

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

***p*-METİLBENZOİK ASİDİN METAL KOMPLEKSLERİNİN  
SENTEZİ VE ÖZELLİKLERİ**

**EFDAL ÇİMEN  
DOKTORA TEZİ**

**DANIŞMAN  
Prof. Dr. Hacı NECEFOĞLU**

**KASIM - 2012  
KARS**

**Bu tez çalışması 2010-FEF-25 nolu proje ile Kafkas Üniversitesi Araştırma Fonu tarafından desteklenmiştir.**

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

***p*-METİLBENZOİK ASİDİN METAL KOMPLEKSLERİNİN  
SENTEZİ VE ÖZELLİKLERİ**

**EFDAL ÇİMEN  
DOKTORA TEZİ**

**DANIŞMAN  
Prof. Dr. Hacı NECEFOĞLU**

**KASIM - 2012  
KARS**

T.C. Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalı Doktora öğrencisi Efdal ÇİMEN'in Prof. Dr. Hacı NECEFOĞLU'nun danışmanlığında doktora tezi olarak hazırladığı "**p-Metilbenzoik Asidin Metal Komplekslerinin Sentezi ve Özellikleri**" adlı bu çalışma, yapılan tez savunması sınavı sonunda jüri tarafından Lisansüstü Eğitim Öğretim Yönetmeliği uyarınca değerlendirilerek oy.....*birliği*.....ile kabul edilmiştir.

23.11.2012

Adı-Soyadı

İmza

Başkan : Prof. Dr. Hacı NECEFOĞLU (Danışman)

Üye : Prof. Dr. İsmail ÇAKMAK

Üye : Doç. Dr. Fikret AKDENİZ

Üye : Doç. Dr. Temel ÖZTÜRK

Üye : Yrd. Doç. Dr. Halis MARŞAN

Bu tezin kabulü, Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun ...../...../2012 gün ve ...../..... sayılı kararıyla onaylanmıştır.

Doç. Dr. Muzaffer ALKAN  
Enstitü Müdürü

## ÖNSÖZ

Bu tez çalışması, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalı Doktora programında yapılmıştır. Çalışmada iki değerlikli geçiş metalleri [Mn(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Cd(II) ve Pb(II)], *p*-metilbenzoik asit ile nikotinamid ve türevleri (dietilnikotinamid ve izonikotinamid) kullanılarak 21 adet karışık ligand kompleksi sentezlenmiş, yapıları elementel analiz, termik analiz, kütle analizi, toz X-Ray, tek kristal X-Ray, IR, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR ve UV spektroskopileri kullanılarak aydınlatılmıştır.

Çalışmayı planlayan, yöneten ve her aşamasını titizlikle takip eden Kafkas Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölüm Başkanı Sayın Prof. Dr. Hacali NECEFOĞLU'na saygı ve teşekkürlerimi sunmayı bir borç bilirim.

Komplekslerin moleküler ve kristal yapılarının X-Ray analizi ile aydınlatılmasında olağanüstü yardımından dolayı Sayın Prof. Dr. Tuncer HÖKELEK'e çok müteşekkirim.

Sentezlenen komplekslerin Kütle ve NMR spektrumlarının alınmasında yardımcı olan arkadaşım Sayın Prof. Dr. Münevver SÖKMEN'e çok teşekkür ederim.

Sentezlenen komplekslerin UV spektrumlarının alınmasında ve IR spektrumlarının ve NMR piklerinin yorumlarında yardımcı olan Sayın Prof. Dr. Haydar YÜKSEK'e çok teşekkür ederim.

Sentezlenen komplekslerin UV spektrumlarının alınmasında ve IR spektrumlarının ve NMR piklerinin yorumlarında yardımcı olan Sayın Dr. Onur AKYILDIRIM'a çok teşekkür ederim.

Sentezlenen komplekslerin toz X-Ray ve IR spektrumlarının alınmasında yardımcı olan arkadaşım Sayın Doç. Dr. Hilmi NAMLI'ya çok teşekkür ederim.

Termik analiz sonuçlarının yorumlanmasında, tezin yazımında ve düzeltmelerinde yardımcı olan Sayın Dr. Özgür AYBİRDİ'ye çok teşekkür ederim

Ayrıca eğitim hayatım boyunca maddi ve manevi desteklerini esirgemeyen sevgili babam Şahin ÇİMEN ve rahmetli sevgili annem Şükran ÇİMEN'e, doktora tez çalışmamın her anında beni destekleyen sevgili eşim Sevilay ÇİMEN ve oğlum Berke ÇİMEN'e şükranlarımı sunarım.

Bu tez çalışması rahmetli annem Şükran ÇİMEN'e ithaf olunur.

Bu tez çalışması 2010-FEF-25 nolu proje kapsamında Kafkas Üniversitesi Araştırma Fonu tarafından desteklenmiştir.

KASIM 2012

Efdal ÇİMEN

## İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ	iv
İÇİNDEKİLER	vi
ÖZET	x
ABSTRACT	xi
SEMBOLLER VE KISALTMALAR	xii
ŞEKİLLER DİZİNİ	xiii
ÇİZELGELER DİZİNİ	xviii
<b>1. GİRİŞ</b>	<b>1</b>
<b>2. <i>p</i>-METİLBENZOİK ASİT KOMPLEKSLERİ</b>	<b>2</b>
2.1 <i>p</i> -Metilbenzoik Asit Moleküler Kompleksleri	2
2.2 <i>p</i> -Metilbenzoik Asit Metal Kompleksleri	5
2.2.1 <i>p</i> -Metilbenzoik Asidin Skandiyum Kompleksi	5
2.2.2 <i>p</i> -Metilbenzoik Asidin Lantan Kompleksi	5
2.2.3 <i>p</i> -Metilbenzoik Asidin Samaryum Kompleksi	5
2.2.4 <i>p</i> -Metilbenzoik Asidin Öropyum Kompleksleri	7
2.2.5 <i>p</i> -Metilbenzoik Asidin Terbiyum Kompleksleri	8
2.2.6 <i>p</i> -Metilbenzoik Asidin Dispersiyum Kompleksleri	9
2.2.7 <i>p</i> -Metilbenzoik Asidin Mangan Kompleksleri	9
2.2.8 <i>p</i> -Metilbenzoik Asidin Demir Kompleksleri	12
2.2.9 <i>p</i> -Metilbenzoik Asidin Kobalt Kompleksleri	13
2.2.10 <i>p</i> -Metilbenzoik Asidin Nikel Kompleksleri	17
2.2.11 <i>p</i> -Metilbenzoik Asidin Bakır Kompleksleri	20
2.2.12 <i>p</i> -Metilbenzoik Asidin Gümüş Kompleksleri	25
2.2.13 <i>p</i> -Metilbenzoik Asidin Çinko Kompleksleri	25
2.2.14 <i>p</i> -Metilbenzoik Asidin Kadmiyum Kompleksleri	32
2.2.15 <i>p</i> -Metilbenzoik Asidin Kurşun Kompleksleri	34
<b>3. MATERYAL VE YÖNTEM</b>	<b>36</b>
3.1 Materyal	36
3.1.1 Kullanılan Kimyasal Maddeler	36
3.1.2 Kullanılan Cihazlar	36

3.2	Sentez	37
3.2.1	[Mn(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>4</sub> ] (1) kompleksinin sentezi	37
3.2.2	[Zn(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] (2) kompleksinin sentezi	37
3.2.3	[Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] (3) kompleksinin sentezi	38
3.2.4	[Pb(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] (4) kompleksinin sentezi	39
3.2.5	[Mn(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] (5) kompleksinin sentezi	39
3.2.6	[Co(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] (6) kompleksinin sentezi	40
3.2.7	[Ni(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] (7) kompleksinin sentezi	40
3.2.8	[Cu(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)]·H <sub>2</sub> O (8) kompleksinin sentezi	41
3.2.9	[Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ][Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O)]·2H <sub>2</sub> O (9) kompleksinin sentezi	41
3.2.10	[Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] (10) kompleksinin sentezi	42
3.2.11	[Pb(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ](H <sub>2</sub> O) (11) kompleksinin sentezi	42
3.2.12	[Mn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)] (12) kompleksinin sentezi	43
3.2.13	[Co(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] (13) kompleksinin sentezi	43
3.2.14	[Ni(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] (14) kompleksinin sentezi	44
3.2.15	[Cu(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)]·H <sub>2</sub> O (15) kompleksinin sentezi	44
3.2.16	[Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] (16) kompleksinin sentezi	45
3.2.17	[Co(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O)] (17) kompleksinin sentezi	45
3.2.18	[Ni(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]·H <sub>2</sub> O (18) kompleksinin sentezi	46
3.2.19	[Cu(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]·2H <sub>2</sub> O (19) kompleksinin sentezi	46
3.2.20	[Cu <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] (20) kompleksinin sentezi	47
3.2.21	[Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)] (21) kompleksinin sentezi	47
<b>4.</b>	<b>BULGULAR</b>	<b>48</b>
4.1	Elementel Analiz	48
4.2	Infrared Spektrumu	49
4.3	Termik Analiz	50
4.4	NMR Spektroskopisi	62
4.5	UV Görünür Bölge Spektrumu	64
<b>5.</b>	<b>TARTIŞMA</b>	<b>65</b>

