip kristalin parametreleri: : $a=6,273(1)$ Å, $b=10,021(1)$ Å, $c=13,696(2)$ Å, $\alpha=90,14(1)$, $\beta=95,74(1)$, $\gamma=93,55(1)^\circ$, $Z=2$, $R=0,048$.

Bakır(II) 3-klorobenzoatın, 2-dimetil-amino-etanolat kompleksinin tetramer yapıya sahip olduğu Turpeinen ve arkadaşları tarafından [42] bulunmuştur: $\text{Cu}_4(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_4(\text{C}_4\text{H}_{10}\text{NO})_4$ (Şekil 1.3.1).



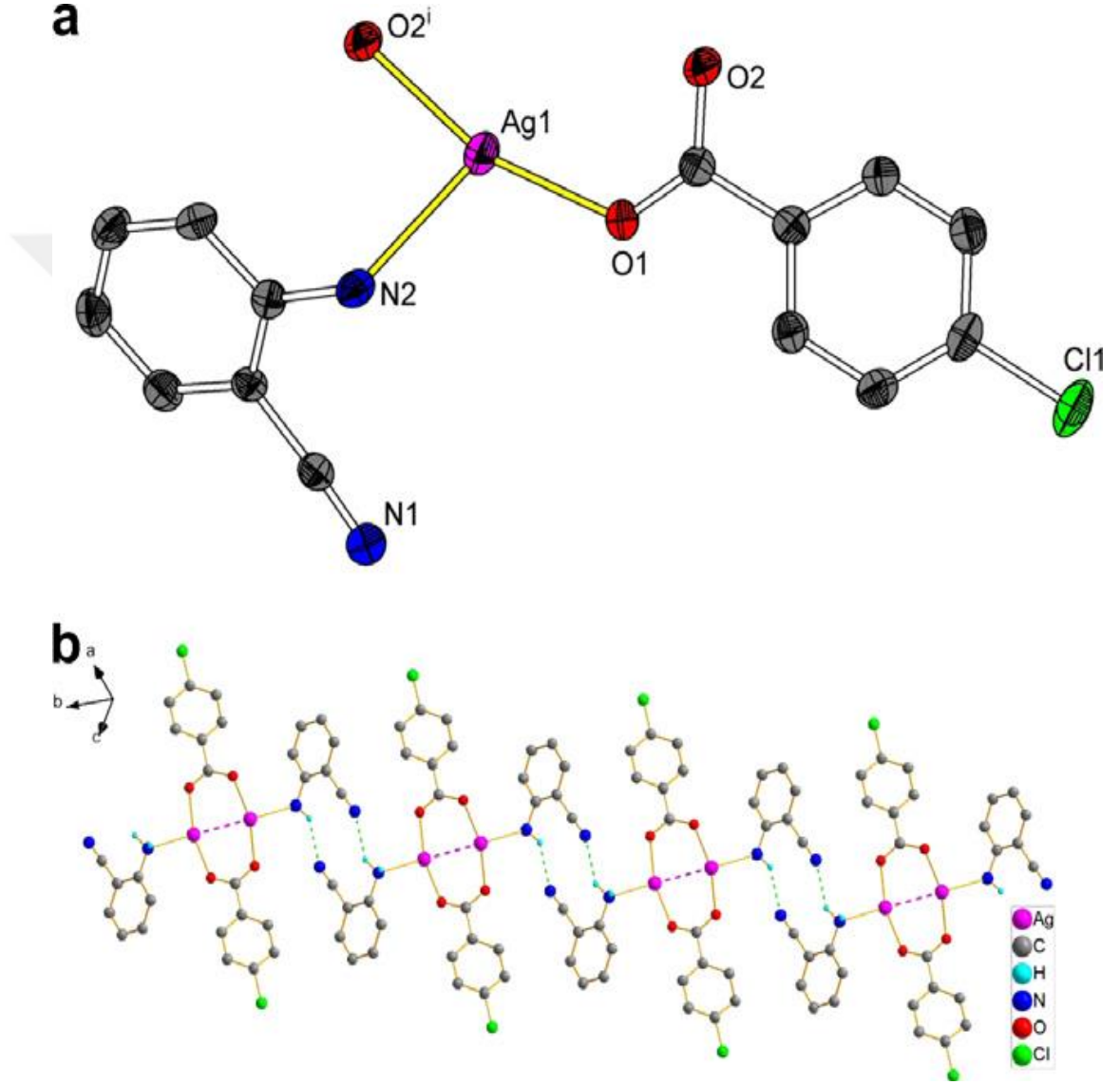
Şekil 1.3.1. $\text{Cu}_4(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_4(\text{C}_4\text{H}_{10}\text{NO})_4$ Kompleksinin Molekül Yapısı [42]

3-klorobenzoik asidin skandiyum ve nadir toprak elementleri ile kompleksleri sentezlenerek, fizikokimyasal özellikleri ve havada termik parçalanması Polonyalı bilim adamları tarafından [43-47] incelenmiştir.

Mangan(III) 3-klorobenzoatın bipyridin $[\{\text{Mn}(\text{bipy})(\text{H}_2\text{O})\}_2(\mu\text{-O})(\mu\text{-3-ClC}_6\text{H}_4\text{COO})_2](\text{NO}_3)_2$ [48] ve bipyridin ile 1,10-fenantrolin kompleksleri $[\{\text{Mn}(\text{H}_2\text{O})(\text{NN})\}_2(\mu\text{-3-ClC}_6\text{H}_4\text{COO})_2(\mu\text{-O})]X_2$ (NN = bipy veya 1,10-fenantrolin ve $X=\text{NO}_3$ veya ClO_4) [49] sentezlenerek, yapıları çözülmüş ve bu dimer komplekslerin magnetik özellikleri ve katalitik aktiviteleri incelenmiştir.

Gümüş(I) 3-klorbenzoatın 2-aminobenzonitril kompleksi sentezlenmiş ve elemental analiz, IR spectra ve tek kristal x-ışını kırınım ile karakterize edilmiştir [50]. Kimyasal formülü $[\text{Ag}(\text{abn})(3\text{-cba})_2]$ (abn = 2-aminobenzonitril, 3-cba = 3-klorbenzoat

anyonu) olan kompleks dimerik yapıya sahiptir. İki Gümüş atomu ($Ag...Ag = 2,9329$ (16) Å) iki 3-klorbenzoat anyonunun karboksilat oksijenleri ve iki 2-aminobenzonitril moleküllerinin birer N atomları ile koordine olmaktadır [$Ag-O : 194$ (6) ve $2,202$ (6) Å, $Ag-N 2,624$ (7) Å]. Ag atomu etrafındaki bağ açıları $91,16$ (9), $102,80$ (9) ve $162,49$ (10) $^{\circ}$ dir.Kompleksin yapısı $[Ag(abn)(4-cba)]_2$ (4-cba = 4-klorbenzoat anyonu) yapısı ile benzerdir (Şekil 1.3.2).



Şekil 1.3.2. $Ag_2C_{28}H_{20}Cl_2N_4O_4 [Ag(abn)(4-cba)]_2$ Kompleksinin Molekül Yapısı [50]

Ray ve arkadaşları [51] $[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{N}_4\text{Py})(\text{CH}_3\text{CN})]^{2+}$ ($\text{N}_4\text{Py} = \text{N,N- bis (2- piridilmetil)- N-bis(2-piridilmetilamin)}$) anyonunun 3-klorobenzoik asit ile CH_2Cl_2 ortamında-30°C’de reaksiyonundan $[\text{Fe}^{\text{IV}}(\text{O})(\text{N}_4\text{Py})]^{2+}$ iyonunun oluşum mekanizmasını incelemişler.

1.4. Metal Halojenobenzoatların Nikotinamid ve Dietilnikotinamid Kompleksleri.

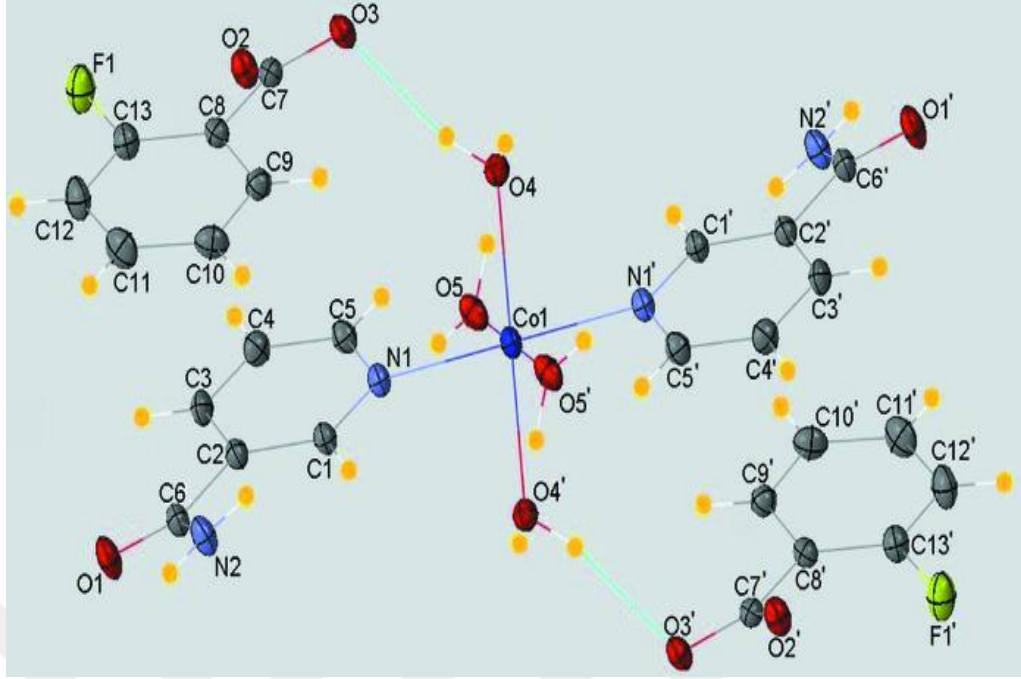
Nikotinamid (3-piridin karboksamid, $\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O}$, $M=122,12$ g/mol, $d=1,40$ g/ml (25°C), E.N. 128-131°C, K. N. 157 °C) PP veya B3 vitamini olarak bilinmektedir [52-54].

N,N-Dietilnikotinamid (Niketamid, 3-piridin dietilkarboksamid, $\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O}$, $M=178,12$ g/mol, $d=1,06$ g/mL (25°C), E.N. 23°C, K. N. 296-300°C) solunum stimülatörü olarak kullanılmaktadır [55].

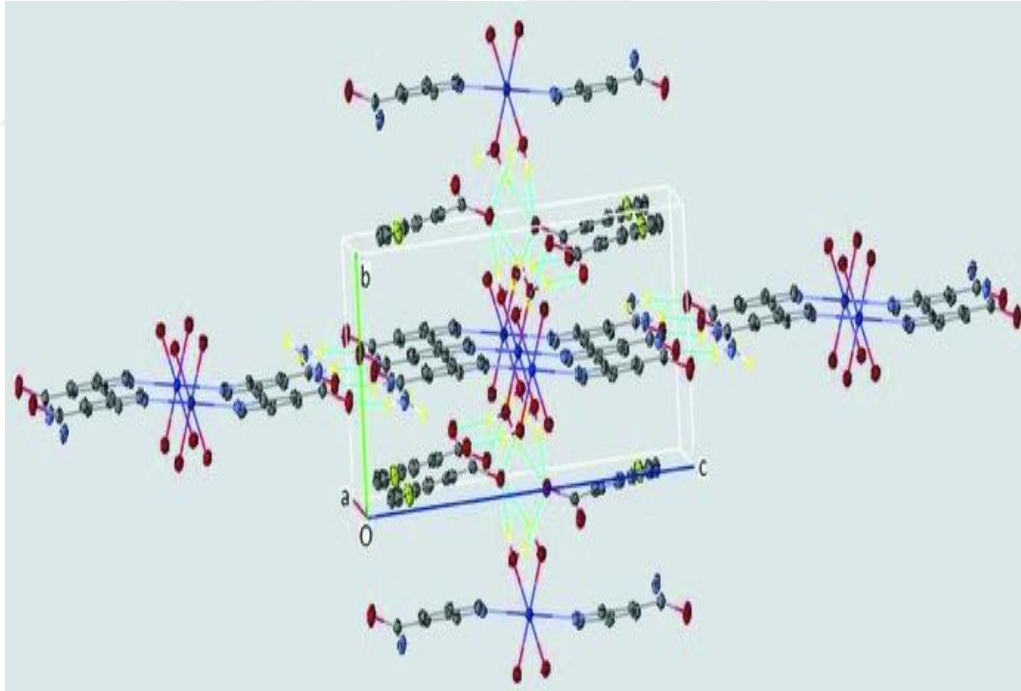
Son yirmi yılda gerek nikotinamid, gerekse de dietilnikotinamidin metal arilkarboksilatlarla komplekslerinin sentezi, spektroskopik ve yapısal özellikleri ile ilgili birçok çalışma yapılmıştır. [56-67]. Bunlar arasında metal halojenobenzoatların nikotinamid ve dietilnikotinamid kompleksleri dikkat çekmektedir.

1.4.1. Metal Halojenobenzoatların Nikotinamid Kompleksleri.

Özbek ve arkadaşları tarafından kobalt 2-florobenzoatın nikotinamid kompleksi $[\text{Co}(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2$ sentezlenerek kristal yapısı çözülmüştür [68]. Kompleks Co(II) atomu, iki monodentat nikotinamid ligandı, dört koordine olunmuş su molekülü ve iki florobenzoat anyonundan oluşmaktadır (şekil 1.4.1.1). Kobalt(II) atomunun ekvatoriyel çevresindeki dört oksijen atomu tahrif olunmuş düzlemsel kare oluşturuyor. Nikotinamid ligandlarının aksiyal pozisyonundaki iki azot atomu sayesinde koordinasyon polihedronu tahrif olunmuş oktahedrona tamamlanıyor. Karboksil grubu ile benzen halkası arasındaki dihedral açı 29,8 (3)° dir. Piridin ve benzen halkaları arasındaki dihedral açı ise 7,97 (12)° dir. Kristal yapısında moleküller O-H...O, N-H...O ve N-H...F hidrojen bağları vasıtası ile üç boyutlu şebeke oluşturuyorlar. Piridin ve benzen halkaları arasında π - π etkileşimi (3,673 (3) Å) kristal yapısını dayanıklı hale getiriyor (Şekil 1.4.1.2).

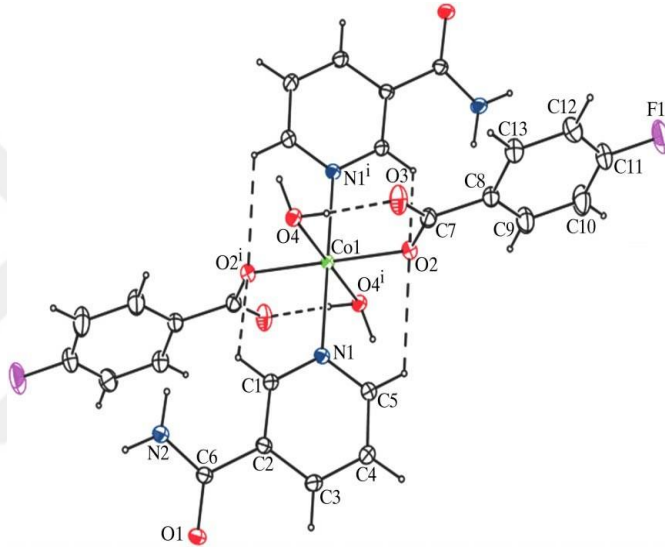


Şekil 1.4.1.1. $[\text{Co}(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2$ Kompleksinin Molekül Yapısı [68]

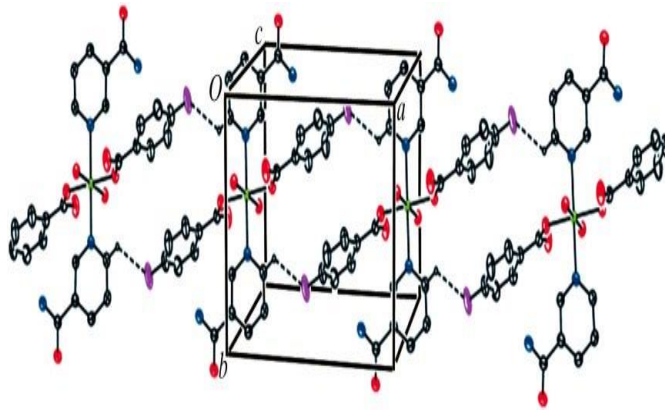


Şekil 1.4.1.2. $[\text{Co}(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2$ Kompleksinin Kristal Yapısı [68]

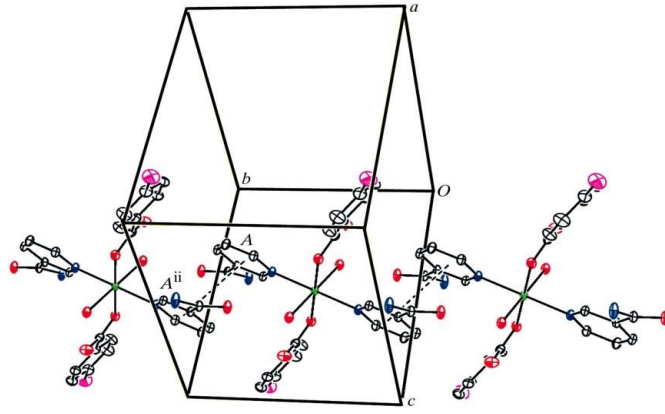
Kobalt(II) 4-florobenzoatın nikotinamid kompleksinin kristal yapısı Şahin ve arkadaşları tarafından [69] çözülmüştür. $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksi hidrojen bağları vasıtası ile oluşan üç boyutlu supramoleküler komplekstir. Simetri merkezinde olan kobalt(+2) iyonu iki piridin N atomu, iki karboksilat oksijen atomu ve iki suyun oksijen atomlarından oluşan oktahedral koordinasyona sahiptir (Şekil 1.4.1.3). Moleküller arası N-H...O ve O-H...O hidrojen bağları iki boyutlu zincirlerin oluşturduğu $R^2_3(6)$, $R^2_2(12)$ ve $R^2_2(16)$ halkalarını üretiyor (Şekil 1.4.1.4), üç boyutlu şebeke C-H...F, N-H...O ve O-H...O hidrojen bağları ve π - π etkileşimi sayesinde oluşuyor (Şekil 1.4.1.5).



Şekil 1.4.1.3. $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [69]

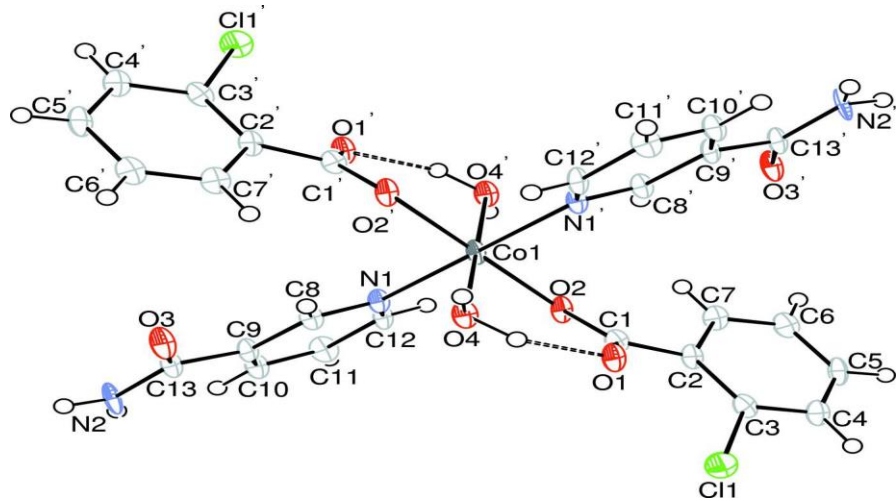


Şekil 1.4.1.4. $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Kristal Yapısı [69]



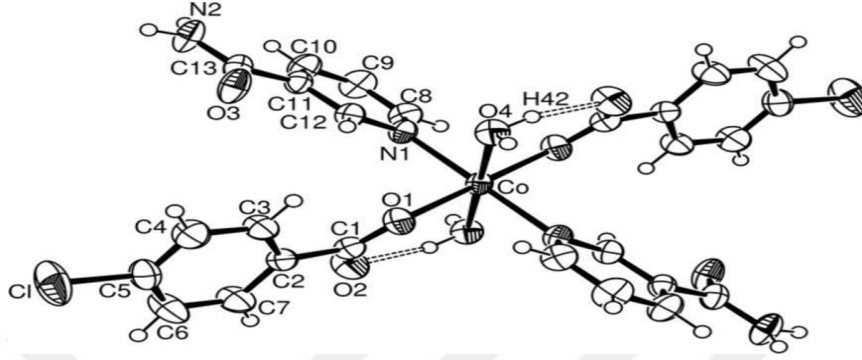
Şekil 1.4.1.5. $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Üç Boyutlu Yapısı [69]

Kobalt(II) 2-klorobenzoatın nikotinamid kompleksinde $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, Co(+2) kasyonu simetri merkezinde olup, iki klorobenzoat anyonu, iki nikotinamid molekülü ve iki su molekülü ile koordine olunmuştur (Şekil 1.4.1.6). Kobalt(+2) kationunun ekvatoriyal çevresindeki dört oksijen atomu kare düzlemsel yapı oluşturuyor. Nikotinamid ligandlarının aksiyon pozisyonundaki iki piridin azot atomları tahrif olunmuş oktahedral koordinasyon oluşturuyor. Karboksil grubu ile benzen halkası arasındaki dihedral açı $29,7 (4)^\circ$, piridin ve benzen halkaları arasındaki dihedral açı ise $83,17(15)^\circ$ dir. Moleküller arası hidrojen bağları sayesinde moleküller üç boyutlu şebeke oluşturuyorlar [70].

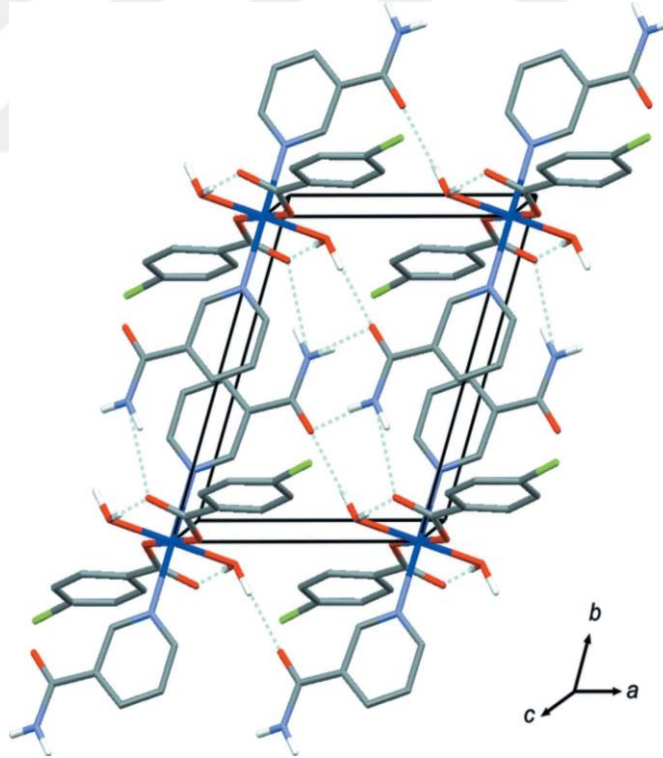


Şekil 1.4.1.6. $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [70]

Kobalt 4-klorobenzoatın nikotinamid kompleksinin $\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2$ yapısında [71] kobalt(+2) iyonunun koordinasyon çevresi 2-klorobenzoat kompleksindeki [70] benzemektedir (Şekil 1.4.1.7). Bu komplekste hidrojen bağları vasıtasıyla moleküller iki boyutlu tabaka oluşturmaktadırlar (Şekil 1.4.1.8).

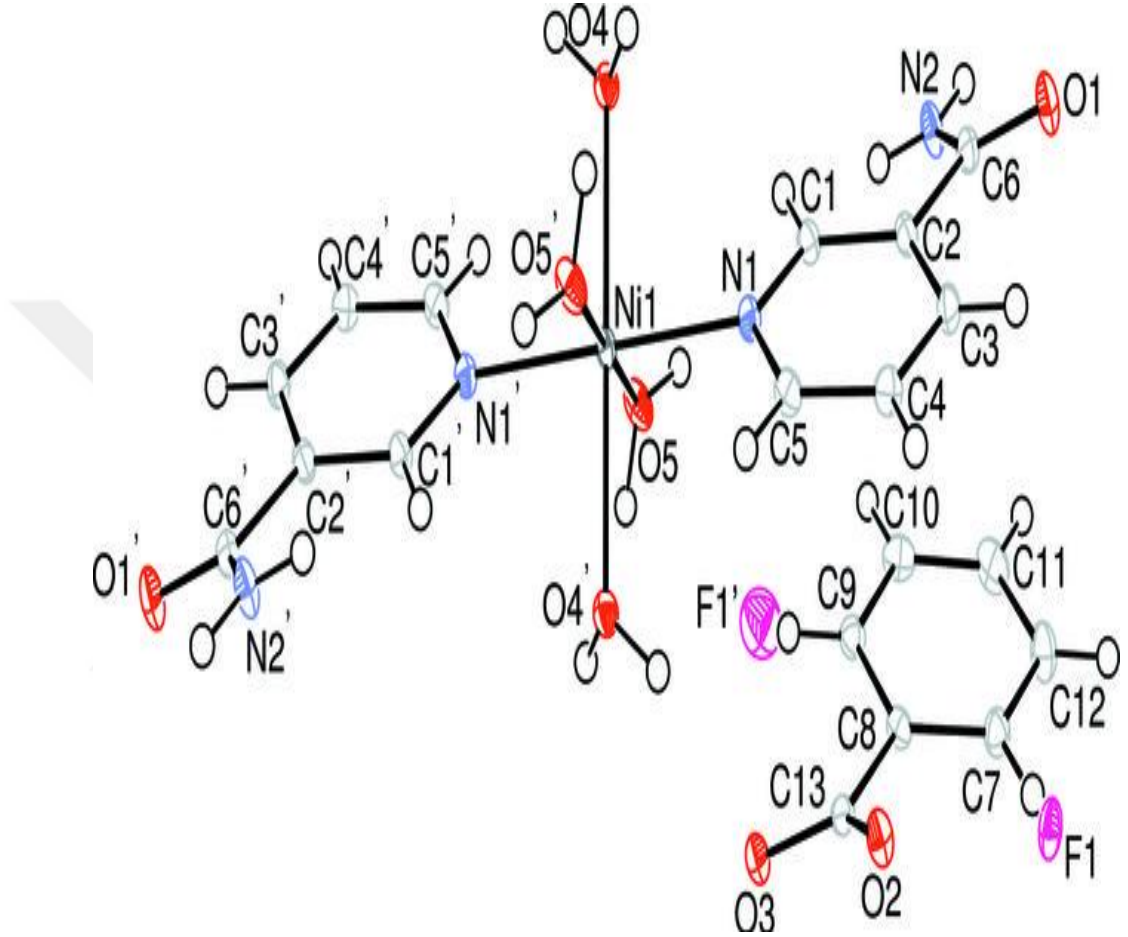


Şekil 1.4.1.7. $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [71]



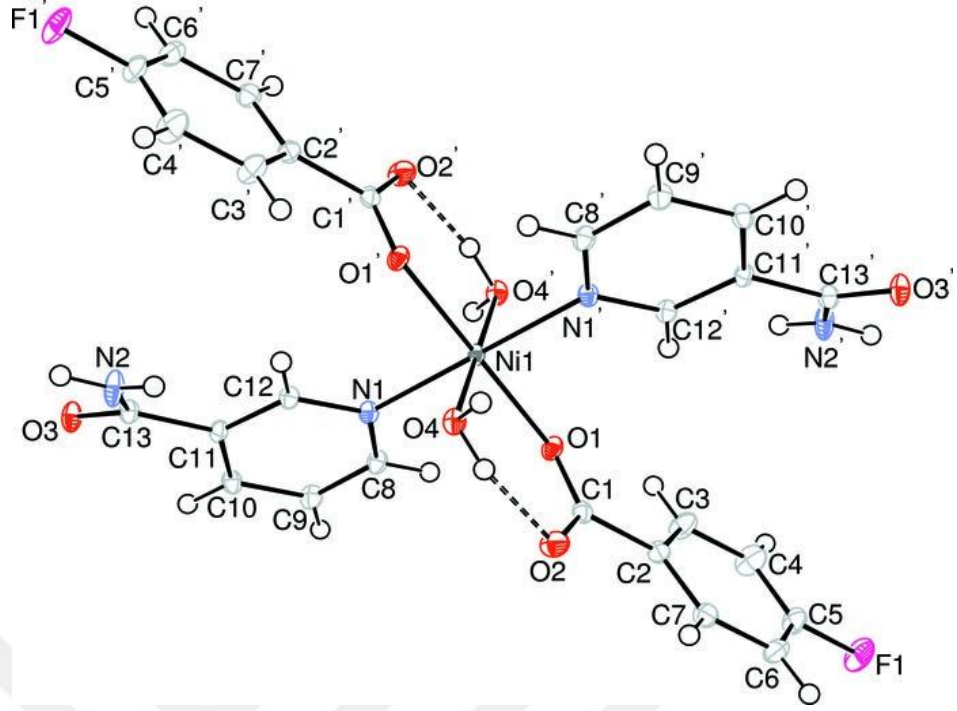
Şekil 1.4.1.8. $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Kristal Yapısı [71]

Nikel(II) 2-florobenzoatın nikotinamid kompleksi $[\text{Ni}(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2$ uygun kobalt kompleksi ile [68] eş yapılıdır (Şekil 1.4.1.9) [72].



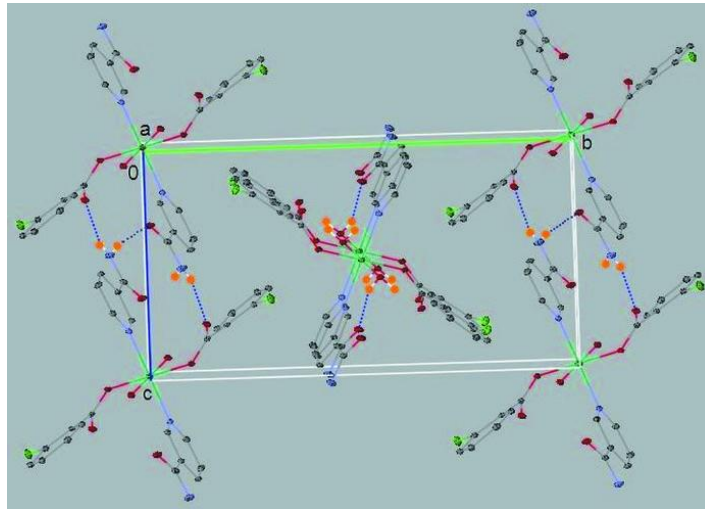
Şekil 1.4.1.9. $[\text{Ni}(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_4](\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2$ iyonik yapısı [72]

Nikel(II) 4-florobenzoatın nikotinamid kompleksi de $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, uygun kobalt kompleksi ile [69] eş yapılıdır (şekil1.4.1.10) [73].



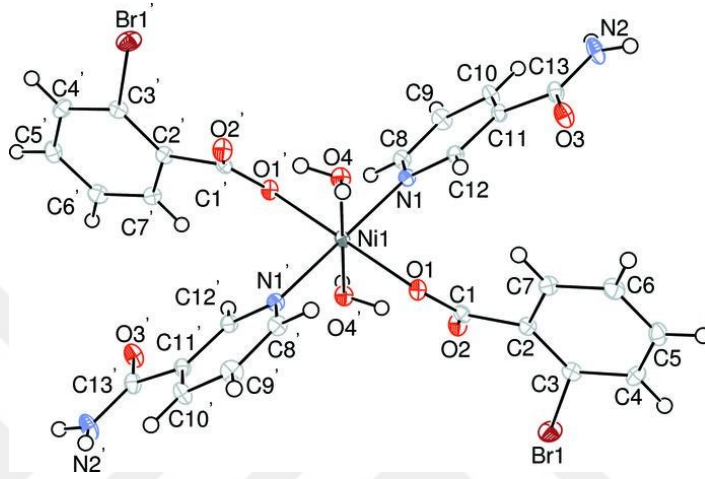
Şekil 1.4.1.10. $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [73]

Nikel(II) 2-klororobenzoatın nikotinamid kompleksinin $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, yapısı da uygun kobalt kompleksinin yapısı [70] ile aynıdır (Şekil 1.4.1.11) [74].



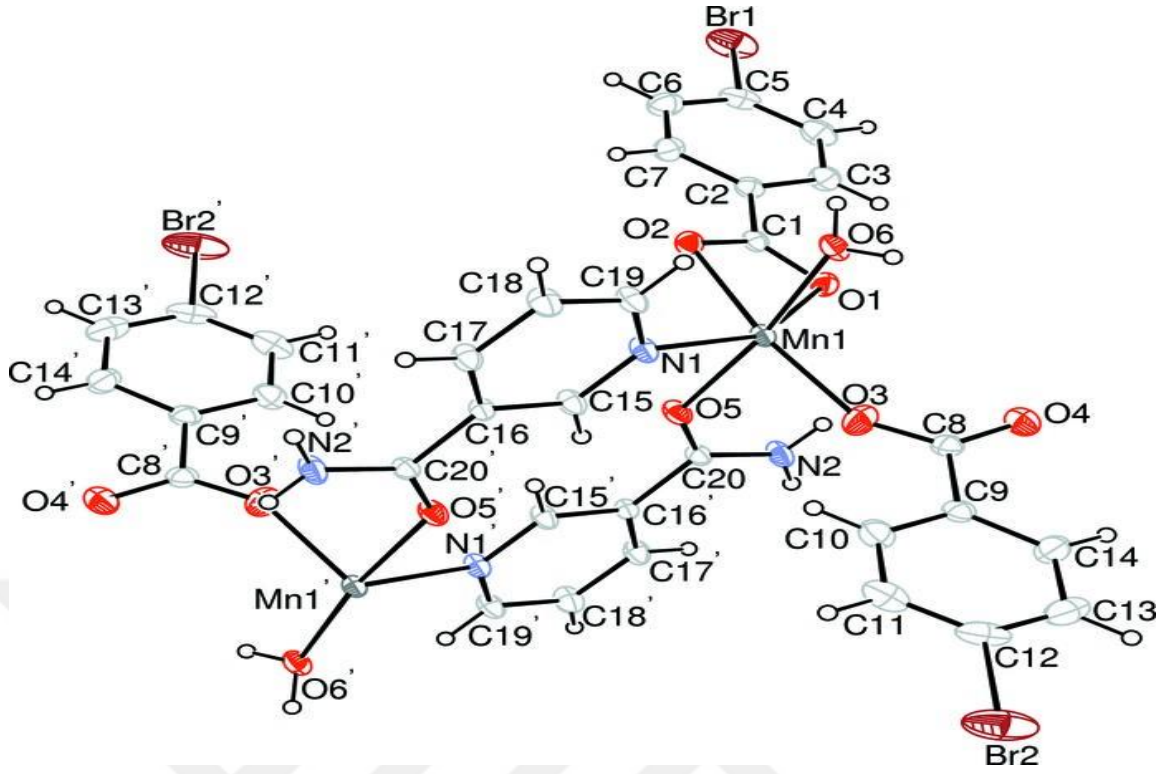
Şekil 1.4.1.11. $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Kristal Yapısı [74]

Nikel(II) 2-bromobenzoatın nikotinamid kompleksinde $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ simetri merkezinde bulunan nikel atomu *trans* pozisyonda olan iki bromobenzoat anyonu, iki nikotinamid ligandı ve iki su molekülü ile koordine olunmuştur. Ligandlar monodentatdırlar. Karboksil grupları ile benzen halkaları arasındaki dihedral açılar $30,81 (17)^\circ$, piridin ve benzen halkaları arasındaki dihedral açılar ise $84,66 (6)^\circ$ 'dir (Şekil 1.4.1.12) [75].

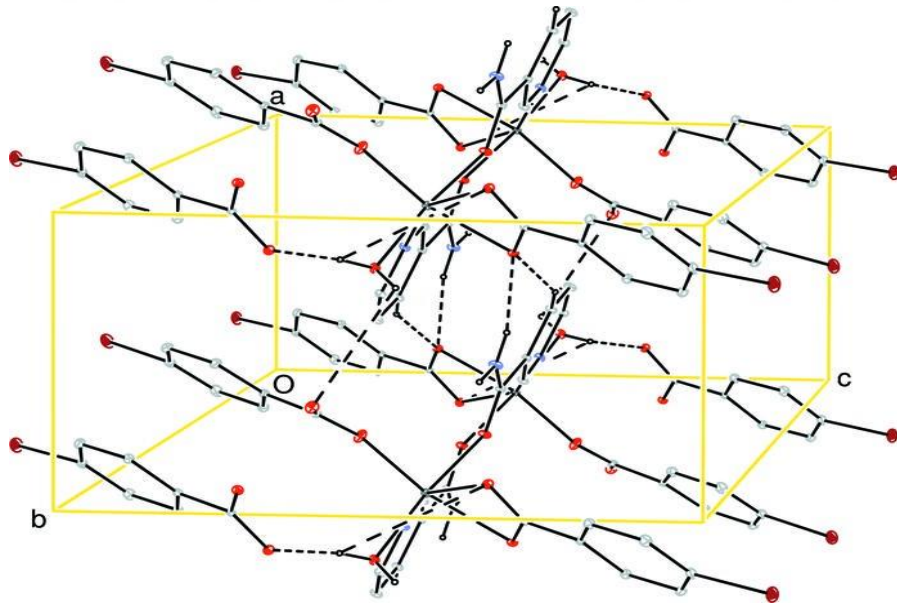


Şekil 1.4.1.12. $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [75]

Mangan(II) 4-bromobenzoatın nikotinamid kompleksi $[\text{Mn}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, simetri merkezli iki çekirdekli moleküllerden oluşmaktadır. Mn(II) atomu köprü rolü oynayan nikotinamid ligandının bir azot atomu ve diğer nikotinamid molekülünün bir oksijen atomu, iki 4-bromobenzoat ligandlarından üç oksijen atomu ve bir su molekülü ile oktahedral geometri ile koordine olunmuştur (Şekil1.4.1.13). Kompleksinin kristal yapısı (Şekil 1.4.1.14)'de verilmektedir [76].



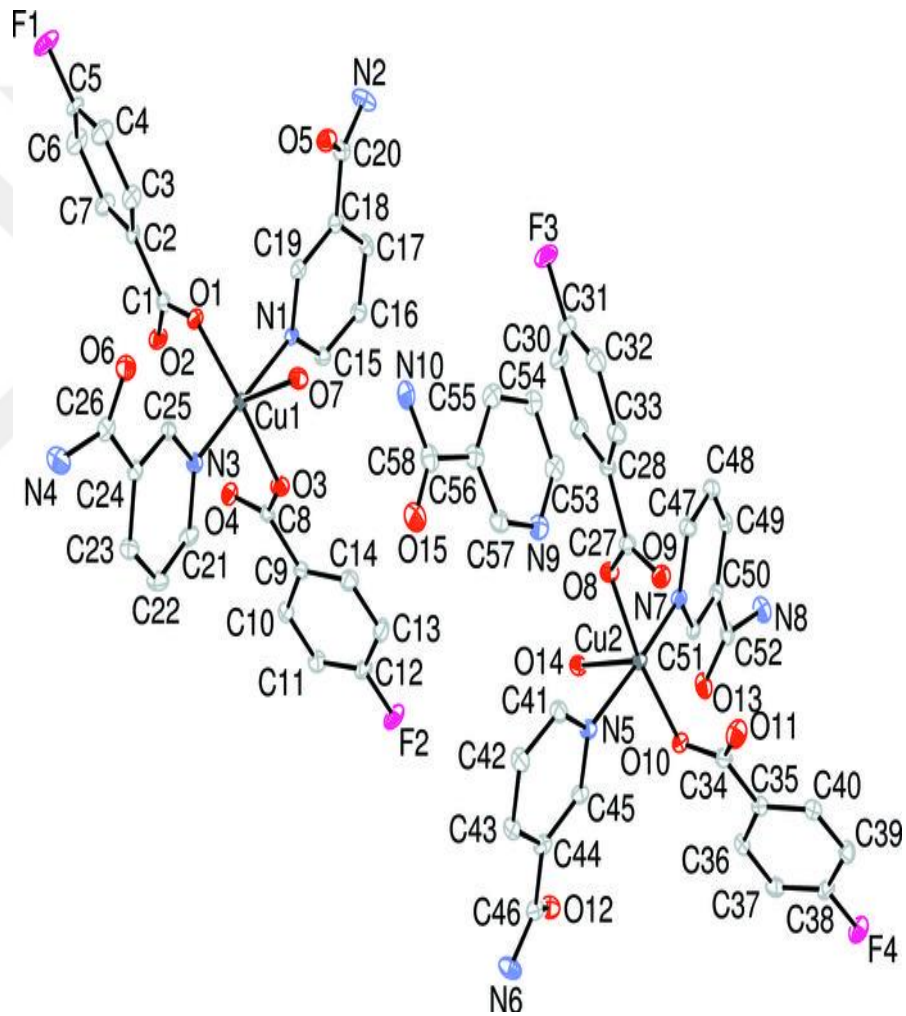
Şekil 1.4.1.13. $[\text{Mn}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı
[76].