5.1	Spektroskopik Değerlendirme	65
5.1.1	<i>p</i> -Metilbenzoat Komplekslerinin Spektrum Verilerinin Yorumu	65
5.1.2	<i>p</i> -Metilbenzoat-Nikotinamid Karışık Komplekslerinin Spektrum Verilerinin Yorumu	67
5.1.3	<i>p</i> -Metilbenzoat-Dietilnikotinamid Karışık Komplekslerinin Spektrum Verilerinin Yorumu	71
5.1.4	<i>p</i> -Metilbenzoat-İzonikotinamid Karışık Komplekslerinin Spektrum Verilerinin Yorumu	75
5.2	X-Ray Analiz Sonuçları	78
5.2.1	Diaquabis(4-metilbenzoat- $\kappa O$ )bis-(nikotinamid- $\kappa N^1$ )mangan(II) (5)	78
5.2.2	Diaquabis(4-metilbenzoat- $\kappa O$ )bis(nikotinamid- $\kappa N^1$ )nikel(II) (7)	79
5.2.3	Bis( $\mu$ -4-metilbenzoat- $\kappa^2 O:O'$ )-bis[aqua(4-metilbenzoat- $\kappa^2 O:O'$ )çinko(II)-bis( $\mu$ -4-metilbenzoat- $\kappa^2 O:O'$ )-bis[(4-metilbenzoat- $\kappa O$ )nikotinamid- $\kappa N$ ]çinko(II)-su(1/1/2) (9)	80
5.2.4	Catena-poli[[bis(4-metilbenzoat- $\kappa^2 O:O'$ )kurşun(II)]- $\mu$ -nikotinamid)- $\kappa^2 N^1:O^3$ ] (11)	81
5.2.5	Catena-poli[[4-metilbenzoat- $\kappa O$ ]mangan(II)]- $\mu$ -aqua-bis( $\mu$ -4-metilbenzoat- $\kappa^2 O:O'$ )[(4-metilbenzoat- $\kappa O$ )mangan(II)]-bis( $\mu$ - <i>N,N</i> -dietilnikotinamid)- $\kappa^2 N^3:O;O:N^3$ ] (12)	82
5.2.6	Diaquabis( <i>N,N</i> -dietilnikotinamid- $\kappa N^1$ )bis(4-metilbenzoat- $\kappa O$ )kobalt(II) (13)	83
5.2.7	Tetrakis( $\mu$ -4-metilbenzoat- $\kappa^2 O:O'$ )-bis( <i>N,N</i> -dietilnikotinamid- $\kappa N^1$ )çinko(II) (16)	84
5.2.8	Bis(izonikotinamid- $\kappa N^1$ )bis(4-metilbenzoat- $\kappa O$ )bakır(II)-dihidrat (19)	85
5.2.9	Tetrakis( $\mu$ -4-metilbenzoat- $\kappa^2 O:O'$ )-bis(izonikotinamid- $\kappa N$ )bakır(II) (20)	86
5.2.10	Aquabis(izonikotinamid- $\kappa N^1$ )bis(4-metilbenzoat)- $\kappa O;\kappa^2 O,O'$ -kadmium(II) monohidrat (21)	87
6.	<b>SONUÇ</b>	94



<b>7.</b>	<b>KAYNAKLAR</b>	96
<b>8.</b>	<b>EKLER</b>	105
	<b>ÖZGEÇMİŞ</b>	263

## ÖZET

Bu çalışmada Mn(II), Cd(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II) ve Pb(II) metallerinin *p*-metilbenzoik asit (*p*-MBA) ve biyolojik öneme sahip nikotinamid (NA) ve türevleri (dietilnikotinamid (DENA) ve izonikotinamid (İNA)) ile 21 adet yeni kompleksleri sentezlendi:

[Mn(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>4</sub> ]	(1)	[Zn(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(2)
[Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(3)	[Pb(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(4)
[Mn(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(5)	[Co(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(6)
[Ni(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(7)	[Cu(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)]·H <sub>2</sub> O	(8)
[Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ][Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O)]·2H <sub>2</sub> O	(9)	[Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(10)
[Pb(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ·H <sub>2</sub> O]	(11)	[Mn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)]	(12)
[Co(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(13)	[Ni(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(14)
[Cu(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)]·H <sub>2</sub> O	(15)	[Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(16)
[Co(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(17)	[Ni(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ·H <sub>2</sub> O]	(18)
[Cu(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ·2H <sub>2</sub> O]	(19)	[Cu <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(20)
[Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)]·H <sub>2</sub> O	(21)		

Komplekslerin yapıları elementel analiz, kütle spektrometresi, <sup>1</sup>H-NMR, <sup>13</sup>C-NMR, IR, UV, termik analiz ve toz X-Ray spektroskopisi verileri ile karakterize edilmiştir. 10 adet kompleksin yapısı tek kristal X-ışını difraksiyonu ile belirlenmiştir. Kurşun kompleksleri polimer yapılı olup bunlardan **4** nolu kompleksin merkezi atomunun sekiz, **11** nolu kompleksinin merkezi atomunun ise altı koordinasyonlu oldukları düşünülmektedir. **8** ve **19** nolu komplekslerin kare düzlemsel, **15**, **16** ve **20** nolu komplekslerin kare piramidal, **9** nolu kompleksin trigonal bipiramidal ve tetrahedral, diğer komplekslerin ise oktahedral geometriye sahip oldukları belirlenmiştir.

2012, 285 sayfa

Anahtar sözcükler: Mn(II), Cd(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II) ve Pb(II) kompleksleri, *p*-metilbenzoik asit, nikotinamid, izonikotinamid, dietilnikotinamid, kristal yapı.

## ABSTRACT

In this study, the 21 new complexes of Mn(II), Cd(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II) and Pb(II) with *p*-methylbenzoic acid (*p*-MBA), and with biologically active nicotinamide and derivatives of nicotinamide (diethylnicotinamide (DENA) and isonicotinamide (INA)) have been synthesized:

$[\text{Mn}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_4]$	(1)	$[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$	(2)
$[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$	(3)	$[\text{Pb}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$	(4)
$[\text{Mn}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$	(5)	$[\text{Co}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$	(6)
$[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$	(7)	$[\text{Cu}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})] \cdot \text{H}_2\text{O}$	(8)
$[\text{Zn}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{H}_2\text{O})_2][\text{Zn}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	(9)	$[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$	(10)
$[\text{Pb}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$	(11)	$[\text{Mn}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})]$	(12)
$[\text{Co}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$	(13)	$[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$	(14)
$[\text{Cu}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})] \cdot \text{H}_2\text{O}$	(15)	$[\text{Zn}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2]$	(16)
$[\text{Co}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$	(17)	$[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$	(18)
$[\text{Cu}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	(19)	$[\text{Cu}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$	(20)
$[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})] \cdot \text{H}_2\text{O}$	(21)		

The complexes were characterized by elemental analysis, mass spectrometry,  $^1\text{H-NMR}$ ,  $^{13}\text{C-NMR}$ , thermic analysis, powder X-Ray diffraction, IR and UV-vis techniques. Crystal and molecular structures of ten complexes were determined by X-ray analysis. The complexes of lead have polymeric structures and coordination number of the central atom the complex **4** is eight, the one of the complex **11** is six. Complexes **8** and **19** have square-planar, complexes **15**, **16** and **20** have square-pyramidal, complex **9** has trigonal bipyramidal and tetrahedral, and the others complexes have octahedral geometries.

2012, 285 pages

Key Words: Mn(II), Cd(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II) and Pb(II) complexes, *p*-methylbenzoic acid, nicotinamide, isonicotinamide, diethylnicotinamide, crystal structure.

## SEMBOLLER VE KISALTMALAR

### Simgeler

$\lambda_{\max}$	:	Maksimum Dalga Boyu
$\epsilon$	:	Molar Absorbivite Katsayısı
$\delta$	:	Kimyasal Kayma
<b>S</b>	:	Elektronun Spin Açısai Momentumu
<b>J</b>	:	Atomun Toplam Açısai Momentumu

### Kısaltmalar

<b><i>p</i>-MBA</b>	:	<i>p</i> -Metilbenzoik Asit
<b><i>p</i>-MB</b>	:	<i>p</i> -Metilbenzoat
<b><i>p</i>-Toluat</b>	:	<i>p</i> -Metilbenzoik Asit
<b>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)</b>	:	<i>p</i> -Metilbenzoik Asit
<b>TTA</b>	:	$\alpha$ -Tenoiltrifloroaseton
<b>TPPO</b>	:	Triosilfosfin Oksit
<b>Bipy</b>	:	Bipiridin
<b>Phen</b>	:	1,10-Fenantrolin
<b>H<sub>3</sub>tea</b>	:	Trietanolamin
<b>PTA</b>	:	Tereftalik Asit
<b>NA</b>	:	Nikotinamid
<b>İNA</b>	:	İzonikotinamid
<b>DENA</b>	:	<i>N,N</i> -Dietilnikotinamid
<b>DTA</b>	:	Diferansiyel Termik Analiz
<b>TGA</b>	:	Termogravimetri
<b>DTG</b>	:	Diferansiyel Termogravimetri
<b>DMSO</b>	:	Dimetilsülfoksit
<b>NMR</b>	:	Nükleer Magnetik Rezonans
<b>EPR</b>	:	Elektron Paramagnetik Rezonans
<b>IR</b>	:	İnfrared Spektroskopisi
<b>UV</b>	:	Ultraviyole Görünür Bölge Spektroskopisi

## ŞEKİLLER DİZİNİ

		Sayfa No
Şekil 1.1	<i>p</i> -Metilbenzoik asidin yapısı	1
Şekil 2.1	Metilbenzoat anyonun geometrik izomerleri	2
Şekil 2.2	4,4'-bipiridin ve 4-metilbenzoik asidin 1:2 ko-kristalde heterokatemer supramolekülleri	2
Şekil 2.3	[Mg <sub>0.70</sub> Al <sub>0.30</sub> (OH) <sub>2</sub> ](C <sub>7</sub> H <sub>7</sub> CO <sub>2</sub> ) <sub>0.30</sub> ·H <sub>2</sub> O kompleksinin modelleri	3
Şekil 2.4	4-metilpiperidinyumhidrojenbis( <i>p</i> -metilbenzoat)'ın molekül yapısı	4
Şekil 2.5	Piperidinyumhidrojenbis( <i>p</i> -metilbenzoat)'ın molekül yapısı	5
Şekil 2.6	[Sm <sub>3</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>9</sub> ] <sub>n</sub> bileşiğinin kristal yapısı	6
Şekil 2.7	[Eu <sub>3</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>9</sub> ] <sub>n</sub> bileşiğinin kristal yapısı	7
Şekil 2.8	Eu(PTA)(TTA) <sub>2</sub> TPPO <sub>2</sub> bileşiğinin molekül yapısı	8
Şekil 2.9	[Mn(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> ] kristalinin molekül yapısı	10
Şekil 2.10	[Mn(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>12</sub> H <sub>9</sub> N <sub>3</sub> )] kristalinin molekül yapısı	10
Şekil 2.11	[Fe <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)] kristalinin molekül yapısı	12
Şekil 2.12	[Co <sub>3</sub> (4,4'-bipy)(4-metilbenzoat) <sub>6</sub> ] kristalinin molekül yapısı	13
Şekil 2.13	[Co <sub>3</sub> (4,4'-bipy)(4-metilbenzoat) <sub>6</sub> ] kompleksinin <i>ac</i> düzleminde bir boyutlu görünümü	14
Şekil 2.14	[Co <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)] kristalinin molekül yapısı	14
Şekil 2.15	[Co(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> ] kristalinin molekül yapısı	15
Şekil 2.16	[ <i>cis</i> (Co(en) <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> )](C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> ·H <sub>2</sub> O kristalinin molekül yapısı	16
Şekil 2.17	[Co(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)] bileşiğinin molekül yapısı	17
Şekil 2.18	[Ni <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)] bileşiğinin kristal yapısı	17
Şekil 2.19	[Ni(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)] bileşiğinin kristal yapısı	18
Şekil 2.20	[Ni(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> N <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)] bileşiğinin kristal yapısı	19
Şekil 2.21	[Cu(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> )(C <sub>10</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> ]·0.5H <sub>2</sub> O bileşiğinin kristal yapısı	20
Şekil 2.22	[Cu(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> )(C <sub>12</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> )(H <sub>2</sub> O)] bileşiğinin kristal yapısı	21
Şekil 2.23	[Cu(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>7</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> )] bileşiğinin kristal yapısı	22
Şekil 2.24	[Cu(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>4</sub> ) <sub>2</sub> ] bileşiğinin kristal yapısı	23
Şekil 2.25	[Cu(bpy)(pba) <sub>2</sub> ·H <sub>2</sub> O] bileşiğinin kristal yapısı	24
Şekil 2.26	[Zn(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] bileşiğinin kristal yapısı	25
Şekil 2.27	[Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>7</sub> H <sub>10</sub> N <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> ] bileşiğinin kristal yapısı	26

Şekil 2.28	$[\text{Zn}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{C}_7\text{H}_{10}\text{N}_2)_2]$ bileşiğinin moleküller arası C-H $\cdots$ O etkileşiminin gösterimi	27
Şekil 2.29	$[\text{Zn}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{C}_7\text{H}_{10}\text{N}_2)_2]$ bileşiğinin moleküller arası C-H $\cdots$ $\pi$ etkileşiminin gösterimi	27
Şekil 2.30	$\{[\text{Zn}(\text{C}_7\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N}_2)] \cdot 4\text{H}_2\text{O}\}_n$ bileşiğinin kristal yapısı	28
Şekil 2.31	$[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N}_2)]$ bileşiğinin kristal yapısı	29
Şekil 2.32	$[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_7\text{H}_6\text{N}_2)_2] \cdot 2\text{C}_8\text{H}_8\text{O}_2$ bileşiğinin kristal yapısı	30
Şekil 2.33	$[\text{Zn}(p\text{-MB})_2(2,2'\text{-bipy})]$ bileşiğinin kristal yapısı	31
Şekil 2.34	$[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ bileşiğinin kristal yapısı	32
Şekil 2.35	$[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_3\text{H}_4\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})]$ bileşiğinin kristal yapısı	33
Şekil 2.36	$[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_3\text{H}_4\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})]$ bileşiğinde moleküller arası hidrojen bağları	33
Şekil 2.37	$[\text{Pb}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N}_2)]$ bileşiğinin kristal yapısı	34
Şekil 2.38	$[(4\text{-CH}_3\text{-C}_6\text{H}_4\text{CO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ bileşiğinin kristal yapısı	35
Şekil 5.1	(5) kompleksinin kristal yapısı	78
Şekil 5.2	(7) kompleksinin kristal yapısı	79
Şekil 5.3	(9) kompleksinin kristal yapısı	80
Şekil 5.4	(11) kompleksinin kristal yapısı	81
Şekil 5.5	(12) kompleksinin kristal yapısı	82
Şekil 5.6	(13) kompleksinin kristal yapısı	83
Şekil 5.7	(16) kompleksinin kristal yapısı	84
Şekil 5.8	(19) kompleksinin kristal yapısı	85
Şekil 5.9	(20) kompleksinin kristal yapısı	86
Şekil 5.10	(21) kompleksinin kristal yapısı	87
Şekil 5.11	(1) kompleksinin muhtemel yapısı	88
Şekil 5.12	(2) komplekslerinin muhtemel yapısı	88
Şekil 5.13	(3) kompleksinin muhtemel yapıları	89
Şekil 5.14	(4) komplekslerinin muhtemel yapısı	89
Şekil 5.15	(6) komplekslerinin muhtemel yapısı	90
Şekil 5.16	(8) kompleksinin muhtemel yapısı.	90
Şekil 5.17	(10) kompleksinin muhtemel yapısı	91
Şekil 5.18	(14) kompleksinin muhtemel yapısı	91