Şekil 1.4.1.14. $[\text{Mn}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Kristal Yapısı
[76]

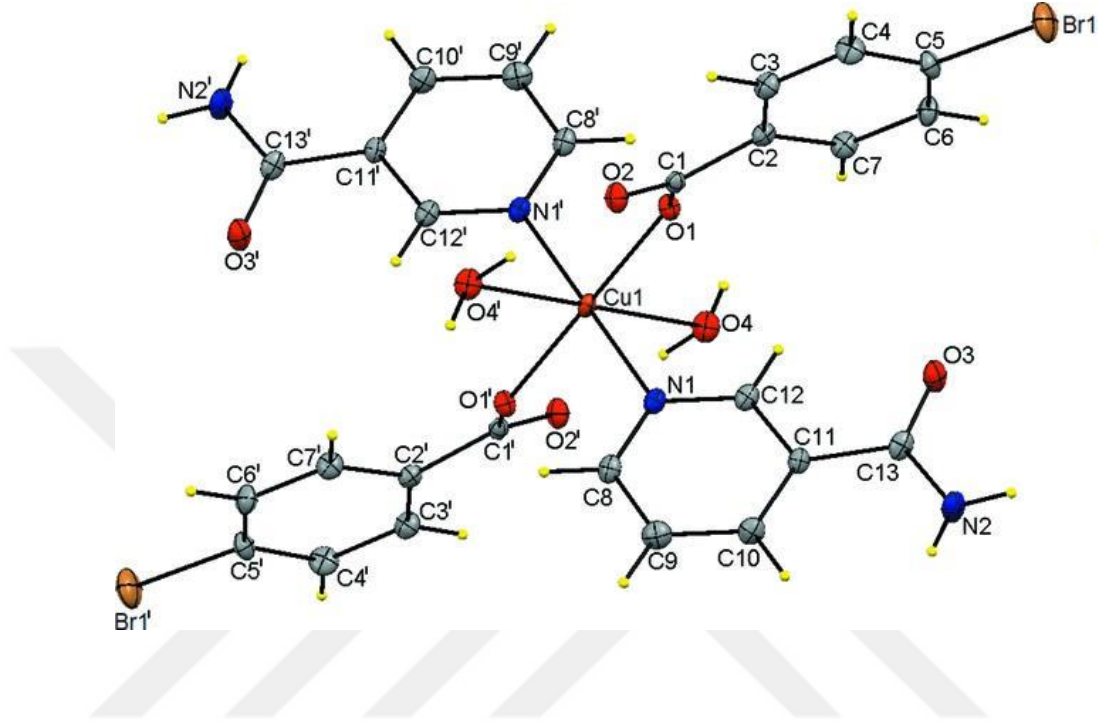
Bakır(II) 4-florobenzoatın nikotinamid kompleksi $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})] \cdot 0.5\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O} \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ iki 4-florobenzoat ligandı, bir nikotinamid molekülü ve altı su molekülünden oluşmaktadır [77].

Cu(II) iyonu iki 4-florobenzoat ligandının iki oksijen atomu, iki nikotinamid ligandının iki azot atomu ve bir su oksijen atomu vasıtası ile hafif bozunmuş kare piramidal geometriye sahiptir. Moleküller arası hidrojen bağları vasıtası ile üç boyutlu ağlar oluşmaktadır (Şekil 1.4.1.15).



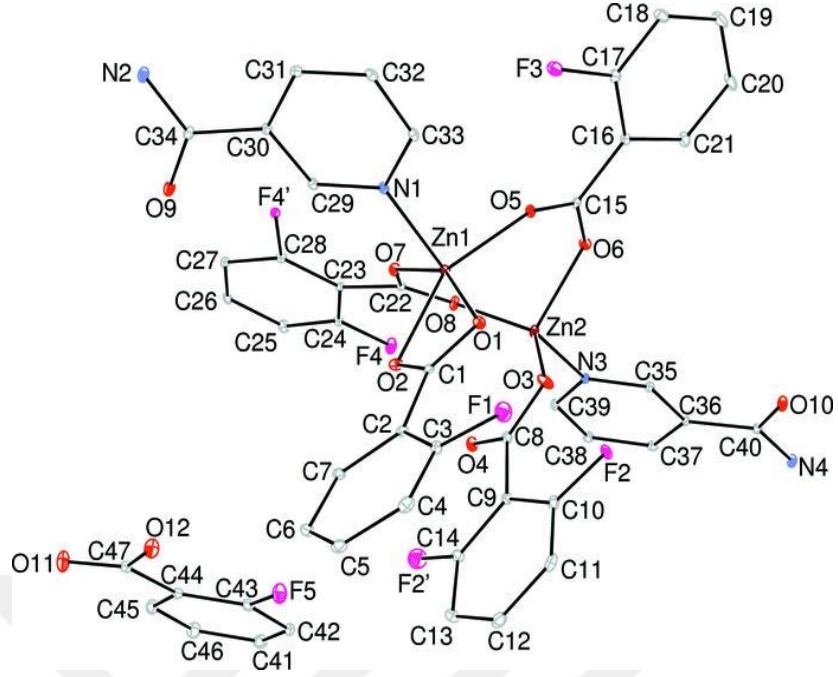
Şekil 1.4.1.15. $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})] \cdot 0.5\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O} \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ Kompleksinin Yapısı [77]

Bakır(II) 4-brombenzoatın nikotinamid kompleksi $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ *trans*-oktahedral yapıya sahiptir (şekil 1.4.1.16) [78].



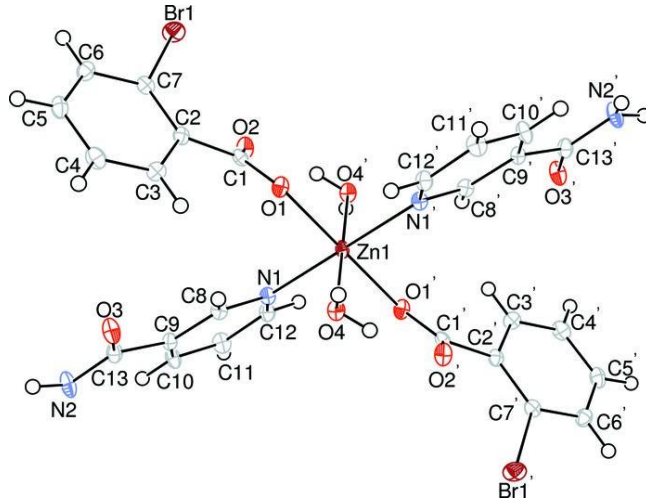
Şekil 1.4.1.16. $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı[78]

Çinko(II) 2-florobenzoatın nikotinamid kompleksi $[\text{Zn}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$ $\text{C}_7\text{H}_5\text{FO}_2$, iki florbenzoat anyonunun iki karboksil grubu vasıtası ile köprü oluşturan iki çekirdekli çinko kompleksi ve bir 2-florobenzoik asit molekülünden oluşmaktadır. İki köprü 2-florobenzoat anyonu, bir şelat 2-florobenzoat anyonu ve bir nikotinamid ligandı bir çinko katyonu ile koordine olarak tahrif olunmuş kare piramidal geometri oluşturmuş, iki köprü 2-florobenzoat anyonu, bir monodentant 2-florobenzoat anyonu ve bir nikotinamid ligandı diğer çinko katyonu ile tahrif olunmuş tetrahedral geometri tamamlanmıştır. Kristal yapısında koordine olunmamış 2-florobenzoik asit molekülleri O-H...O hidrojen bağları vasıtası ile simetri merkezli supramoleküler dimerler oluşturuyorlar (Şekil 1.4.1.17) [79].



Şekil 1.4.1.17. $[\text{Zn}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2] \cdot \text{C}_7\text{H}_5\text{FO}_2$ Kompleksinin Molekül Yapısı[79]

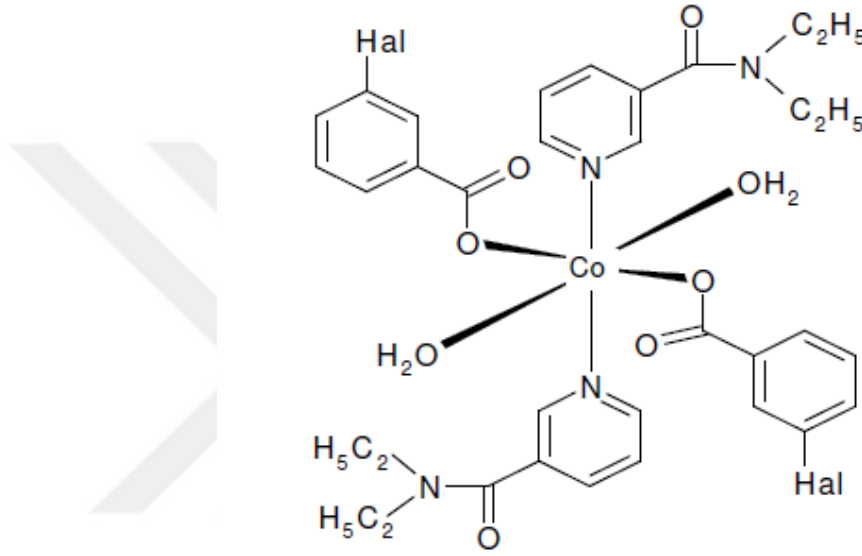
Çinko(II) 2-bromobenzoatın nikotinamid kompleksinin $[\text{Zn}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, kristal yapısı (şekil 1.4.1.18) [80] uygun nikel kompleksinin kristal yapısı ile [75] ile aynıdır.



Şekil 1.4.1.18. $[\text{Zn}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Kristal Yapısı [80]

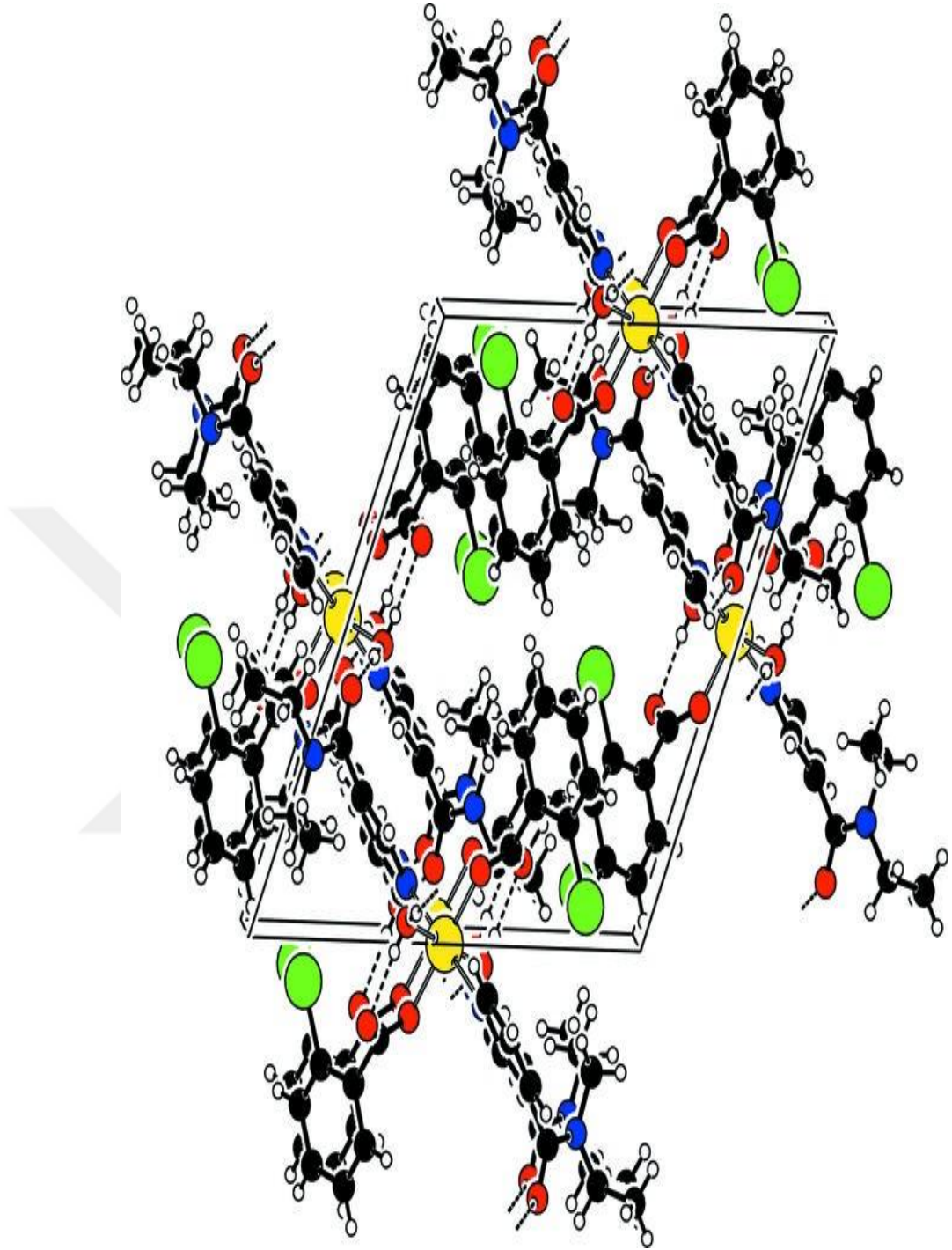
1.4.2. Metal Halojenbenzoatların Dietilnikotinamid Kompleksleri.

Öztürkkan ve arkadaşları [81] kobalt (II) 4-halojenbenzoatlarının dietilnikotinamid komplekslerinin sentezleyerek elde ettikleri bileşikleri elementel analiz, FT-IR spektroskopisi ve TGA,DTA yöntemleri ile karakterize ederek manyetik duyarlılıklarını incelemişler. Komplekslerin genel formülünün $[Co(4-XC_6H_4COO)_2(DENA)_2(H_2O)_2]$ ($X=F, Cl, Br, I$) olduğu belirlenmiş yapılarının şekildeki gibi olduğu tahmin edilmiştir (Şekil 1.4.2.1).



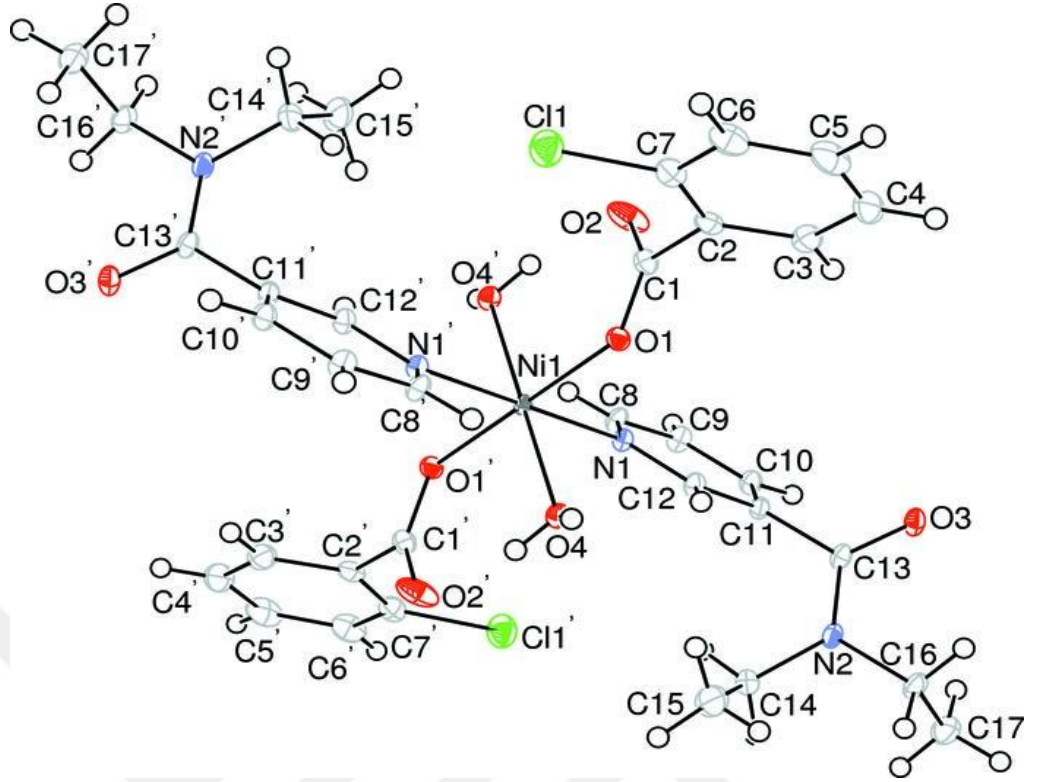
Şekil 1.4.2.1. $[Co(4-XC_6H_4COO)_2(DENA)_2(H_2O)_2]$ Komplekslerinin Yapısı [81]

Kobalt(II) 2-bromobenzoatın dietilnikotinamid kompleksi $[Co(C_7H_4BrO_2)_2(C_{10}H_{14}N_2O)_2(H_2O)_2]$ tek çekirdekli bileşik olup, kobalt(+2) iyonu simetri merkezine yerleşmiştir. Bileşiğin asimetric birimi bir 2-bromobenzoat anyonu, bir dietilnikotinamid ve bir koordine olunmuş su molekülünden oluşmaktadır. Tüm ligandlar monodentantdır. Karboksilat grubu ve benzen halkaları arasındaki dihedral açı $84.7(1)^\circ$, piridin ve benzen halkaları arasındaki dihedral açı ise $43,64(6)^\circ$ dir. Moleküller arası O - H...O ve C - H...O hidrojen bağları sayesinde moleküller üç boyutlu ağ oluşturuyorlar (Şekil 1.4.2.2) [82].



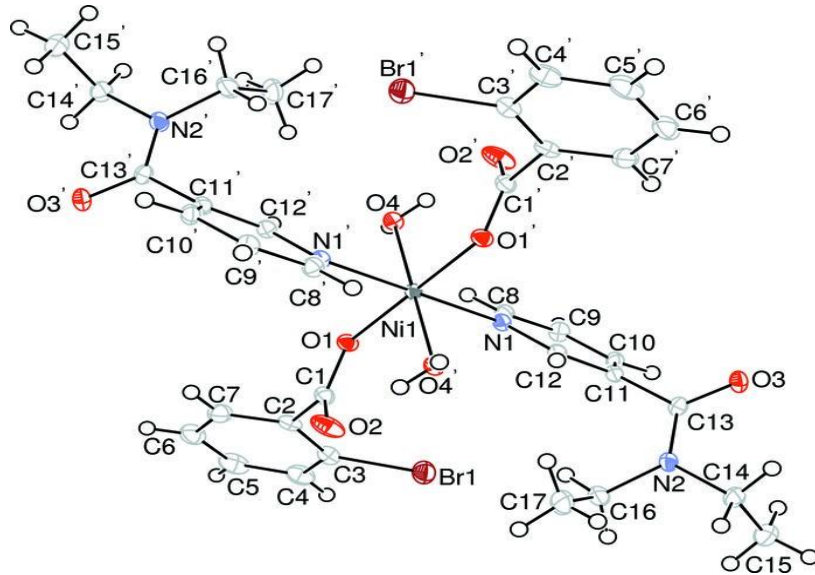
Şekil 1.4.2.2. $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Kristal Yapısı [82]

Hökelek ve arkadaşları tarafından [83-84] sentezlenen nikel (II) 2-klorobenzoat ve nikel(II) 2-bromobenzoatların dietilnikotinamid kompleksleri eş yapılı olup *trans*-oktahedral koordinasyonu sahiptirler (Şekil 1.4.2.3 ve 1.4.2.4).



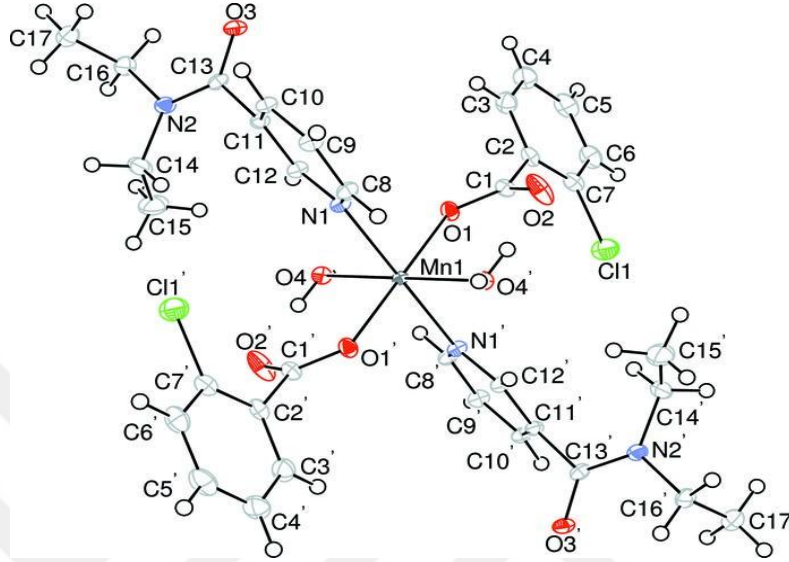
Şekil 1.4.2.3. $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı

[83]

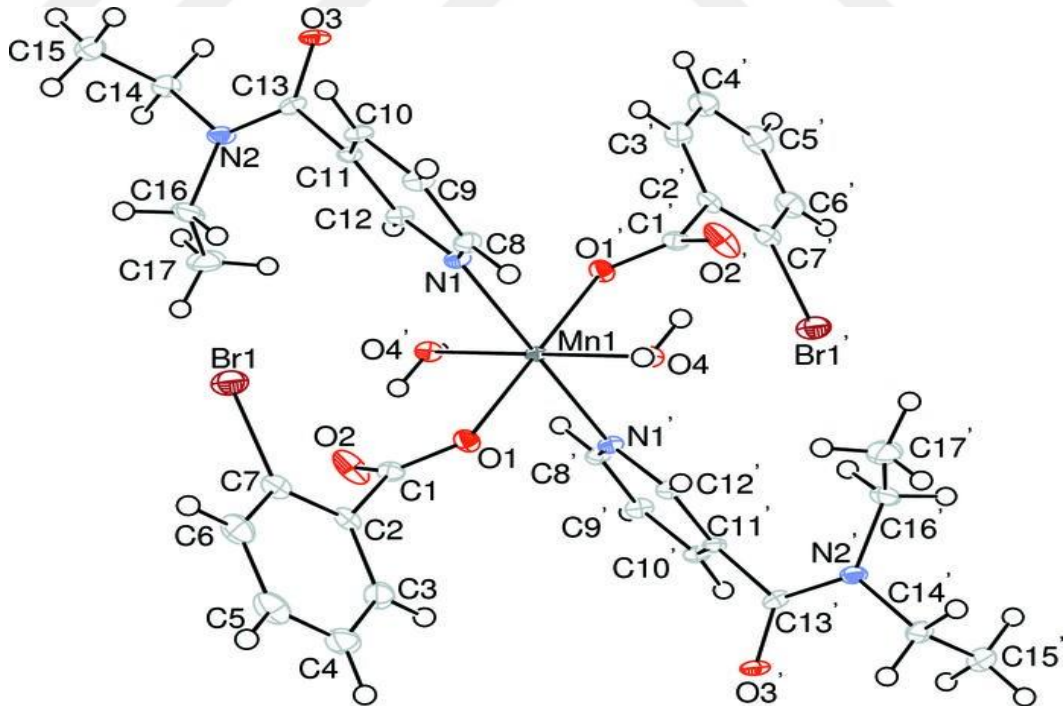


Şekil 1.4.2.4 $[\text{Ni}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül yapısı [84]

Mangan(II) 2-klorobenzoat ve mangan(II) 2-bromobenzoatların dietilnikotinamid kompleksleri de eş yapılı (Şekil 1.4.2.5 ve 1.4.2.6) [85,86] olup, uygun kobalt (II) kompleksleri [83 , 84] ile benzer yapıdadırlar.

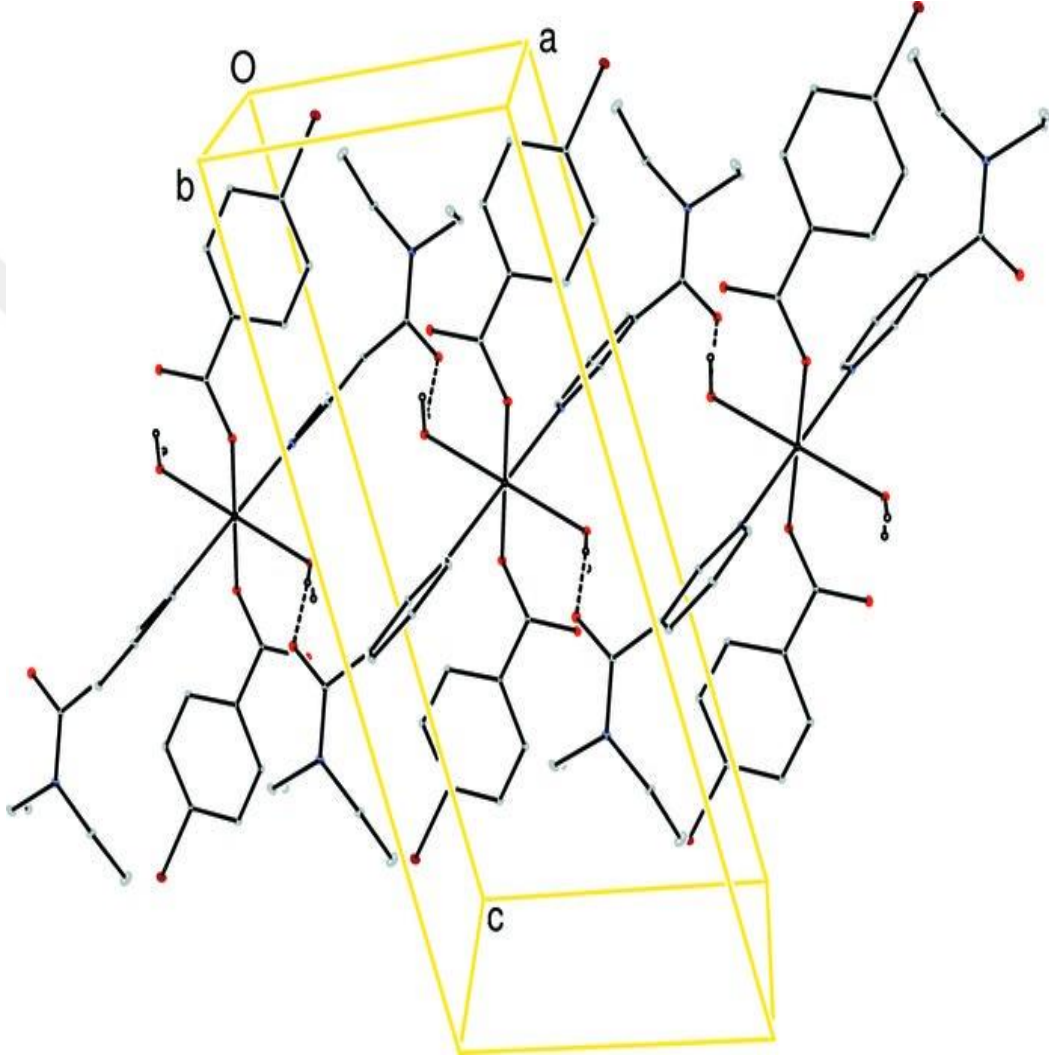


Şekil 1.4.2.5. $[\text{Mn}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksin Molekül Yapısı [85]



Şekil 1.4.2.6. $[\text{Mn}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [86]

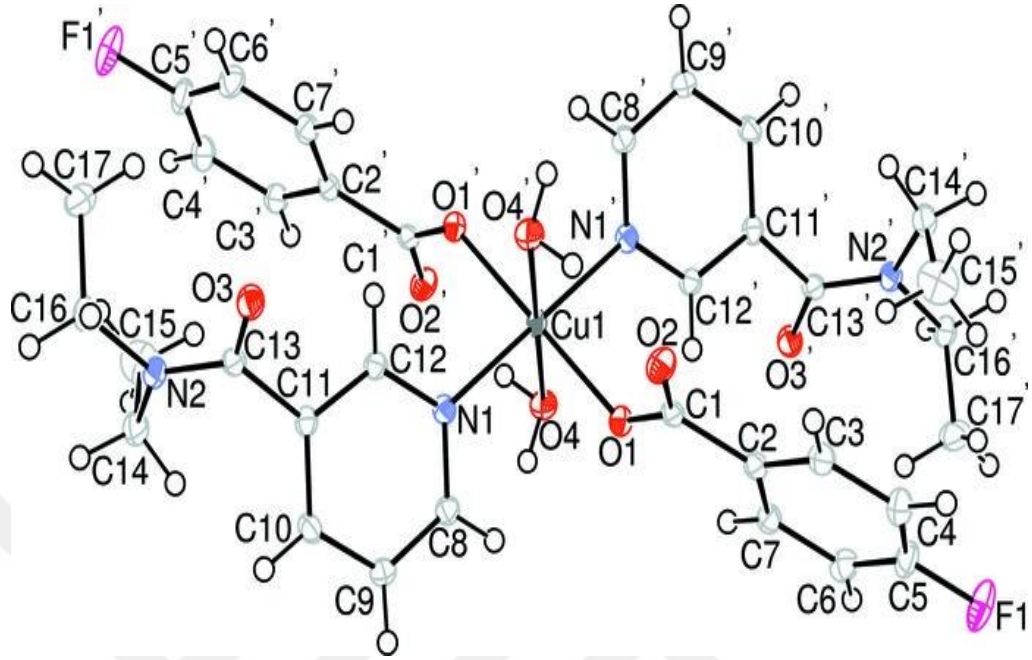
Mangan(II) 4-florobenzoatın dietilnikotinamid kompleksi $[\text{Mn}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, simetri merkezinde bulunan mangan(+2) kasyonu, iki koordine olunmuş dietilnikotinamid ligandı iki monodentant 4-bromobenzoat anyonu ve iki su molekülünden oluşmaktadır. Kristal yapısında moleküller arası C-H...O hidrojen bağları molekülleri iki boyutlu ağ birleştiriyor (Şekil 1.4.2.7) [87].



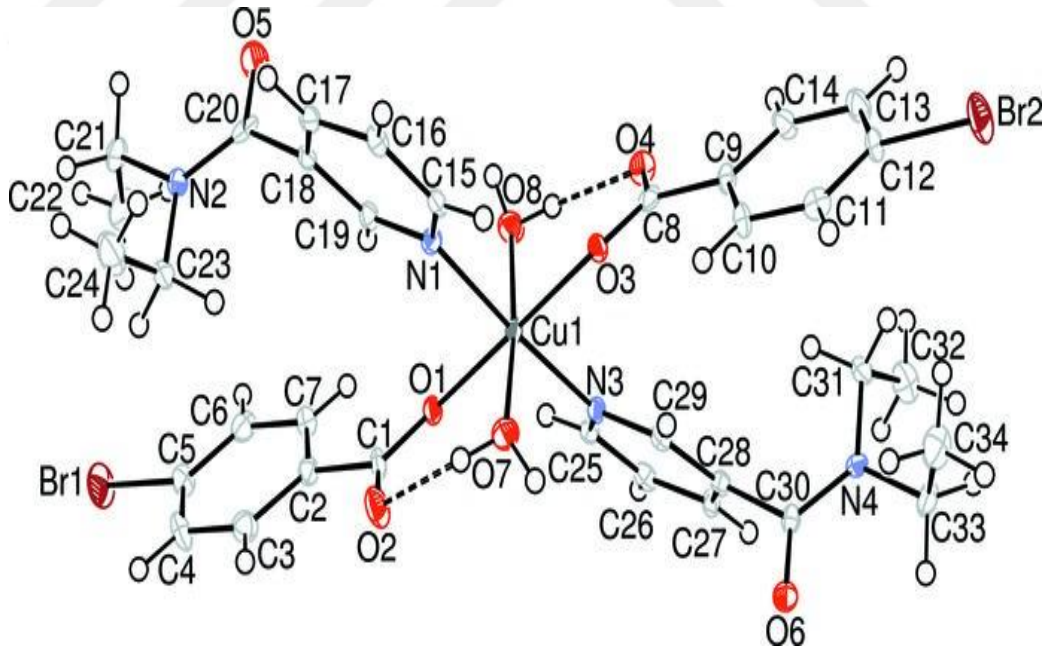
Şekil 1.4.2.7. $[\text{Mn}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Kristal Yapısı [87]

Necefoğlu ve arkadaşları [88, 89] bakır(II) 4-florobenzoat ve bakır(II) 4-bromobenzoat komplekslerini sentezleyerek kristal yapılarını çözmüşler. Bu

komplekslerin yapıları benzer olup, Cu atomunun çevresi *trans*-oktahedral geometridedir (Şekil 1.4.2.8 ve 1.4.2.9).

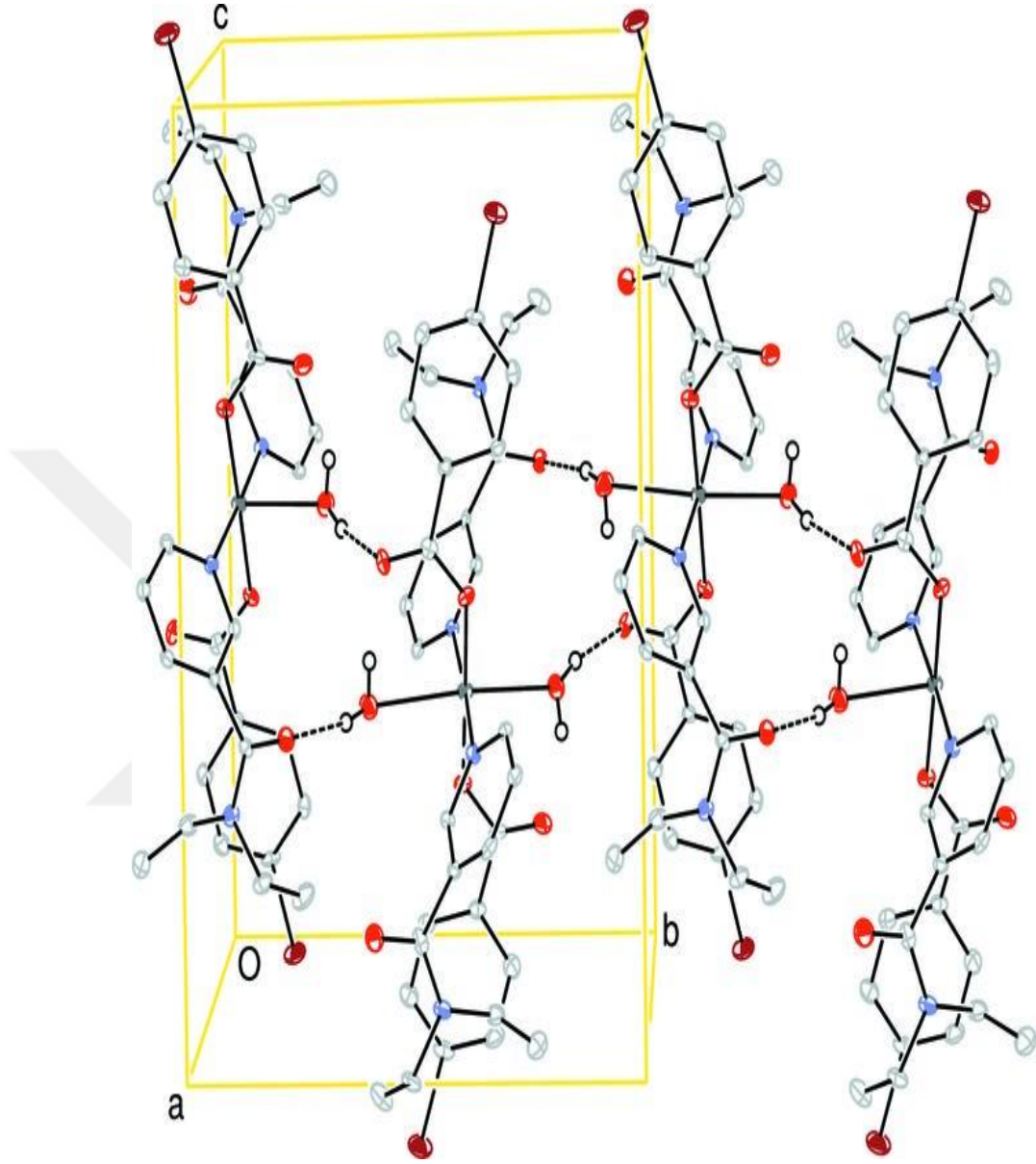


Şekil 1.4.2.8. $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{FO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [88]



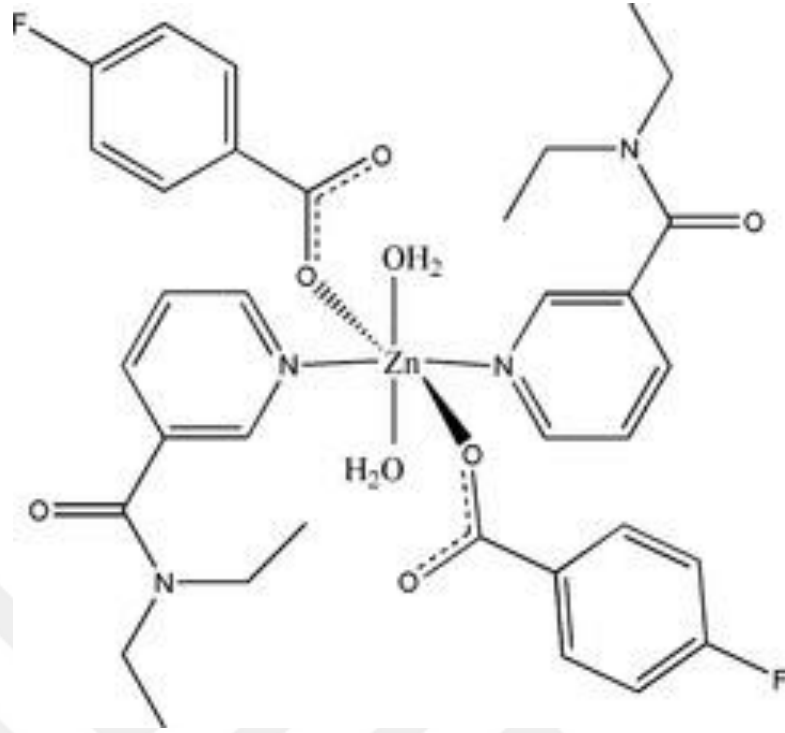
Şekil 1.4.2.9. $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [89]

Bu komplekslerde de moleküller arası hidrojen-bağları sayesinde üç boyutlu ağ oluşuyor (Şekil 1.4.2.10) [89].