Şekil 5.19	(15) kompleksinin muhtemel yapısı	92
Şekil 5.20	(17) kompleksinin muhtemel yapısı	92
Şekil 5.21	(18) kompleksinin muhtemel yapısı	93
Ek Şekil 2	(1) kompleksinin IR spektrumu	107
Ek Şekil 3	(2) kompleksinin IR spektrumu	108
Ek Şekil 4	(3) kompleksinin IR spektrumu	109
Ek Şekil 5	(4) kompleksinin IR spektrumu	110
Ek Şekil 6	(5) kompleksinin IR spektrumu	111
Ek Şekil 7	(6) kompleksinin IR spektrumu	112
Ek Şekil 8	(7) kompleksinin IR spektrumu	113
Ek Şekil 9	(8) kompleksinin IR spektrumu	114
Ek Şekil 10	(9) kompleksinin IR spektrumu	115
Ek Şekil 11	(10) kompleksinin IR spektrumu	116
Ek Şekil 12	(11) kompleksinin IR spektrumu	117
Ek Şekil 13	(12) kompleksinin IR spektrumu	118
Ek Şekil 14	(13) kompleksinin IR spektrumu	119
Ek Şekil 15	(14) kompleksinin IR spektrumu	120
Ek Şekil 16	(15) kompleksinin IR spektrumu	121
Ek Şekil 17	(16) kompleksinin IR spektrumu	122
Ek Şekil 18	(17) kompleksinin IR spektrumu	123
Ek Şekil 19	(18) kompleksinin IR spektrumu	124
Ek Şekil 20	(19) kompleksinin IR spektrumu	125
Ek Şekil 21	(20) kompleksinin IR spektrumu	126
Ek Şekil 22	(21) kompleksinin IR spektrumu	127
Ek Şekil 23	(1) kompleksinin DTA-DTG-TG eğrileri	128
Ek Şekil 24	(2) kompleksinin DTA-DTG-TG eğrileri	128
Ek Şekil 25	(3) kompleksinin DTA-DTG-TG eğrileri	129
Ek Şekil 26	(4) kompleksinin DTA-DTG-TG eğrileri	129
Ek Şekil 27	(5) kompleksinin DTA-DTG-TG eğrileri	130
Ek Şekil 28	(6) kompleksinin DTA-DTG-TG eğrileri	130
Ek Şekil 29	(7) kompleksinin DTA-DTG-TG eğrileri	131
Ek Şekil 30	(8) kompleksinin DTA-DTG-TG eğrileri	131

Ek Şekil 31	(9) kompleksinin DTA-DTG-TG eğrileri	132
Ek Şekil 32	(10) kompleksinin DTA-DTG-TG eğrileri	132
Ek Şekil 33	(11) kompleksinin DTA-DTG-TG eğrileri	133
Ek Şekil 34	(12) kompleksinin DTA-DTG-TG eğrileri	133
Ek Şekil 35	(13) kompleksinin DTA-DTG-TG eğrileri	134
Ek Şekil 36	(14) kompleksinin DTA-DTG-TG eğrileri	134
Ek Şekil 37	(15) kompleksinin DTA-DTG-TG eğrileri	135
Ek Şekil 38	(16) kompleksinin DTA-DTG-TG eğrileri	135
Ek Şekil 39	(17) kompleksinin DTA-DTG-TG eğrileri	136
Ek Şekil 40	(18) kompleksinin DTA-DTG-TG eğrileri	136
Ek Şekil 41	(19) kompleksinin DTA-DTG-TG eğrileri	137
Ek Şekil 42	(20) kompleksinin DTA-DTG-TG eğrileri	137
Ek Şekil 43	(21) kompleksinin DTA-DTG-TG eğrileri	138
Ek Şekil 44	(6) kompleksinin UV spektrumu	139
Ek Şekil 45	(7) kompleksinin UV spektrumu	139
Ek Şekil 46	(8) kompleksinin UV spektrumu	139
Ek Şekil 47	(13) kompleksinin UV spektrumu	140
Ek Şekil 48	(14) kompleksinin UV spektrumu	140
Ek Şekil 49	(15) kompleksinin UV spektrumu	140
Ek Şekil 50	(17) kompleksinin UV spektrumu	141
Ek Şekil 51	(18) kompleksinin UV spektrumu	141
Ek Şekil 52	(19) kompleksinin UV spektrumu	141
Ek Şekil 53	(20) kompleksinin UV spektrumu	142
Ek Şekil 54	(19) kompleksinin kütle spektrumu	142
Ek Şekil 55	(2) kompleksinin $^1\text{H-NMR}$ (DMSO- $d_6$ ) spektrumu	143
Ek Şekil 56	(2) kompleksinin $^{13}\text{C-NMR}$ (DMSO- $d_6$ ) spektrumu	143
Ek Şekil 57	(3) kompleksinin $^1\text{H-NMR}$ (DMSO- $d_6$ ) spektrumu	144
Ek Şekil 58	(3) kompleksinin $^{13}\text{C-NMR}$ (DMSO- $d_6$ ) spektrumu	144
Ek Şekil 59	(9) kompleksinin $^1\text{H-NMR}$ (DMSO- $d_6$ ) spektrumu	145
Ek Şekil 60	(9) kompleksinin $^{13}\text{C-NMR}$ (DMSO- $d_6$ ) spektrumu	145
Ek Şekil 61	(10) kompleksinin $^1\text{H-NMR}$ (DMSO- $d_6$ ) spektrumu	146
Ek Şekil 62	(10) kompleksinin $^{13}\text{C-NMR}$ (DMSO- $d_6$ ) spektrumu	146



Ek Şekil 63	(16) kompleksinin $^1\text{H}$ -NMR (DMSO- $d_6$ ) spektrumu	147
Ek Şekil 64	(16) kompleksinin $^{13}\text{C}$ -NMR (DMSO- $d_6$ ) spektrumu	147
Ek Şekil 65	(21) kompleksinin $^1\text{H}$ -NMR (DMSO- $d_6$ ) spektrumu	148
Ek Şekil 66	(21) kompleksinin $^{13}\text{C}$ -NMR (DMSO- $d_6$ ) spektrumu	148
Ek Şekil 67	(5) ve (6) komplekslerinin toz X ışını diffraktogramları	149
Ek Şekil 68	(13) ve (14) komplekslerinin toz X ışını diffraktogramları	150

## ÇİZELGELER DİZİNİ

		<b>Sayfa No</b>
Çizelge 4.1	Komplekslerin elementel analiz verileri	48
Çizelge 4.2	<i>p</i> -Metilbenzoik asit komplekslerinin IR spektrum verileri	49
Çizelge 4.3	(1) kompleksinin termik analiz verileri	51
Çizelge 4.4	(2) kompleksinin termik analiz verileri	51
Çizelge 4.5	(3) kompleksinin termik analiz verileri	52
Çizelge 4.6	(4) kompleksinin termik analiz verileri	52
Çizelge 4.7	(5) kompleksinin termik analiz verileri	53
Çizelge 4.8	(6) kompleksinin termik analiz verileri	53
Çizelge 4.9	(7) kompleksinin termik analiz verileri	54
Çizelge 4.10	(8) kompleksinin termik analiz verileri	54
Çizelge 4.11	(9) kompleksinin termik analiz verileri	55
Çizelge 4.12	(10) kompleksinin termik analiz verileri	55
Çizelge 4.13	(11) kompleksinin termik analiz verileri	56
Çizelge 4.14	(12) kompleksinin termik analiz verileri	56
Çizelge 4.15	(13) kompleksinin termik analiz verileri	57
Çizelge 4.16	(14) kompleksinin termik analiz verileri	57
Çizelge 4.17	(15) kompleksinin termik analiz verileri	58
Çizelge 4.18	(16) kompleksinin termik analiz verileri	58
Çizelge 4.19	(17) kompleksinin termik analiz verileri	59
Çizelge 4.20	(18) kompleksinin termik analiz verileri	59
Çizelge 4.21	(19) kompleksinin termik analiz verileri	60
Çizelge 4.22	(20) kompleksinin termik analiz verileri	60
Çizelge 4.23	(21) kompleksinin termik analiz verileri	61
Çizelge 4.24	Bazı komplekslerin <sup>1</sup> H-NMR spektrum verileri	62
Çizelge 4.25	Bazı komplekslerin <sup>13</sup> C-NMR spektrum verileri	63
Çizelge 4.26	Bazı komplekslerin UV-Görünür Bölge verileri	64
Ek Çizelge 1	(5) kristalinin fraksiyonel atomik koordinatları ve izotropik veya eşdeğer izotropik yer değiştirme parametreleri	151
Ek Çizelge 2	(5) kristalinin atomik yer değiştirme parametreleri	152
Ek Çizelge 3	(5) kristalinin geometrik parametreleri	152