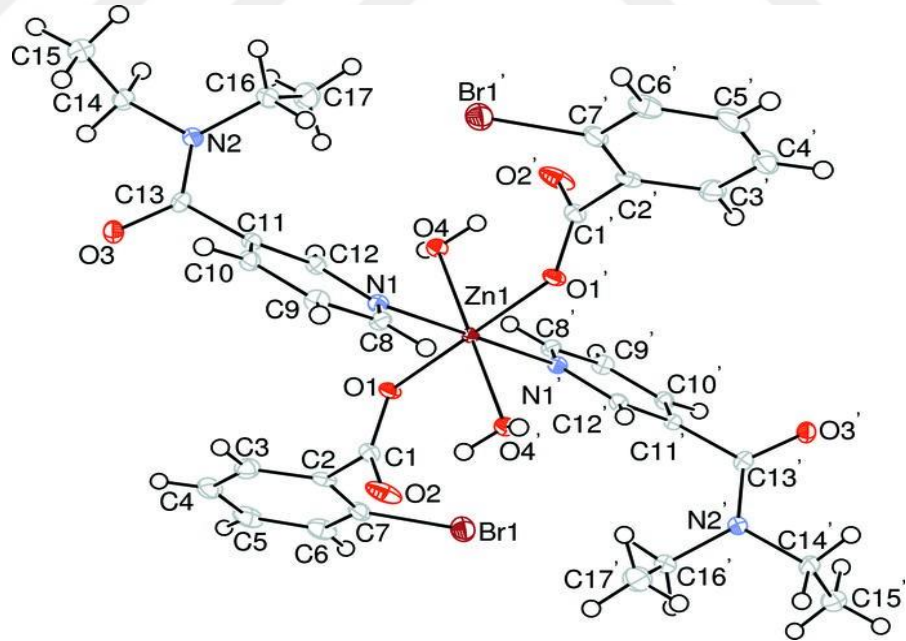


Şekil 1.4.2.10. $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{BrO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin Kristal Yapısı [89]

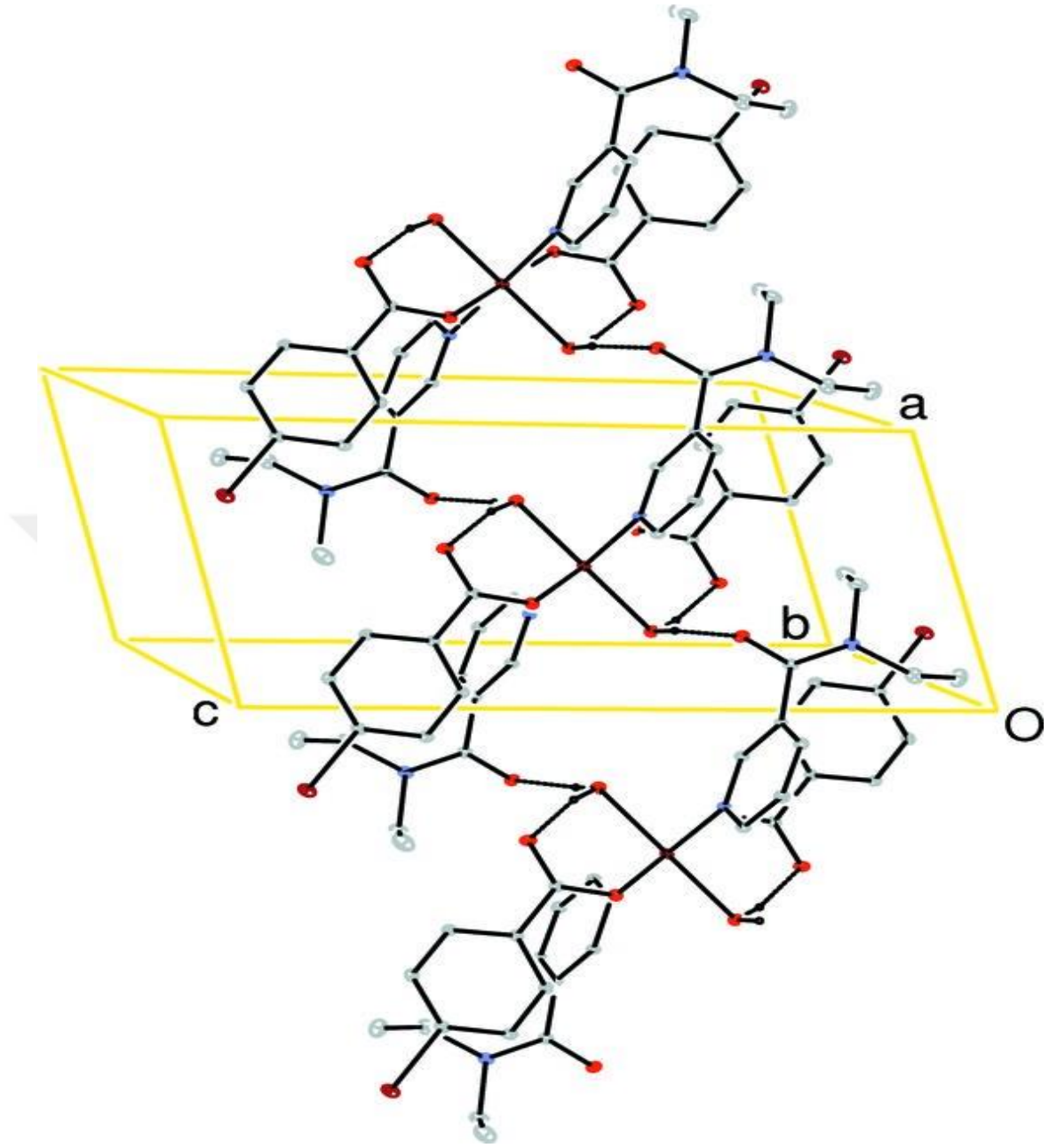
Çinko(II) 4-florobenzoat, çinko(II) 2-bromobenzoat ve çinko(II) 4-bromobenzoatların dietilnikotinamid kompleksleri de *trans*-oktahedral geometridedirler (Şekil 1.4.2.11 - 1.4.2.12 ve 1.4.2.13) [90-92].



Şekil 1.4.2.11. $[Zn(C_7H_4FO_2)_2(C_{10}H_{14}N_2O)_2(H_2O)_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [90].



Şekil 1.4.2.12. $[Zn(C_7H_4BrO_2)_2(C_{10}H_{14}N_2O)_2(H_2O)_2]$ Kompleksinin Molekül Yapısı [91]



Şekil 1.4.2.13. $Zn(C_7H_4BrO_2)_2(C_{10}H_{14}N_2O)_2(H_2O)_2$ Kompleksinin Kristal Yapısı [92]

2. MATERYAL, METOT VE SENTEZ

2.1. Materyal

2.1.1. Kullanılan Kimyasal Maddeler

Bu çalışma yapılırken, Kafkas Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Anorganik Kimya Araştırma Laboratuvarında gerçekleştirilmiş olup çalışmada kullanılan *N,N'*-dietilnikotinamid Tatkim farm Preparat (Tataristan, Rusya Federasyonu) firmasından, diğer kimyasal maddeler Fluka, Merck, Aldrich firmalarından temin edilmiştir. Komplekslerin sentezinde, sodyum bikarbonat NaHCO_3 , 3-klorobenzoik asiti nikel(II) sülfat heksahidrat ($\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$), kobalt(II) sülfat heptahidrat ($\text{CoSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$), mangan(II) sülfat monohidrat ($\text{MnSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$), çinko(II) sülfat monohidrat ($\text{ZnSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$) nikotinamid metal tuzları kullanılmıştır.

2.1.2. Kullanılan Aletler

Elementel Analiz: LECO CHNS 932, İnönü Üniversitesi Merkez Araştırma Laboratuvarı, Malatya.

Infrared (IR) Spektrometresi: Perkin Elmer Spectrum RXI FT-IR System, Kafkas Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü, Kars

Ultraviyole-Visible(UV-vis) Spektrometresi: Perkin Elmer Lambda 25, Kafkas Üniversitesi, Fizik Bölümü, Kars.

Termik Analiz: Rigaku TG 8110 termik analizatörlü TAS 100 (Azot atmosferi), Hacettepe Üniversitesi Fen Fakültesi, Kimya Bölümü, Ankara.

2.2. Metot

2.2.1. Elemental Analiz

Elemental analiz çalışmaları ile komplekslerin içerdiği element miktarları hakkında kesin bir veri elde edilmesi mümkündür. Bu elde edilen deneysel veriler ile teorik veriler kıyaslanmasına bağlı olarak komplekslerin yapısındaki hangi ligandlardan

ne oranda bulunduđu hakkında ise kesin bir bilgi olmasa da, bir fikir yürütebilmemiz konusunda bize yardımcı olacađı aşıkardır.

2.2.2. Infrared Spektrum

Komplekslerin yapısında bulunan fonksiyonel gruplar, bađlanan atomlar ile bu atomların bađlanma pozisyonları IR spektroskopisiyle belirlenebilir. Ayrıca bununla birlikte bu fonksiyonel grup ve atomların oluşturmuş olduđu titreşim frekanslarından da faydalanmak sureti ile komplekslerin geometrik şekilleri ve yapıda bulunan bađların türleri hakkında da fikir yürütülebilmeside mümkündür.

2.2.3. Termik Analiz

Günümüzde termik analiz çalışmaları yapılan koordinasyon kimyasında yaygın olarak kullanılmaktadır. Metal komplekslerinin genel özellikleri dikkate alındığında basamaklı bir bozunma şekli göstermektedir. Bu şekilde bozunma ise çeşitli termik analiz metodları kullanılması sistematik araştırmalar bakımından bir önemli rol oynamaktadır. Komplekslerin termik kararlılıkları göz önünde bulundurulursa, ayrılan ve kalan parçalanma ürünlerinden yola çıkarak stokiometrinin belirlemede termogravimetri (TG) kullanılmaktadır. TG analizi bozunmalar sonucu meydana gelen katı ara ürünlerin termik kararlılıkları içinde kullanılması mümkündür. Bozunma ürünlerinin tespit edilmesi sonucu komplekslerin bozunma mekanizmaları tahmin edilerek fikir yürütülebilir.

TG sonuçları ve buna bađlı olarak meydana gelen DTG eğrileri komplekslerin bozunma kinetiklerinin belirlenmesinde önemlidir. Diferansiyel Termik Analiz (DTA), komplekslerin bozunma sıcaklık aralıklarının, erime noktalarının ve bozunma olaylarının aydınlatılmasında sık bir şekilde kullanılır. DTA, erime entalpileri, süblimasyon entalpilerinin bulunması, ayrıca kısmen de olsa, metal-ligand bađ enerjisinin belirlenmesinde kullanıldığı bilinmektedir. Termik analiz metodlarının birlikte kullanılması ve yapılan termik analiz çalışmaları ile metal kompleksler için ayrıca önem arz etmektedir. Isı sonucu meydana gelen bozunmayı da anlamamız için TG ve DTA eğrileri kullanılmaktadır. Bu eğrilerde erime olayı keskin bir DTA piki ile anlaşılabilir. Olan bu pike de denk gelen TG eğrisinde bir ağırlık kaybı bulunmaz.

Bozunma olayı olduğunda ise DTA piki geniş ve endotermik bir şekilde olup, buna karşılık gelen TG eğrisinde ağırlık kaybı gözlemlenebilir. Elde edilme koşulları aynı olan bir numunenin TG ve DTA sonuçları dikkate alındığında ağırlık azalmaları ve bozunma sıcaklıkları arasında bir bağıntı kurulabilmesi mümkündür. TG ve MS (kütlespektroskopisi) eğrilerinin birleştirilmesi sonucu ortamdan açığa çıkan bozunma ürünlerinin nitelikleri belirlenebilir.

Termik analiz eğrilerinin alındığı şartlar: Referans: Sinterleşmiş α -Al₂O₃, Isıtma hızı: 10 °C/dak. Kroze: Platin, Atmosfer: Azot, Gaz akış hızı: 100 ml/dak, Numune miktarı: 3-10 mg, Sıcaklık aralığı: 20-1000 °C Komplekslerin bozunmasıyla uçucu ürünlerin uzaklaşması sonucu meydana gelen ağırlık azalması TG eğrilerinden hesaplanmıştır. Ağırlık azalması ve kalan son bozunma ürünlerinden metal-ligand oranları ortaya çıkmıştır.

2.2.4. X-Ray Yapı Analizi

X-ışını (veya nötron) difraksiyonu ile kristal yapı analizinin temel amacı, incelenen kristalin içeriğinin ayrıntılı bir şeklini atomik seviyede elde etmek ve bu resme dayanarak yapıdaki tüm atomların konumları alındıktan sonra, atomlar arası mesafe (bağ uzunlukları), bağ açıları, belirli atomların oluşturduğu düzlemler, düzlemler arası açılar, bağlar etrafındaki torsiyon açıları gibi ilgilenilen moleküler geometriye ait diğer özellikler de hesaplanması yapılabilir. Bir moleküle ait özelliklerin incelenmesi için moleküle ait tüm bilgilerin bilinmesi gerekmektedir. Günümüz teknolojisi hızlı bilgisayar ve okuyucuların gelişmesi sonucu, karmaşık kristal yapıları çözmek dahada kolaylaştığı görülmektedir. Bununla beraber kristalografın bilgi ve tecrübesi kristal yapının çözülmesine ve yorumlanmasına da temel teşkil ettiği söylenebilir.

2.3. Sentez

Komplekslerin Sentezi

2.3.1 $[\text{Zn}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})]$

0,8401 g NaHCO_3 100 mL suda çözüldü. Manyetik karıştırıcı üzerinde bu çözeltiye 1,565 g 3-klorobenzoik asit yavaş yavaş ilave edilerek çözülünceye ve CO_2 gazının çıkışı duruncaya kadar karıştırıldı ve süzüldü. 0,8925 g $\text{ZnSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ 50 mL saf suda çözülerek üzerine 1,2213 g nikotinamid 50 ml sudaki çözeltisi ilave edildi. Bu karışımın üzerine yukarıda hazırlanan sodyum 3-klorobenzoat çözeltisi eklenerek oda sıcaklığında kristallenmeye bırakıldı. Beş gün içinde beyaz kristaller oluştu [93].

2.3.2 $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$

0,8401 g NaHCO_3 100 mL suda çözüldü. Manyetik karıştırıcı üzerinde bu çözeltiye 1,565 g 3-klorobenzoik asit yavaş yavaş ilave edilerek çözülünceye ve CO_2 gazının çıkması duruncaya kadar karıştırıldı ve süzüldü. 1,25 g $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ 50 mL saf suda çözülerek üzerine 1,2213 g nikotinamid 50 ml sudaki çözeltisi ilave edildi. Bu karışımın üzerine yukarıda hazırlanan sodyum 3-klorobenzoat çözeltisi eklenerek oda sıcaklığında kristallenmeye bırakıldı. Beş gün içinde mavi kristaller oluştu [94].

2.3.3 $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$

0,8401 g NaHCO_3 100 mL suda çözüldü. Manyetik karıştırıcı üzerinde bu çözeltiye 1,565 g 3-klorobenzoik asit yavaş yavaş ilave edilerek çözülünceye ve CO_2 gazının çıkması duruncaya kadar karıştırıldı ve süzüldü. 1,456 g $\text{CoSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ 50 mL saf suda çözülerek üzerine 1,2213 g nikotinamid 50 ml sudaki çözeltisi ilave edildi. Bu karışımın üzerine yukarıda hazırlanan sodyum 3-klorobenzoat çözeltisi eklenerek oda sıcaklığında kristallenmeye bırakıldı. Beş gün içinde pembe kristaller oluştu [95].

2.3.4 $[\text{Cd}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$

0,8401 g NaHCO_3 100 ml suda çözüldü. Manyetik karıştırıcı üzerinde bu çözeltiye 1,565 g 3-klorobenzoik asit yavaş yavaş ilave edilerek çözülünceye ve CO_2 gazının çıkması duruncaya kadar karıştırıldı ve süzüldü. 1,2829 g $3\text{CdSO}_4 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ 50 ml saf suda çözülerek üzerine 1,2213 g nikotinamid 50 ml sudaki çözeltisi ilave edildi. Bu karışımın üzerine yukarıda hazırlanan sodyum 3-klorobenzoat çözeltisi eklenerek oda sıcaklığında kristallenmeye bırakıldı. Beş gün içinde beyaz kristaller oluştu [96].

2.3.5 $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}]$ ve $[\text{Cu}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_4(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2]$

0,8401 g NaHCO_3 100 ml suda çözüldü. Manyetik karıştırıcı üzerinde bu çözeltiye 1,565 g 3-klorobenzoik asit yavaş yavaş ilave edilerek çözülünceye ve CO_2 gazının çıkması duruncaya kadar karıştırıldı ve süzüldü. 1,25 g $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ 100 ml saf suda çözülerek üzerine 7,12 g NNdietilnikotinamid %25 lik sudaki çözeltisi ilave edildi. Bu karışımın üzerine yukarıda hazırlanan sodyum 3-klorobenzoat çözeltisi eklenerek oda sıcaklığında kristallenmeye bırakıldı. Beş gün içinde mavi $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}]$ ve az miktarda yeşil $[\text{Cu}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_4(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2]$ kristaller oluştu [97, 98].

2.3.6 $[\text{Cd}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})\text{H}_2\text{O}]$

0,8401 g NaHCO_3 100 ml suda çözüldü. Manyetik karıştırıcı üzerinde bu çözeltiye 1,565 g 3-klorobenzoik asit yavaş yavaş ilave edilerek çözülünceye ve CO_2 gazının çıkması duruncaya kadar karıştırıldı ve süzüldü. 1,2829 g $3\text{CdSO}_4 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ 100 ml saf suda çözülerek üzerine 7,12 g NNdietilnikotinamid 100 ml sudaki çözeltisi ilave edildi. Bu karışımın üzerine yukarıda hazırlanan sodyum 3-klorobenzoat çözeltisi eklenerek oda sıcaklığında kristallenmeye bırakıldı. On dört gün içinde beyaz kristaller oluştu [99].

3. Bulgular ve Tartışma

3.1. Elemental Analiz

Sentezlenen komplekslerin elementel analiz sonuçları Tablo 3.1. de verilmiştir.

Tablo 3.1. Elemental Analiz Sonuçları

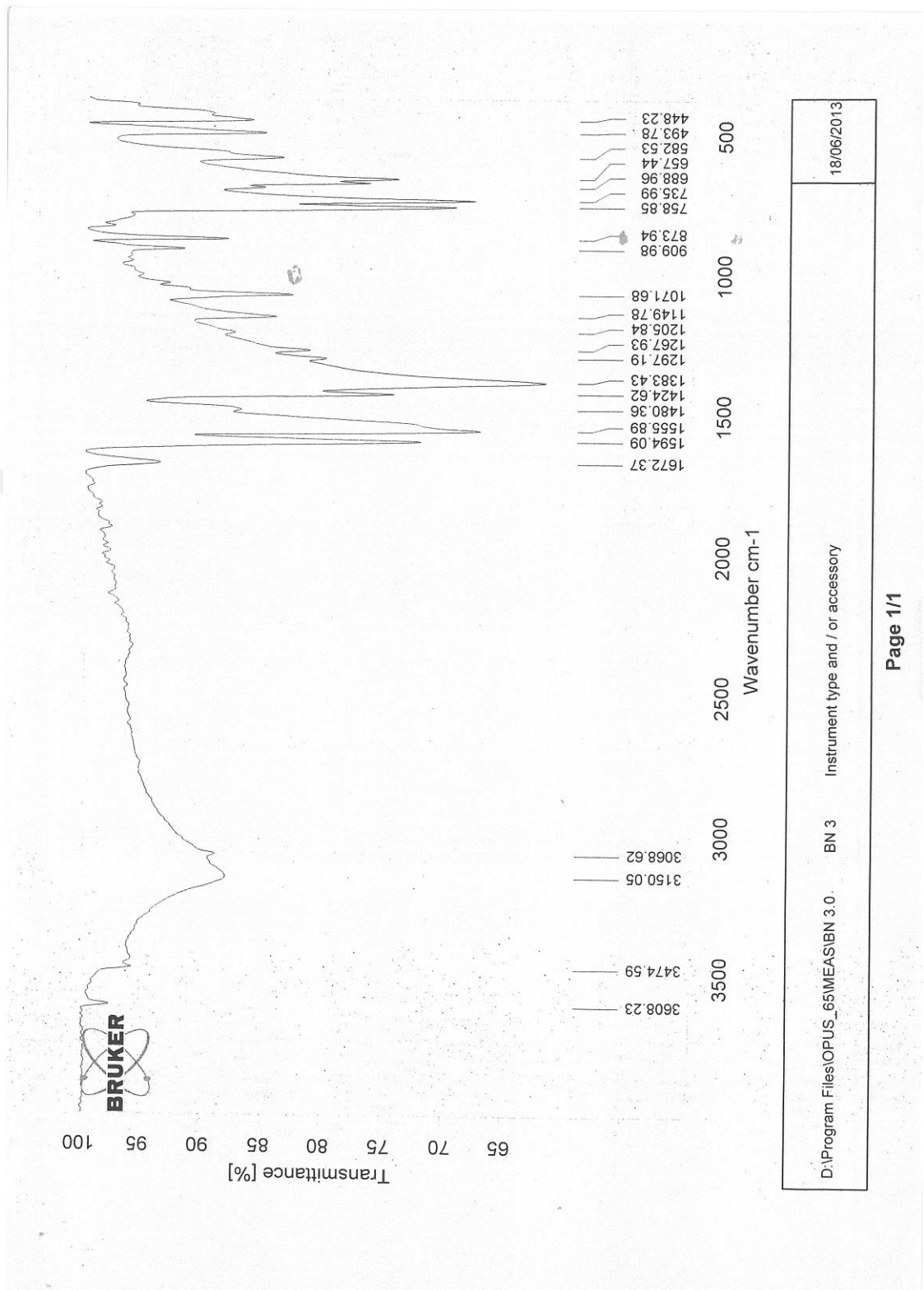
Kompleksler	%C	%C	%H	%H	%N	%N
	deneysel	teorik	deneysel	teorik	deneysel	teorik
[Zn(C ₇ H ₄ ClO ₂) ₂ (H ₂ O)]	43,15	42,58	2,64	2,53	-	-
[Cu(C ₇ H ₄ ClO ₂) ₂ (C ₆ H ₆ N ₂ O) ₂]	50,93	50,41	3,37	3,23	8,93	9,05
[Co(C ₇ H ₄ ClO ₂) ₂ (C ₆ H ₆ N ₂ O) ₂ (H ₂ O) ₂]	47,75	47,97	3,66	3,69	8,47	8,61
[Cd ₂ (C ₇ H ₄ ClO ₂) ₄ (C ₆ H ₆ N ₂ O) ₂ (H ₂ O) ₂]	42,87	42,57	2,90	2,84	4,95	4,97
[Cu(C ₇ H ₄ ClO ₂) ₂ (C ₁₀ H ₁₄ N ₂ O) ₂ H ₂ O]	54,72	54,46	5,05	5,07	7,44	7,48
[Cd(C ₇ H ₄ ClO ₂) ₂ (C ₁₀ H ₁₄ N ₂ O)H ₂ O]	48,29	46,46	3,90	3,54	4,55	4,52

3.2. Infrared Spektrum

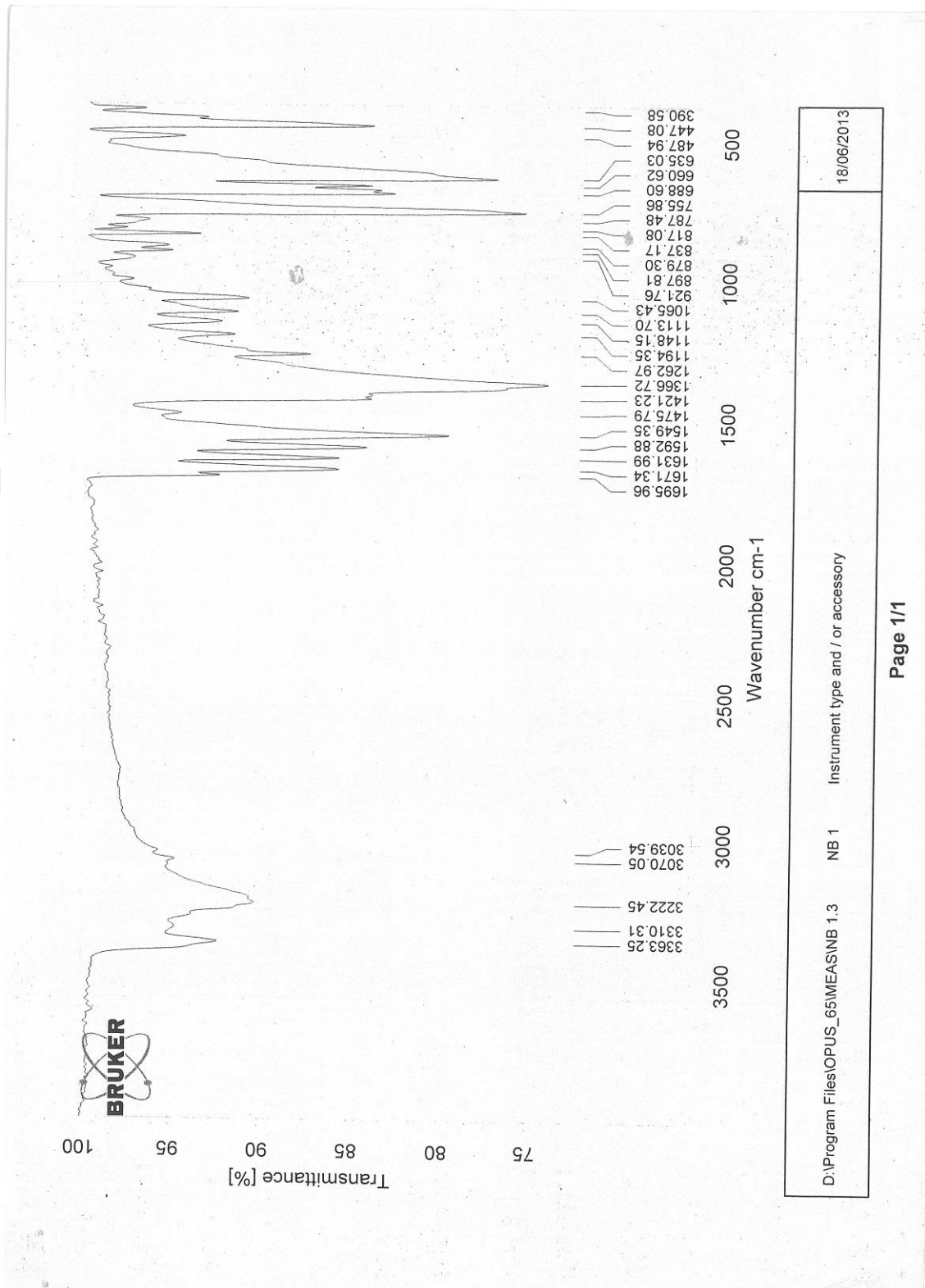
Sentezlenen komplekslerin IR Spektrum değerleri Tablo 3.2.'de ve Şekil 3.2.1-3.2.6'da verilmiştir.

Tablo 3.2. Komplekslerinin IR spektrum verileri

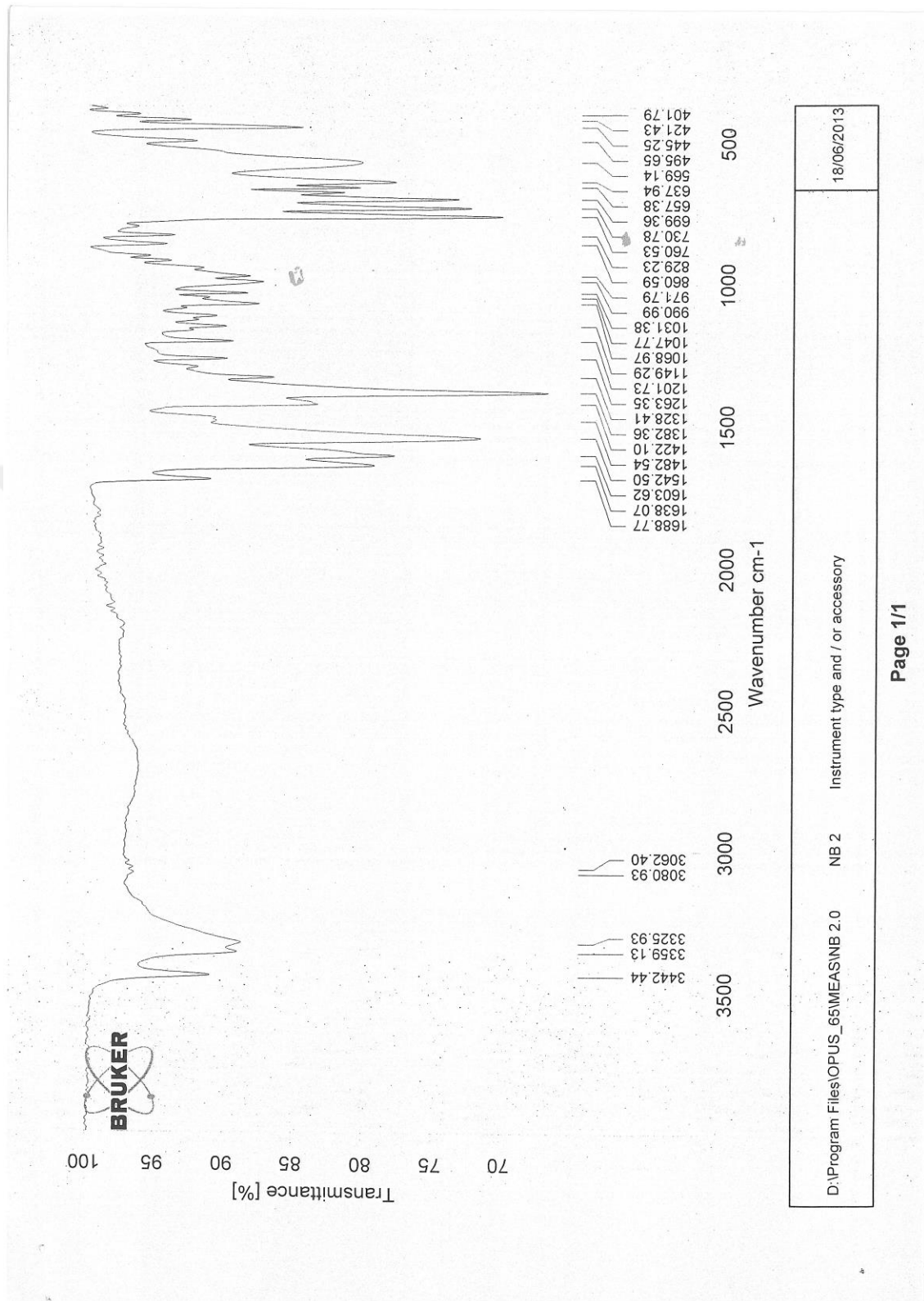
GRUPLAR	I	II	III	IV	V	VI
v(OH)	3475	-	3442	3337	3335	3318
v(C=O) _{amid}	1672	1671	1688	1667	1631	1672
v(C=C) _{halka}	1594	1593	1604	1614	1564	1594
v(N-H)	-	3310	3359	3290	-	-
v(COO ⁻) _{as}	1556	1549	1543	1528	1564	1539
v(COO ⁻) _s	1383	1367	1382	1384	1370	1380
Δ v(COO)	173	182	161	144	194	159
v(C-N) _{py}	-	1065	1069	1048	1062	1052
m-disubstitue benzen	874	879	861	859	871	880
v(C-N) _{amid}	1150	1148	1149	1134	1190	1193
v(M-O)	657	635	638	646	651	636
v(M-N)	-	488	496	498	504	504
v(C-H) (alifatik)	-	-	-	-	2939 2978	2936 2968



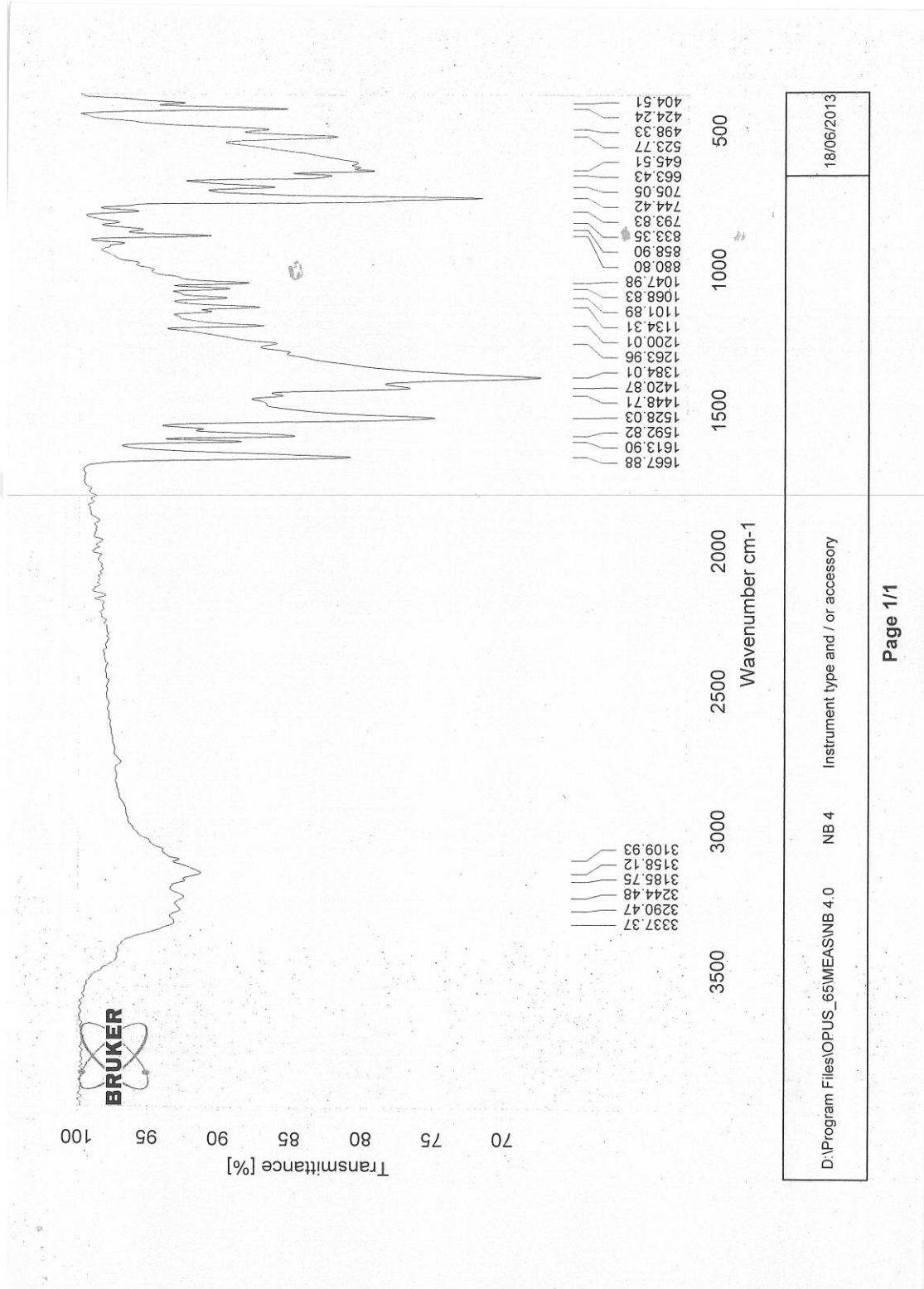
Şekil 3.2.1 [Zn(C₇H₄ClO₂)₂(H₂O)] Kompleksinin (I) IR Spektrumu



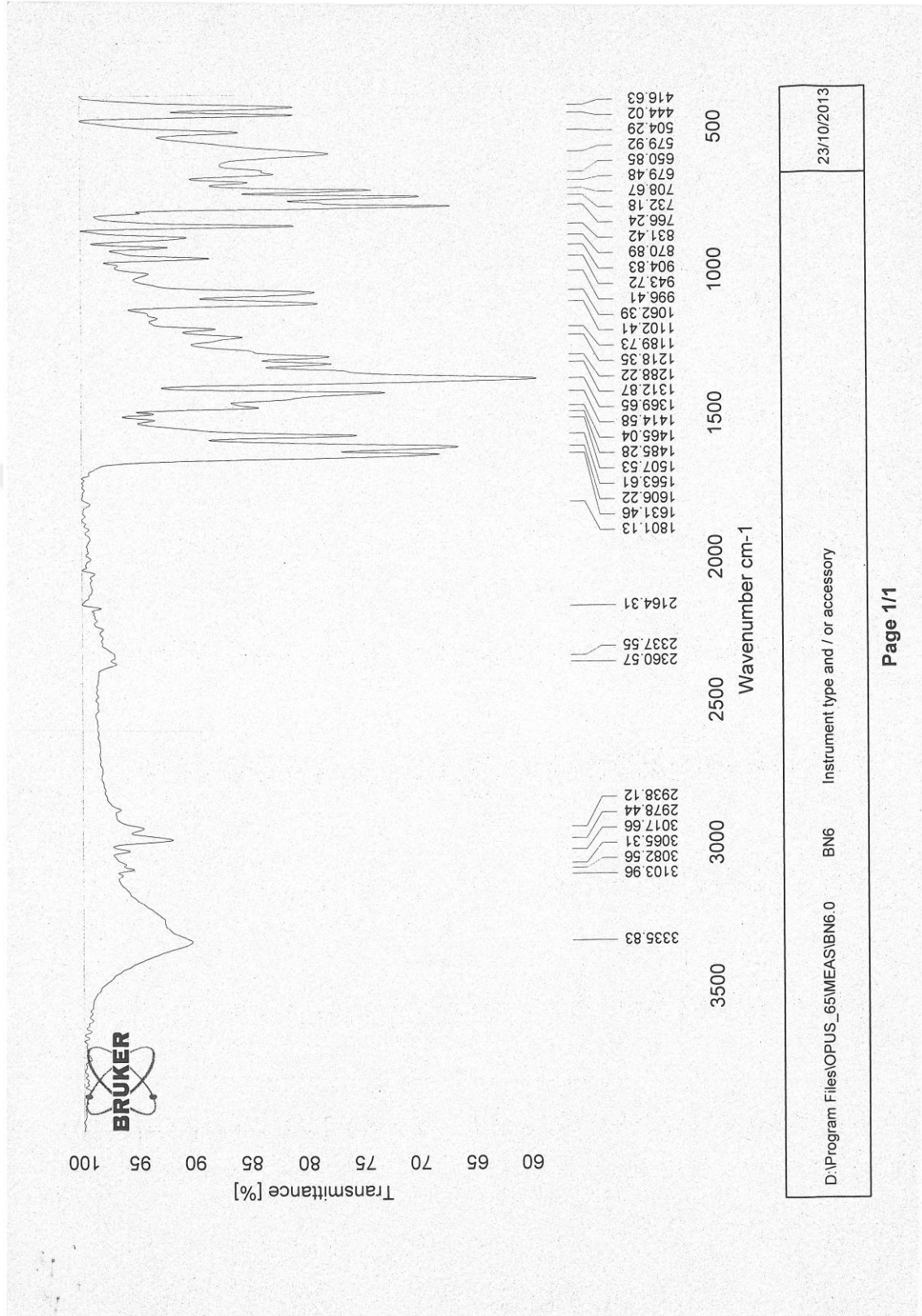
Şekil 3.2.2 $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin (II) IR Spektrumu



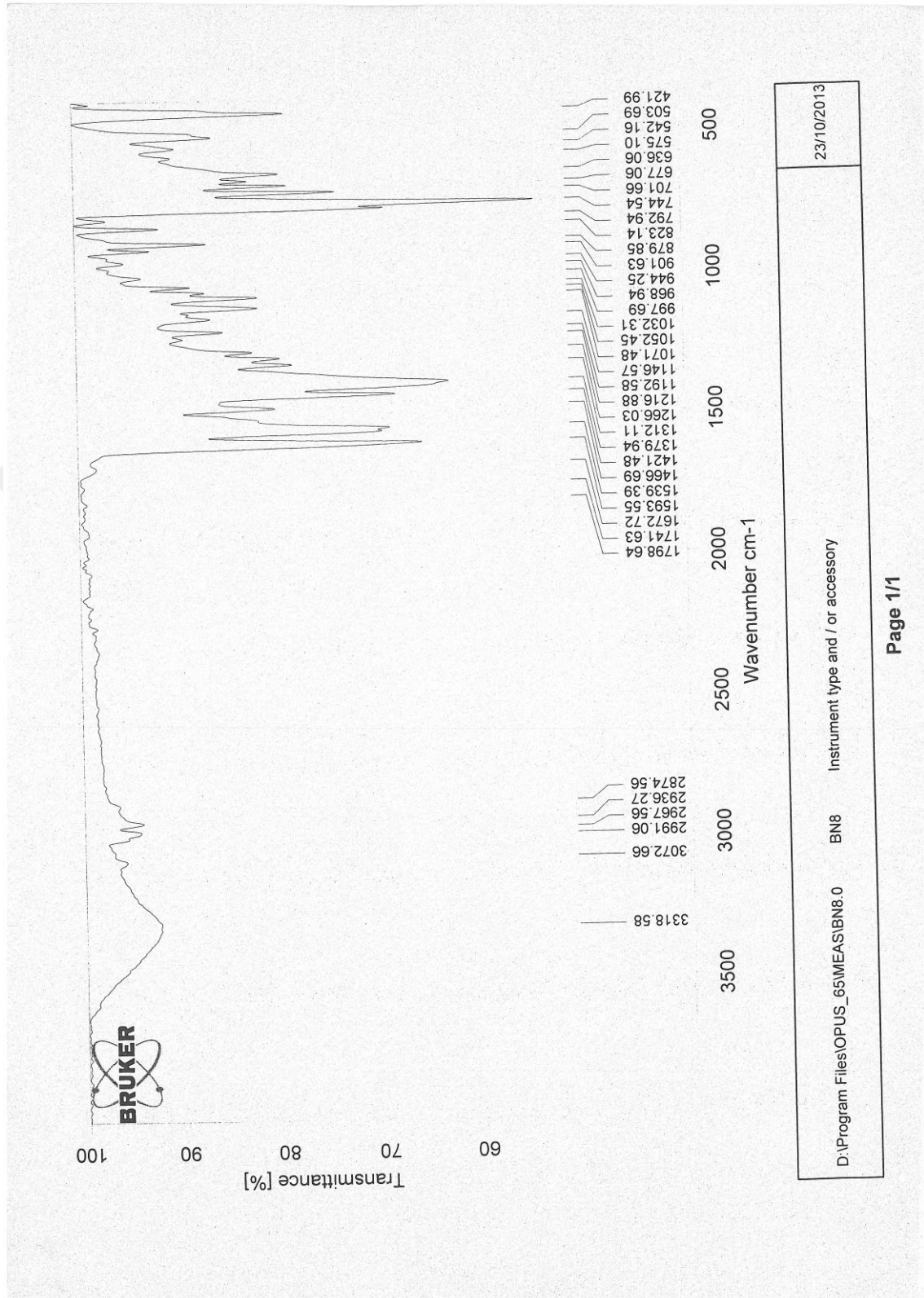
Şekil 3.2.3 $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin (III) IR Spektrumu



Şekil 3.2.4 $[Cd_2(C_7H_4ClO_2)_4(C_6H_9N_2O)_2(H_2O)_2]$ Kompleksinin (IV) IR Spektrumu



Şekil 3.2.5 $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2 (\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}]$ Kompleksinin IR Spektrumu (V)



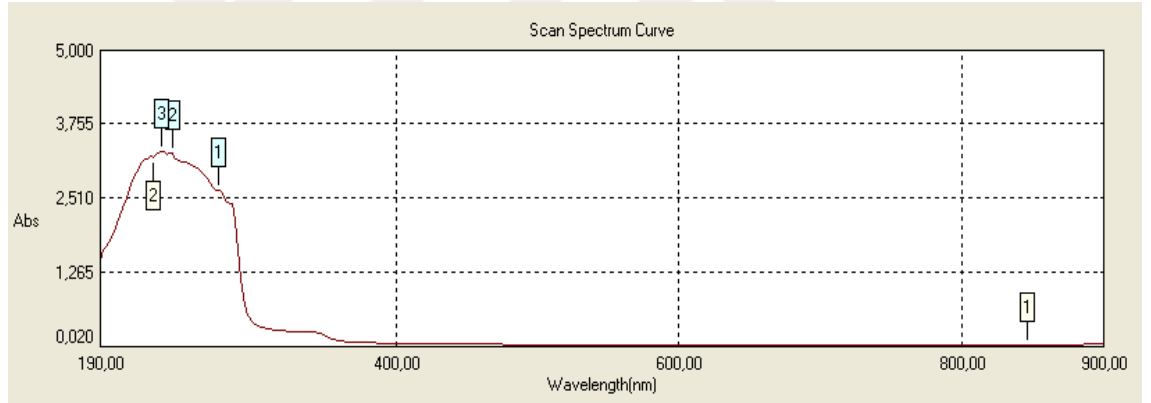
Şekil 3.2.6 [Cd (C₇H₄ClO₂)₂(C₁₀H₁₄N₂O).H₂O]Kompleksinin (VI) IR Spektrumu

3.3. UV Görünür Bölge Spektrumu

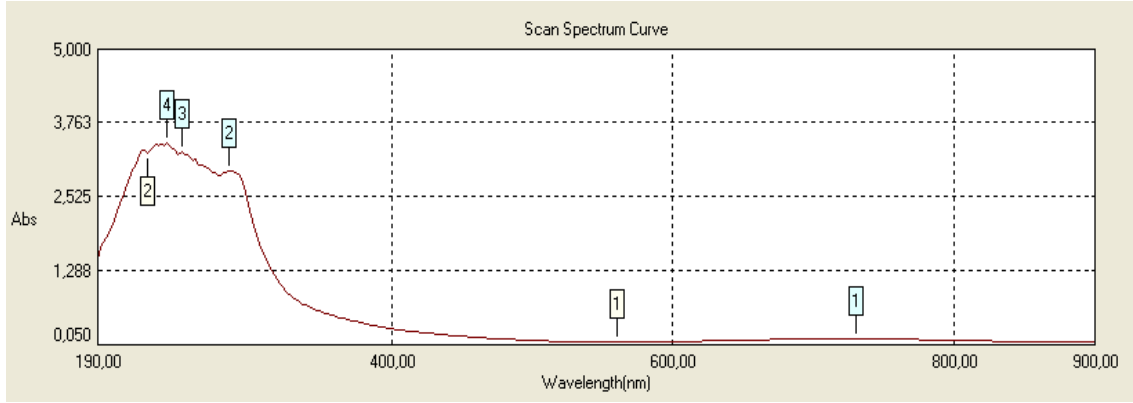
Sentezlenen komplekslerin UV Spektrum değerleri Tablo 3.3.'de ve Şekil 3.3.1-3.3.6'da ve verilmiştir.

Tablo 3.3. Sentezlenen komplekslerin UV görünür bölge değerleri λ_{\max} (nm)

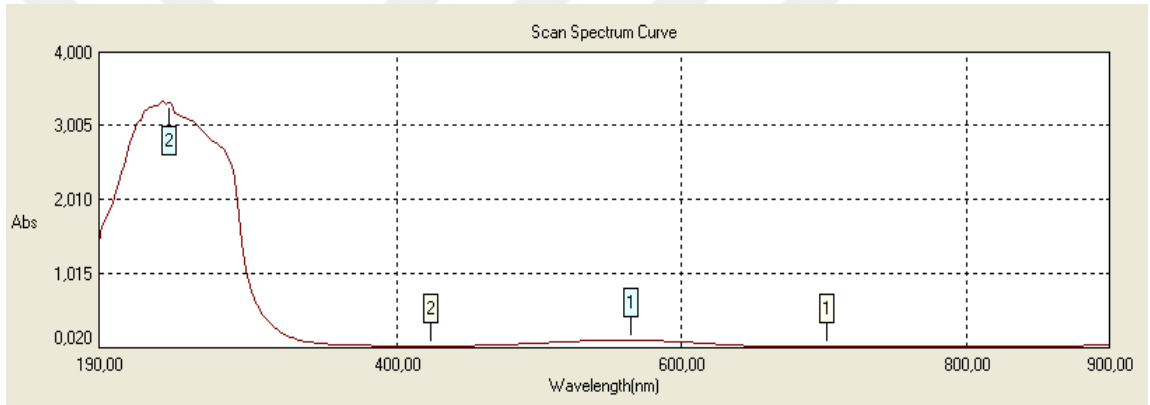
Kod	Kompleksler	λ_{\max} (nm)
I	[Zn(C ₇ H ₄ ClO ₂) ₂ (H ₂ O)]	-
II	[Co(C ₇ H ₄ ClO ₂) ₂ (C ₆ H ₆ N ₂ O) ₂ ·(H ₂ O) ₂]	564
III	[Cd ₂ (C ₇ H ₄ ClO ₂) ₄ (C ₆ H ₆ N ₂ O) ₂ ·(H ₂ O) ₂]	-
IV	[Cu(C ₇ H ₄ ClO ₂) ₂ (C ₁₀ H ₁₄ N ₂ O) ₂ ·H ₂ O]	744
V	[Cd (C ₇ H ₄ ClO ₂) ₂ (C ₁₀ H ₁₄ N ₂ O)·H ₂ O]	-



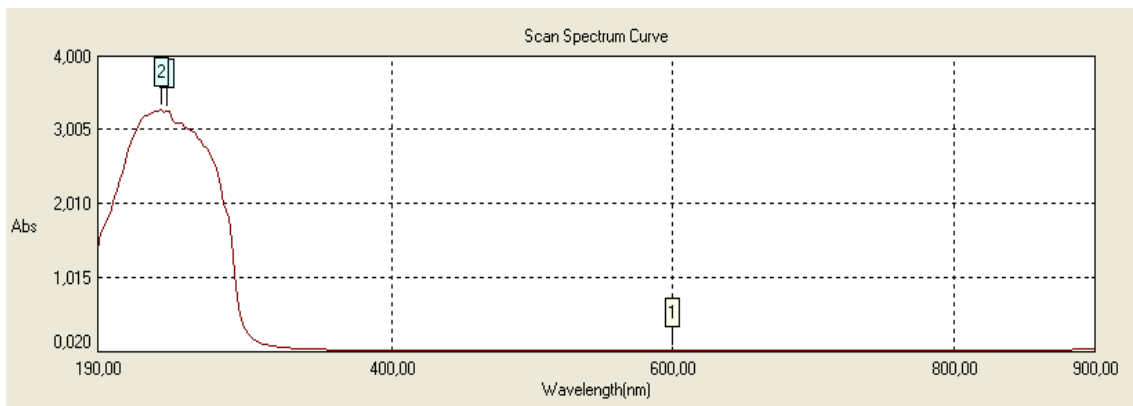
Şekil 3.3.1 [Zn(C₇H₄ClO₂)₂(H₂O)] Kompleksinin UV Spektrumu



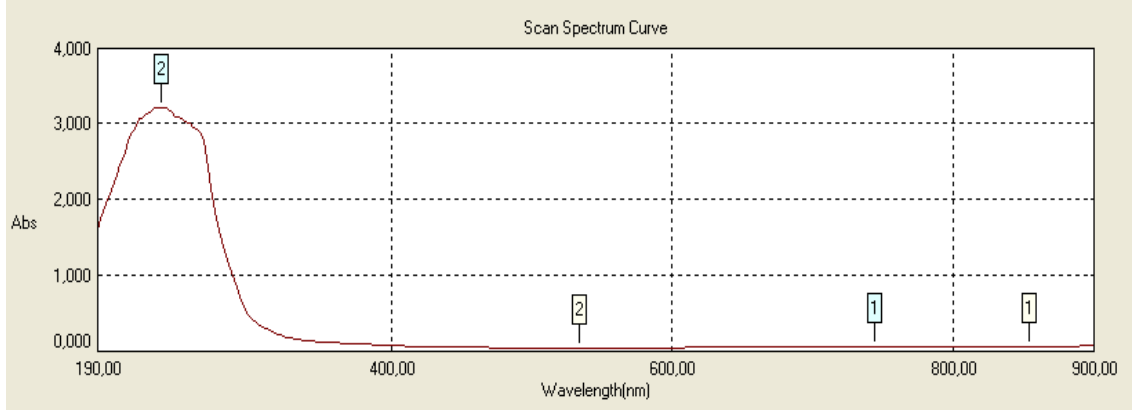
Şekil 3.3.2 $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin UV Spektrumu



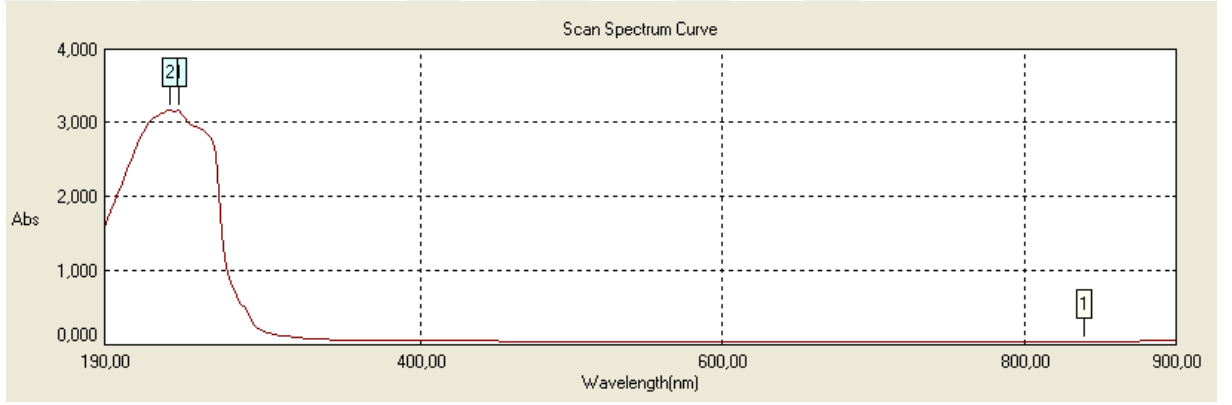
Şekil 3.3.3 $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin UV Spektrumu



Şekil 3.3.4 $[\text{Cd}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ Kompleksinin UV Spektrumu



Şekil 3.3.5 $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}]$ Kompleksinin UV Spektrumu



Şekil 3.3.6 $[\text{Cd}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}]$ Kompleksinin UV Spektrumu

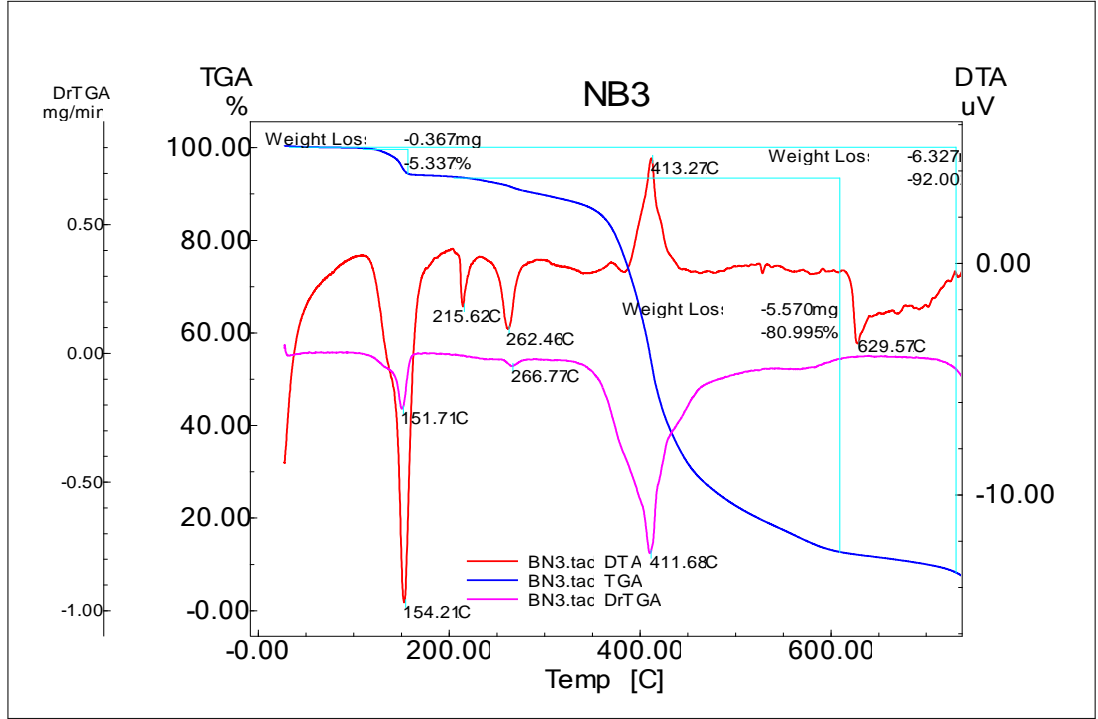
3.4. Termik Analiz

Sentezlenen komplekslerin termik analiz sonuçları Tablo 3.4. de verilmiştir.

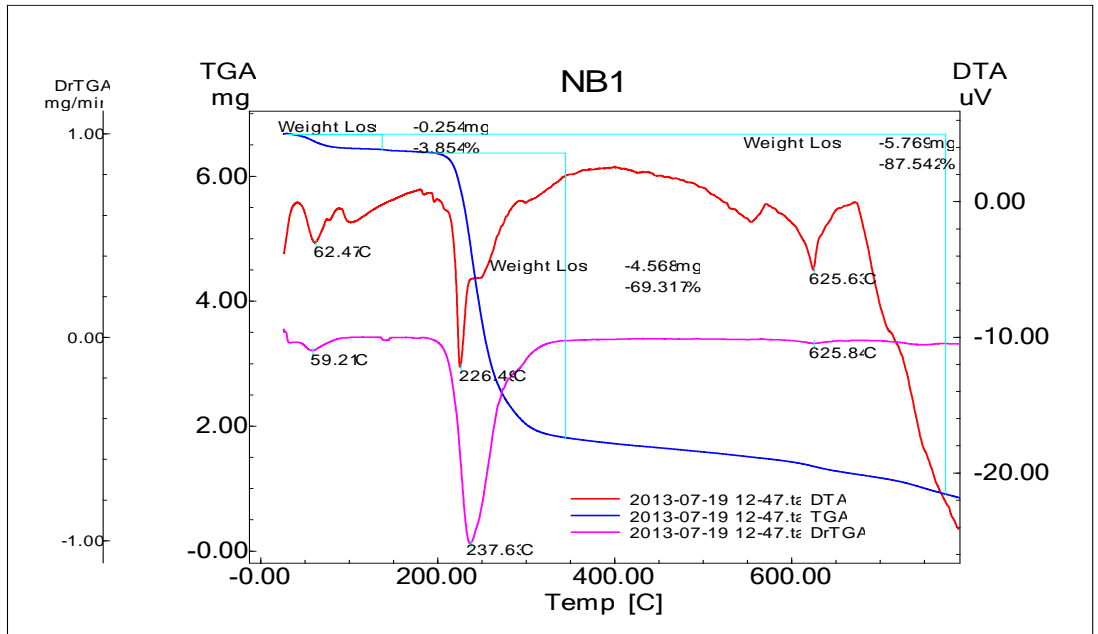
Tablo 3.4. Termik Analiz Sonuçları

Bileşik	Sıcaklık Aralığı°C	Max.Boz Sıc. °C DTG max	Uzaklaş an grup	Ağırlık Kaybı% Deneysel	Toplam ağırlık Kaybı % Deneysel	Katı Bozunma Ürünü	Renk
$Zn[(C_7H_4ClO_2)_2(H_2O)]$ Ma: 394,51gr/mol							
1	135-175	154,21	H ₂ O	5,33-4,56		Zn(C ₇ H ₄ ClO ₂) ₂	Beyaz
2	200-650	629,57		%7,99-%7,94		ZnO	
$[Cu(C_7H_4ClO_2)_2(C_6HN_2O)_2]$ Ma:618,91gr/mol							
1	50-90	226,49				Cu(C ₇ H ₄ ClO ₂) ₂ (C ₆ H ₆ N ₂ O) ₂	Mavi
2	200-650	625,63		12,46-12,92	87,542	CuO	
$[Co(C_7H_4ClO_2)_2(C_6H_6N_2O)_2(H_2O)_2]$ Ma:650,32gr/mol							
1	110-140	132,71	H ₂ O	5,76-5,53		Co(C ₇ H ₄ ClO ₂) ₂ (C ₆ H ₆ N ₂ O) ₂	Pembe
2	140-170	223,20		36,83-39,73		CoO	
3	200-280	278,88		10,85-11,52			
4	280-445	360,06			89,157		
5	445-1000	722,74					
$Cd_2(C_7H_4ClO_2)_4(C_6H_6N_2O)_2(H_2O)_2$ Ma:1127,32gr/mol							
1	130-160	145,99	H ₂ O	3,70-3,19		Cd ₂ (C ₇ H ₄ ClO ₂) ₄ (C ₆ H ₆ N ₂ O) ₂	Beyaz
2	180-200	180,54					
3	180-390	202,62		93,51			
4	280-570	298,03		24,18-22,38			
5	570-750	389,67		9,39-9,97		CdO	
$[Cu(C_7H_4ClO_2)_2(C_{10}H_{14}N_2O)_2H_2O]$ Ma: 749,13 gr/mol							
1	80-180	126,52	H ₂ O	2,70-2,40		Cu(C ₇ H ₄ ClO ₂) ₂ (C ₁₀ H ₁₄ N ₂ O) ₂	Mavi
2	150-220	202,76		48,69-43,47			
3	210-260	247,87		10,86-8,47			
4	590-620			101,076		CuO	

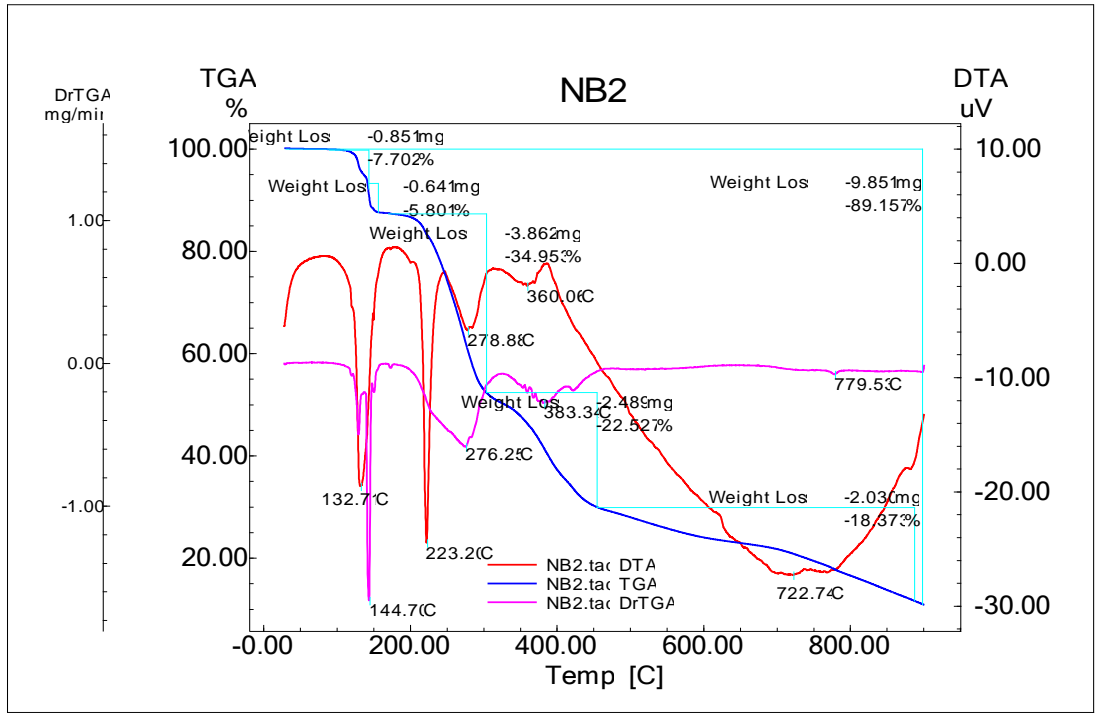
Komplekslerin termik analiz eğrileri şekil 3.4.1-3.4.6'da verilmiştir.



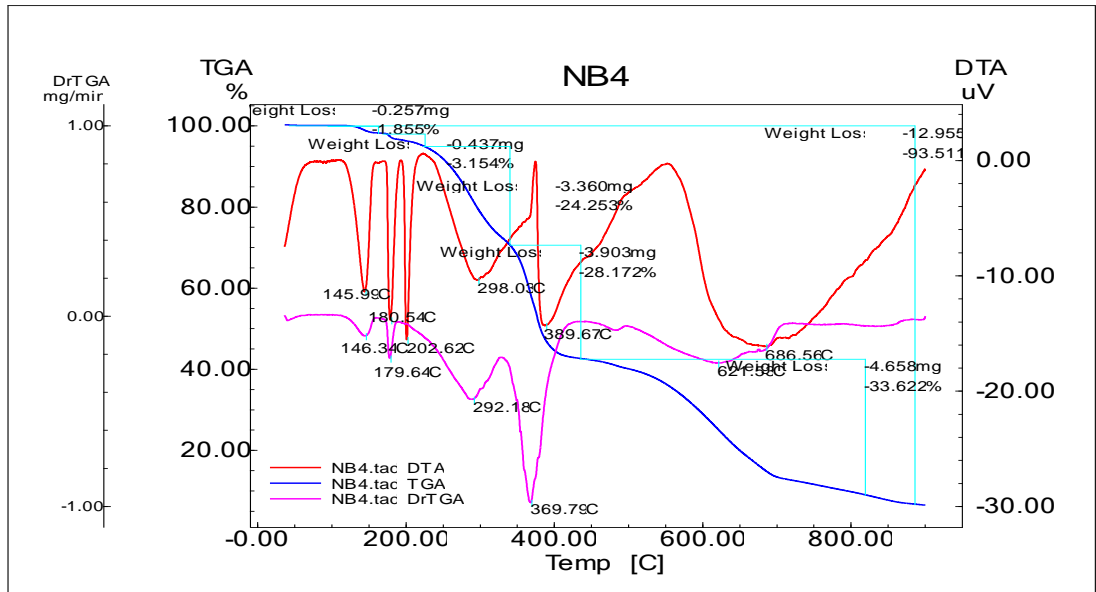
Şekil 3.4.1 $[Zn(C_7H_4ClO_2)_2(H_2O)]$ kompleksinin termik analiz eğrisi



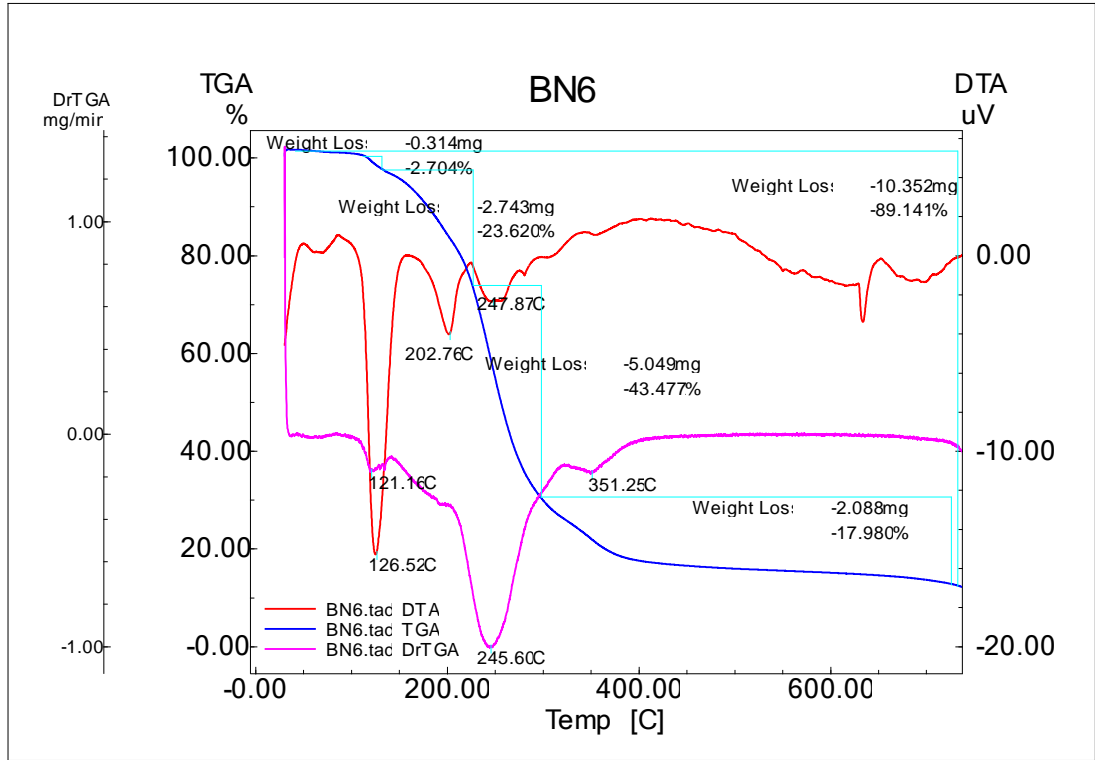
Şekil 3.4.2 $[Cu(C_7H_4ClO_2)_2(C_6H_6N_2O)_2]$ kompleksinin termik analiz eğrisi



Şekil 3.4.3 $[\text{Co}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin termik analiz eğrisi



Şekil 3.4.4 $[\text{Cd}_2(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ kompleksinin termik analiz eğrisi



Şekil 3.4.5 $[\text{Cu}(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}]$ kompleksinin termik analiz eğrisi

3.5. X Ray Yapı Analizi

Sentezlenen komplekslerin kristal verileri Tablo 3.5’de verimiştir.

Tablo 3.5. Komplekslerin Kristal Verileri.

	I	II	III	IV	V	VI
M_r	394,51	618,91	650,32	1127,32	749,13	619,76
Singoni	monoklinik	triklinik	monoklinik	triklinik	Ortohombik	monoklinik
Uzay grubu	C2/c	P 1	P2 ₁ /n	P1	1ba2	C2/c
a, Å	31,8553(8)	9,6614(2)	11,5181(3)	7,5835(2)	15,9185(9)	25,1809(5)
b, Å	6,1786(2)	12,5429(3)	8,8191(2)	12,3652(3)	19,2366(11)	7,0161(3)
c, Å	7,5117(3)	12,8728(3)	13,5089(3)	12,4893(3)	11,5535(7)	30,6755(6)
α, °	90	61,598(2)	90	66,878(2)	90	90
β, °	96,554(2)	87,386(3)	90,546(2)	78,678(3)	90	106,203(3)
γ, °	90	77,115(3)	90	83,222(3)	90	90
V, Å³	1468,80(8)	1334,30(6)	1372,16(6)	1055,02(5)	3537,9(4)	5204,2(3)
Z	4	2	2	1	4	8
F(000)	792	630	666	560	1556	2496
D_x mg,m⁻³	1,784	1,541	1,574	1,774	1,406	1,582
Radyasyon	Mo K _α					
λ, Å	0,71073					
Yansıma sayısı	9983	9977	4857	9868	9278	9713
θ, °	2,6-28,3	2,2-28,3	2,3-24,4	2,7-28,4	2,2-30,7	2,5-28,4
μ, mm⁻¹	2,06	1,07	0,88	1,33	0,82	1,09
T, K	294	296	294	296	296	296
Renk	renksiz	mavi	pembe	renksiz	mavi	renksiz
Kristal ölçüleri, mm	0,35x0,25 x0,15	0,35x0,20 x0,15	0,35x0,22 x0,18	0,38x0,24 x0,12	0,35x0,20 x0,15	0,35x0,15 x0,10
R	0,036	0,022	0,027	0,020	0,048	0,026

4. TARTIŞMA

İlk kez altı adet cobalt(II), bakır(II), çinko(II) ve kadmium(II) 3-Klorobenzoatlarının nikotinamid ve N,N'-dietilnikotinamid kompleksleri sentezlenmiştir:

$[Zn(C_7H_4ClO_2)_2(H_2O)]$	I
$[Cu(C_7H_4ClO_2)_2(C_6H_6N_2O)_2]$	II
$[Co(C_7H_4ClO_2)_2(C_6H_6N_2O)_2(H_2O)_2]$	III
$[Cd_2(C_7H_4ClO_2)_4(C_6H_6N_2O)_2(H_2O)_2]$	IV
$[Cu(C_7H_4ClO_2)_2(C_{10}H_{14}N_2O)_2.H_2O]$	V
$[Cd(C_7H_4ClO_2)_2(C_{10}H_{14}N_2O).H_2O]$	VI

Sentezlenen bileşiklerin IR spektrum sonuçları değerlendirilerek bileşiklerin yapısının ortaya çıkarılmasında faydalanılmıştır(Tablo 3.2.7).

Zn(II), Cu(II), Co(II) ve Cd(II) 3-klorobenzoik asidin nikotinamid ve dietilnikotinamid komplekslerinde O – H grubundan oluşan pikler: (I) 3608 – 3475, (II) 3363 – 3310, (IV) 3337, (V) 3336, (VI) 3319 cm^{-1} aralığında gözlemlenen kompleksinde oluşabilecek suda O –H bandı görülmekte olup, (II) kompleksinde O – H bandı görülmemektedir.

Zn(II), Cu(II), Co(II), Cd(II) 3-klorobenzoik asit nikotinamid ve dietilnikotinamid komplekslerinde (C=O)_{amid} titreşimleri: (I) 1672, (II) 1671, (III) 1688, (IV) 1667, (V) 1631, (VI) 1672 titreşimleri gözlemlenmiş olup, komplekslerin hepsinde titreşim görülmektedir.

Zn(II), Cu(II), Co(II), Cd(II) 3-klorobenzoik asit nikotinamid ve dietilnikotinamid komplekslerinde NH₂ gruplarına ait N – H titreşim değerleri: (I) - , (II) 3310, (III)

3359, (IV) 3290 titreşimleri gözlemlenmiş olup, (V) ve (VI) komplekslerde titreşim gözlenmemektedir.

Zn(II), Cu(II), Co(II), Cd(II) 3-klorobenzoik asit nikotinamid ve dietilnikotinamid komplekslerinde COO⁻ asimetrik ve simetrik titreşimleri: (I) 1556 – 1383, (II) 1549 – 1367, (III) 1543 – 1382, (IV) 1528 – 1384, (V) 1564 – 1370, (VI) 1539 – 1380 titreşimleri gözlemlenmiştir.

Zn(II), Cu(II), Co(II), Cd(II) 3-klorobenzoik asit nikotinamid ve dietilnikotinamid komplekslerinde (C-N)_{py} absorpsiyon bandları : (II) 1065, (III) 1069, (IV) 1048, (V) 1062, (VI) 1052 olarak gözlemlenmiştir

Zn(II), Cu(II), Co(II), Cd(II) 3-klorobenzoik asit nikotinamid ve dietilnikotinamid komplekslerinde (C-N)_{amid} titreşim değerleri: (I) 1150, (II) 1148, (III) 1149, (IV) 1134, (V) 1190, (VI) 1193 komplekslerinde verilen titreşim değerleri görülmektedir.

I kompleksin DTA eğrisi incelendiğinde (Şekil3.4.1). 154.21, 215.62, 262.46, 413,27 ve 629,57°C sıcaklıklara karşılık gelen dördü endotermik, biri ekzotermik pikler görülmektedir. 135-175°C sıcaklık aralığında yapıdan bir mol koordinasyon suyunun ayrıldığı görülmektedir. TG eğrisinde kütle kaybı teorik değer ile uyum içerisinde (deneysel % 5.34, teorik %4.56). 200°C de susuz kompleks bozunmaya başlıyor (215,62 ve 262,46°C) 385-450°C aralığında kompleksin organik kısmının yanması(413,27°C ekzotermik) gözlenmiştir. Yanma sonucu kompleksten geriye ZnO kaldığı düşünülmektedir (deneysel % 13,67, teorik % 16,57).

II kompleksin ilk bozunma basamağı (50-65°C aralığında) tipik su uzaklaşmasına benzediğinden sanki hidrat suyu veya nem olabilir (Şekil3.4.2). Susuz kompleks 200°C de bozunmaya başlıyor,bozunmaya uygun endo-efektler 226,49 ve 625,63°C sıcaklıkta müşahade edilmektedir.Termik parçalanmanın son ürünü CuO susuz komplekse göre (deneysel %12,46 , teorik %12,85) olduğu görülmektedir.

III kompleksin DTA eğrisinde (Şekil3.4.3). 132.71, 223.20, 278.88, 360.06, ve 722.74°C maksimum sıcaklıklara karşılık gelen beş basamaklı bozunma görülmektedir.

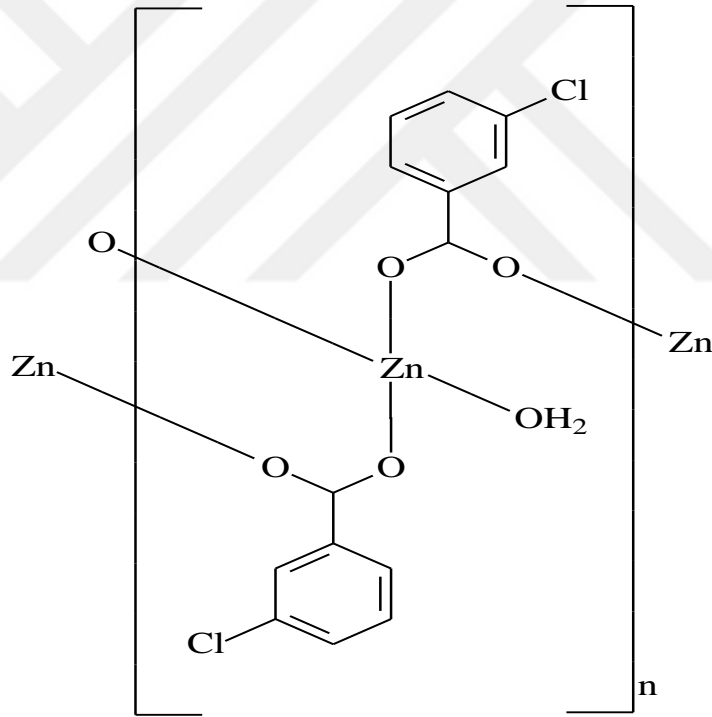
110-140°C sıcaklık aralığında yapıdan iki mol koordinasyon suyunun ayrıldığı görülmektedir.(deneysel %5,76, teorik %5,53) 140-300°C sıcaklık aralığında iki mol nikotinamid ayrıldığı tahmin edilmektedir. Bozunmalar sonucu kompleksten geriye CoO kaldığı düşünülmektedir (deneysel % 10.85, teorik %11.52).

Şekil 3.4.4'den görüldüğü gibi **IV** kompleksin DTA eğrisinde 145,99, 180,54, 202,62, 298,03, 389,67 ve 686,56°C maksimum sıcaklıklara karşılık gelen altı adet endotermik pik vardır. 130-160°C sıcaklık aralığında yapıdan iki mol koordinasyon suyu iki aşamada ayrılıyor.Susuz kompleks 165°C den başlayarak bozunuyor ve iki mol nikotinamid ayrılıyor (180,54 ve 202,62°C) endo efektler (deneysel 3.70, teorik %3.19). (deneysel %24.25, teorik %24.64) ve bozunmalar sonucu kompleksten geriye Cd metali kaldığı düşünülmektedir (deneysel % 8.94, teorik %9.97)

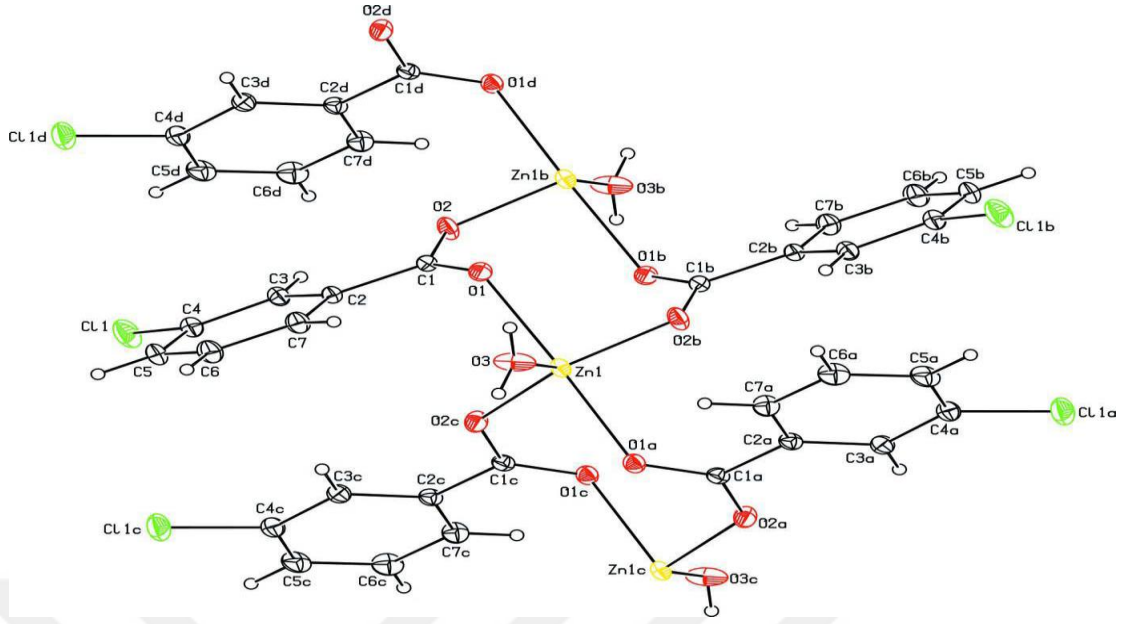
V Kompleksin DTA eğrisi incelendiğinde (Şekil3.4.5). 126.52, 202.76 ve 247.87 °C maksimum sıcaklıklara karşılık gelen üç endo efekt müşahade edilmektedir. 80-175 °C sıcaklık aralığında yapıdan bir mol koordinasyon suyunun ayrıldığı görülmektedir.175 °C den itibaren susuz kompleksin bozunması başlıyor ve ilk aşamada (202,76 °C endo) bir molekül dietilnikotinamid ayrılıyor.(deneysel %23,62, teorik %23,79) TG eğrisinde kütle kaybı teorik değer ile uyum içerisindedir (deneysel %2.70, teo. %2.40). Termik bozunmanın son ürünü CuO dur.(deneysel %10,86, teorik %10,62).