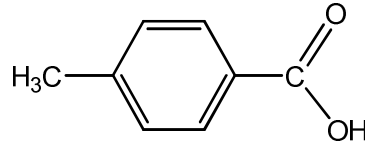
Ek Çizelge 4	(5) kristalinin hidrojen bağı geometrisi	154
Ek Çizelge 5	(7) kristalinin fraksiyonel atomik koordinatları ve izotropik veya eşdeğer izotropik yer değiştirme parametreleri	155
Ek Çizelge 6	(7) kristalinin atomik yer değiştirme parametreleri	156
Ek Çizelge 7	(7) kristalinin geometrik parametreleri	157
Ek Çizelge 8	(7) kristalinin hidrojen bağı geometrisi	159
Ek Çizelge 9	(9) kristalinin fraksiyonel atomik koordinatları ve izotropik veya eşdeğer izotropik yer değiştirme parametreleri	159
Ek Çizelge 10	(9) kristalinin atomik yer değiştirme parametreleri	164
Ek Çizelge 11	(9) kristalinin geometrik parametreleri	167
Ek Çizelge 12	(9) kristalinin hidrojen bağı geometrisi	177
Ek Çizelge 13	(11) kristalinin geometrik parametreleri	177
Ek Çizelge 14	(11) kristalinin hidrojen bağı geometrisi	179
Ek Çizelge 15	(11) kristalinin geometrik parametreleri	180
Ek Çizelge 16	(11) kristalinin hidrojen bağı geometrisi	183
Ek Çizelge 17	(12) kristalinin geometrik parametreleri	183
Ek Çizelge 18	(12) kristalinin hidrojen bağı geometrisi	190
Ek Çizelge 19	(12) kristalinin geometrik parametreleri	194
Ek Çizelge 20	(12) kristalinin hidrojen bağı geometrisi	208
Ek Çizelge 21	(13) kristalinin geometrik parametreleri	209
Ek Çizelge 22	(13) kristalinin hidrojen bağı geometrisi	210
Ek Çizelge 23	(13) kristalinin geometrik parametreleri	211
Ek Çizelge 24	(13) kristalinin hidrojen bağı geometrisi	213
Ek Çizelge 25	(16) kristalinin geometrik parametreleri	213
Ek Çizelge 26	(16) kristalinin hidrojen bağı geometrisi	216
Ek Çizelge 27	(16) kristalinin geometrik parametreleri	217
Ek Çizelge 28	(16) kristalinin hidrojen bağı geometrisi	220
Ek Çizelge 29	(19) kristalinin geometrik parametreleri	220
Ek Çizelge 30	(19) kristalinin hidrojen bağı geometrisi	221
Ek Çizelge 31	(19) kristalinin geometrik parametreleri	222
Ek Çizelge 32	(19) kristalinin hidrojen bağı geometrisi	224
Ek Çizelge 33	(20) kristalinin geometrik parametreleri	224

Ek Çizelge 34	(20) kristalinin hidrojen bağı geometrisi	226
Ek Çizelge 35	(20) kristalinin geometrik parametreleri	227
Ek Çizelge 36	(20) kristalinin hidrojen bağı geometrisi	230
Ek Çizelge 37	(21) kristalinin geometrik parametreleri	230
Ek Çizelge 38	(21) kristalinin hidrojen bağı geometrisi	232
Ek Çizelge 39	(21) kristalinin geometrik parametreleri	233
Ek Çizelge 40	(21) kristalinin hidrojen bağı geometrisi	237
Ek Çizelge 41	(6) kompleksinin toz XRD değerleri	238
Ek Çizelge 42	(7) kompleksinin toz XRD değerleri	239
Ek Çizelge 43	(13) kompleksinin toz XRD değerleri	240
Ek Çizelge 44	(14) kompleksinin toz XRD değerleri	241
Ek Çizelge 45	(1) kompleksinin elementel analiz sonucu	242
Ek Çizelge 46	(2) kompleksinin elementel analiz sonucu	243
Ek Çizelge 47	(3) kompleksinin elementel analiz sonucu	244
Ek Çizelge 48	(4) kompleksinin elementel analiz sonucu	245
Ek Çizelge 49	(5) kompleksinin elementel analiz sonucu	246
Ek Çizelge 50	(6) kompleksinin elementel analiz sonucu	247
Ek Çizelge 51	(7) kompleksinin elementel analiz sonucu	248
Ek Çizelge 52	(8) kompleksinin elementel analiz sonucu	249
Ek Çizelge 53	(9) kompleksinin elementel analiz sonucu	250
Ek Çizelge 54	(10) kompleksinin elementel analiz sonucu	251
Ek Çizelge 55	(11) kompleksinin elementel analiz sonucu	252
Ek Çizelge 56	(12) kompleksinin elementel analiz sonucu	253
Ek Çizelge 57	(13) kompleksinin elementel analiz sonucu	254
Ek Çizelge 58	(14) kompleksinin elementel analiz sonucu	255
Ek Çizelge 59	(15) kompleksinin elementel analiz sonucu	256
Ek Çizelge 60	(16) kompleksinin elementel analiz sonucu	257
Ek Çizelge 61	(17) kompleksinin elementel analiz sonucu	258
Ek Çizelge 62	(18) kompleksinin elementel analiz sonucu	259
Ek Çizelge 63	(19) kompleksinin elementel analiz sonucu	260
Ek Çizelge 64	(20) kompleksinin elementel analiz sonucu	261
Ek Çizelge 65	(21) kompleksinin elementel analiz sonucu	262

## 1. GİRİŞ

*p*-Metilbenzoik asit bileşiklerinin kozmetik ürünlerinin üretiminde kullanılmasından dolayı biyoanorganik kimyada ligand olarak kullanılması önem kazanmıştır. Ayrıca *p*-Metilbenzoik asidin bazı metal kompleksleri, polimerik yapıyı etkinleştirmeleri sebebiyle günümüzde daha çok tercih edilmektedirler.

*p*-Metilbenzoik asidin yapısı Takwale ve Pant tarafından aydınlatılmıştır [1]. *p*-metilbenzoik asit, *p*-toluik asit veya kritiminik asit olarak bilinir. Bazı endüstri proseslerinde polietilen tereftalatın üretiminde kullanılır ve *p*-ksilenin tereftalik aside oksidasyonu sırasında ara ürün olarak bulunabilir. Pratikte suda zor çözünen ama asetonu iyi çözünebilir beyaz kristal görünümünde katı bir maddedir.



Şekil 1.1. *p*-Metilbenzoik Asidin Yapısı

Yukarıda açık formülü verilen bileşiğin kapalı formülü  $C_8H_8O_2$  olup, molekül ağırlığı 136,15 g/mol'dur. IUPAC adı 4-metilbenzoik asit veya *p*-toluik asittir. Erime noktası 177–180 °C iken bozunma noktası 274-275 °C'dir [2].

Zakzeski ve Bell tarafından, oksijen ve oksidatif vanadyum varlığında rodyum ile kataliz edilerek toluene karbonil grubu bağlanmış ve *p*-toluik asit elde edilmiştir [3].

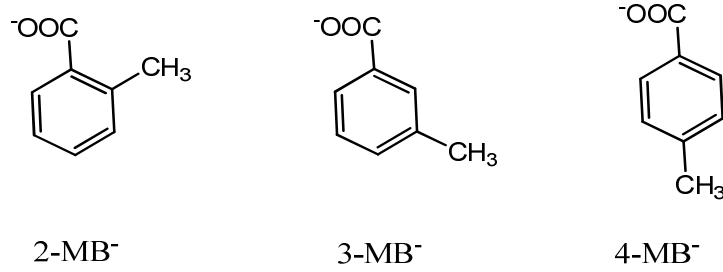
Li ve arkadaşları tarafından, 288 K ve 370 K'de, atmosfer basıncında, su, asetik asit, triklorometan, *N,N*-dimetilasetamid ve *N*-metilpirolidon çözücülerinde 4-metilbenzoik asidin çözünürlüğü tayin edildi [4].