I kompleksi polimerik yapıya sahip olup (Şekil 4.1), çinko (II) katyonları ikili eksen üzerinde yerleşmektedir. çinko katyonu dört monodentant 3-klorbenzoat anyonlarının dört karboksilat oksijeni atomları ve bir su molekülü ile koordine olunarak tahrif olunmuş kare-piramidal çeviriye sahiptir. Kristalde 3-klorbenzoat anyonları komşu çinko katyonlarını karboksilat köprüsü ile birleştirerek *c* eksenini istikametinde polimer zincir oluşturuyor. (şekil 4.2). İki 3-klorbenzoat anyonlarının oluşturdukları köprü neticesinde sekiz üyeli halkalar oluşmaktadır. (Zn1-O1-C1-O2-Zn1b-O1b-C1b-O2b) bu halkada simetri bağımlı aynı tür atomlar arasındaki mesafeler simetri bağımlı Zn1...Zn1b 4,3798(3) Å, O1...O1b 3,020(2) Å, O2...O2b 4,337(2) Å ve C1...C1b 3,975(2) Å (b simetri kodu -x, -y, 1-z) çinko ile koordinasyonda olan dört karboksil oksijeni ekvatoriyal düzlemde tahrif olunmuş kare düzlemsel çevre oluşturur (Zn-O

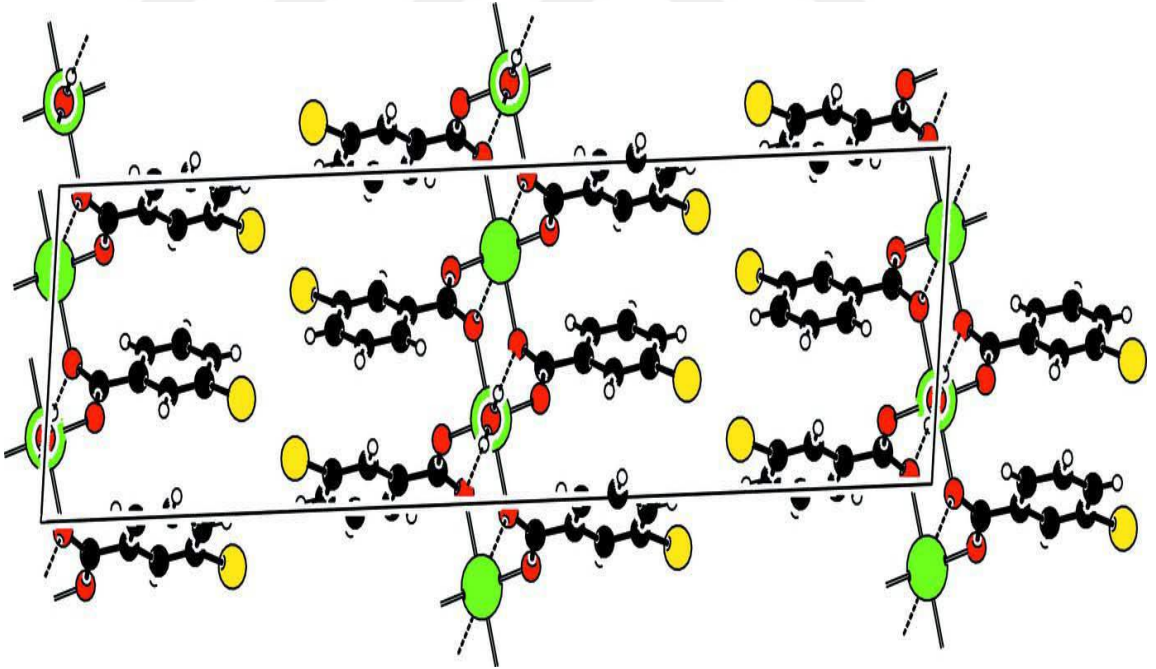
2,1779(12) ve 1,9493(11) Å - Ek tablo 1.3). Bir su molekülünün koordinasyonu neticesinde (Zn-OH₂ 1,9664(19) Å -Ek tablo 1.3) koordinasyon çevresi tahrip olunmuş kare piramidal kare piramide dönüşüyor. Karboksilat grubundaki C1-O1 [1,260(2) Å] ve C1-O2 [1,258(2) Å] bağ uzunluklarının yakın değerlere sahip olması C-O bağlarının delokalize olduğunun göstergesidir. Çinko atomu karboksilat gruplarının (O1/C1/O2) ortalama düzleminden 1,3998(1) Å sapmaktadır. C11, C1 ve O1 atomları benzen halkasının ortalama düzlemine uygun olarak -0,0897 (7), -0,0181(16) ve -0,2341 (12) Å sapmaktadırlar. Anyonda karboksilat grubu ile benzen halkası arasındaki dihedral açı 44,16(11)°dir. Kristalde kuvvetli O-H...O hidrojen bağları suyun hidrojenlerini polimer zincirdeki karboksilat oksijenlerine bağlıyor (Şekil 4.3)(Ek tablo 1.4).



Şekil 4.1. I Kompleksinin Molekül Yapısı [93].

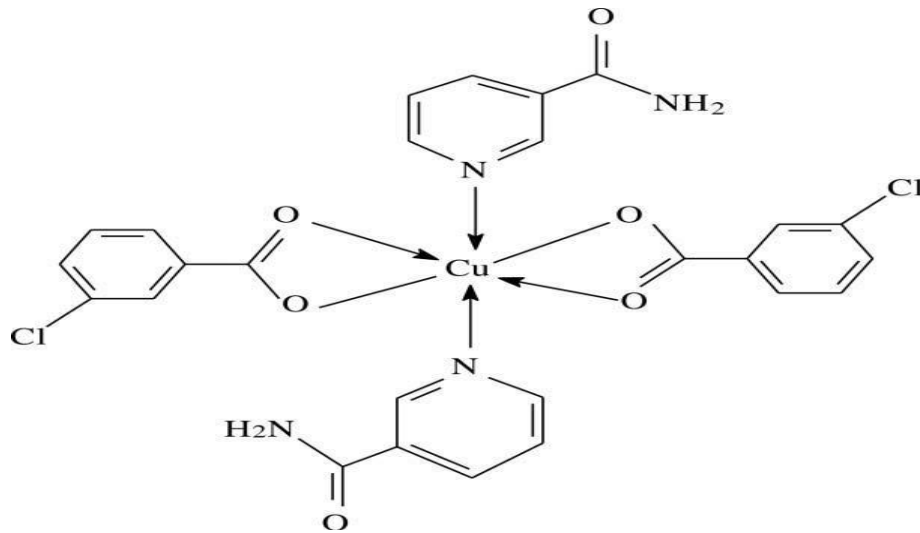


Şekil 4.2. I Kompleksinin Polimer Zincirinin Bir Kısmı [93].

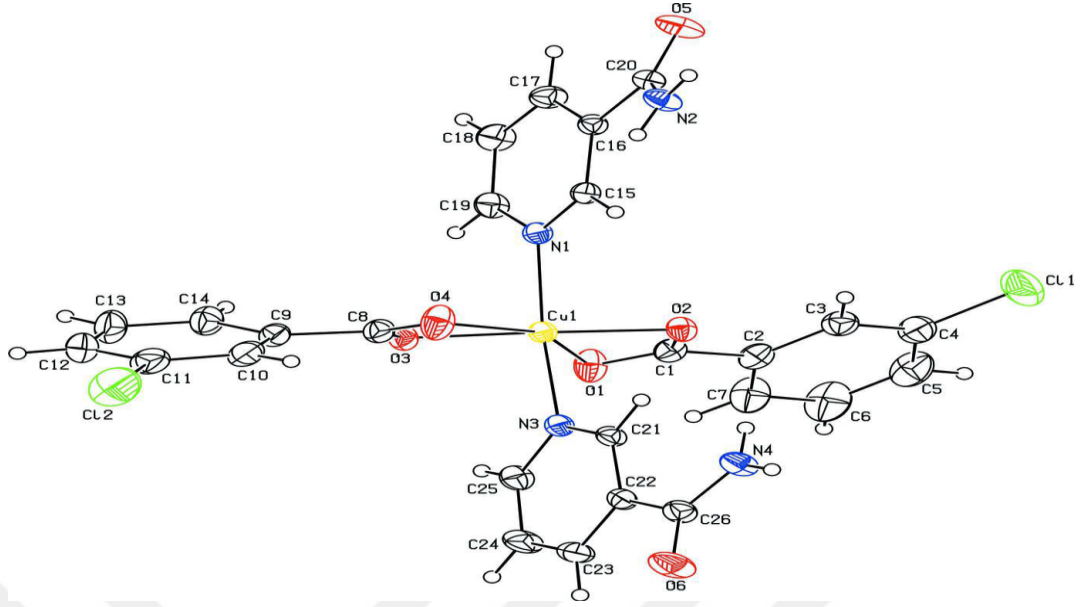


Şekil 4.3. I Kompleksinin Kristal Yapısı [93].

Monomer yapıya sahip **II** kompleksinde (Şekil 4.4) bakır atomu iki 3-klorbenzoat anyonu ve iki nikotinamid molekülü ile koordine olunmuştur, 3-klorbenzoat anyonu bidendant (Cu-O 2,3487(14); 2,0168(12); 1,8574(12) ve 2,6280 (12) Å - Ek Tablo 2,3), nikotinamid molekülü ise monodentant ligand olarak (Cu-N 1,9947(14); 2,0065(14) Å - Ek Tablo 2.3) bakır atomu ile bağ oluşturuyor. CuN₂O₄ koordinasyon polihedronu tahrif olunmuş oktahedrondur (Şekil 4.5). **II** kompleksinde bakır atomu (O1/C1/O2) ve (O3/C8/O4) karboksilat gruplarının en küçük düzlemlerinden uygun olarak 0,1556(2) Å ve -0,0577(2) Å sapmaktadır. Karboksilat gruplarının düzlemi ile komşu A(C2-C7) ve B(C9-C14) benzen halkaları arasındaki dihedral açılar uygun olarak 17,92(12)°ve 24,69(16)°. İki benzen halkası arasındaki dihedral açı ise 52,20(8)° Nikotinamid moleküllerinin piridin halkalarına ait C (N1/C15-C19) ve D(N3/C21-C25) düzlemlerinin oluşturdukları dihedral açılar: A/C = 85,61(7)°, A/D = 84,86(7)°, B/C = 71,49(7)°, B/D = 69,95(6)° ve C/D = 1,56 (6)°dir. İki (Cu1/O1/O2/C1) ve (Cu1/O3/O4/C8) dört üyeli halkaların düzlemleri arasındaki dihedral açı ise 12,07(7)° dir. O1-Cu1-O2 ve O3-Cu1-O4 açıları uygun olarak 59,76(5)° ve 55,08 (5)°'dir (Ek Tablo 2.3). Kristal yapısında moleküller arası N-H...O ve C-H...O hidrojen bağları (Ek Tablo 2.4) molekülleri üç boyutlu şebekede birleştiriyor ki, bunun sayesinde yapı stabil oluyor.

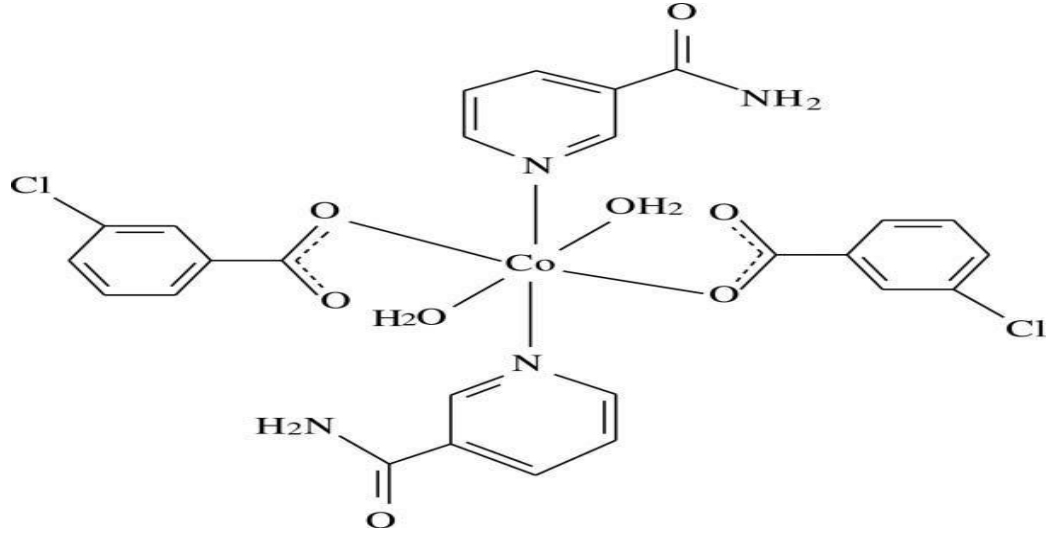


Şekil 4.4. **II** Kompleksinin Molekül Yapısı [94].

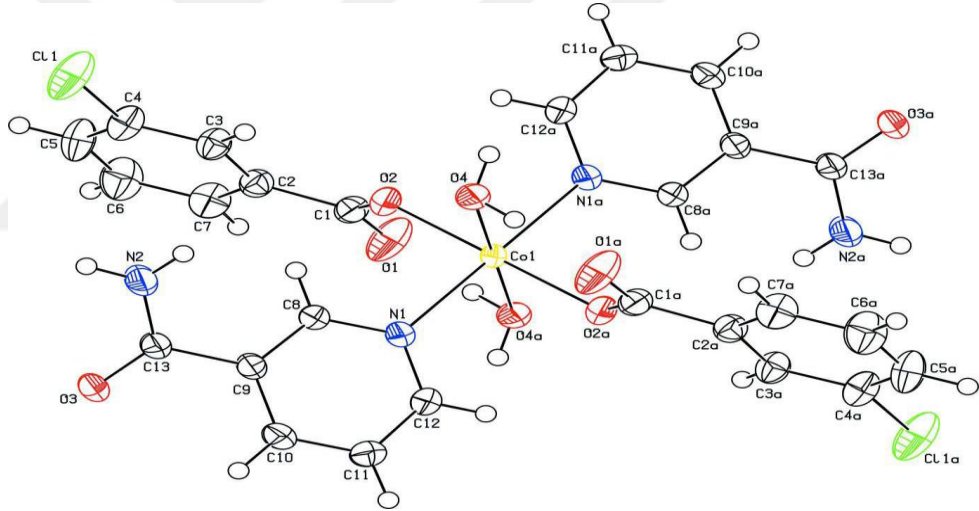


Şekil 4.5. II Kompleksinin Kristal Yapısı [94].

III kompleksinde kobalt(II) atomu simetri merkezinde yerleşerek iki 3-klorbenzoat anyonu, iki nikotinamid ligandı ve iki su molekülü ile koordine olunmuştur (Şekil 4.6 ve 4.7). Tüm ligandlar monodentantdırlar, ekvatoriyal düzlemde yerleşen dört oksijen atomu (Co–O 2,0592(9) Å, Co–OH₂ 2,1385(11) Å - Ek Tablo 3.3.) hafif tahrif olunmuş kare düzlemsel çevre oluşturuyor, nikotinamid ligandlarının iki azot atomu koordinasyon çevresini hafif tahrif olunmuş oktahedrona tamamlamaktadır (Co – N 2,1640(12) Å - Ek Tablo 3.3.). C1–O1 [1,2435(19) Å] ve C1–O2 [1,2677(18)Å] bağ uzunluklarının yakınlığı karboksilat gruplarında bağların delokalize olduğunu göstermektedir (Ek-Tablo 3.3.). Kobalt atomu (O1/C1/O2 karboksil grubunun ortalama düzleminden -0,5077(1) Å sapmaktadır. Karboksil grubunun düzlemi ile komşu benzen halkasının (C2 – C7) düzlemi arasındaki dihedral açı 9,14(9)°'dir. Benzen halkası (C2 – C7) ile piridin (N1/ C8 – C12) halkası arasındaki dihedral açı ise 82,18(8)°'dir. Kristalde N–H...O ve O–H...O hidrojen bağları (Ek Tablo 3.4.) molekülleri *b* eksenine paralel olan iki boyutlu şebekede birleştiriyor.



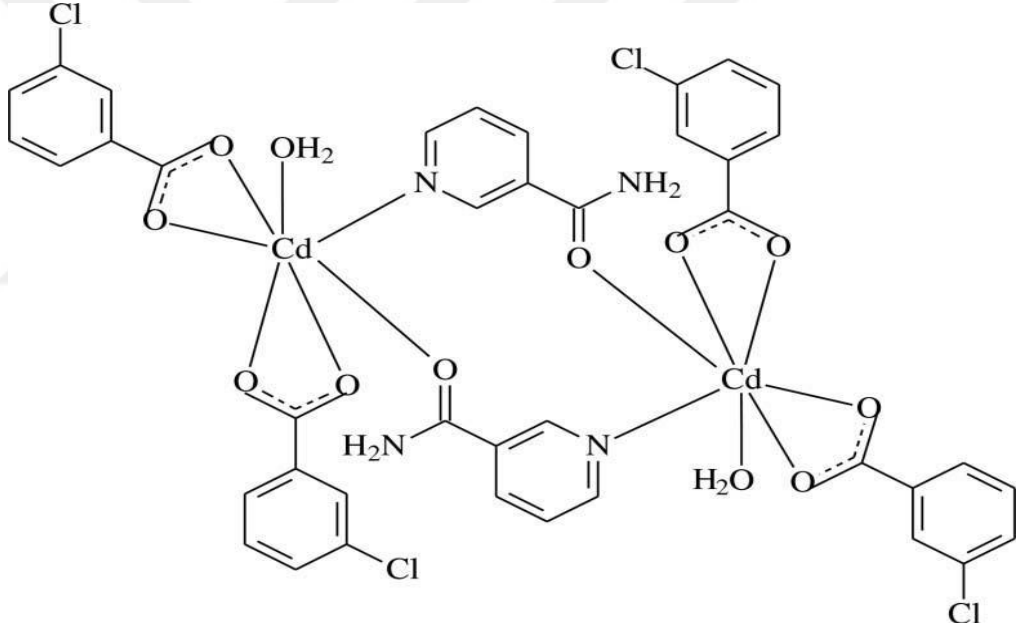
Şekil 4.6. III Kompleksinin Molekül Diyagramı [95]



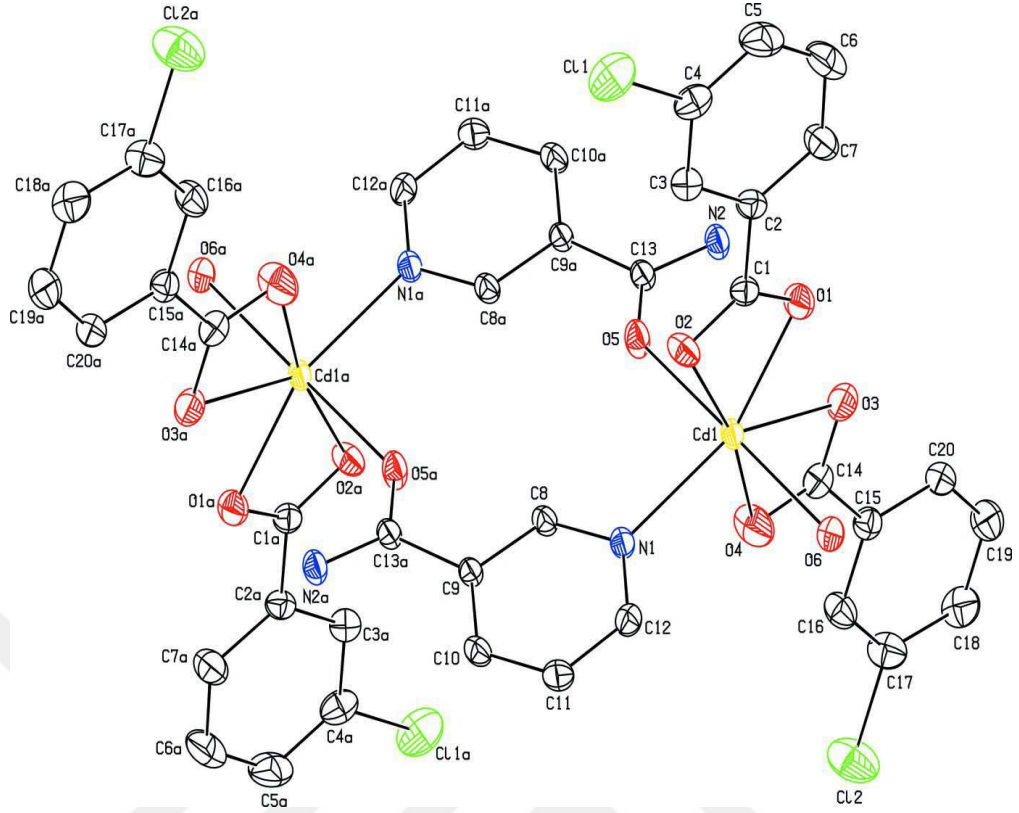
Şekil 4.7. III Kompleksinin Molekül Yapısı [95]

Simetri merkezli, iki çekirdekli **IV** kompleksinde (Şekil 4.8) kadmiyum(II) atomu köprü nikotinamid ligandının bir azot atomu (Cd–N 2,3384(14) Å ve simetri bağımlı diğer köprü nikotinamid ligandının oksijen atomu (Cd–O 2,3175(12) Å), iki 3-klorbenzoat anyonunun dört oksijen atomu (Cd–O 2,3234(14), 2,4800(13), 2,5447(15), 2,3110(16) Å ve bir su molekülünün oksijen atomu (Cd–OH₂ 2,3019(14) Å) ile koordine olunarak düzensiz koordinasyon çevresine sahiptir (Ek Tablo 4.3.). İki monomer birimi

simetri merkezli iki köprü nikotinamid ligandı vasıtası ile birleşmiştir (Şekil 4.9). İki çekirdekli moleküldeki kadmiyum atomları arasındaki mesafe 7,1647(3) Å'dur. Ortalama Cd–O bağ uzunluğu 2,3798(14) Å'dur, kadmiyum atomu (O1/C1/O2) ve (O3/C14/O4) karboksil gruplarının en küçük kare düzlemlerinden uygun olarak -0,2003(1) Å ve -0,3909(1) Å sapmaktadır. Düzlemsel karboksilat grupları ile komşu A(C2 – C7) ve C(C15 – C20) benzen halkaları arasındaki dihedral açılar uygun olarak 6,98(12)° ve 2,42(13)°'dir. B(N1/C8 – C12) piridin halkasının oluşturduğu dihedral açılar: A/B = 80,48(7)° , B/C = 81,80(7)°. O1–Cd1–O2 ve O3–Cd1–O4 açıları uygun olarak 54,22(4)° ve 53,32(5)°'dir (Ek Tablo 4.3). Kristalde moleküller arası O–H...O, N–H...O ve C–H...O hidrojen bağları iki çekirdekli molekülleri üç boyutlu şebekede birleştiriyor.



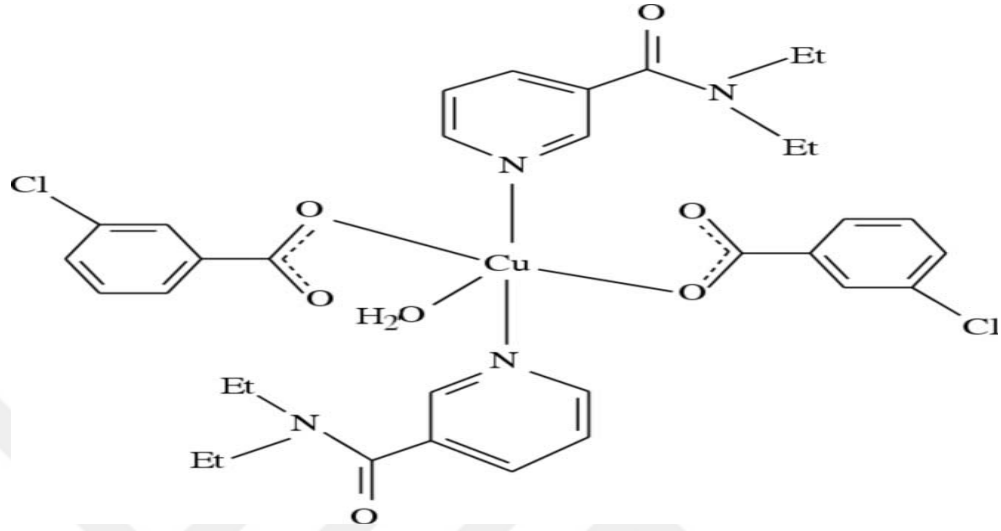
Şekil 4.8. IV Kompleksinin Moleküler Diyagramı [96].



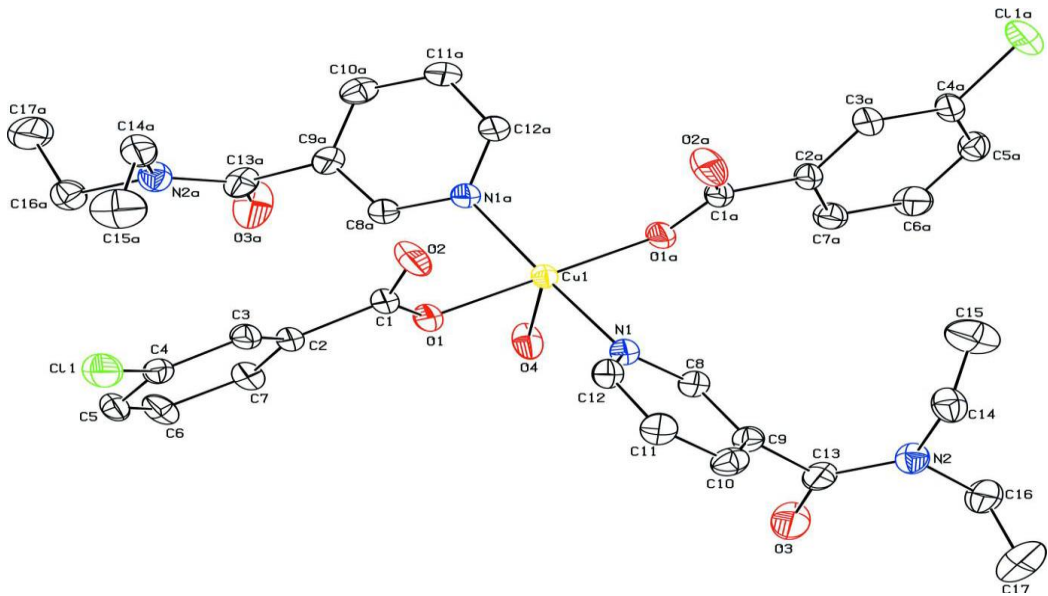
Şekil 4.9. IV Kompleksinin Molekül Yapısı [96].

Monomer yapıya sahip V kompleksinde (Şekil 4.10) bakır(II) atomu ve koordine su molekülünün oksijen atomu ikili simetri ekseninde yerleşmektedirler. Bakır(II) atomu 3-klorbenzoat anyonlarının iki karboksilat oksijen atomları (Cu–O 1,9337(10) Å), iki dietilnikotinamid ligandlarının iki azot atomları (Cu–N 2,0294(12) Å) ve bir su molekülünün bir oksijen atomu (Cu–OH₂ 2,238(2) Å) ile koordine olunarak (Ek Tablo 5.3) N₂O₃ kare-piramidal koordinasyon çevresi oluşturuyor (Şekil 4.11). 3-klorbenzoat anyonları ve dietilnikotinamid ligandları monodentant olarak koordine olunmaktadır, dört simetri bağımlı oksijen ve azot atomları bakır(II) katyonunun ekvatoriyal düzleminde tahrif olunmuş kare düzlemsel çevre oluşturuyorlar. Su molekülü bu çevreyi tahrif olunmuş kare piramide tamamlanmaktadır. Bakır(II) atomu (O1/C1/O2) karboksil grubunun ortalama düzleminden -0,1606(1) Å sapmaktadır. Düzlemsel karboksil grubu ile komşu A(C2 – C7) benzen halkası arasındaki dihedral açı 12,82(11)° dir. Benzen halkası ile B(N1/C8 – C12) piridin halkası arasında dihedral açı ise 82,51(6)° dir,

kristalde kuvvetli OH – H ...O hidrojen bağları (Ek Tablo 5.4) su hidrojen atomlarını karboksilat oksijenlerine bağlayarak C eksenini boyu sonsuz zincir oluşturuyorlar.



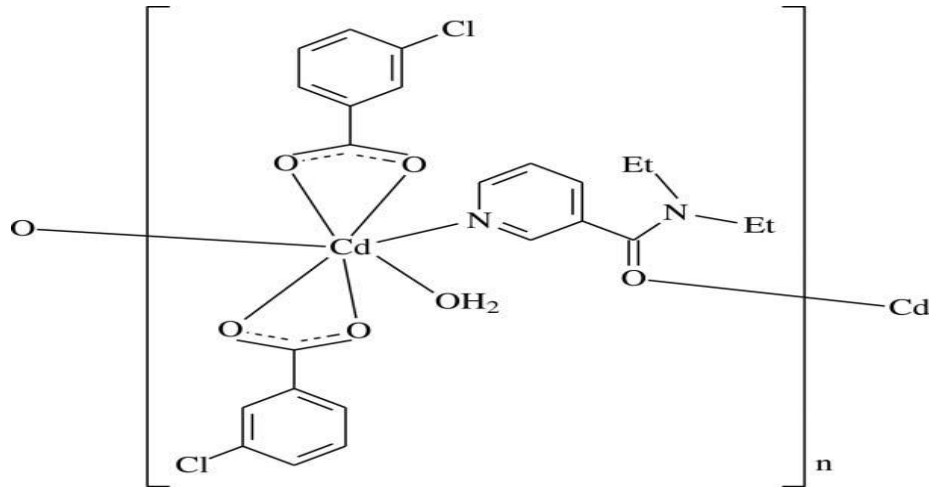
Şekil 4.10. V Kompleksinin Molekül Diyagramı [97].



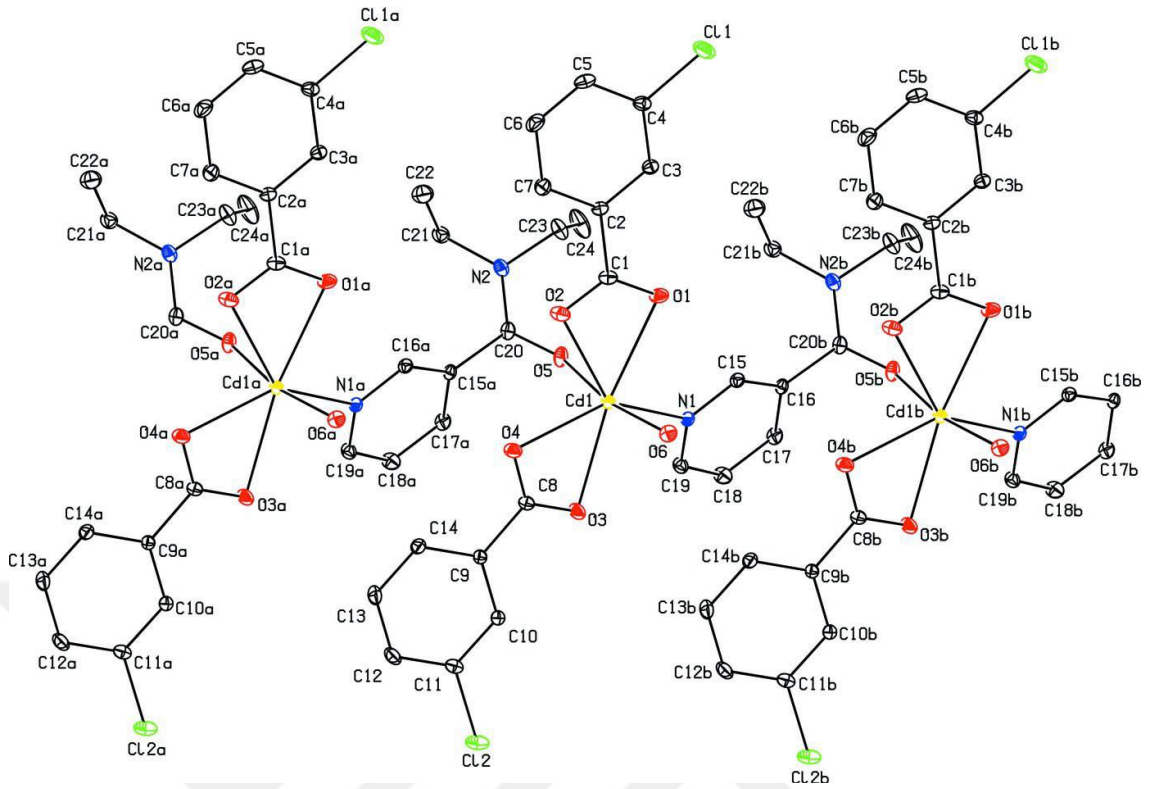
Şekil 4.11. V Kompleksinin Molekül Yapısı [97].

Polimer yapıya sahip VI kompleksinde kadmiyum(II) katyonları iki 3-klorobenzoat anyonları ile şelat oluşturuyor ve iki dietilnikotinamid molekülü ve bir su molekülü ile koordine olunarak tahrip olunmuş NO_6 pentagonal – bipiramidal geometri oluşturuyor(Şekil 4.15) ortalama Cd – O bağ uzunluğu $2,389(3)\text{Å}$ (Ek Tablo 7.3) dietilnikotinamid ligandları heteroazot atomu ve karbonil oksijen atomu vasıtası ile kadmiyum(II) katyonları köprü oluşturuyorlar(Cd – N $2,305(3)\text{Å}$, Cd – O_{CO} $2,410(3)\text{Å}$). Bunun sonucunda *b* eksenini boyunca polimer zincir oluşuyor(Şekil 4.16).

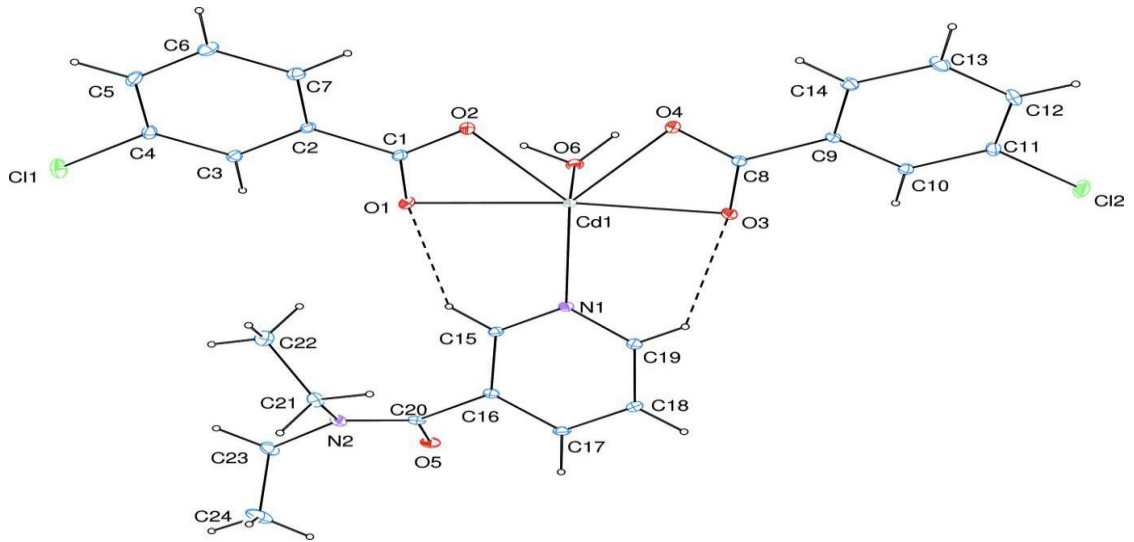
Molekül dahili C – H ... O hidrojen bağları dietilnikotinamid ligandlarını karboksil gruplarına bağlıyorlar(Şekil 4.17 ve Ek Tablo 7.4). O1 – Cd1 – O2 ve O3 – Cd1 – O4 açıları uygun olarak $53,75(10)^\circ$ ve $54,23(9)^\circ$ dir. (O1/O2/C1) ve (O3/O4/C8) karboksilat grupları düzlemleri ile komşu A(C2 – C7) ve B(C9 – C14) benzen halkaları arasındaki dihedral açılar uygun olarak $4,56(28)^\circ$ ve $12,84(26)^\circ$ dir iki benzen halkası birbiri ile $1,89(14)^\circ$ lik dihedral açı oluşturuyorlar.Benzen halkaları ile C(N1/C5 – C19) piridin halkası arasındaki dihedral açı A/C= $34,83(13)^\circ$ ve B/C= $35,13(11)^\circ$ kadmiyum atomu karboksilat grupları düzlemlerinden $0,0972(3)\text{Å}$ ve $0,0127(3)\text{Å}$ sapmaktadırlar.Su molekülleri ile karboksilat grupları arasındaki kuvvetli moleküller arası O – H ... O hidrojen bağları (Ek Tablo 7.4) komşu polimer zincirleri birleştirerek *bc* düzlemine paralel katmanlar oluşturuyor.



Şekil 4.12. VI Kompleksinin Molekül Diyagramı [98].



Şekil 4.13. VI Kompleksinin Kristal Yapısı [98].



Şekil 4.14. VI Kompleksinin Molekül Yapısı [98].

SONUÇ

“Metal 3-*klorobenzoatların Nikotinamid ve Dietilnikotinamid Komplekslerinin Sentezi ve Özellikleri*” başlıklı bu çalışma sonucunda m-*klorobenzoik asit ve biyolojik öneme sahip nikotinamid ve dietilnikotinamid kullanılarak iki değerlikli geçiş metallerinin [Cu(II), Co(II), Zn(II) ve Cd(II)] altı adet yeni kompleksi sentezlenerek, yapısal özellikleri incelenmiştir.*



KAYNAKLAR

- [1]. Alvarez-Ros M.C., Sanchez-Cortes S., Garcia-Ramos J.V. (2000), Vibrational study of the salicylate interaction with metallic ions and surfaces, *Spectrochim.Acta*,56,p. 2471.
- [2]. Biber M.V., Stumm W., (1994), An IN-SITU ATR-FTIR study the surface coordination of salicylic-acid on aluminum and iron(III) oxides, *Environ.Sci.Technol.*, 28, p. 763.
- [3]. Appendini P., Hotchkiss J.H., (2002), Review of antimicrobial food packaging. *Inn. Food Sci. Emerg. Technol.*, p.3299.
- [4]. Pylypiw H.M. Jr., Grether, M.T. J. (2000), Rapid high-performance liquid chromatography method for the analysis of sodium benzoate and potassium sorbate in foods. *Chrom. A.*, 883, p.299.
- [5]. Joseph J.K., Akinyosoye F.A., (1997), comparative studies on red sorghum extracts and other chemicals as preservatives for west african soft cheese. *Int. Dairy J.*7. p. 193.
- [6]. Menon H., Fleck R.W., Yong G., (1990), Strothkamp K.G., Benzoic acid inhibition of the alpha, beta, and gamma isozymes agaricus bisporus tyrosinase. *Arch. Biochem. Biophys.*1,p.27.
- [7]. Atigadda V.R., Brouillette W.J., Duarte F., Babu Y.S., Bantia S., Chand P., Chu N., Montgomery J.A., Walsh D.A., Sudbeck E., Finley J., Air G.M., Luo M., Laver G.W., (1999), Hydrophobic benzoic acids as inhibitors of influenza neuraminidase. *Bioorg. Med. Chem.*,7, p.2487.
- [8]. Jedrzejewski M.J., Singh S., Brouillette W.J., Laver G.W., Air G.M., Luo M., (1995), Structures of aromatic inhibitors of influenza virus neuraminidase. *Biochemistry*, 34, p.3144.
- [9]. Yang P., Guo M., (1999), Interactions of organometallic anticancer agents with nucleotides and DNA. *Coord. Chem. Rev.*, 185–186, p.189.