Allopurinolün sudaki çözünürlüğüne *p*-toluik asidin etkisi Ammar ve Elnahas tarafından incelenmiştir [5].

## 2. *p*-METİLBENZOİK ASİT KOMPLEKSLERİ

### 2.1. *p*-Metilbenzoik Asitin Moleküler Kompleksleri

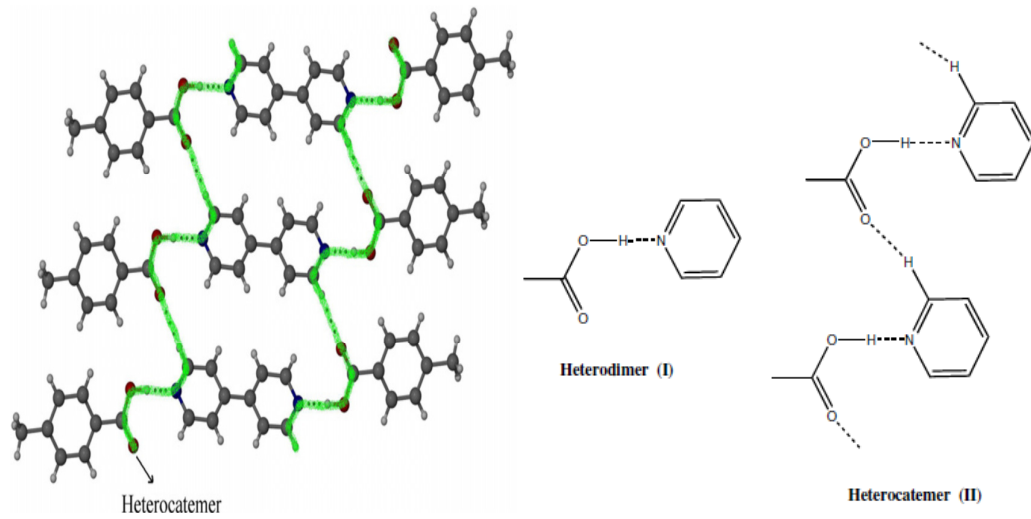
$\beta$ -siklodekstrin kullanarak 2-, 3- ve 4-metilbenzoat anyonlarının ayrılmasına etki eden faktörler Ferguson ve arkadaşları tarafından incelenmiştir (Şekil 2.1) [6].



Şekil 2.1. Metilbenzoat anyonunun geometrik izomerleri [6].

4,4'-bipiridin ile *p*-metilbenzoik asidin 1:2 mol oranındaki ko-kristalinde karboksilik asit-piridin supramolekül sağlamlığını Sudhakar ve arkadaşları incelemişlerdir [7].

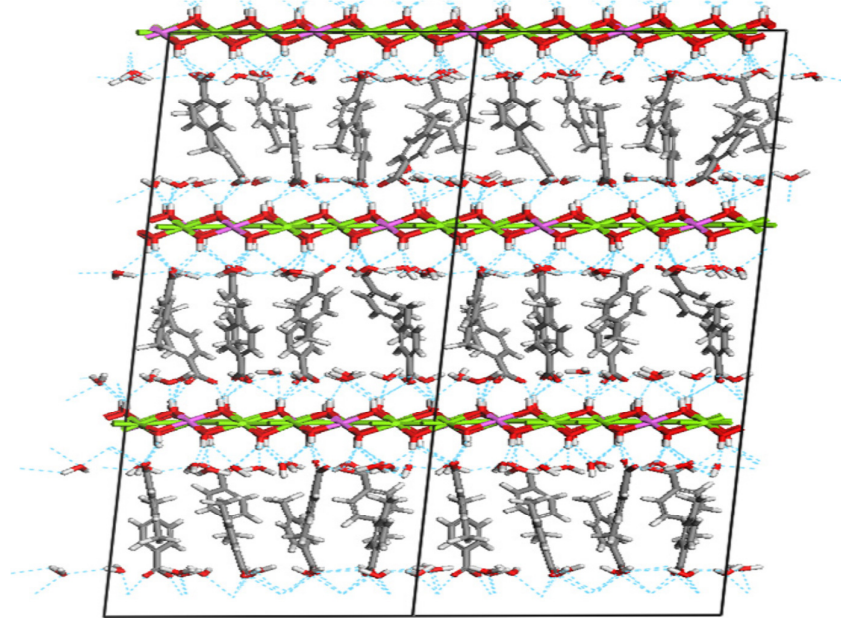
Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü [(C<sub>10</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>)(C<sub>8</sub>H<sub>8</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>], M<sub>A</sub> = 428,49 g/mol, kristal sistemi monoklinik, uzay grubu *P2*<sub>1</sub>/*c* olan bileşiğin birim hücre parametreleri: *a* = 7,866 (4) Å, *b* = 6,097 (3) Å, *c* = 23,383 (11) Å,  $\beta$  = 92,481 (5)°, *V* = 1120,4 (10) Å<sup>3</sup>, *Z* = 2 (Şekil 2.2) [7].



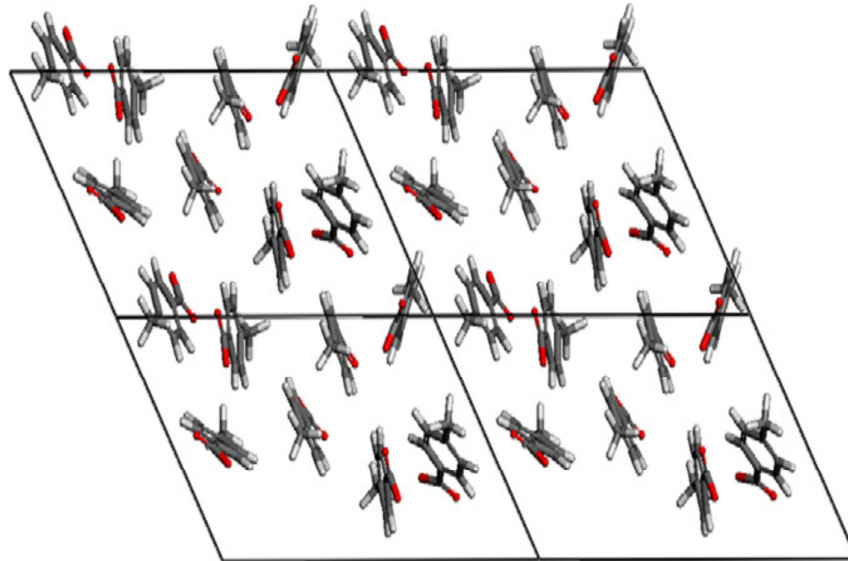
Şekil 2.2. 4,4'-bipiridin ve 4-metilbenzoik asidin 1:2 ko-kristalde heterokatemer supramolekülleri [7]

Ichihara ve arkadaşları, *p*-metilbenzoik asidin enzimatik hidroksilasyonu konusunda çalışmışlardır [8].

Kovář ve diğerleri  $[Mg_{0.70}Al_{0.30}(OH)_2](C_7H_7CO_2)_{0.30} \cdot H_2O$  formüllü kompleksin yapısını termik analiz ve X-Ray analizi ile incelemişler (Şekil 2.3) [9].