- [10]. Weismann. G., (1991), Aspirin. *Sci. Am.*, 264, p.84.
- [11]. Kasuya F., Yamaoka Y., Igarashi K., Fukui M., (1998), Molecular specificity of a medium chain acyl-CoA synthetase for substrates and inhibitors: conformational analysis. *Biochem. Pharmacol.*, 55, p.1769.
- [12]. Peskar B.M., Ehrlich K., Peskar B.A., (2002), Interaction of cyclooxygenase-2 inhibitors and salicylate, ingastric, mucosaldamage. *Eur. J. Pharmacol.*, 434, p.65.
- [13]. George G.N., Bray R.C., (1988), Studies by electron paramagnetic resonance spectroscopy of xanthine oxidase enriched with molybdenum-95 and with molybdenum-97. *Biochemistry*, 27, p.3603.
- [14]. Mondal M.S., Mitra S. (1996), The inhibition of bovine xanthine oxidase activity by Hg^{2+} and other metal ions. *J. Inorg. Biochem.*, 62, p.271.
- [15]. Sax N.I. and Lewis, R.J. Sr. (eds.). (1987)., *Hawley's Condensed Chemical Dictionary*. 11th ed., NewYork: Van Nostrand Reinhold. Co., p.263.
- [16]. Williams A.E.; (1978), *Kirk-Othmer Encycl. Chem. Tech.* 3rd ed., NY: Wiley3, pp.778-790.
- [17]. John NY: Wiley and Sons, (1978-1984), *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology*, 3rd ed., Volumes 1-26. New. York,, V3, p. 790.
- [18]. Sabbah R., Hirtz, H. (1991), Thermodynamic study of chlorobenzoic acids. *Bulletin De La Societe Chimique De France*, 1, pp. 26-29.
- [19]. Sabbah, R., Aguilar, A.R. (1995), Thermodynamic study on isomers of chlorobenzoic acids, *Journal of Revue Canadienne de Chimie*, 9, pp. 1538-1545.
- [20]. Emel'yanenko, V.N., Strutynska., Verevkin, S.P. (2005), Enthalpies of formation and strain of chlorobenzoic acids from thermochemical measurements and from ab initio calculations. *Journal of Physical Chemistry*, 109 (19), pp.4375-4380.

- [21]. Ribeiro da S, Manuel A.V., Fonseca, José M.S., Carvalho, Rui P.B.M., Monte, Manuel J.S. (2005), Thermodynamic study of the sublimation of six halobenzoic acids, *The Journal Chemical Thermodynamics*, 37, pp. 271-279.
- [22]. Johnson W.H., Prosen E.J. (1974), Enthalpies of combustion and formation of mono- chlorobenzoic acids. *Journal of Research of the National Bureau of Standards, Section A - Physics and Chemistry*, volume A 78, pp. 683-689.
- [23]. Contreras, M., Silva, S. (1998), Dissociation of organic acids in mixtures of 2-propanol with water at 25 degrees C. A conductometric study. *Boletin de la Sociedad Chilena de Quimica*, 43, pp.147-153.
- [24]. Li, M.C., You, N.N., Ma, C.A. (1989), Studies on electrochemical dechlorination reaction of 3-chlorobenzoic acid on Pd/Ti electrode. *Acta Chimica Sinica*, 23, pp. 2762-2766.
- [25]. Konovalov V.V.,Raitsimring A.M, Tsvetkov Yu.D. (1989), Photoelectrochemical study of the radical anion cleavage rates in aromatic molecules: Halobenzoic acids. *Chemical Physics Letters*, 3, pp.257-264.
- [26]. Zona, R., Solar S., Getoff N., Sehested K, Holcman, J. (2008), Reactivity of H atoms and hydrated electrons with chlorobenzoic acids. *Radyasyon Physics and Chemistry*, 77(2), pp. 162-168.
- [27]. Hoover K.R.,Pop K, Acree W.E., Abraham M.H. (2005), Solubility of crystalline nonelectrolyte solutes in organic solvents: Mathematical correlation of 3-chlorobenzoic acid solubilities with the Abraham solvation parameter model. *South-African Journal of Chemistry*, 58, pp.25-29.
- [28]. Yun, Q., Lin Z., Xin T., (2009), Cometabolism and immobilized degradation of monochlorobenzoate by *Rhodococcus erythropolis*. *African Journal of Microbiology Research*, 3(9), pp.482-486 .

- [29]. Ledger T., Aceituno, F., Gonzalez, B. (2009), 3-Chlorobenzoate is taken up by a chromosomally encoded transport system in *Cupriavidus necator* JMP134. *Microbiology-SGM*, 155, pp.2757-2765.
- [30]. Tarawneha, K.A., Irstaide F., Ajlundi, I.H., Abboud, M.M., Mohammed N.A, Khleifat, A.M. (2010), Biodegradation kinetics of four substituted chlorobenzoic acids by *Enterobacter aerogenes*. *Bioremediation Journal*, 14(2), pp. 55-56.
- [31]. Aakeroy, C.B., Beffert, K., Desper, J., Elisabeth, E. (2003), Hydrogen-bond directed structural selectivity in asymmetric heterocyclic cations. *Crystal Growth and Design*, 3(5), pp. 837-846.
- [32]. Devi P., Muthiah P.T., Rychlewska U., Plutecka A. (2006), Hydrogen-bonding patterns in pyrimethaminium 3-chlorobenzoate. *Acta Cryst. E*62, pp. o3704-o3706.
- [33]. Grech E., Kalenik J., Sobczyk L. (1985), Cl-35 nuclear-quadrupole resonance studies of hydrogen-bonding in solid complexes of chlorobenzoic acids with amines, *Journal of the Chemical Society – Faraday Transactions*, 81, pp. 311-319.
- [34]. Al-Farhan, K.A. (2003), Triphenylphosphine oxide-3-chloro-benzoic acid. *Acta Crystallographica*, C59, pp. 179-180.
- [35]. MorenoFugen, R., Grajales Tamayo, M., Gambardella, M.T.D. (1997), The 1:1 complex formed by 2-picoline N-oxide and 3-chlorobenzoic acid. *Acta Crystallographica*, C53, pp. 1635-1637.
- [36]. Sikorski A., Trzybiński D. (2011), The influence of benzoate anion substituents on the crystal packing and hydrogen-bonding network of 9-aminoacridinium salts, *Tetrahedron*, 16, pp. 2839-2843.
- [37]. Wattenbach C., Sippel H., Muller U., Frauenrath H, (2000), Crystal structure of (2S,4S,5S)-3-chlorobenzoic acid 2-tert-butyl-5-hydroxy-5-methyl-1,3-dioxan-4-ylester, C₁₆H₂₁ClO₅, *Zeitschrift für Kristallographie – New Crystal Structures*, 215(4), pp. 507-508.

- [38]. Hemamalini M., Fun H. (2010), 2-Amino-4-methylpyridinium 3-klorobenzoate. Acta Cryst., E66, o1843-o1844.
- [39]. Hemamalini M., Goh J. H., Fun H. (2011), 2,3-Diaminopyridinium 3-klorobenzoate 3-korobenzoik acid. Acta Cryst., E67, o349.
- [40]. Souza M. V. N., Howie R. A., Tiekink E. R. T., Wardell J. L., Wardell S. M. S. V. (2009), Acta Cryst. E65, o3204-o3205.
- [41]. Pavkovic S.F., Wilhelm F.C., Brown J.N. (1978), Tetraaquabis(metachlorobenzoato) nickel(II). Acta Crystallographica, B34, pp. 1337-1340.
- [42]. Turpeinen U., Orama O., Mutikainen I., Hamalainen R. (1996), Crystal structure of the tetramer of (3-chlorobenzoato)(2-dimethyl-amino-ethanolato)copper(II), $\text{Cu}_4(\text{C}_7\text{H}_4\text{ClO}_2)(\text{C}_4\text{H}_{10}\text{NO})_4$. Zeitschrift für Kristallographie, 211, pp. 867-869
- [43]. Kurpiel-Gorgol R. (1986), Scandium(III) complexes with meta-nitrobenzoic, meta-chlorobenzoic, meta-hydroxybenzoic and meta-aminobenzoic acids. Polish Journal of Chemistry, 60(7-12), pp. 749-758.
- [44]. Brzyska W., Kurpiel-Gorgol R. (1987), Thermal decompositions of scandium(III) m-nitrobenzoate, m-chlorobenzoate, m-hydroxybenzoate and m-aminobenzoate in air atmosphere. Journal of Thermal Analysis, 32(2), pp. 671-678.
- [45]. Brzyska W., Swita E. (1987), Studies on thermal-decomposition of 3-chlorobenzoates of rare-earth elements in air atmosphere. Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, 32(4), pp. 1005-1013.
- [46]. Brzyska W., Swita E. (1989), Properties of rare-earth element complexes with 3-chlorobenzoic acid. Polish Journal of Chemistry, 63(1-3), pp. 59-64.
- [47]. Brzyska W., Kurpiel-Gorgol R. (1995), Thermal decomposition of scandium(III) 2-chloro-, 3-chloro-, 4-chloro- and 2,4-dichlorobenzoates in an air atmosphere. Journal Thermal Analysis, 45(6), pp. 1471-1478.

- [48]. Albela B., Corbella M., Ribas J. (1996), Synthesis, characterization and magnetic properties of dinuclear complexes of manganese(III) and manganese(II) with oxo and benzoate derivatives as bridging ligands. *Tetrahedron*, 15(1), pp. 91-96.
- [49]. Gomez, V., Corbella M. (2012), Catalase activity of dinuclear Mn(III) compounds with chlorobenzoate bridges. *European Journal of Inorganic Chemistry*, 19, pp. 3147-3155.
- [50]. Sun D., Liu F.J., Hao H.J., Li Y.H., Huang R.B., Zheng L.S. (2012), Six low dimensional silver(I) coordination complexes derived from 2-aminobenzonitrile and carboxylates. *Inorganica Chimica Acta*, 387, pp. 271–276.
- [51]. Ray K., Lee S.M., Que Jr. L. (2008). Iron oxidation state dependent O-O bond cleavage of meta-klorobenzoic acid to form an iron(IV) oxo complex, *Acta Cryst.* E65, o3204-o3205.
- [52]. Rolfe H.M. A (2014), review of nicotinamide: treatment of skin diseases and potential side effects. *Journal of Cosmetic Dermatology*, **13** (4), pp. 324–8.
- [53]. MacKay D., Hathcock J., Guarneri E. (2012), Niacin: chemical forms, bioavailability, and health effects. *Nutrition Reviews*, **70**(6), pp. 357–66.
- [54]. Niren N. M. (2006), Pharmacologic doses of nicotinamide in the treatment of inflammatory skin conditions: a review. *Cutis*, **77** (1 Suppl), pp. 11–6.
- [55]. Bigoli, F., Braibanti, A., Pellinghelli, M. A. (1972), & Tiripicchio, A. Crystal and Molecular Structure of Mono-(N,N-Diethylnicotinamide)Cadmium Dithiocyanate. *Acta Cryst.*, **B28**, pp. 962–966.
- [56]. Kıvılcım Şendil, (1998). Kobalt(II) Arilkarboksilatlarının Nikotinamid ile Komplekslerinin Sentezi ve Yapılarının İncelenmesi. Kafkas Üniversitesi. Fen Bilimleri Enstitüsü. Kars.

- [57]. Dursun Ali Köse, (2000). Bakır(II), Nikel(II), Kobalt(II) ve Çinko(II) Asetilsalisilatlarının Nikotinamid ve Dietilnikotinamid Komplekslerinin Sentezi ve Yapılarının İncelenmesi. Kafkas Üniversitesi. Fen Bilimleri Enstitüsü Kars.
- [58]. Afşin Ahmet Kaya. (2004).Bakır (II), Nikel(II), Kobalt(II) ve Çinko(II) 3-Hidroksibenzoatların Nikotinamid ve Dietilnikotinamid Komplekslerinin Sentezi ve Özellikleri. Kafkas Üniversitesi. Fen Bilimleri Enstitüsü Kars.
- [59]. Barış Kanbay. (2004). Bakır(II) Arilkarboksilatların İzonikotinamid Kompleksleri. Kafkas Üniversitesi. Fen Bilimleri Enstitüsü Kars.
- [60]. Özgür Aybirdi. (2005). Bakır(II), Kobalt(II), Nikel(II), Mangan(II) 4-Dimetilaminobenzoatlar ve Nikotinamid Komplekslerinin Sentezi ve Özellikleri. Kafkas Üniversitesi. Fen Bilimleri Enstitüsü. Kars.
- [61]. Fureya Elif Öztürkkan. (2006). Kobalt p-Halojenobenzoatların Nikotinamid ve N,N'-Dietilnikotinamid Komplekslerinin Sentezi ve Özellikleri. Kafkas Üniversitesi. Fen Bilimleri Enstitüsü. Kars,
- [62]. Songül Edebalı. (2007). Çinko p-Floro- ve p-Bromobenzoatların Nikotinamid, İzoikotinamid ve N,N'-Dietilnikotinamid Komplekslerinin Sentezi ve Özellikleri. Kafkas Üniversitesi. Fen Bilimleri Enstitüsü. Kars.
- [63]. Mustafa Sertçelik. (2009). 4-Formilbenzoik Asitin Metal Komplekslerinin Sentezi ve Özellikleri. Kafkas Üniversitesi. Fen Bilimleri Enstitüsü. Kars.
- [64]. Erdinç Tenlik. (2011). p-Metoksibenzoatların Nikotinamid, İzonikotinamid ve Dietilnikotinamid Komplekslerinin Sentezi ve Özellikleri. Kafkas Üniversitesi. Fen Bilimleri Enstitüsü. Kars.
- [65]. Özgür Aybirdi. (2010). p-Aminobenzoik Asit Türevlerinin Komplekslerinin Sentezi ve Özellikleri. Kafkas Üniversitesi. Fen Bilimleri Enstitüsü. Kars.
- [66]. F. Elif Özbek. (2011). 2-Halojenobenzoat Komplekslerinin Sentezi ve Özellikleri. Kafkas Üniversitesi. Fen Bilimleri Enstitüsü. Kars.

- [67]. Efdal Çimen. (2011). p-Metilbenzoik Asidin Metal Komplekslerinin Sentezi ve Özellikleri. Kafkas Üniversitesi. Fen Bilimleri Enstitüsü. Kars.
- [68]. Özbek F. E., Tercan B., Şahin, E., Necefoğlu H. and Hökelek T. (2009), Tetraaquabis(nicotinamide- κN^1)-cobalt(II)bis(2-fluorobenzoate). Acta Cryst., E65, pp. m341-m342.
- [69]. Şahin O., Büyüküngör O., Köse D.A., Öztürkkan E.F. and Necefoğlu H. (2007), Diaquabis(4-fluorobenzoato- κO)- bis(nicotinamide- κN)cobalt(II). Acta Cryst., C63, pp. m243-m245.
- [70]. Dincel Ö., Tercan B., Öztürkkan F.E., Necefoğlu H. and Hökelek T. (2013), Diaquabis(2-chlorobenzoato- κO)bis-(nicotinamide- κN^1)cobalt(II). Acta Cryst., E69, pp.m173-m174.
- [71]. Çaylak N., Hökelek T., Öztürkkan F.E., Necefoğlu H. (2007), Diaquabis(4-chlorobenzoato- κO)bis(nicotinamide- κN)cobalt(II). Acta Cryst., E63, pp. m1344-m1346.
- [72]. Hökelek T., Dal H., Tercan B, Öztürkkan F.E., and Hökelek T. (2009), Tetraaquabis(nicotinamide- κN^1)nickel(II)bis(2-fluorobenzoate). Acta Cryst., E65, pp. m1330-m1331.
- [73]. Necefoğlu H., Öztürk V., Özbek F.E, Adıgüzel V. and Hökelek T. (2011), *trans-trans*-Diaquabis(4-fluorobenzoato- κO)-bis(nicotinamide- κN^1)nickel(II). Acta Cryst., E67, pp. m1638–m1639.
- [74]. Hökelek T., Dal H., Tercan B., Özbek F.E. and Necefoğlu H. (2009), Diaquabis(2-chlorobenzoato- κO)-bis(nicotinamide- κN^1)nickel(II). Acta Cryst., E65, pp. m466-m467.
- [75]. Hökelek T., Yılmaz F., Tercan B., Özbek F.E., and Necefoğlu H. (2009), Diaquabis(2-bromobenzoato- κO)bis-(nicotinamide- κN^1)nickel(II). Acta Cryst., E65, pp. m768–m769.

- [76]. Necefoğlu H., Özbek F.E ., Öztürk V., Adıgüzel V. and Hökelek T. (2011).Di- μ -nicotinamide- $\kappa^2N^1:O;\kappa^2O:N^1$ -bis[aquabis(4-bromobenzoato)- $\kappa O;\kappa^2O,O'$ -manganese(II)]., *Acta Cryst.*, E67, pp. m1128–m1129.
- [77]. Necefoğlu H., Özbek F.E ., Öztürk V., Adıgüzel V. and Hökelek T. (2012), Aquabis,(4fluorobenzoato- κO) bis(nicotinamide- κN^1)copper(II) nicotinamide hemisolvate trihydrate. *Acta Cryst.*, E68, m52-m53
- [78]. Necefoğlu H., Özbek F.E., Öztürk V., Tercan B. and Hökelek (2011), T. Diaquabis(4-bromobenzoato- κO)-bis(nicotinamide- κN^1)copper(II). *Acta Cryst.* E67, pp. m900-m901.
- [79]. Hökelek T., Yılmaz F., Tercan B., Özbek F.E. and Necefoğlu H. (2009), Bis(μ -2-fluorobenzoato-1:2 $\kappa^2O:O'$)-(2-fluorobenzoato-1 κ^2O,O')(2-fluorobenzoato 2 κO) dinicotinamide-1 $\kappa N^1,2\kappa N^1$ -dizinc(II)–2-fluorobenzoic acid (1/1). *Acta Cryst.*, E65, pp. m1608–m1609.
- [80]. Hökelek T., Dal H., Tercan B., Özbek F.E. and Necefoğlu H. (2009),Diaquabis(2-bromobenzoato- κO)bis-(nicotinamide κN^1)zinc(II). *Acta Cryst.*E65,pp.m607m608.
- [81]. Öztürkkan E.F., Köse D.A., Necefoğlu H. and Uzun I. (2007), Synthesis and Characterization of bis(N,N-Diethylnicotinamide) *p*-Halogenbenzoate Complexes of Co(II). *Asian Journal of Chemistry*, 19(6), pp. 4880-4888.
- [82]. Hökelek T., Saka G., Tercan, B., Öztürkkan F.E. and Necefoğlu H. (2010), Diaquabis(2-bromobenzoato- κO)bis(N,N-diethylnicotinamide- κN^1)cobalt(II). *Acta Cryst.*, E66, pp. m1132-m1133.
- [83]. Hökelek T., Dal H., Tercan B., Özbek F.E. and Necefoğlu H. (2009), Diaquabis(2-chlorobenzoato- κO)bis(N,N-diethylnicotinamide- κN^1)nickel(II). *Acta Cryst.* E65, pp. m545-m546.

- [84]. Hökelek T., Yilmaz F., Tercan B., Özbek F. E., and Necefoğlu H. (2009), Diaquabis-(2-bromobenzoato- κ O)bis(N,N-diethylnicotinamide- κ N¹)nickel(II). Acta Cryst., E65, pp. m766-m767.
- [85]. Hökelek T., Dal H., Tercan B., Özbek F. E. and Necefoğlu H. (2009), Diaquabis-(2-chlorobenzoato- κ O)bis(N,N-diethylnicotinamide- κ N¹)manganes (II).Acta Cryst. E65, pp. m513-m514.
- [86]. Hökelek T.,Dal H.,Tercan B.,Özbek F.E. and Necefoğlu H.(2009),. Diaquabis(2-bromobenzoato- κ O)bis(N,N-diethylnicotinamide- κ N¹)manganese(II). Acta Cryst., E65, pp. m533-m534.
- [87]. Necefoğlu H., Özbek F.E., Öztürk V., Adıgüzel V. and Hökelek T. (2011), Diaquabis(4-bromobenzoato- κ O)bis(N,N-diethylnicotinamide- κ N¹)manganese(II). Acta. Cryst., E67, pp. m1209-m1210.
- [88]. Necefoğlu H., Özbek F.E., Öztürk V.,Adıgüzel V. and Hökelek T. (2011), Diaquabis(N,N'-diethylnicotinamide- κ N¹)bis(4-fluorobenzoato- κ O)copper(II). Acta Cryst., E67, pp. m1164-m1165.
- [89]. Necefoğlu H., Özbek F.E., Öztürk V., Adıgüzel V. and Hökelek T. (2011). Diaquabis(4-bromobenzoato- κ O)bis(N,N-diethylnicotinamide- κ N¹)copper(II)., Acta Cryst., E67, pp. m1317-m1318.
- [90].Hökelek.T., Çaylak.N. and Necefoğlu.H.(2007),.Diaquabis(N,N-diethylnicotinamide- κ N)bis(4-fluorobenzoato- κ O)zinc(II). 63(10), p p . 2561–2562.
- [91]. Hökelek T., Dal H., Tercan B., Özbek F.E. and Necefoğlu H. (2009), Diaquabis(2-bromobenzoato- κ O)bis(N,N-diethylnicotinamide- κ N¹)zinc(II). Acta Cryst., E65, pp. m481-m482.
- [92]. Öztürk A., Hökelek T., Özbek F.E. and Necefoğlu H. (2008), Diaquabis(4-bromobenzoato- κ O)bis(N,N'-diethylnicotinamide- κ N¹)zinc(II). Acta Cryst., E64, pp. m1218-m1219.

- [93].Bozkurt N, Dilek N, Delibas N.C., Necefoğlu H.,and Hökelek T.,(2013).,catena-Poly[aquabis(μ -3-chlorobenzoato- κ^2 O:O₂)zinc], ActaCryst. E69, pp. m381–m382
- [94].Bozkurt.N,Dilek.N,Delibas.N.C. ,Necefoğlu.H.,and.Hökelek.T.,(2013).Bis(3chlorobenzoato- κ^2 O,O₂)bis(nicotinamide- κ N)copper(II), ActaCryst.E69,pp. m356–m357
- [95].Bozkurt.N,Dilek.N,Delibas.N.C. ,Necefoğlu.H.,and.Hökelek.T.,(2013).Diaquabis(3chlorobenzoato- κ O) bis(nicotinamide- κ N1)cobalt(II),,Acta Cryst. E69, pp. m349–m350
- [96].Bozkurt N, Dilek N, Delibas N.C., Necefoğlu H.,and Hökelek T.,(2013).Di- μ -nicotinamide κ^2 N¹:O; κ^2 O:N¹bis[aquabis(3chlorobenzoato- κ O,O₂)cadmium(II)],,Acta Cryst. E69, pp. m389–m390
- [97].Bozkurt N, Dilek N, Delibas N.C. ,Necefoğlu H.,and Hökelek T.,(2013).,Aquabis(3-chlorobenzoato-jO)bis(N,Ndiethylnicotinamide- κ^2 N¹ copper(II) Acta Cryst. E69, pp. M458–m459
- [98].Bozkurt N, Dilek N, Delibas N.C., Necefoğlu H.,and Hökelek T.,(2013)catena-Poly[aquabis(3chlorobenzoato- κ^2 O,O)cadmium]- μ -N,Ndiethylnicotinamide- κ^2 N¹:O], Acta Cryst. E69, pp. M466–m467

EKLER

Ek Tablo 1.1. *I* kompleksinin Kesirli atomik koordinatları ve izotropik veya eşdeğer izotropik yerdeğiştirme parametreleri (Å), [95].

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å²)

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> _{iso} */ <i>U</i> _{eq}
Zn1	1.0000	0.18233 (4)	0.2500	0.02388 (10)
Cl1	0.781898 (15)	-0.05564 (11)	-0.15745 (9)	0.05827 (18)
O1	0.97446 (4)	0.20515 (18)	-0.03094 (16)	0.0286 (3)
O2	1.05402 (4)	0.0674 (2)	0.19485 (18)	0.0368 (3)
O3	1.0000	0.5006 (3)	0.2500	0.0497 (6)
H31	0.9935 (8)	0.573 (4)	0.325 (3)	0.045 (7)*
C1	0.94299 (5)	0.1000 (3)	-0.1019 (2)	0.0250 (3)
C2	0.89932 (5)	0.1772 (2)	-0.0796 (2)	0.0263 (3)
C3	0.86489 (5)	0.0444 (3)	-0.1307 (2)	0.0306 (3)
H3	0.8687	-0.0906	-0.1814	0.037*
C4	0.82482 (5)	0.1162 (3)	-0.1050 (3)	0.0357 (4)
C5	0.81842 (6)	0.3189 (3)	-0.0349 (3)	0.0409 (5)
H5	0.7913	0.3660	-0.0205	0.049*
C6	0.85288 (6)	0.4504 (3)	0.0133 (3)	0.0411 (4)
H6	0.8489	0.5872	0.0600	0.049*
C7	0.89340 (6)	0.3808 (3)	-0.0069 (3)	0.0346 (4)

Ek Tablo 1.2. *I* Kristalinin Atomik yer değiştirme parametreleri (Å)

Atomic displacement parameters (Å²)

	<i>U</i> ¹¹	<i>U</i> ²²	<i>U</i> ³³	<i>U</i> ¹²	<i>U</i> ¹³	<i>U</i> ²³
Zn1	0.02038 (13)	0.01944 (13)	0.03266 (17)	0.000	0.00670 (10)	0.000
Cl1	0.0262 (2)	0.0787 (4)	0.0707 (4)	-0.0071 (2)	0.0089 (2)	-0.0203 (3)
O1	0.0262 (5)	0.0295 (6)	0.0302 (6)	-0.0027 (4)	0.0034 (5)	0.0041 (4)
O2	0.0225 (5)	0.0460 (7)	0.0416 (7)	0.0066 (5)	0.0027 (5)	-0.0187 (6)
O3	0.0973 (18)	0.0189 (8)	0.0384 (12)	0.000	0.0312 (12)	0.000
C1	0.0237 (7)	0.0287 (7)	0.0231 (8)	0.0039 (6)	0.0049 (6)	0.0027 (6)
C2	0.0241 (7)	0.0296 (8)	0.0256 (8)	0.0060 (5)	0.0052 (6)	0.0013 (6)
C3	0.0256 (7)	0.0356 (8)	0.0310 (9)	0.0043 (6)	0.0056 (6)	-0.0034 (7)
C4	0.0249 (8)	0.0485 (10)	0.0340 (9)	0.0030 (7)	0.0046 (7)	-0.0012 (8)
C5	0.0302 (9)	0.0523 (12)	0.0418 (11)	0.0169 (8)	0.0105 (8)	0.0013 (8)
C6	0.0432 (10)	0.0355 (9)	0.0459 (11)	0.0151 (8)	0.0107 (8)	-0.0036 (8)
C7	0.0337 (8)	0.0311 (8)	0.0395 (10)	0.0049 (7)	0.0062 (7)	-0.0030 (7)

Ek Tablo 1.3. I Kristalinin Geometrik parametreleri(Å)*Geometric parameters (Å, °)*

Zn1—O1	2.1779 (12)	C2—C3	1.388 (2)
Zn1—O1 ⁱ	2.1779 (12)	C2—C7	1.393 (2)
Zn1—O2	1.9493 (11)	C3—C4	1.386 (2)
Zn1—O2 ⁱ	1.9493 (11)	C3—H3	0.9300
Zn1—O3	1.9664 (19)	C5—C4	1.383 (3)
C11—C4	1.740 (2)	C5—C6	1.380 (3)
O1—C1	1.260 (2)	C5—H5	0.9300
O2—C1 ⁱⁱ	1.258 (2)	C6—H6	0.9300
O3—H31	0.77 (2)	C7—C6	1.385 (2)
C1—O2 ⁱⁱ	1.258 (2)	C7—H7	0.9300
C2—C1	1.498 (2)		
O1—Zn1—O1 ⁱ	172.58 (6)	C3—C2—C7	120.29 (15)
O2—Zn1—O1	93.38 (5)	C7—C2—C1	120.01 (15)
O2 ⁱ —Zn1—O1	89.33 (5)	C2—C3—H3	120.5
O2—Zn1—O1 ⁱ	89.33 (5)	C4—C3—C2	118.90 (16)
O2 ⁱ —Zn1—O1 ⁱ	93.38 (5)	C4—C3—H3	120.5
O2 ⁱ —Zn1—O2	137.26 (8)	C3—C4—C11	119.05 (16)
O2—Zn1—O3	111.37 (4)	C5—C4—C11	119.50 (14)
O2 ⁱ —Zn1—O3	111.37 (4)	C5—C4—C3	121.43 (18)
O3—Zn1—O1	86.29 (3)	C4—C5—H5	120.5
O3—Zn1—O1 ⁱ	86.29 (3)	C6—C5—C4	119.05 (16)
C1—O1—Zn1	124.58 (10)	C6—C5—H5	120.5
C1 ⁱⁱ —O2—Zn1	122.84 (11)	C5—C6—C7	120.76 (17)
Zn1—O3—H31	125.7 (19)	C5—C6—H6	119.6
O1—C1—C2	119.52 (14)	C7—C6—H6	119.6
O2 ⁱⁱ —C1—O1	123.47 (14)	C2—C7—H7	120.2
O2 ⁱⁱ —C1—C2	117.00 (14)	C6—C7—C2	119.54 (18)
C3—C2—C1	119.70 (14)	C6—C7—H7	120.2

Ek Tablo 1.4. I Kristalinin Hidrojen Bağı Geometrisi(Å)*Hydrogen-bond geometry (Å, °)*

<i>D—H...A</i>	<i>D—H</i>	<i>H...A</i>	<i>D...A</i>	<i>D—H...A</i>
O3—H31...O1 ⁱⁱⁱ	0.77 (2)	1.89 (2)	2.6421 (17)	168 (2)

Symmetry code: (iii) $x, -y+1, z+1/2$.

Ek Tablo 2.1. *II kompleksinin Kesirli atomik koordinatları ve izotropik veya eşdeğer izotropik yer değiştirme parametreleri (Å) ,[93].*

H4B	-0.079 (3)	0.818 (2)	0.648 (2)	0.058 (7)*
C1	0.4330 (2)	0.78886 (17)	0.25815 (16)	0.0354 (4)
C2	0.5297 (2)	0.66138 (17)	0.31005 (18)	0.0411 (4)
C3	0.6115 (2)	0.61181 (18)	0.4143 (2)	0.0448 (5)
H3	0.6067	0.6566	0.4553	0.054*
C4	0.7010 (2)	0.4944 (2)	0.4575 (2)	0.0551 (6)
C5	0.7073 (3)	0.4258 (2)	0.3993 (3)	0.0701 (7)
H5	0.7664	0.3465	0.4298	0.084*
C6	0.6252 (4)	0.4758 (2)	0.2957 (3)	0.0791 (9)
H6	0.6283	0.4298	0.2560	0.095*
C7	0.5381 (3)	0.5933 (2)	0.2499 (2)	0.0640 (7)
H7	0.4848	0.6272	0.1785	0.077*
C8	0.1053 (2)	1.21991 (17)	0.08210 (16)	0.0377 (4)
C9	0.0182 (2)	1.33707 (17)	-0.01605 (17)	0.0391 (4)
C10	-0.1053 (2)	1.39805 (18)	0.0098 (2)	0.0487 (5)
H10	-0.1309	1.3691	0.0875	0.058*
C11	-0.1900 (2)	1.5022 (2)	-0.0812 (2)	0.0582 (6)
C12	-0.1515 (3)	1.5492 (2)	-0.1967 (2)	0.0668 (7)
H12	-0.2098	1.6192	-0.2573	0.080*
C13	-0.0263 (3)	1.4911 (2)	-0.2205 (2)	0.0640 (6)
H13	0.0021	1.5236	-0.2975	0.077*
C14	0.0587 (3)	1.3845 (2)	-0.13122 (18)	0.0498 (5)
H14	0.1426	1.3448	-0.1486	0.060*
C15	0.47759 (18)	1.09464 (16)	0.28005 (14)	0.0307 (3)
H15	0.4211	1.0749	0.3442	0.037*
C16	0.59731 (17)	1.13714 (15)	0.28251 (15)	0.0297 (3)
C17	0.6804 (2)	1.16596 (19)	0.18655 (18)	0.0412 (4)
H17	0.7637	1.1914	0.1866	0.049*
C18	0.6388 (2)	1.1566 (2)	0.09122 (18)	0.0474 (5)
H18	0.6915	1.1789	0.0248	0.057*
C19	0.5179 (2)	1.11393 (19)	0.09505 (16)	0.0405 (4)
H19	0.4899	1.1080	0.0302	0.049*
C20	0.64242 (18)	1.14888 (16)	0.38547 (16)	0.0334 (4)
C21	0.05121 (18)	0.90891 (16)	0.34942 (15)	0.0308 (3)
H21	0.0993	0.9225	0.4014	0.037*
C22	-0.07235 (18)	0.86597 (16)	0.38352 (15)	0.0319 (4)
C23	-0.1438 (2)	0.8479 (2)	0.30439 (18)	0.0444 (5)
H23	-0.2282	0.8210	0.3234	0.053*
C24	-0.0884 (2)	0.8701 (2)	0.19695 (19)	0.0494 (5)
H24	-0.1344	0.8574	0.1432	0.059*
C25	0.0353 (2)	0.91112 (19)	0.17077 (17)	0.0408 (4)
H25	0.0728	0.9252	0.0987	0.049*
C26	-0.13259 (19)	0.84043 (18)	0.50037 (17)	0.0380 (4)

Ek Tablo 2.2. II Kristalinin Atomik yer deęiřtirme parametreleri (Å)

Atomic displacement parameters (Å²)

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{12}	U^{13}	U^{23}
Cu1	0.03384 (13)	0.03311 (12)	0.02251 (11)	-0.01037 (9)	0.00167 (8)	-0.01354 (9)
C11	0.0746 (5)	0.0701 (4)	0.1137 (7)	0.0100 (4)	-0.0438 (5)	-0.0290 (4)
C12	0.0536 (4)	0.0683 (4)	0.1427 (8)	0.0039 (3)	0.0142 (4)	-0.0287 (5)
O1	0.0689 (10)	0.0471 (8)	0.0279 (7)	-0.0023 (7)	0.0038 (6)	-0.0200 (6)
O2	0.0412 (7)	0.0358 (6)	0.0285 (6)	-0.0055 (5)	0.0001 (5)	-0.0180 (5)
O3	0.0451 (7)	0.0373 (6)	0.0279 (6)	-0.0085 (6)	-0.0017 (5)	-0.0138 (5)
O4	0.0919 (12)	0.0461 (8)	0.0290 (7)	-0.0090 (8)	0.0040 (7)	-0.0175 (6)
O5	0.0295 (7)	0.0882 (11)	0.0697 (10)	-0.0180 (7)	0.0031 (7)	-0.0548 (9)
O6	0.0336 (8)	0.1099 (14)	0.0543 (10)	-0.0324 (8)	0.0127 (7)	-0.0376 (10)
N1	0.0362 (7)	0.0352 (7)	0.0256 (7)	-0.0118 (6)	0.0024 (6)	-0.0144 (6)
N2	0.0334 (9)	0.0622 (11)	0.0368 (9)	-0.0152 (7)	0.0031 (7)	-0.0322 (8)
N3	0.0344 (7)	0.0346 (7)	0.0266 (7)	-0.0093 (6)	0.0006 (6)	-0.0148 (6)
N4	0.0315 (9)	0.0711 (12)	0.0331 (9)	-0.0195 (8)	0.0094 (7)	-0.0262 (8)
C1	0.0398 (9)	0.0360 (9)	0.0327 (9)	-0.0111 (7)	0.0080 (7)	-0.0177 (7)
C2	0.0451 (11)	0.0366 (9)	0.0419 (10)	-0.0110 (8)	0.0123 (8)	-0.0192 (8)
C3	0.0408 (10)	0.0402 (10)	0.0536 (12)	-0.0091 (8)	0.0040 (9)	-0.0226 (9)
C4	0.0400 (11)	0.0442 (11)	0.0685 (15)	-0.0062 (9)	0.0014 (10)	-0.0181 (11)
C5	0.0697 (16)	0.0405 (12)	0.088 (2)	0.0011 (11)	0.0127 (14)	-0.0276 (13)
C6	0.114 (2)	0.0505 (14)	0.0786 (19)	-0.0030 (15)	0.0115 (17)	-0.0426 (14)
C7	0.0931 (19)	0.0480 (12)	0.0525 (14)	-0.0053 (12)	0.0044 (13)	-0.0300 (11)
C8	0.0476 (10)	0.0350 (9)	0.0313 (9)	-0.0130 (8)	0.0014 (8)	-0.0148 (7)
C9	0.0482 (11)	0.0327 (9)	0.0353 (10)	-0.0133 (8)	0.0000 (8)	-0.0134 (8)
C10	0.0497 (12)	0.0373 (10)	0.0529 (12)	-0.0149 (9)	0.0078 (9)	-0.0148 (9)
C11	0.0430 (12)	0.0389 (11)	0.0801 (17)	-0.0089 (9)	-0.0009 (11)	-0.0183 (11)
C12	0.0701 (16)	0.0426 (12)	0.0636 (16)	-0.0101 (11)	-0.0198 (13)	-0.0054 (11)
C13	0.0832 (18)	0.0534 (13)	0.0370 (12)	-0.0156 (12)	-0.0041 (11)	-0.0065 (10)
C14	0.0611 (13)	0.0457 (11)	0.0361 (10)	-0.0123 (10)	0.0024 (9)	-0.0144 (9)
C15	0.0330 (8)	0.0365 (8)	0.0243 (8)	-0.0123 (7)	0.0053 (6)	-0.0143 (7)
C16	0.0282 (8)	0.0321 (8)	0.0296 (8)	-0.0081 (6)	0.0031 (6)	-0.0150 (7)
C17	0.0364 (10)	0.0513 (11)	0.0419 (10)	-0.0188 (8)	0.0117 (8)	-0.0239 (9)
C18	0.0488 (11)	0.0652 (13)	0.0333 (10)	-0.0234 (10)	0.0183 (8)	-0.0245 (10)
C19	0.0464 (11)	0.0525 (11)	0.0277 (9)	-0.0152 (9)	0.0073 (8)	-0.0219 (8)
C20	0.0296 (8)	0.0374 (9)	0.0374 (9)	-0.0096 (7)	0.0001 (7)	-0.0203 (8)
C21	0.0312 (8)	0.0375 (9)	0.0276 (8)	-0.0104 (7)	0.0000 (6)	-0.0174 (7)
C22	0.0286 (8)	0.0351 (8)	0.0315 (9)	-0.0074 (7)	-0.0009 (7)	-0.0151 (7)
C23	0.0392 (10)	0.0553 (12)	0.0450 (11)	-0.0207 (9)	-0.0010 (8)	-0.0244 (10)
C24	0.0547 (12)	0.0657 (13)	0.0436 (11)	-0.0237 (11)	-0.0028 (9)	-0.0339 (10)
C25	0.0492 (11)	0.0500 (11)	0.0302 (9)	-0.0150 (9)	0.0018 (8)	-0.0231 (8)
C26	0.0279 (9)	0.0484 (10)	0.0370 (10)	-0.0114 (8)	0.0050 (7)	-0.0188 (8)

Ek Tablo 2.3. II Kristalinin Geometrik parametreleri(Å)

Geometric parameters (Å, °)