(a)

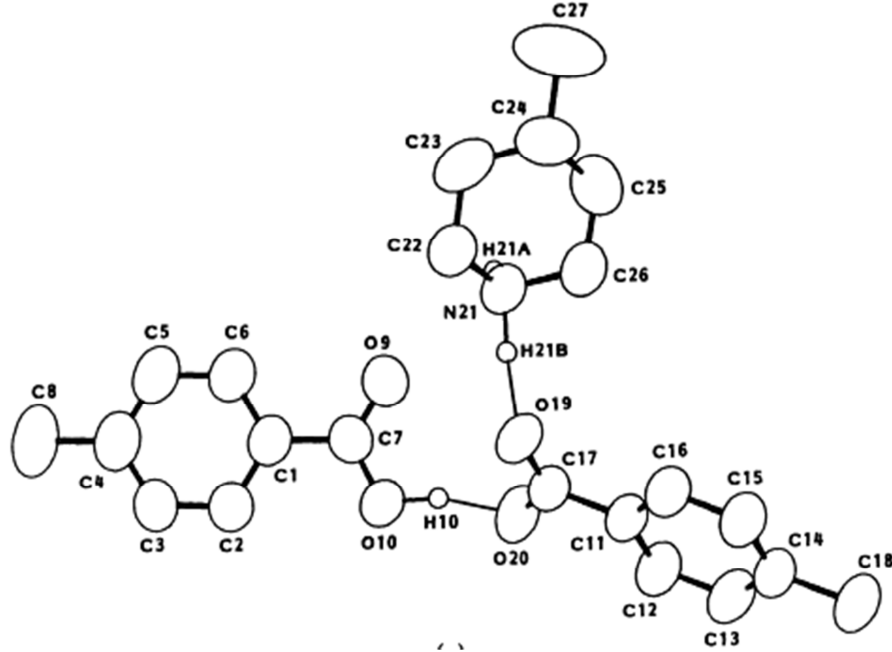


(b)

Şekil 2.3.  $[Mg_{0.70}Al_{0.30}(OH)_2](C_7H_7CO_2)_{0.30} \cdot H_2O$  kompleksinin modelleri [9]

Shintaro Misaki ve arkadaşları, 4-metilpiperidinyum hidrojen bis(*p*-metilbenzoat) ve piperidinyum hidrojen bis(*p*-metilbenzoat) komplekslerinin kristal yapılarını aydınlatarak moleküllerdeki kısa hidrojen bağlarını incelemiştir (Şekil 1.2 ve 1.3) [10].

4-metilpiperidinyum hidrojen bis(*p*-metilbenzoat) bileşiğinin kristal verileri: molekül formülü  $C_6H_{14}N^+C_{16}H_{15}O_4^-$ ,  $M_A = 371,48$  g/mol, kristal sistemi prizmatik *b*, uzay grubu  $P2_1/n$  olan bileşiğin birim hücre parametreleri:  $a = 19,260$  (2) Å,  $b = 8,0061$  (5) Å,  $c = 14,065$  (1) Å,  $\beta = 94,391$  (7)°,  $V = 2162,5$  (3) Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$  (Şekil 2.4) [10].



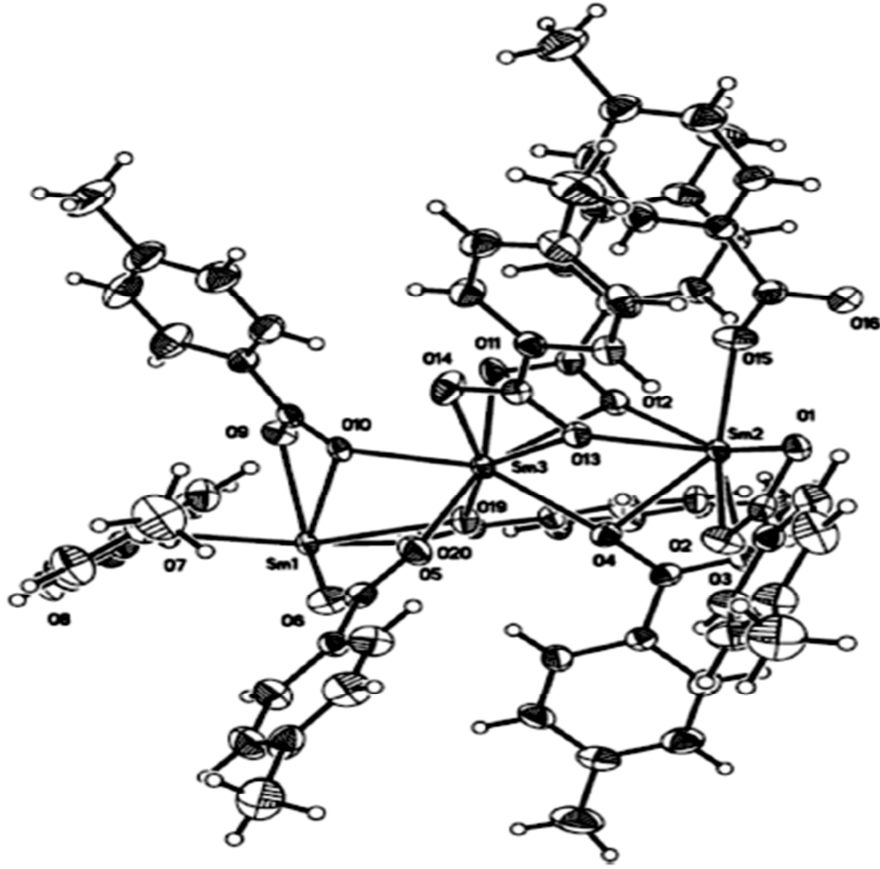
Şekil 2.4. 4-metilpiperidinyumhidrojenbis(*p*-metilbenzoat)'ın molekül yapısı [10].

Piperidinyum hidrojen bis(metilbenzoat) bileşiğinin kristal verileri: molekül formülü  $C_5H_{12}N^+C_{16}H_{15}O_4^-$ ,  $M_A = 357,45$  g/mol, kristal sistemi prizmatik *c*, uzay grubu  $Pcan$  olan bileşiğin birim hücre parametreleri:  $a = 10,292$  (1) Å,  $b = 25,248$  (4) Å,  $c = 7,763$  (2) Å,  $V = 2017,2$  (5) Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$  (Şekil 2.5) [10].





*Catena*-poli[bis( $\mu$ -4-metilbenzoat- $\kappa^2 O, O$ )heptakis( $\mu$ -4-metilbenzoat- $\kappa^3 O, O': O$ )] trisamaryum kompleksinde, üç bağımsız Sm(III) atomundan ikisi bozulmuş kare-antiprizmatik koordinasyon düzende sekiz-koordineli iken, üçüncüsü ise biraz bozulmuş trigonal-prizmatik yapıda dokuz-koordinasyonludur. Metal merkezi, dört tridentat, üç bidentat ve iki monodentat metilbenzoat anyonu ile köprü şeklinde koordine edilir ve polimerik zincir *b*-eksenine paralel biçimlenmiştir.



Şekil 2.6.  $[Sm_3(C_8H_7O_2)_9]_n$  bileşiğinin kristal yapısı [13]

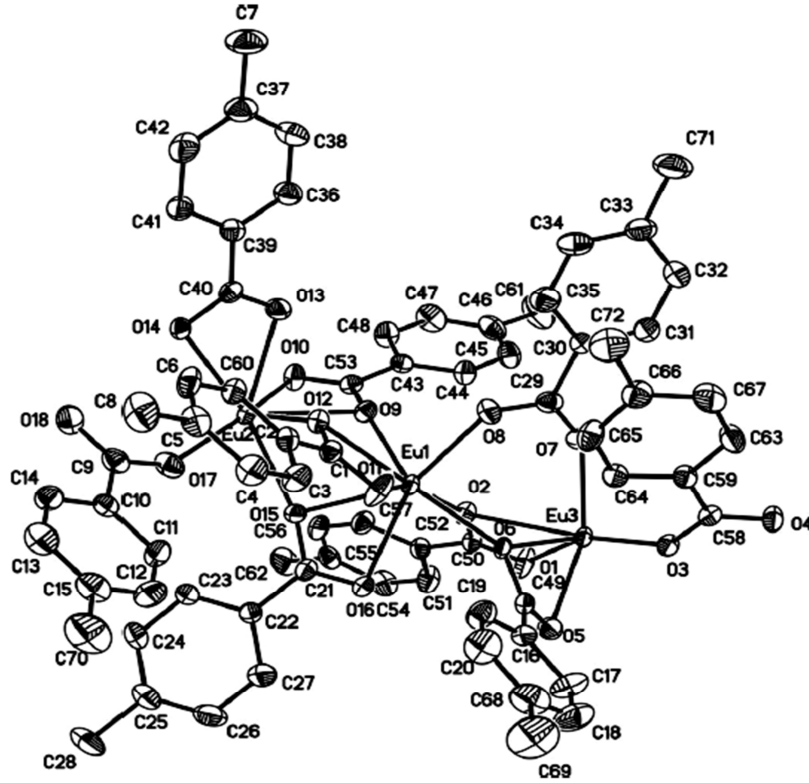
$[Sm(p-MB)_3phen]_2$  kompleksini Zhang ve arkadaşları sentezlemişler ve kompleksin yapısını UV, IR, TG-DTG ve elementel analiz yöntemleri ile aydınlatmışlardır. TG-DTG tekniğinde termal bozunma mekanizması incelenmiştir [14].