Cu1—O1	2.3487 (14)	C6—H6	0.9300
Cu1—O2	2.0168 (12)	C7—C6	1.376 (4)
Cu1—O3	1.9574 (12)	C7—H7	0.9300
Cu1—O4	2.6280 (12)	C8—C9	1.498 (3)
Cu1—N1	1.9947 (14)	C9—C10	1.385 (3)
Cu1—N3	2.0065 (14)	C9—C14	1.384 (3)
Cu1—C1	2.5090 (18)	C10—C11	1.379 (3)
C11—C4	1.731 (3)	C10—H10	0.9300
C12—C11	1.740 (3)	C11—C12	1.382 (4)
O1—Cu1—C1	29.28 (5)	O4—C8—O3	122.57 (17)
O2—Cu1—O1	59.76 (5)	O4—C8—C9	120.80 (18)
O2—Cu1—C1	30.48 (5)	C10—C9—C8	118.89 (18)
O3—Cu1—O1	106.81 (5)	C14—C9—C8	121.26 (19)
O3—Cu1—O2	166.26 (5)	C14—C9—C10	119.85 (19)
O3—Cu1—O4	55.08 (5)	C9—C10—H10	120.4
O3—Cu1—N1	91.50 (6)	C11—C10—C9	119.2 (2)
O3—Cu1—N3	93.10 (6)	C11—C10—H10	120.4
O3—Cu1—C1	136.00 (6)	C10—C11—C12	119.0 (2)
N1—Cu1—O1	100.98 (6)	C10—C11—C12	121.3 (2)
N1—Cu1—O2	88.65 (5)	C12—C11—C12	119.71 (19)
N1—Cu1—N3	164.90 (6)	C11—C12—H12	120.5
N1—Cu1—C1	95.33 (6)	C13—C12—C11	119.0 (2)
N3—Cu1—O1	91.43 (6)	C13—C12—H12	120.5
N3—Cu1—O2	90.26 (5)	C12—C13—C14	120.7 (2)
N3—Cu1—C1	91.32 (6)	C12—C13—H13	119.6
C1—O1—Cu1	82.56 (11)	C14—C13—H13	119.6
C1—O2—Cu1	96.52 (11)	C9—C14—C13	119.8 (2)
C8—O3—Cu1	106.27 (11)	C9—C14—H14	120.1
C15—N1—Cu1	120.40 (11)	C13—C14—H14	120.1
C19—N1—Cu1	120.98 (12)	N1—C15—C16	122.74 (16)
C19—N1—C15	118.47 (15)	N1—C15—H15	118.6
C20—N2—H2A	119.4 (16)	C16—C15—H15	118.6
C20—N2—H2B	121.7 (17)	C15—C16—C20	122.86 (15)
H2A—N2—H2B	118 (2)	C17—C16—C15	117.97 (16)
O2—Cu1—O1—C1	-0.68 (11)	Cu1—N3—C21—C22	177.25 (13)
O3—Cu1—O1—C1	176.18 (11)	C25—N3—C21—C22	-0.5 (3)
N1—Cu1—O1—C1	81.22 (12)	Cu1—N3—C25—C24	-176.47 (16)
N3—Cu1—O1—C1	-90.14 (12)	C21—N3—C25—C24	1.3 (3)
O1—Cu1—O2—C1	0.66 (10)	O1—C1—C2—C3	161.79 (19)
O3—Cu1—O2—C1	-12.1 (3)	O1—C1—C2—C7	-17.1 (3)
N1—Cu1—O2—C1	-102.89 (11)	O2—C1—C2—C3	-18.0 (3)
N3—Cu1—O2—C1	92.17 (11)	O2—C1—C2—C7	163.1 (2)
O1—Cu1—O3—C8	169.20 (11)	C1—C2—C3—C4	-178.91 (18)
O2—Cu1—O3—C8	-179.33 (19)	C7—C2—C3—C4	0.0 (3)
N1—Cu1—O3—C8	-88.86 (12)	C1—C2—C7—C6	-179.5 (2)
N3—Cu1—O3—C8	76.76 (12)	C3—C2—C7—C6	1.5 (4)
C1—Cu1—O3—C8	171.88 (11)	C2—C3—C4—C11	179.33 (16)
O1—Cu1—N1—C15	-126.37 (13)	C2—C3—C4—C5	-1.3 (3)
O1—Cu1—N1—C19	49.23 (15)	C11—C4—C5—C6	-179.5 (2)
O2—Cu1—N1—C15	-67.55 (14)	C3—C4—C5—C6	1.1 (4)
O2—Cu1—N1—C19	108.05 (15)	C4—C5—C6—C7	0.4 (5)
O3—Cu1—N1—C15	126.19 (14)	C2—C7—C6—C5	-1.7 (5)

N3—Cu1—N1—C15	18.4 (3)	O3—C8—C9—C14	-24.5 (3)
N3—Cu1—N1—C19	-165.97 (19)	O4—C8—C9—C10	-23.5 (3)
C1—Cu1—N1—C15	-97.33 (14)	O4—C8—C9—C14	156.8 (2)
C1—Cu1—N1—C19	78.27 (15)	C8—C9—C10—C11	-176.52 (18)
O1—Cu1—N3—C21	128.70 (13)	C14—C9—C10—C11	3.1 (3)
O1—Cu1—N3—C25	-53.57 (15)	C8—C9—C14—C13	178.2 (2)
O2—Cu1—N3—C21	68.94 (13)	C10—C9—C14—C13	-1.4 (3)
O2—Cu1—N3—C25	-113.33 (15)	C9—C10—C11—C12	178.44 (17)
O3—Cu1—N3—C21	-124.39 (13)	C9—C10—C11—C12	-2.3 (3)
O3—Cu1—N3—C25	53.34 (15)	C12—C11—C12—C13	178.9 (2)
N1—Cu1—N3—C21	-16.8 (3)	C10—C11—C12—C13	-0.4 (4)
N1—Cu1—N3—C25	160.9 (2)	C14—C13—C12—C11	2.1 (4)
C1—Cu1—N3—C21	99.41 (13)	C9—C14—C13—C12	-1.2 (4)
C1—Cu1—N3—C25	-82.86 (15)	C17—C16—C15—N1	-0.1 (3)
O1—Cu1—C1—O2	-178.84 (18)	C20—C16—C15—N1	-177.97 (16)
O2—Cu1—C1—O1	178.84 (18)	C15—C16—C17—C18	2.7 (3)
O3—Cu1—C1—O1	-5.26 (15)	C20—C16—C17—C18	-179.32 (18)
O3—Cu1—C1—O2	175.90 (9)	C15—C16—C20—O5	155.40 (18)
N1—Cu1—C1—O1	-102.99 (12)	C15—C16—C20—N2	-25.1 (3)
N1—Cu1—C1—O2	78.17 (11)	C17—C16—C20—O5	-22.5 (3)
N3—Cu1—C1—O1	90.58 (12)	C17—C16—C20—N2	157.06 (18)
N3—Cu1—C1—O2	-88.26 (11)	C16—C17—C18—C19	-2.6 (3)
Cu1—O1—C1—O2	1.09 (17)	N1—C19—C18—C17	-0.2 (3)
Cu1—O1—C1—C2	-178.70 (16)	N3—C21—C22—C23	-0.8 (3)
Cu1—O2—C1—O1	-1.3 (2)	N3—C21—C22—C26	-179.89 (16)
Cu1—O2—C1—C2	178.53 (14)	C21—C22—C23—C24	1.5 (3)

Ek Tablo 2.4. *II Kristalinin Hidrojen Bağı Geometrisi(Å)*

Hydrogen-bond geometry (Å, °)

<i>D—H...A</i>	<i>D—H</i>	<i>H...A</i>	<i>D...A</i>	<i>D—H...A</i>
N2—H2A...O2 ⁱ	0.80 (2)	2.12 (2)	2.896 (2)	164 (2)
N2—H2B...O6 ⁱⁱ	0.84 (3)	2.02 (3)	2.790 (2)	153 (2)
N4—H4A...O5 ⁱ	0.83 (3)	2.01 (3)	2.817 (2)	164 (2)
N4—H4B...O4 ⁱⁱ	0.81 (2)	2.05 (2)	2.836 (2)	162 (3)
C19—H19...O1 ⁱⁱⁱ	0.93	2.45	3.100 (2)	127
C21—H21...O5 ⁱ	0.93	2.56	3.416 (2)	154
C24—H24...O3 ^{iv}	0.93	2.59	3.475 (3)	158

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

Ek Tablo 3.1. *III kompleksinin Kesirli atomik koordinatları ve izotropik veya eşdeğer izotropik yer değiştirme parametreleri (Å) ,[94].*

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å²)

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> _{iso} */ <i>U</i> _{eq}
Co1	0.00000	1.00000	1.00000	0.0221 (1)
Cl1	0.57400 (4)	0.77742 (8)	0.87425 (3)	0.0604 (2)
O1	0.17264 (10)	0.87980 (18)	1.18080 (9)	0.0518 (4)
O2	0.17291 (8)	0.94984 (12)	1.02212 (8)	0.0299 (3)
O3	0.16810 (10)	0.34420 (12)	0.81282 (10)	0.0415 (4)
O4	0.04558 (10)	1.07995 (12)	0.85606 (8)	0.0298 (3)
N1	-0.02319 (10)	0.77771 (13)	0.93492 (9)	0.0258 (3)
N2	0.23334 (16)	0.56716 (18)	0.76095 (16)	0.0592 (6)
C1	0.21833 (12)	0.88839 (17)	1.09796 (11)	0.0293 (4)
C2	0.33518 (12)	0.81535 (17)	1.08465 (11)	0.0286 (4)
C3	0.39495 (13)	0.83285 (18)	0.99657 (11)	0.0316 (4)
C4	0.49988 (13)	0.7599 (2)	0.98487 (12)	0.0368 (5)
C5	0.54679 (15)	0.6700 (2)	1.05879 (14)	0.0464 (6)
C6	0.48691 (17)	0.6533 (2)	1.14586 (14)	0.0496 (6)
C7	0.38168 (15)	0.7255 (2)	1.15907 (12)	0.0388 (5)
C8	0.06524 (12)	0.70512 (15)	0.89207 (11)	0.0268 (4)
C9	0.05526 (12)	0.56102 (15)	0.85229 (10)	0.0258 (4)
C10	-0.05151 (14)	0.48869 (16)	0.85705 (12)	0.0314 (4)
C11	-0.14353 (13)	0.56408 (18)	0.89921 (13)	0.0356 (5)
C12	-0.12591 (12)	0.70790 (16)	0.93721 (11)	0.0303 (4)
C13	0.15664 (14)	0.48213 (16)	0.80673 (12)	0.0304 (4)
H3	0.36460	0.89300	0.94610	0.0380*
H5	0.61770	0.62160	1.04990	0.0560*
H6	0.51750	0.59290	1.19620	0.0590*
H7	0.34200	0.71360	1.21820	0.0470*
H8	0.13670	0.75380	0.88890	0.0320*
H10	-0.06090	0.39100	0.83220	0.0380*
H11	-0.21640	0.51890	0.90200	0.0430*
H12	-0.18830	0.75810	0.96560	0.0360*
H21	0.221 (2)	0.659 (3)	0.7492 (19)	0.066 (7)*
H22	0.293 (2)	0.526 (3)	0.7323 (19)	0.063 (7)*
H41	-0.028 (2)	1.098 (3)	0.8311 (18)	0.069 (7)*
H42	0.079 (2)	1.163 (3)	0.8530 (17)	0.055 (6)*

Ek Tablo 3.2. III Kristalinin Atomik yer deęiřtirme parametreleri (Å)*Atomic displacement parameters (Å²)*

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{12}	U^{13}	U^{23}
Co1	0.0201 (2)	0.0183 (2)	0.0280 (2)	0.0011 (1)	0.0066 (1)	-0.0026 (1)
C11	0.0389 (2)	0.1013 (4)	0.0412 (3)	0.0171 (2)	0.0140 (2)	0.0029 (2)
O1	0.0339 (6)	0.0875 (10)	0.0342 (6)	0.0108 (6)	0.0090 (5)	0.0038 (6)
O2	0.0230 (5)	0.0306 (5)	0.0362 (5)	0.0039 (4)	0.0044 (4)	0.0007 (4)
O3	0.0403 (6)	0.0194 (5)	0.0651 (8)	0.0024 (4)	0.0211 (5)	-0.0007 (5)
O4	0.0297 (5)	0.0267 (6)	0.0332 (5)	-0.0023 (4)	0.0098 (4)	-0.0001 (4)
N1	0.0256 (6)	0.0205 (5)	0.0313 (6)	0.0005 (4)	0.0049 (5)	-0.0027 (4)
N2	0.0569 (10)	0.0231 (7)	0.0985 (14)	0.0036 (7)	0.0507 (10)	0.0049 (8)
C1	0.0247 (7)	0.0308 (7)	0.0324 (7)	-0.0020 (5)	0.0034 (5)	-0.0042 (6)
C2	0.0261 (7)	0.0297 (7)	0.0301 (7)	0.0001 (6)	-0.0001 (5)	-0.0025 (6)
C3	0.0273 (7)	0.0369 (8)	0.0307 (7)	0.0051 (6)	0.0000 (6)	0.0031 (6)
C4	0.0286 (7)	0.0489 (10)	0.0331 (8)	0.0054 (6)	0.0038 (6)	-0.0028 (7)
C5	0.0344 (8)	0.0564 (11)	0.0482 (10)	0.0200 (8)	-0.0027 (7)	0.0004 (8)
C6	0.0479 (10)	0.0572 (11)	0.0435 (10)	0.0165 (9)	-0.0075 (8)	0.0127 (8)
C7	0.0401 (9)	0.0459 (9)	0.0303 (8)	0.0038 (7)	0.0005 (6)	0.0045 (7)
C8	0.0251 (6)	0.0214 (6)	0.0339 (7)	-0.0006 (5)	0.0068 (5)	-0.0010 (5)
C9	0.0292 (7)	0.0197 (6)	0.0287 (7)	0.0017 (5)	0.0063 (5)	0.0004 (5)
C10	0.0336 (8)	0.0220 (7)	0.0388 (8)	-0.0030 (5)	0.0051 (6)	-0.0062 (5)
C11	0.0270 (7)	0.0312 (8)	0.0486 (9)	-0.0058 (6)	0.0062 (6)	-0.0072 (7)
C12	0.0249 (7)	0.0276 (7)	0.0384 (8)	0.0010 (5)	0.0073 (6)	-0.0032 (6)
C13	0.0320 (8)	0.0211 (7)	0.0382 (8)	0.0000 (5)	0.0112 (6)	-0.0025 (6)

Ek Tablo 3.3. III Kristalinin Geometrik parametreleri(Å)*Geometric parameters (Å, °)*

Co1—O2	2.0592 (9)	C2—C3	1.389 (2)
Co1—O4	2.1385 (11)	C3—C4	1.380 (2)
Co1—N1	2.1640 (12)	C4—C5	1.381 (2)
Co1—O2 ⁱ	2.0592 (9)	C5—C6	1.377 (3)
Co1—O4 ⁱ	2.1385 (11)	C6—C7	1.382 (3)
Co1—N1 ⁱ	2.1640 (12)	C8—C9	1.3841 (19)
C11—C4	1.7350 (16)	C9—C13	1.497 (2)
O1—C1	1.2435 (19)	C9—C10	1.387 (2)
O2—C1	1.2676 (18)	C10—C11	1.379 (2)
O3—C13	1.2262 (18)	C11—C12	1.383 (2)
O4—H41	0.92 (2)	C3—H3	0.9300
O4—H42	0.83 (3)	C5—H5	0.9300
N1—C12	1.3344 (18)	C6—H6	0.9300
N1—C8	1.3392 (18)	C7—H7	0.9300
N2—C13	1.317 (2)	C8—H8	0.9300
N2—H21	0.84 (3)	C10—H10	0.9300
N2—H22	0.87 (2)	C11—H11	0.9300
C1—C2	1.504 (2)	C12—H12	0.9300
C2—C7	1.384 (2)		

O2—Co1—O4	87.55 (4)	C11—C4—C3	119.73 (12)
O2—Co1—N1	88.84 (4)	C3—C4—C5	121.47 (15)
O2—Co1—O2 ⁱ	180.00	C11—C4—C5	118.79 (13)
O2—Co1—O4 ⁱ	92.45 (4)	C4—C5—C6	118.90 (16)
O2—Co1—N1 ⁱ	91.16 (4)	C5—C6—C7	120.53 (17)
O4—Co1—N1	87.69 (4)	C2—C7—C6	120.25 (15)
O2 ⁱ —Co1—O4	92.45 (4)	N1—C8—C9	123.09 (13)
O4—Co1—O4 ⁱ	180.00	C8—C9—C13	121.62 (13)
O4—Co1—N1 ⁱ	92.31 (4)	C8—C9—C10	118.33 (13)
O2 ⁱ —Co1—N1	91.16 (4)	C10—C9—C13	120.05 (12)
O4 ⁱ —Co1—N1	92.31 (4)	C9—C10—C11	118.86 (13)
N1—Co1—N1 ⁱ	180.00	C10—C11—C12	119.01 (14)
O2 ⁱ —Co1—O4 ⁱ	87.55 (4)	N1—C12—C11	122.80 (13)
O2 ⁱ —Co1—N1 ⁱ	88.84 (4)	N2—C13—C9	117.24 (13)
O4 ⁱ —Co1—N1 ⁱ	87.69 (4)	O3—C13—N2	121.59 (16)
Co1—O2—C1	126.89 (9)	O3—C13—C9	121.16 (14)
H41—O4—H42	105 (2)	C2—C3—H3	120.00
Co1—O4—H41	99.0 (15)	C4—C3—H3	120.00
Co1—O4—H42	117.1 (16)	C4—C5—H5	121.00
Co1—N1—C8	121.14 (9)	C6—C5—H5	121.00
Co1—N1—C12	120.97 (9)	C5—C6—H6	120.00
C8—N1—C12	117.88 (12)	C7—C6—H6	120.00
H21—N2—H22	117 (2)	C2—C7—H7	120.00
C13—N2—H21	121.8 (16)	C6—C7—H7	120.00
C13—N2—H22	120.5 (17)	N1—C8—H8	118.00
O1—C1—O2	125.34 (14)	C9—C8—H8	118.00
O1—C1—C2	117.92 (13)	C9—C10—H10	121.00
O2—C1—C2	116.70 (13)	C11—C10—H10	121.00
C1—C2—C3	120.41 (13)	C10—C11—H11	121.00
C1—C2—C7	119.92 (13)	C12—C11—H11	120.00
C3—C2—C7	119.63 (14)	N1—C12—H12	119.00
C2—C3—C4	119.23 (14)	C11—C12—H12	119.00
H41—O4—H42	105 (2)	C2—C3—H3	120.00
Co1—O4—H41	99.0 (15)	C4—C3—H3	120.00
Co1—O4—H42	117.1 (16)	C4—C5—H5	121.00
Co1—N1—C8	121.14 (9)	C6—C5—H5	121.00
Co1—N1—C12	120.97 (9)	C5—C6—H6	120.00
C8—N1—C12	117.88 (12)	C7—C6—H6	120.00
H21—N2—H22	117 (2)	C2—C7—H7	120.00
C13—N2—H21	121.8 (16)	C6—C7—H7	120.00
C13—N2—H22	120.5 (17)	N1—C8—H8	118.00
O1—C1—O2	125.34 (14)	C9—C8—H8	118.00
O1—C1—C2	117.92 (13)	C9—C10—H10	121.00
O2—C1—C2	116.70 (13)	C11—C10—H10	121.00
C1—C2—C3	120.41 (13)	C10—C11—H11	121.00
C1—C2—C7	119.92 (13)	C12—C11—H11	120.00
C3—C2—C7	119.63 (14)	N1—C12—H12	119.00
C2—C3—C4	119.23 (14)	C11—C12—H12	119.00

Ek Tablo 3.4. III Kristalinin Hidrojen Bağı Geometrisi(Å)

Hydrogen-bond geometry (Å, °)

<i>D—H...A</i>	<i>D—H</i>	<i>H...A</i>	<i>D...A</i>	<i>D—H...A</i>
N2—H21...O3 ⁱⁱ	0.84 (3)	2.24 (3)	2.876 (2)	133 (2)
N2—H22...O4 ⁱⁱⁱ	0.87 (2)	2.27 (2)	3.012 (2)	143 (2)
O4—H41...O1 ⁱ	0.92 (2)	1.68 (2)	2.5822 (16)	164 (2)
O4—H42...O3 ^{iv}	0.83 (3)	1.98 (3)	2.7892 (15)	166 (2)

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

Ek Tablo 4.1. IV kompleksinin Kesirli atomik koordinatları ve izotropik veya eşdeğer izotropik yer değiştirme parametreleri (Å) ,[96].

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å²)

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> _{iso} [*] / <i>U</i> _{eq}
Cd1	0.460563 (15)	0.713174 (9)	0.502386 (11)	0.02850 (5)
C11	0.20058 (11)	1.03333 (7)	-0.11806 (6)	0.0761 (2)
C12	0.76396 (11)	0.40476 (8)	1.09335 (6)	0.0821 (2)
O1	0.53731 (18)	0.68689 (12)	0.32444 (12)	0.0428 (3)
O2	0.31326 (17)	0.81613 (13)	0.32598 (12)	0.0409 (3)
O3	0.7424 (2)	0.58157 (12)	0.54856 (12)	0.0454 (3)
O4	0.5701 (2)	0.64166 (16)	0.67878 (14)	0.0635 (5)
O5	0.35989 (16)	1.12711 (11)	0.55996 (14)	0.0421 (3)
O6	0.2965 (2)	0.54660 (13)	0.57771 (15)	0.0428 (3)
H61	0.340 (4)	0.488 (3)	0.631 (3)	0.086 (11)*
H62	0.266 (4)	0.523 (2)	0.532 (2)	0.059 (8)*
N1	0.22851 (19)	0.80844 (12)	0.59063 (13)	0.0305 (3)
N2	0.0768 (2)	1.19067 (14)	0.60728 (15)	0.0359 (3)
H21	0.110 (3)	1.259 (2)	0.5826 (19)	0.040 (6)*
H22	-0.033 (3)	1.1805 (19)	0.6266 (19)	0.040 (6)*
C1	0.4252 (2)	0.76332 (15)	0.27256 (16)	0.0322 (4)
C2	0.4302 (2)	0.79357 (16)	0.14374 (16)	0.0342 (4)
C3	0.3235 (3)	0.88734 (17)	0.08028 (17)	0.0386 (4)
H3	0.2453	0.9300	0.1181	0.046*
C4	0.3347 (3)	0.91633 (19)	-0.03919 (18)	0.0476 (5)
C5	0.4493 (4)	0.8553 (3)	-0.0977 (2)	0.0640 (7)
H5	0.4561	0.8766	-0.1785	0.077*
C6	0.5542 (4)	0.7616 (3)	-0.0341 (2)	0.0681 (7)
H6	0.6318	0.7192	-0.0725	0.082*
C7	0.5445 (3)	0.7307 (2)	0.0856 (2)	0.0497 (5)
H7	0.6152	0.6672	0.1275	0.060*
C8	0.2617 (2)	0.91606 (15)	0.57989 (16)	0.0312 (4)
H8	0.3762	0.9434	0.5445	0.037*
C9	0.1366 (2)	0.98948 (14)	0.61809 (15)	0.0271 (3)
C10	-0.0336 (2)	0.94833 (16)	0.67092 (17)	0.0354 (4)
H10	-0.1225	0.9951	0.6971	0.042*
C11	-0.0685 (3)	0.83632 (17)	0.68393 (18)	0.0415 (4)
H11	-0.1813	0.8063	0.7200	0.050*
C12	0.0650 (2)	0.76927 (15)	0.64305 (17)	0.0351 (4)
H12	0.0398	0.6939	0.6524	0.042*

C13	0.1971 (2)	1.10895 (15)	0.59403 (15)	0.0297 (3)
C14	0.6964 (3)	0.57773 (16)	0.65218 (17)	0.0386 (4)
C15	0.7945 (2)	0.49355 (16)	0.74759 (17)	0.0346 (4)
C16	0.7431 (3)	0.48946 (19)	0.86197 (18)	0.0429 (4)
H16	0.6506	0.5397	0.8790	0.051*
C17	0.8306 (3)	0.4102 (2)	0.94991 (19)	0.0494 (5)
C18	0.9655 (3)	0.3336 (2)	0.9270 (2)	0.0538 (5)
H18	1.0216	0.2793	0.9876	0.065*
C19	1.0164 (3)	0.3383 (2)	0.8131 (2)	0.0527 (5)
H19	1.1086	0.2877	0.7965	0.063*
C20	0.9308 (3)	0.41792 (17)	0.72359 (18)	0.0404 (4)
H20	0.9652	0.4205	0.6470	0.049*

Ek Tablo 4.2. IV Kristalinin Atomik yer deęiřtirme parametreleri (Å)

Atomic displacement parameters (Å²)

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{12}	U^{13}	U^{23}
Cd1	0.02751 (7)	0.02414 (7)	0.03423 (8)	0.00202 (5)	-0.00289 (5)	-0.01339 (5)
C11	0.0897 (5)	0.0728 (4)	0.0522 (4)	0.0005 (4)	-0.0339 (3)	-0.0001 (3)
C12	0.0835 (5)	0.1212 (6)	0.0423 (3)	0.0194 (4)	-0.0211 (3)	-0.0333 (4)
O1	0.0440 (7)	0.0409 (7)	0.0385 (7)	0.0112 (6)	-0.0088 (6)	-0.0123 (6)
O2	0.0344 (7)	0.0516 (8)	0.0382 (7)	0.0078 (6)	-0.0040 (5)	-0.0224 (6)
O3	0.0644 (9)	0.0350 (7)	0.0377 (8)	-0.0055 (6)	-0.0119 (6)	-0.0122 (6)
O4	0.0594 (10)	0.0753 (11)	0.0474 (9)	0.0313 (9)	-0.0172 (8)	-0.0197 (8)

Ek Tablo 4.3. IV Kristalinin Geometrik parametreleri(Å)

Geometric parameters (Å, °)

Cd1—O1	2.3234 (14)	C3—H3	0.9300
Cd1—O2	2.4800 (13)	C4—C5	1.373 (4)
Cd1—O3	2.5447 (15)	C5—C6	1.383 (4)
Cd1—O4	2.3110 (16)	C5—H5	0.9300
Cd1—O5 ⁱ	2.3175 (12)	C6—H6	0.9300
Cd1—O6	2.3019 (14)	C7—C6	1.379 (3)
Cd1—N1	2.3384 (14)	C7—H7	0.9300
Cd1—C1	2.7496 (18)	C8—H8	0.9300
C11—C4	1.739 (2)	C9—C8	1.383 (2)
C12—C17	1.740 (2)	C9—C10	1.385 (2)
O1—C1	1.257 (2)	C9—C13	1.497 (2)
O2—C1	1.257 (2)	C10—C11	1.381 (3)
O3—C14	1.256 (2)	C10—H10	0.9300
O4—C14	1.247 (3)	C11—H11	0.9300
O5—Cd1 ⁱ	2.3175 (12)	C12—C11	1.380 (3)
O5—C13	1.241 (2)	C12—H12	0.9300
O6—H61	0.85 (3)	C15—C14	1.499 (3)
O6—H62	0.82 (3)	C15—C16	1.387 (3)
N1—C8	1.333 (2)	C15—C20	1.380 (3)
N1—C12	1.332 (2)	C16—C17	1.377 (3)
N2—C13	1.317 (2)	C16—H16	0.9300
N2—H21	0.83 (2)	C17—C18	1.376 (3)
N2—H22	0.83 (2)	C18—H18	0.9300
C1—C2	1.496 (3)	C19—C18	1.378 (3)

O1—Cd1—O2	54.22 (4)	C4—C3—H3	120.3
O1—Cd1—O3	82.45 (4)	C3—C4—C11	119.17 (18)
O1—Cd1—N1	137.15 (5)	C5—C4—C11	119.11 (18)
O1—Cd1—C1	27.07 (5)	C5—C4—C3	121.7 (2)
O2—Cd1—O3	136.12 (4)	C4—C5—C6	118.8 (2)
O2—Cd1—C1	27.20 (5)	C4—C5—H5	120.6
O3—Cd1—C1	109.10 (5)	C6—C5—H5	120.6
O4—Cd1—O1	135.63 (5)	C5—C6—H6	119.7
O4—Cd1—O2	169.88 (5)	C7—C6—C5	120.5 (2)
O4—Cd1—O3	53.32 (5)	C7—C6—H6	119.7
O4—Cd1—O5 ⁱ	88.27 (6)	C2—C7—H7	119.8
O4—Cd1—N1	87.04 (5)	C6—C7—C2	120.4 (2)
O4—Cd1—C1	162.39 (6)	C6—C7—H7	119.8
O5 ⁱ —Cd1—O1	93.65 (5)	N1—C8—C9	124.08 (15)
O5 ⁱ —Cd1—O2	88.64 (5)	N1—C8—H8	118.0
O5 ⁱ —Cd1—O3	87.51 (4)	C9—C8—H8	118.0
O5 ⁱ —Cd1—N1	90.96 (5)	C8—C9—C10	117.80 (15)
O5 ⁱ —Cd1—C1	90.09 (5)	C8—C9—C13	116.21 (15)
O6—Cd1—O1	89.05 (5)	C10—C9—C13	125.95 (15)
O6—Cd1—O2	96.40 (6)	C9—C10—H10	120.7
O6—Cd1—O3	88.63 (5)	C11—C10—C9	118.53 (16)
O6—Cd1—O4	86.82 (7)	C11—C10—H10	120.7
O6—Cd1—O5 ⁱ	174.96 (6)	C10—C11—H11	120.2
O6—Cd1—N1	89.95 (5)	C12—C11—C10	119.61 (16)
O6—Cd1—C1	94.24 (6)	C12—C11—H11	120.2
N1—Cd1—O2	83.38 (5)	N1—C12—C11	122.44 (16)
N1—Cd1—O3	140.36 (5)	N1—C12—H12	118.8
C1—O1—Cd1	95.71 (11)	O5—C13—N2	122.76 (16)
C1—O2—Cd1	88.42 (11)	O5—C13—C9	117.92 (15)
C14—O3—Cd1	86.39 (12)	N2—C13—C9	119.30 (15)
C14—O4—Cd1	97.51 (13)	O3—C14—C15	119.50 (18)
C13—O5—Cd1 ⁱ	136.29 (11)	O4—C14—O3	121.95 (18)
Cd1—O6—H62	118.6 (19)	O4—C14—C15	118.55 (18)
Cd1—O6—H61	115 (2)	C16—C15—C14	119.32 (17)
H62—O6—H61	108 (3)	C20—C15—C14	120.79 (18)
C8—N1—Cd1	115.65 (11)	C20—C15—C16	119.86 (18)
C12—N1—Cd1	126.66 (11)	C15—C16—H16	120.4
C12—N1—C8	117.53 (15)	C17—C16—C15	119.19 (19)
C13—N2—H21	117.5 (16)	C17—C16—H16	120.4
C13—N2—H22	123.5 (15)	C16—C17—C12	118.88 (17)
H21—N2—H22	118 (2)	C18—C17—C16	121.3 (2)
O1—C1—O2	121.43 (17)	C18—C17—C12	119.75 (17)
O1—C1—C2	118.66 (16)	C17—C18—C19	119.2 (2)
O1—C1—Cd1	57.23 (10)	C17—C18—H18	120.4

O2—C1—Cd1	64.37 (10)	C19—C18—H18	120.4
O2—C1—C2	119.89 (16)	C18—C19—C20	120.2 (2)
C2—C1—Cd1	172.93 (12)	C18—C19—H19	119.9
C3—C2—C1	120.25 (17)	C20—C19—H19	119.9
C7—C2—C1	120.45 (17)	C15—C20—C19	120.2 (2)
C7—C2—C3	119.28 (18)	C15—C20—H20	119.9
C2—C3—H3	120.3	C19—C20—H20	119.9
C4—C3—C2	119.33 (19)		
O2—Cd1—O1—C1	2.65 (10)	Cd1—O1—C1—O2	-4.98 (18)
O3—Cd1—O1—C1	-170.02 (11)	Cd1—O1—C1—C2	173.31 (13)
O4—Cd1—O1—C1	-174.29 (11)	Cd1—O2—C1—O1	4.64 (17)
O5 ⁱ —Cd1—O1—C1	-83.03 (11)	Cd1—O2—C1—C2	-173.62 (14)
O6—Cd1—O1—C1	101.24 (11)	Cd1—O3—C14—O4	-8.9 (2)
N1—Cd1—O1—C1	12.33 (14)	Cd1—O3—C14—C15	170.72 (15)
O1—Cd1—O2—C1	-2.64 (10)	Cd1—O4—C14—O3	9.8 (2)
O3—Cd1—O2—C1	7.87 (13)	Cd1—O4—C14—C15	-169.75 (14)
O4—Cd1—O2—C1	165.1 (3)	Cd1 ⁱ —O5—C13—N2	-3.1 (3)
O5 ⁱ —Cd1—O2—C1	92.85 (11)	Cd1 ⁱ —O5—C13—C9	175.50 (12)
O6—Cd1—O2—C1	-86.82 (11)	C12—N1—C8—C9	-1.0 (3)
N1—Cd1—O2—C1	-176.03 (11)	Cd1—N1—C12—C11	-174.35 (15)
O1—Cd1—O3—C14	-171.24 (11)	C8—N1—C12—C11	1.0 (3)
O2—Cd1—O3—C14	-179.82 (10)	O1—C1—C2—C3	-172.19 (17)
O4—Cd1—O3—C14	5.05 (11)	O1—C1—C2—C7	6.0 (3)
O5 ⁱ —Cd1—O3—C14	94.75 (11)	O2—C1—C2—C3	6.1 (3)
O6—Cd1—O3—C14	-82.01 (11)	O2—C1—C2—C7	-175.64 (18)
N1—Cd1—O3—C14	6.26 (14)	C1—C2—C7—C6	-177.4 (2)
C1—Cd1—O3—C14	-176.02 (10)	C3—C2—C7—C6	0.8 (3)
O1—Cd1—O4—C14	0.16 (19)	C4—C3—C2—C1	177.72 (17)
O2—Cd1—O4—C14	-165.6 (3)	C4—C3—C2—C7	-0.5 (3)
O3—Cd1—O4—C14	-5.11 (12)	C2—C3—C4—C11	179.81 (15)
O5 ⁱ —Cd1—O4—C14	-93.29 (14)	C2—C3—C4—C5	-0.2 (3)
O6—Cd1—O4—C14	85.54 (14)	C11—C4—C5—C6	-179.3 (2)
N1—Cd1—O4—C14	175.66 (14)	C3—C4—C5—C6	0.7 (4)
C1—Cd1—O4—C14	-8.5 (3)	C2—C7—C6—C5	-0.4 (4)

Ek Tablo 4.4. IV Kristalinin Hidrojen Bağı Geometrisi(Å)

Hydrogen-bond geometry (Å, °)

<i>D—H...A</i>	<i>D—H</i>	<i>H...A</i>	<i>D...A</i>	<i>D—H...A</i>
N2—H21...O3 ⁱ	0.83 (3)	2.26 (2)	3.026 (2)	155 (2)
N2—H22...O2 ⁱⁱ	0.83 (2)	2.09 (2)	2.913 (2)	170 (2)
O6—H61...O1 ⁱⁱⁱ	0.85 (4)	2.15 (4)	2.897 (2)	146 (3)
O6—H62...O3 ⁱⁱⁱ	0.81 (3)	1.94 (3)	2.710 (2)	158 (3)
C8—H8...O5 ⁱ	0.93	2.43	3.158 (2)	135
C10—H10...O2 ⁱⁱ	0.93	2.54	3.403 (3)	154

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

Ek Tablo 5.1. *V* kompleksinin Kesirli atomik koordinatları ve izotropik veya eşdeğer izotropik yer değiştirme parametreleri (Å) ,[97].

Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å²)

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> _{iso} */ <i>U</i> _{eq}
Cu1	1.0000	0.5000	0.41873 (3)	0.03000 (6)
Cl1	1.46828 (3)	0.59979 (3)	0.63513 (5)	0.06445 (15)
O1	1.11786 (6)	0.52434 (6)	0.41852 (13)	0.0393 (2)
O2	1.14688 (8)	0.52348 (10)	0.60832 (13)	0.0614 (4)
O3	0.84439 (11)	0.72659 (11)	0.16031 (16)	0.0800 (5)
O4	1.0000	0.5000	0.22505 (18)	0.0538 (6)
H41	1.0395 (19)	0.4937 (15)	0.185 (4)	0.083 (10)*
N1	0.96843 (7)	0.60210 (6)	0.42656 (14)	0.0353 (2)
N2	0.74305 (10)	0.72799 (9)	0.29566 (14)	0.0469 (3)
C1	1.16668 (9)	0.52875 (9)	0.50510 (15)	0.0363 (3)
C2	1.25768 (9)	0.54254 (8)	0.47400 (14)	0.0349 (3)
C3	1.31396 (9)	0.56202 (9)	0.56019 (15)	0.0391 (3)
H3	1.2964	0.5673	0.6364	0.047*
C4	1.39704 (10)	0.57329 (8)	0.52927 (16)	0.0414 (3)
C5	1.42506 (9)	0.56541 (8)	0.4176 (2)	0.0469 (3)
H5	1.4812	0.5729	0.3992	0.056*
C6	1.36773 (12)	0.54600 (10)	0.33236 (19)	0.0514 (4)
H6	1.3857	0.5403	0.2563	0.062*
C7	1.28426 (11)	0.53510 (9)	0.36030 (17)	0.0422 (4)
H7	1.2460	0.5228	0.3030	0.051*
C8	0.90811 (10)	0.62540 (8)	0.35534 (15)	0.0372 (3)
H8	0.8802	0.5936	0.3084	0.045*
C9	0.88569 (10)	0.69476 (8)	0.34881 (14)	0.0398 (3)
C10	0.92796 (12)	0.74174 (8)	0.4190 (2)	0.0510 (4)
H10	0.9146	0.7888	0.4161	0.061*
C11	0.99002 (12)	0.71828 (10)	0.4931 (2)	0.0509 (4)
H11	1.0188	0.7490	0.5409	0.061*
C12	1.00827 (10)	0.64755 (10)	0.49440 (18)	0.0412 (3)
H12	1.0497	0.6314	0.5443	0.049*
C13	0.82193 (13)	0.71794 (10)	0.26044 (15)	0.0462 (4)
C14	0.71426 (12)	0.71772 (12)	0.4142 (2)	0.0551 (4)
H14A	0.6784	0.7563	0.4361	0.066*
H14B	0.7625	0.7177	0.4656	0.066*
C15	0.6667 (2)	0.65112 (17)	0.4298 (3)	0.0907 (8)
H15A	0.6454	0.6486	0.5074	0.136*
H15B	0.7036	0.6125	0.4159	0.136*
H15C	0.6208	0.6496	0.3760	0.136*
C16	0.68061 (14)	0.75374 (11)	0.2115 (2)	0.0546 (5)
H16A	0.6255	0.7363	0.2325	0.066*
H16B	0.6943	0.7358	0.1353	0.066*
C17	0.6778 (2)	0.83180 (13)	0.2067 (3)	0.0864 (9)

Ek Tablo 5.2. *V* Kristalinin Atomik yer deęiřtirme parametreleri (Å)*Atomic displacement parameters (Å²)*

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{12}	U^{13}	U^{23}
Cu1	0.02380 (9)	0.03532 (10)	0.03087 (11)	0.00119 (8)	0.000	0.000
Cl1	0.0404 (2)	0.0777 (3)	0.0752 (4)	-0.0116 (2)	-0.0184 (2)	0.0065 (3)
O1	0.0265 (4)	0.0465 (5)	0.0449 (5)	-0.0019 (4)	-0.0005 (5)	-0.0018 (7)
O2	0.0334 (6)	0.1087 (12)	0.0420 (7)	-0.0084 (7)	0.0062 (5)	0.0074 (8)
O3	0.0700 (10)	0.1258 (14)	0.0442 (8)	0.0380 (10)	0.0141 (8)	0.0253 (10)
O4	0.0329 (9)	0.1020 (18)	0.0265 (10)	0.0133 (9)	0.000	0.000
N1	0.0290 (5)	0.0383 (5)	0.0385 (7)	0.0010 (4)	0.0002 (6)	-0.0028 (6)
N2	0.0421 (7)	0.0617 (8)	0.0369 (7)	0.0086 (6)	-0.0025 (6)	-0.0013 (7)
C1	0.0271 (6)	0.0404 (8)	0.0414 (8)	0.0011 (5)	0.0034 (5)	0.0022 (6)
C2	0.0259 (6)	0.0380 (7)	0.0408 (8)	0.0008 (5)	0.0023 (6)	0.0036 (6)
C3	0.0304 (6)	0.0462 (8)	0.0409 (8)	-0.0006 (6)	-0.0011 (6)	0.0060 (6)
C4	0.0292 (6)	0.0394 (7)	0.0556 (10)	-0.0005 (6)	-0.0050 (6)	0.0073 (7)
C5	0.0283 (6)	0.0440 (7)	0.0683 (10)	-0.0026 (5)	0.0105 (8)	0.0012 (10)
C6	0.0425 (9)	0.0593 (10)	0.0523 (11)	-0.0073 (7)	0.0181 (8)	-0.0060 (8)
C7	0.0353 (7)	0.0488 (9)	0.0426 (9)	-0.0033 (6)	0.0052 (7)	-0.0042 (7)
C8	0.0340 (7)	0.0392 (7)	0.0385 (8)	0.0023 (5)	-0.0017 (6)	-0.0016 (6)
C9	0.0390 (7)	0.0417 (7)	0.0389 (8)	0.0065 (6)	0.0043 (6)	0.0030 (6)
C10	0.0548 (9)	0.0352 (6)	0.0631 (10)	0.0041 (6)	0.0000 (11)	-0.0029 (10)
C11	0.0458 (9)	0.0426 (9)	0.0643 (12)	-0.0027 (7)	-0.0054 (8)	-0.0141 (8)
C12	0.0339 (7)	0.0463 (8)	0.0435 (9)	0.0026 (6)	-0.0029 (6)	-0.0071 (7)
C13	0.0503 (9)	0.0505 (9)	0.0377 (9)	0.0151 (8)	0.0031 (7)	0.0035 (7)
C14	0.0438 (8)	0.0812 (12)	0.0405 (8)	0.0058 (8)	0.0010 (9)	-0.0060 (12)
C15	0.099 (2)	0.0903 (18)	0.0825 (19)	-0.0149 (15)	0.0178 (19)	0.0077 (18)
C16	0.0501 (10)	0.0630 (11)	0.0508 (10)	0.0082 (8)	-0.0108 (8)	-0.0045 (9)
C17	0.094 (2)	0.0615 (13)	0.104 (2)	0.0226 (13)	-0.0383 (17)	-0.0114 (14)

Ek Tablo 5.3. *V Kristalinin Geometrik parametreleri(Å)*

Geometric parameters (Å, °)

Cu1—N1	2.0294 (12)	C7—H7	0.9300
Cu1—N1 ⁱ	2.0294 (12)	C8—H8	0.9300
Cu1—O1	1.9337 (10)	C9—C8	1.383 (2)
Cu1—O1 ⁱ	1.9337 (10)	C9—C10	1.388 (3)
Cu1—O4	2.238 (2)	C9—C13	1.507 (2)
C11—C4	1.7439 (18)	C10—C11	1.383 (3)
O1—C1	1.269 (2)	C10—H10	0.9300
O4—H41	0.79 (4)	C11—H11	0.9300
N1—C8	1.341 (2)	C12—C11	1.391 (3)
N1—C12	1.335 (2)	C12—H12	0.9300
N2—C13	1.334 (2)	C13—O3	1.222 (2)
N2—C14	1.458 (3)	C14—C15	1.499 (4)
N2—C16	1.476 (3)	C14—H14A	0.9700
C1—O2	1.238 (2)	C14—H14B	0.9700
C1—C2	1.516 (2)	C15—H15A	0.9600
C2—C3	1.391 (2)	C15—H15B	0.9600
C2—C7	1.387 (2)	C15—H15C	0.9600
C3—C4	1.387 (2)	C16—C17	1.503 (3)
C3—H3	0.9300	C16—H16A	0.9700
C5—C4	1.373 (3)	C16—H16B	0.9700
C5—C6	1.394 (3)	C17—H17A	0.9600
C5—H5	0.9300	C17—H17B	0.9600
C6—H6	0.9300	C17—H17C	0.9600
C7—C6	1.383 (2)		
O1—Cu1—O1 ⁱ	179.86 (9)	C9—C8—H8	118.6
O1—Cu1—O4	89.93 (5)	C8—C9—C10	118.11 (16)
O1 ⁱ —Cu1—O4	89.93 (5)	C8—C9—C13	119.75 (16)
O1—Cu1—N1	90.35 (5)	C10—C9—C13	121.96 (15)
O1 ⁱ —Cu1—N1	89.66 (5)	C9—C10—H10	120.2
O1—Cu1—N1 ⁱ	89.66 (5)	C11—C10—C9	119.69 (15)
O1 ⁱ —Cu1—N1 ⁱ	90.35 (5)	C11—C10—H10	120.2
N1—Cu1—O4	92.55 (5)	C10—C11—C12	118.36 (17)
N1 ⁱ —Cu1—O4	92.55 (5)	C10—C11—H11	120.8
N1 ⁱ —Cu1—N1	174.89 (9)	C12—C11—H11	120.8
C1—O1—Cu1	127.53 (12)	N1—C12—C11	122.34 (17)
Cu1—O4—H41	126 (3)	N1—C12—H12	118.8
C8—N1—Cu1	118.25 (11)	C11—C12—H12	118.8
C12—N1—Cu1	122.85 (12)	O3—C13—N2	122.97 (18)

C12—N1—C8	118.79 (13)	O3—C13—C9	118.98 (17)
C13—N2—C14	124.25 (16)	N2—C13—C9	118.05 (16)
C13—N2—C16	118.78 (16)	N2—C14—C15	112.8 (2)
C14—N2—C16	116.93 (15)	N2—C14—H14A	109.0
O1—C1—C2	114.20 (14)	N2—C14—H14B	109.0
O2—C1—O1	126.72 (15)	C15—C14—H14A	109.0
O2—C1—C2	119.08 (15)	C15—C14—H14B	109.0
C3—C2—C1	119.53 (15)	H14A—C14—H14B	107.8
C7—C2—C1	119.85 (14)	C14—C15—H15A	109.5
C7—C2—C3	120.62 (14)	C14—C15—H15B	109.5
C2—C3—H3	120.9	C14—C15—H15C	109.5
C4—C3—C2	118.15 (16)	H15A—C15—H15B	109.5
C4—C3—H3	120.9	H15A—C15—H15C	109.5
C3—C4—C11	119.02 (14)	H15B—C15—H15C	109.5
C5—C4—C11	118.68 (12)	N2—C16—C17	112.26 (19)
C5—C4—C3	122.30 (16)	N2—C16—H16A	109.2
C4—C5—C6	118.74 (14)	N2—C16—H16B	109.2
C4—C5—H5	120.6	C17—C16—H16A	109.2
C6—C5—H5	120.6	C17—C16—H16B	109.2
C5—C6—H6	119.8	H16A—C16—H16B	107.9
C7—C6—C5	120.31 (18)	C16—C17—H17A	109.5
C7—C6—H6	119.8	C16—C17—H17B	109.5
C2—C7—H7	120.1	C16—C17—H17C	109.5
C6—C7—C2	119.87 (17)	H17A—C17—H17B	109.5
C6—C7—H7	120.1	H17A—C17—H17C	109.5
N1—C8—C9	122.71 (15)	H17B—C17—H17C	109.5
N1—C8—H8	118.6		
O4—Cu1—O1—C1	-173.97 (13)	O1—C1—C2—C7	-13.2 (2)
N1—Cu1—O1—C1	93.48 (14)	O2—C1—C2—C3	-12.1 (2)
N1 ⁱ —Cu1—O1—C1	-81.41 (14)	O2—C1—C2—C7	167.34 (19)
O1—Cu1—N1—C8	133.82 (13)	C1—C2—C3—C4	179.08 (15)
O1 ⁱ —Cu1—N1—C8	-46.04 (13)	C7—C2—C3—C4	-0.4 (2)
O1—Cu1—N1—C12	-42.21 (15)	C1—C2—C7—C6	-178.40 (16)
O1 ⁱ —Cu1—N1—C12	137.94 (15)	C3—C2—C7—C6	1.1 (3)
O4—Cu1—N1—C8	43.87 (12)	C2—C3—C4—C11	178.47 (12)
O4—Cu1—N1—C12	-132.15 (14)	C2—C3—C4—C5	-0.4 (2)
Cu1—O1—C1—O2	-6.0 (3)	C6—C5—C4—C11	-178.34 (14)
Cu1—O1—C1—C2	174.59 (9)	C6—C5—C4—C3	0.6 (3)
Cu1—N1—C8—C9	-175.86 (13)	C4—C5—C6—C7	0.1 (3)
C12—N1—C8—C9	0.3 (3)	C2—C7—C6—C5	-0.9 (3)
Cu1—N1—C12—C11	175.38 (16)	C10—C9—C8—N1	0.2 (3)
C8—N1—C12—C11	-0.6 (3)	C13—C9—C8—N1	175.42 (16)
C14—N2—C13—O3	179.6 (2)	C8—C9—C10—C11	-0.5 (3)
C14—N2—C13—C9	-0.3 (3)	C13—C9—C10—C11	-175.56 (19)
C16—N2—C13—O3	-2.8 (3)	C8—C9—C13—O3	-79.9 (3)
C16—N2—C13—C9	177.28 (16)	C8—C9—C13—N2	100.0 (2)
C13—N2—C14—C15	-102.9 (3)	C10—C9—C13—O3	95.1 (3)
C16—N2—C14—C15	79.5 (3)	C10—C9—C13—N2	-85.0 (2)

Ek Tablo 5.4. V Kristalinin Hidrojen Bağı Geometrisi(Å)*Hydrogen-bond geometry (Å, °)*

<i>D—H...A</i>	<i>D—H</i>	<i>H...A</i>	<i>D...A</i>	<i>D—H...A</i>
O4—H41...O2 ^a	0.79 (4)	1.95 (3)	2.7367 (17)	171 (4)

Symmetry code: (ii) $x, -y+1, z-1/2$.**Ek Tablo 6.1.** VI kompleksinin kesirli atomik koordinatları ve izotropik veya eşdeğer izotropik yer değiştirme parametreleri (Å), [98].*Fractional atomic coordinates and isotropic or equivalent isotropic displacement parameters (Å²)*

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> _{iso} */ <i>U</i> _{eq}
Cd1	0.430006 (10)	0.86384 (4)	0.032753 (9)	0.03649 (8)
Cl1	0.67865 (6)	0.6435 (2)	0.24132 (4)	0.0797 (4)
Cl2	0.20678 (5)	1.2006 (2)	-0.17853 (4)	0.0741 (4)
O1	0.50773 (11)	0.7328 (5)	0.09538 (10)	0.0534 (7)
O2	0.50591 (11)	1.0331 (5)	0.07578 (9)	0.0533 (7)
O3	0.35198 (12)	0.9354 (4)	-0.03179 (10)	0.0547 (8)
O4	0.41552 (11)	1.1524 (4)	-0.00840 (9)	0.0500 (7)
O5	0.39003 (12)	0.9782 (4)	0.09065 (10)	0.0498 (7)
O6	0.47410 (12)	0.7107 (5)	-0.01422 (11)	0.0485 (7)
H61	0.472 (2)	0.785 (7)	-0.0367 (12)	0.083 (19)*
H62	0.5081 (12)	0.709 (10)	0.0016 (18)	0.13 (3)*
N1	0.38036 (12)	0.6005 (4)	0.04343 (10)	0.0349 (6)
N2	0.42885 (14)	1.1630 (5)	0.15138 (11)	0.0453 (8)
C1	0.52769 (14)	0.8941 (6)	0.10063 (12)	0.0420 (9)
C2	0.57856 (13)	0.9332 (6)	0.13935 (12)	0.0368 (8)
C3	0.60309 (14)	0.7865 (6)	0.16792 (12)	0.0410 (8)
H3	0.5892	0.6631	0.1627	0.049*
C4	0.64831 (15)	0.8243 (6)	0.20430 (13)	0.0451 (9)
C5	0.66979 (17)	1.0049 (8)	0.21233 (15)	0.0575 (12)
H5	0.7004	1.0287	0.2369	0.069*
C6	0.6455 (2)	1.1492 (8)	0.18368 (16)	0.0648 (13)
H6	0.6597	1.2721	0.1888	0.078*

C9	0.33859 (14)	1.2296 (5)	-0.07074 (11)	0.0328 (7)
C10	0.29377 (14)	1.1625 (5)	-0.10465 (11)	0.0364 (7)
H10	0.2847	1.0337	-0.1060	0.044*
C11	0.26293 (16)	1.2868 (6)	-0.13623 (13)	0.0458 (9)
C12	0.2747 (2)	1.4770 (7)	-0.13478 (15)	0.0583 (12)
H12	0.2530	1.5599	-0.1561	0.070*
C13	0.3196 (2)	1.5445 (6)	-0.10090 (16)	0.0606 (12)
H13	0.3280	1.6737	-0.0994	0.073*
C14	0.35155 (18)	1.4214 (6)	-0.06956 (13)	0.0465 (9)
H14	0.3821	1.4673	-0.0474	0.056*
C15	0.40358 (14)	0.4560 (5)	0.07000 (12)	0.0363 (7)
H15	0.4418	0.4552	0.0822	0.044*
C16	0.37313 (15)	0.3070 (5)	0.08017 (12)	0.0346 (7)
C17	0.31657 (15)	0.3072 (6)	0.06121 (13)	0.0442 (9)
H17	0.2951	0.2065	0.0665	0.053*
C18	0.29234 (16)	0.4580 (7)	0.03445 (15)	0.0523 (10)
H18	0.2542	0.4629	0.0220	0.063*
C19	0.32558 (15)	0.6014 (6)	0.02650 (13)	0.0442 (9)
H19	0.3091	0.7037	0.0085	0.053*
C20	0.39878 (15)	1.1380 (5)	0.10824 (13)	0.0408 (8)
C21	0.43608 (18)	1.3440 (7)	0.17587 (14)	0.0530 (10)
H21A	0.4277	1.3260	0.2046	0.064*
H21B	0.4101	1.4362	0.1583	0.064*
C22	0.4944 (2)	1.4228 (8)	0.18486 (17)	0.0724 (14)
H22A	0.4972	1.5408	0.2012	0.109*
H22B	0.5026	1.4446	0.1565	0.109*
H22C	0.5203	1.3328	0.2026	0.109*
C23	0.4519 (2)	0.9923 (7)	0.17814 (16)	0.0606 (12)
H23A	0.4863	1.0261	0.2004	0.073*
H23B	0.4601	0.8969	0.1581	0.073*
C24	0.4129 (3)	0.9093 (9)	0.2021 (2)	0.097 (2)
H24A	0.4306	0.8052	0.2210	0.146*
H24B	0.3802	0.8641	0.1802	0.146*
H24C	0.4029	1.0056	0.2207	0.146*

Ek Tablo 6.2. VI Kristalinin atomik yer deęiřtirme parametreleri (Å)

Atomic displacement parameters (Å²)

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{12}	U^{13}	U^{23}
Cd1	0.03456 (13)	0.03444 (13)	0.03743 (13)	-0.00848 (11)	0.00502 (9)	0.00642 (11)
Cl1	0.0728 (8)	0.0926 (10)	0.0612 (7)	0.0290 (8)	-0.0022 (6)	0.0143 (7)
Cl2	0.0523 (6)	0.1018 (11)	0.0533 (6)	-0.0002 (7)	-0.0100 (5)	0.0020 (7)
O1	0.0415 (15)	0.0632 (19)	0.0483 (16)	-0.0173 (14)	0.0008 (12)	-0.0009 (14)
O2	0.0414 (15)	0.070 (2)	0.0435 (15)	-0.0062 (14)	0.0043 (12)	0.0154 (15)
O3	0.0528 (16)	0.0446 (16)	0.0570 (17)	-0.0091 (13)	-0.0005 (13)	0.0198 (14)
O4	0.0392 (14)	0.0561 (17)	0.0474 (15)	-0.0072 (13)	-0.0002 (11)	0.0094 (14)
O5	0.0609 (17)	0.0322 (14)	0.0653 (18)	-0.0061 (13)	0.0322 (15)	-0.0015 (13)
O6	0.0440 (16)	0.0526 (17)	0.0512 (17)	-0.0086 (13)	0.0173 (13)	0.0004 (14)
N1	0.0369 (14)	0.0292 (15)	0.0384 (15)	-0.0081 (12)	0.0103 (12)	0.0011 (12)
N2	0.0537 (19)	0.0402 (18)	0.0457 (18)	0.0070 (15)	0.0200 (15)	0.0106 (14)
C1	0.0291 (16)	0.063 (3)	0.0349 (18)	-0.0060 (17)	0.0107 (14)	0.0010 (18)

C2	0.0260 (15)	0.049 (2)	0.0356 (17)	-0.0057 (14)	0.0095 (13)	-0.0025 (15)
C3	0.0344 (17)	0.048 (2)	0.0401 (19)	-0.0016 (16)	0.0102 (15)	-0.0038 (17)
C4	0.0351 (18)	0.060 (3)	0.0383 (19)	0.0069 (17)	0.0074 (15)	-0.0016 (18)
C5	0.041 (2)	0.080 (3)	0.045 (2)	-0.013 (2)	0.0015 (18)	-0.014 (2)
C6	0.062 (3)	0.059 (3)	0.068 (3)	-0.023 (2)	0.008 (2)	-0.014 (2)
C7	0.049 (2)	0.046 (2)	0.058 (2)	-0.0066 (19)	0.0110 (19)	0.002 (2)
C8	0.0339 (17)	0.045 (2)	0.0324 (17)	-0.0001 (15)	0.0108 (13)	0.0058 (15)
C9	0.0377 (17)	0.0326 (17)	0.0300 (16)	-0.0011 (14)	0.0128 (13)	0.0032 (13)
C10	0.0373 (17)	0.0345 (18)	0.0376 (18)	-0.0006 (14)	0.0109 (14)	0.0006 (14)
C11	0.041 (2)	0.060 (3)	0.0341 (19)	0.0080 (18)	0.0072 (15)	0.0051 (18)
C12	0.070 (3)	0.053 (3)	0.048 (2)	0.018 (2)	0.011 (2)	0.018 (2)
C13	0.085 (3)	0.033 (2)	0.061 (3)	0.003 (2)	0.016 (2)	0.007 (2)
C14	0.059 (2)	0.037 (2)	0.040 (2)	-0.0086 (18)	0.0097 (17)	-0.0011 (16)
C15	0.0350 (17)	0.0350 (18)	0.0388 (18)	-0.0089 (14)	0.0102 (14)	0.0001 (15)
C16	0.0413 (18)	0.0294 (16)	0.0366 (17)	-0.0043 (14)	0.0168 (14)	-0.0004 (14)
C17	0.0406 (19)	0.041 (2)	0.054 (2)	-0.0147 (16)	0.0187 (17)	0.0038 (17)
C18	0.0332 (18)	0.060 (3)	0.061 (3)	-0.0097 (18)	0.0097 (17)	0.012 (2)
C19	0.0403 (19)	0.039 (2)	0.052 (2)	-0.0046 (16)	0.0100 (16)	0.0093 (17)
C20	0.0464 (19)	0.0345 (18)	0.049 (2)	-0.0065 (16)	0.0265 (17)	0.0047 (16)
C21	0.061 (3)	0.055 (3)	0.043 (2)	0.009 (2)	0.0142 (19)	0.0029 (19)
C22	0.070 (3)	0.079 (4)	0.062 (3)	-0.010 (3)	0.010 (2)	0.000 (3)
C23	0.069 (3)	0.056 (3)	0.065 (3)	0.022 (2)	0.032 (2)	0.024 (2)
C24	0.116 (5)	0.085 (4)	0.117 (5)	0.037 (4)	0.076 (4)	0.059 (4)
Cd1—O1		2.504 (3)		C9—C10		1.386 (5)
Cd1—O2		2.323 (3)		C9—C14		1.383 (5)
Cd1—O3		2.421 (3)		C10—C11		1.372 (5)
Cd1—O4		2.360 (3)		C10—H10		0.9300
Cd1—O5		2.410 (3)		C11—C12		1.365 (6)
Cd1—O6		2.314 (3)		C12—C13		1.388 (7)
Cd1—N1		2.305 (3)		C12—H12		0.9300
Cd1—C1		2.752 (4)		C13—H13		0.9300
Cd1—C8		2.732 (3)		C14—C13		1.373 (6)
C11—C4		1.732 (4)		C14—H14		0.9300
C12—C11		1.739 (4)		C15—C16		1.383 (5)
O1—C1		1.230 (5)		C15—H15		0.9300
O3—C8		1.242 (4)		C16—C17		1.380 (5)
O4—C8		1.251 (4)		C16—C20 ⁱ		1.502 (5)
O6—H61		0.856 (17)		C17—C18		1.373 (6)
O6—H62		0.86 (2)		C17—H17		0.9300
O5—C20		1.237 (5)		C18—H18		0.9300
N1—C15		1.330 (4)		C19—C18		1.374 (5)
N1—C19		1.331 (5)		C19—H19		0.9300
N2—C21		1.461 (5)		C20—N2		1.340 (5)
N2—C23		1.476 (5)		C20—C16 ^a		1.502 (5)
C1—O2		1.265 (5)		C21—C22		1.521 (6)
C2—C1		1.509 (5)		C21—H21A		0.9700
C2—C3		1.381 (5)		C21—H21B		0.9700

C2—C7	1.368 (6)	C22—H22A	0.9600
C3—C4	1.380 (5)	C22—H22B	0.9600
C3—H3	0.9300	C22—H22C	0.9600
C4—C5	1.372 (6)	C23—C24	1.500 (6)
C5—C6	1.368 (7)	C23—H23A	0.9700
C5—H5	0.9300	C23—H23B	0.9700
C6—H6	0.9300	C24—H24A	0.9600
C7—C6	1.389 (6)	C24—H24B	0.9600
C7—H7	0.9300	C24—H24C	0.9600
C9—C8	1.497 (5)		
O1—Cd1—C1	26.54 (11)	C7—C6—H6	119.8
O1—Cd1—C8	161.03 (10)	C2—C7—C6	120.1 (4)
O2—Cd1—O1	53.75 (10)	C2—C7—H7	119.9
O2—Cd1—O3	135.22 (10)	C6—C7—H7	119.9
O2—Cd1—O4	81.10 (10)	O3—C8—Cd1	62.38 (19)
O2—Cd1—O5	81.83 (10)	O3—C8—O4	122.0 (3)
O2—Cd1—C1	27.21 (11)	O3—C8—C9	118.8 (3)
O2—Cd1—C8	108.24 (11)	O4—C8—Cd1	59.57 (19)
O3—Cd1—O1	170.39 (10)	O4—C8—C9	119.2 (3)
O3—Cd1—C1	162.33 (11)	C9—C8—Cd1	178.0 (3)
O3—Cd1—C8	27.04 (10)	C10—C9—C8	120.1 (3)
O4—Cd1—O1	134.15 (9)	C14—C9—C8	120.7 (3)
O4—Cd1—O3	54.23 (9)	C14—C9—C10	119.1 (3)
O4—Cd1—O5	94.28 (10)	C9—C10—H10	120.1
O4—Cd1—C1	108.10 (11)	C11—C10—C9	119.7 (4)
O4—Cd1—C8	27.19 (10)	C11—C10—H10	120.1
O5—Cd1—O1	87.40 (10)	C10—C11—C12	119.2 (3)
O5—Cd1—O3	97.07 (11)	C12—C11—C10	121.6 (4)
O5—Cd1—C1	83.43 (10)	C12—C11—C12	119.2 (3)
O5—Cd1—C8	96.30 (10)	C11—C12—C13	118.8 (4)
O6—Cd1—O1	84.21 (11)	C11—C12—H12	120.6
O6—Cd1—O2	97.43 (11)	C13—C12—H12	120.6
O6—Cd1—O3	90.46 (11)	C12—C13—H13	119.8
O6—Cd1—O4	95.42 (11)	C14—C13—C12	120.4 (4)
O6—Cd1—O5	170.03 (11)	C14—C13—H13	119.8
O6—Cd1—C1	91.39 (11)	C9—C14—H14	119.8
O6—Cd1—C8	93.37 (11)	C13—C14—C9	120.4 (4)
N1—Cd1—O1	86.30 (10)	C13—C14—H14	119.8
N1—Cd1—O2	136.21 (10)	N1—C15—C16	122.6 (3)
N1—Cd1—O3	86.21 (10)	N1—C15—H15	118.7
N1—Cd1—O4	139.00 (10)	C16—C15—H15	118.7
N1—Cd1—O5	78.90 (10)	C15—C16—C20 ⁱ	123.4 (3)
N1—Cd1—O6	95.16 (10)	C17—C16—C15	118.4 (3)
N1—Cd1—C1	111.11 (11)	C17—C16—C20 ⁱ	118.1 (3)
N1—Cd1—C8	112.67 (10)	C16—C17—H17	120.4
C8—Cd1—C1	135.29 (12)	C18—C17—C16	119.1 (3)
C1—O1—Cd1	88.1 (2)	C18—C17—H17	120.4
C1—O2—Cd1	95.6 (2)	C17—C18—C19	118.7 (4)

C8—O3—Cd1	90.6 (2)	C17—C18—H18	120.7
C8—O4—Cd1	93.2 (2)	C19—C18—H18	120.7
C20—O5—Cd1	124.3 (2)	N1—C19—C18	122.9 (4)
Cd1—O6—H61	107 (4)	N1—C19—H19	118.5
Cd1—O6—H62	103 (5)	C18—C19—H19	118.5
H61—O6—H62	107 (4)	O5—C20—N2	122.2 (4)
C15—N1—Cd1	122.3 (2)	O5—C20—C16 ⁱⁱ	118.0 (3)
C15—N1—C19	118.2 (3)	N2—C20—C16 ⁱⁱ	119.8 (3)
C19—N1—Cd1	119.0 (2)	N2—C21—C22	112.6 (4)
C20—N2—C21	125.2 (3)	N2—C21—H21A	109.1
C20—N2—C23	118.0 (4)	N2—C21—H21B	109.1
C21—N2—C23	116.5 (3)	C22—C21—H21A	109.1
O1—C1—Cd1	65.4 (2)	C22—C21—H21B	109.1
O1—C1—O2	122.5 (3)	H21A—C21—H21B	107.8
O1—C1—C2	119.7 (4)	C21—C22—H22A	109.5
O2—C1—Cd1	57.16 (19)	C21—C22—H22B	109.5
O2—C1—C2	117.7 (4)	C21—C22—H22C	109.5
C2—C1—Cd1	173.1 (3)	H22A—C22—H22B	109.5
C3—C2—C1	119.7 (3)	H22A—C22—H22C	109.5
C7—C2—C1	120.6 (4)	H22B—C22—H22C	109.5
C7—C2—C3	119.7 (3)	N2—C23—C24	112.3 (4)
C2—C3—H3	120.3	N2—C23—H23A	109.2
C4—C3—C2	119.5 (4)	N2—C23—H23B	109.2
C4—C3—H3	120.3	C24—C23—H23A	109.2
C3—C4—C11	120.2 (3)	C24—C23—H23B	109.2
C5—C4—C11	118.6 (3)	H23A—C23—H23B	107.9
C5—C4—C3	121.2 (4)	C23—C24—H24A	109.5
C4—C5—H5	120.5	C23—C24—H24B	109.5
C6—C5—C4	119.0 (4)	C23—C24—H24C	109.5
C6—C5—H5	120.5	H24A—C24—H24B	109.5
C5—C6—C7	120.5 (4)	H24A—C24—H24C	109.5
C5—C6—H6	119.8	H24B—C24—H24C	109.5
O2—Cd1—O1—C1	1.3 (2)	Cd1—O5—C20—N2	-109.6 (3)
O4—Cd1—O1—C1	13.0 (3)	Cd1—O5—C20—C16 ⁱⁱ	72.2 (4)
O5—Cd1—O1—C1	-80.5 (2)	C15—N1—Cd1—O1	-9.4 (3)
O6—Cd1—O1—C1	104.9 (2)	C15—N1—Cd1—O2	-31.9 (3)
N1—Cd1—O1—C1	-159.5 (2)	C15—N1—Cd1—O3	164.6 (3)
C8—Cd1—O1—C1	21.4 (5)	C15—N1—Cd1—O4	178.8 (2)
O1—Cd1—O2—C1	-1.3 (2)	C15—N1—Cd1—O5	-97.5 (3)
O3—Cd1—O2—C1	-176.7 (2)	C15—N1—Cd1—O6	74.4 (3)
O4—Cd1—O2—C1	-172.8 (2)	C15—N1—Cd1—C1	-19.0 (3)
O5—Cd1—O2—C1	91.5 (2)	C15—N1—Cd1—C8	170.3 (3)
O6—Cd1—O2—C1	-78.4 (2)	C19—N1—Cd1—O1	163.1 (3)
N1—Cd1—O2—C1	27.0 (3)	C19—N1—Cd1—O2	140.6 (3)
C8—Cd1—O2—C1	-174.5 (2)	C19—N1—Cd1—O3	-22.9 (3)
O2—Cd1—O3—C8	4.5 (3)	C19—N1—Cd1—O4	-8.6 (4)
O4—Cd1—O3—C8	-0.2 (2)	C19—N1—Cd1—O5	75.1 (3)
O5—Cd1—O3—C8	90.0 (2)	C19—N1—Cd1—O6	-113.0 (3)

O6—Cd1—O3—C8	-96.5 (2)	C19—N1—Cd1—C1	153.5 (3)
N1—Cd1—O3—C8	168.3 (2)	C19—N1—Cd1—C8	-17.2 (3)
C1—Cd1—O3—C8	-0.5 (5)	Cd1—N1—C15—C16	173.3 (3)
O1—Cd1—O4—C8	174.0 (2)	C19—N1—C15—C16	0.7 (5)
O2—Cd1—O4—C8	-176.5 (2)	Cd1—N1—C19—C18	-174.4 (3)
O3—Cd1—O4—C8	0.2 (2)	C15—N1—C19—C18	-1.5 (6)
O5—Cd1—O4—C8	-95.5 (2)	C20—N2—C21—C22	-109.8 (5)
O6—Cd1—O4—C8	86.8 (2)	C23—N2—C21—C22	76.9 (5)
N1—Cd1—O4—C8	-17.5 (3)	C20—N2—C23—C24	-89.3 (5)
C1—Cd1—O4—C8	-179.9 (2)	C21—N2—C23—C24	84.5 (6)
O1—Cd1—C1—O2	177.7 (4)	O1—C1—O2—Cd1	2.4 (4)
O2—Cd1—C1—O1	-177.7 (4)	C2—C1—O2—Cd1	-174.6 (3)
O3—Cd1—C1—O1	-170.0 (3)	C3—C2—C1—O1	1.6 (5)
O3—Cd1—C1—O2	7.8 (5)	C3—C2—C1—O2	178.7 (3)
O4—Cd1—C1—O1	-170.3 (2)	C7—C2—C1—O1	-176.8 (4)
O4—Cd1—C1—O2	7.5 (2)	C7—C2—C1—O2	0.4 (5)
O5—Cd1—C1—O1	97.4 (2)	C1—C2—C3—C4	-177.5 (3)
O5—Cd1—C1—O2	-84.9 (2)	C7—C2—C3—C4	0.9 (6)
O6—Cd1—C1—O1	-74.1 (2)	C1—C2—C7—C6	177.9 (4)
O6—Cd1—C1—O2	103.6 (2)	C3—C2—C7—C6	-0.5 (6)
N1—Cd1—C1—O1	22.0 (3)	C2—C3—C4—C11	178.4 (3)
N1—Cd1—C1—O2	-160.3 (2)	C2—C3—C4—C5	-0.8 (6)
C8—Cd1—C1—O1	-170.3 (2)	C11—C4—C5—C6	-178.9 (4)
C8—Cd1—C1—O2	7.4 (3)	C3—C4—C5—C6	0.3 (7)
O1—Cd1—C8—O3	166.4 (3)	C4—C5—C6—C7	0.1 (7)
O1—Cd1—C8—O4	-13.3 (5)	C2—C7—C6—C5	0.0 (7)
O2—Cd1—C8—O3	-176.6 (2)	C10—C9—C8—O3	-11.4 (5)
O2—Cd1—C8—O4	3.7 (2)	C10—C9—C8—O4	170.1 (3)
O3—Cd1—C8—O4	-179.7 (4)	C14—C9—C8—O3	166.1 (4)
O4—Cd1—C8—O3	179.7 (4)	C14—C9—C8—O4	-12.4 (5)
O5—Cd1—C8—O3	-93.2 (2)	C8—C9—C10—C11	177.2 (3)
O5—Cd1—C8—O4	87.1 (2)	C14—C9—C10—C11	-0.3 (5)
O6—Cd1—C8—O3	84.4 (2)	C8—C9—C14—C13	-175.9 (4)
O6—Cd1—C8—O4	-95.3 (2)	C10—C9—C14—C13	1.6 (6)
N1—Cd1—C8—O3	-12.6 (3)	C9—C10—C11—C12	-179.9 (3)
N1—Cd1—C8—O4	167.7 (2)	C9—C10—C11—C12	-1.1 (6)
C1—Cd1—C8—O3	179.8 (2)	C10—C11—C12—C13	1.1 (7)
C1—Cd1—C8—O4	0.1 (3)	C12—C11—C12—C13	-180.0 (4)
Cd1—O1—C1—O2	-2.3 (4)	C11—C12—C13—C14	0.2 (7)
Cd1—O1—C1—C2	174.8 (3)	C9—C14—C13—C12	-1.6 (7)
Cd1—O3—C8—O4	0.3 (4)	N1—C15—C16—C17	1.3 (5)
Cd1—O3—C8—C9	-178.2 (3)	N1—C15—C16—C20 ⁱ	176.9 (3)
Cd1—O4—C8—O3	-0.3 (4)	C15—C16—C17—C18	-2.4 (6)
Cd1—O4—C8—C9	178.1 (3)	C20 ⁱ —C16—C17—C18	-178.4 (4)
C20—O5—Cd1—O1	91.2 (3)	C16—C17—C18—C19	1.7 (6)
C20—O5—Cd1—O2	37.5 (3)	N1—C19—C18—C17	0.3 (7)
C20—O5—Cd1—O3	-97.3 (3)	O5—C20—N2—C21	-173.2 (4)
C20—O5—Cd1—O4	-42.9 (3)	O5—C20—N2—C23	0.0 (5)
C20—O5—Cd1—N1	178.0 (3)	C16 ⁱⁱ —C20—N2—C21	5.0 (5)

Ek Tablo 6.3. VI Kristalinin geometrik parametreleri(Å)

Cd1—O1	2.504 (3)	C9—C10	1.386 (5)
Cd1—O2	2.323 (3)	C9—C14	1.383 (5)
Cd1—O3	2.421 (3)	C10—C11	1.372 (5)
Cd1—O4	2.360 (3)	C10—H10	0.9300
Cd1—O5	2.410 (3)	C11—C12	1.365 (6)
Cd1—O6	2.314 (3)	C12—C13	1.388 (7)
Cd1—N1	2.305 (3)	C12—H12	0.9300
Cd1—C1	2.752 (4)	C13—H13	0.9300
Cd1—C8	2.732 (3)	C14—C13	1.373 (6)
C11—C4	1.732 (4)	C14—H14	0.9300
C12—C11	1.739 (4)	C15—C16	1.383 (5)
O1—C1	1.230 (5)	C15—H15	0.9300
O3—C8	1.242 (4)	C16—C17	1.380 (5)
O4—C8	1.251 (4)	C16—C20 ⁱ	1.502 (5)
O6—H61	0.856 (17)	C17—C18	1.373 (6)
O6—H62	0.86 (2)	C17—H17	0.9300
O5—C20	1.237 (5)	C18—H18	0.9300
N1—C15	1.330 (4)	C19—C18	1.374 (5)
N1—C19	1.331 (5)	C19—H19	0.9300
N2—C21	1.461 (5)	C20—N2	1.340 (5)
N2—C23	1.476 (5)	C20—C16 ⁱⁱ	1.502 (5)
C1—O2	1.265 (5)	C21—C22	1.521 (6)
C2—C1	1.509 (5)	C21—H21A	0.9700
C2—C3	1.381 (5)	C21—H21B	0.9700

Ek Tablo 6.4. VI Kristalinin Hidrojen Bağı Geometrisi(Å)*Hydrogen-bond geometry (Å, °)*

<i>D—H...A</i>	<i>D—H</i>	<i>H...A</i>	<i>D...A</i>	<i>D—H...A</i>
O6—H61...O2 ⁱⁱⁱ	0.85 (4)	1.94 (4)	2.753 (5)	160 (4)
O6—H62...O4 ⁱⁱⁱ	0.86 (4)	2.11 (4)	2.838 (4)	142 (5)
C15—H15...O1	0.93	2.52	3.181 (5)	128
C19—H19...O3	0.93	2.47	3.130 (5)	128

Symmetry code: (iii) $-x+1, -y+2, -z$.

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Nihat BOZKURT

Dogum Yeri : Kars

Dogum Tarihi : 09.12.1971

Medeni Hali : Evli

Yabancı Dili : İngilizce

Egitim Durumu (Kurum ve Yıl)

1971 yılında KARS 'ta doğan Nihat BOZKURT, lise öğrenimini Kars İmam Hatip Lisesinde tamamlamıştır. 1991 yılında kazandığı Atatürk Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümünü 1995 yılında başarıyla bitirmiştir.

1995 yılından beri MEB'de Öğretmen olarak çalışmakta olan Nihat BOZKURT, evli ve 3 çocuk babasıdır.

2013 yılında yüksek lisans eğitimine Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalında başlamıştır. Prof. Dr. Hacali NECEFOĞLU danışmanlığında hazırladığı “metal 3-klorobenzoatların nikotinamid ve dietilnikotinamid komplekslerinin sentezi ve özellikleri.” Başlıklı Tezli Yüksek Lisans öğrenimine devam etmektedir.

Çalıştığı Kurum/Kurumlar ve Yıl

1995 yılından beri MEB'de Öğretmen olarak çalışmakta

İletişim Bilgileri

Adres : Alpaslan Anadolu Lisesi,Kimya öğretmeni

36100 KARS

Telefon: 05386434998

E-posta:nihatbozkurt36@hotmail.com

Yayınları (SCI ve diğer)

- 1-Nihat Bozkurt, Nefise Dilek, Nagihan Çaylak Delibaş, Hacali Necefoğlu and Tuncer Hökelek, (2013). Bis(3-chlorobenzoato- κ 2O,O)bis(nicotinamide- κ N)copper(II) [Acta Cryst. E69, m356–m357](#)
- 2- Nihat Bozkurt, Nefise Dilek, Nagihan Çaylak Delibaş, Hacali Necefoğlu and Tuncer Hökelek, (2013). Diaquabis(3-chlorobenzoato- κ O)bis(nicotinamide- κ N1)cobalt(II) [Acta Cryst. E69, m349–m350](#)
- 3-Nihat Bozkurt, Nefise Dilek, Nagihan Çaylak Delibaş, Hacali Necefoğlu and Tuncer Hökelek, (2013). catena -Poly[aquabis(μ -3-chlorobenzoato- κ 2O:O)zinc] [Acta Cryst. E69, m381–m382](#)
- 4-Nihat Bozkurt, Nefise Dilek, Nagihan Çaylak Delibaş, Hacali Necefoğlu and Tuncer Hökelek, (2013). Di- μ -nicotinamide- κ 2N1:O; κ 2O:N1-bis[aquabis (3-chlorobenzoato κ 2O,O) cad mium] [Acta Cryst. E69, m389–m390](#)
- 5-Nihat Bozkurt, Nefise Dilek, Nagihan Çaylak Delibaş, Hacali Necefoğlu and Tuncer Hökelek, (2013). Aquabis(3-chlorobenzoato-jO)bis(N,NdiethylnicotinamideN)copper(II) [Acta Cryst. E69, m458–m459](#)
- 6-Nihat Bozkurt, Nefise Dilek, Nagihan Çaylak Delibaş, Hacali Necefoğlu and Tuncer Hökelek, (2013). Tetrakis(μ -3-chlorobenzoato- κ 2O:O_)bis[(N,N-diethylnicotinamide- κ N1) copper(II)] [Acta Cryst. E69, m431–m432](#)
- 7-Nihat Bozkurt, Nefise Dilek, Nagihan Çaylak Delibaş, Hacali Necefoğlu and Tuncer Hökelek, (2013). catena-Poly [aquabis (3chlorobenzoatoj2O,O)cadmium] N,Ndiethylnicotin amide j2N1:O] [Cryst. E69, m466–m467](#)