## 2.2.4 *p*-Metilbenzoik Asidin Öropyum Kompleksleri

Zhang ve arkadaşları,  $[\text{Eu}_3(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_9]_n$  kristalini sentezlemişlerdir [15].

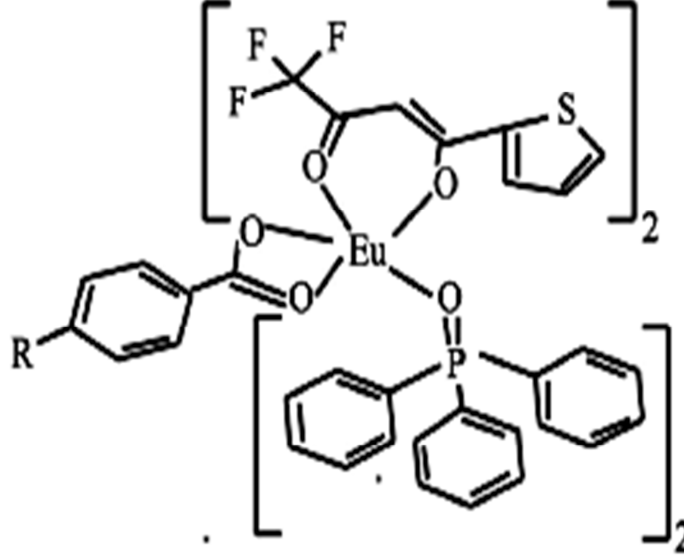
Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü  $[\text{Eu}_3(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_9]_n$ ,  $M_A = 1672,10$  g/mol, kristal sistemi monoklinik, uzay grubu  $P2_1/n$  olan bileşiğin birim hücre parametreleri:  $a = 13,8417$  (4) Å,  $b = 22,4998$  (7) Å,  $c = 21,8170$  (7) Å,  $\beta = 96,490$  (2)°,  $V = 6751,0$  (4) Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$ ,  $T = 296$  K [15].

*Catena*-poli[[heksakis( $\mu$ -4-metilbenzoat- $\kappa^2 O, O'$ ;  $\kappa^{15} O, O'$ : $O$ -trieuropiyum(III)]-tris( $\mu$ -4-metilbenzoat)- $\kappa^2 O, O'$ ;  $\kappa^6 O:O':O$ ] kompleksinde, üç bağımsız Eu(III) atomundan ikisi bozulmuş kare-antiprizmatik koordinasyon düzende sekiz-koordineli iken, üçüncüsü ise biraz bozulmuş trigonal-prizmatik yapıda dokuz-koordinasyonludur. Metal atomlar iki bidentat ve yedi tridentat metilbenzoat grupları ile *b*-ekseni yönünde doğrusal zincir şeklinde bağlıdır (Şekil 2.7).



Şekil 2.7.  $[\text{Eu}_3(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_9]_n$  bileşiğinin kristal yapısı [15].

Eu(PTA)(TTA)<sub>2</sub>TPPO<sub>2</sub> (PTA = *p*-toluik asit, TTA =  $\alpha$ -tenoiltrifloroaseton, TPPO = triosilfosfin oksit) kompleksin sentezi ve floresans özellikleri Zhan ve arkadaşları tarafından incelenmiştir (Şekil 2.8) [16].



Şekil 2.8. Eu(PTA)(TTA)<sub>2</sub>TPPO<sub>2</sub> bileşiğinin molekül yapısı [16].

[Eu<sub>3</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>9</sub>] molekülünün sentezi Jin ve arkadaşları tarafından yapılmış olup, *catena-*poli[Eu(III)-tri- $\mu$ -4-metilbenzoat-O:O,O';O,O,O';O,O':O'], kompleksinde her Eu(III) iyonu dokuz oksijen atomu ile koordinasyondadır ve üç Eu(III) atomu trimerik bir ünite biçimindedir. Bu trimerik üniteler köprü durumundaki şelat karboksilatlar ile bir boyutlu polimer zincir şeklinde bağlıdır [17].

### 2.2.5 *p*-Metilbenzoik Asidin Terbiyum Kompleksleri

Li ve çalışma grubunun sentezlediği {[Tb(*p*-MB)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]<sub>2</sub>(4,4'-bipy)<sub>2</sub>]<sub>n</sub> kompleksinin luminesans özellikleri incelenmiş ve kristal yapısı aydınlatılmıştır [18].

Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü {[Tb(*p*-MB)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]<sub>2</sub>(4,4'-bipy)<sub>2</sub>]<sub>n</sub>, M<sub>A</sub> = 834,64 g/mol, kristal sistemi monoklinik, uzay grubu *P*2<sub>1</sub>/*n* olan bileşiğin birim hücre parametreleri: *a* = 0,97401 (10) nm, *b* = 2,6058 (37) nm, *c* = 1,45777 (8) nm,  $\beta$  = 96,108 (2)°, *V* = 3,678 (6) nm<sup>3</sup>, *Z* = 4 olarak belirlenmiştir [18].

[Tb<sub>2</sub>(*p*-MB)<sub>6</sub>(Phen)<sub>2</sub>] kompleksinin termal bozunmasını TG-DTC SEM ve IR tekniği ile Zhang ve çalışma grubu tarafından incelenmiştir [19].

### 2.2.6 *p*-Metilbenzoik Asidin Disprosiyum Kompleksleri

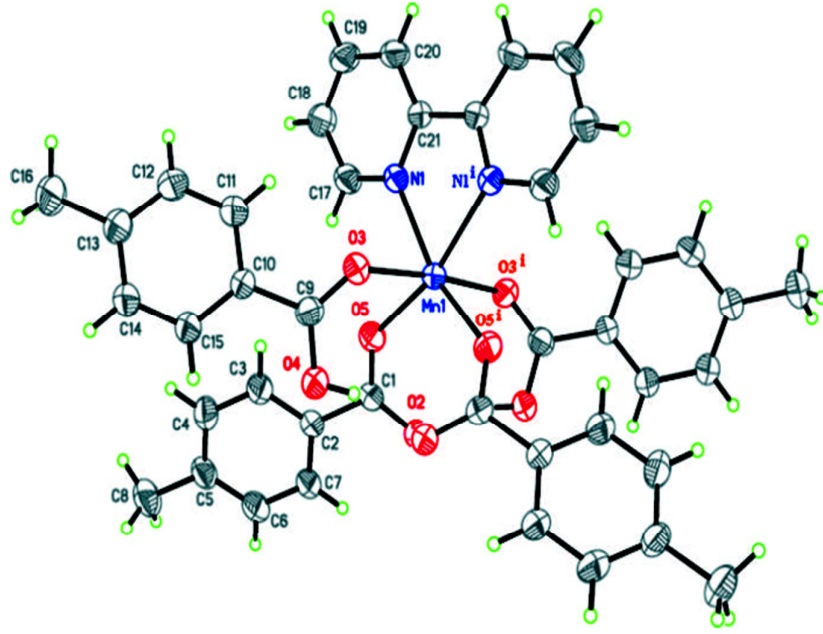
Li ve arkadaşları, [Dy<sub>2</sub>(*p*-MB)<sub>6</sub>(Phen)<sub>2</sub>] kompleksinin kristal yapısını incelemiştir. Asimetrik üniteye iki tane bağımsız binükleer kompleks vardır ve ikisinde simetri merkezlidir. Birincisinde Dy(III) iyonu iki köprü 4-metilbenzoat grubu ile ikincisinde ise Dy(III) iyonu dört köprü 4-metilbenzoat grubu ile bağlıdır. Kalan 4-metilbenzoat grubu ve 1,10-fenontrolin ünitesi bir metal iyonuna bidentat modunda koordinelidir [20].

### 2.2.7 *p*-Metilbenzoik Asidin Mangan Kompleksleri

[Mn(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(C<sub>10</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>)<sub>2</sub>] kristalini; mangan(II) klorür, 4-metilbenzoik asit ve 2,2'-bipiridil kullanarak Song ve arkadaşları sentezlemiştir [21].

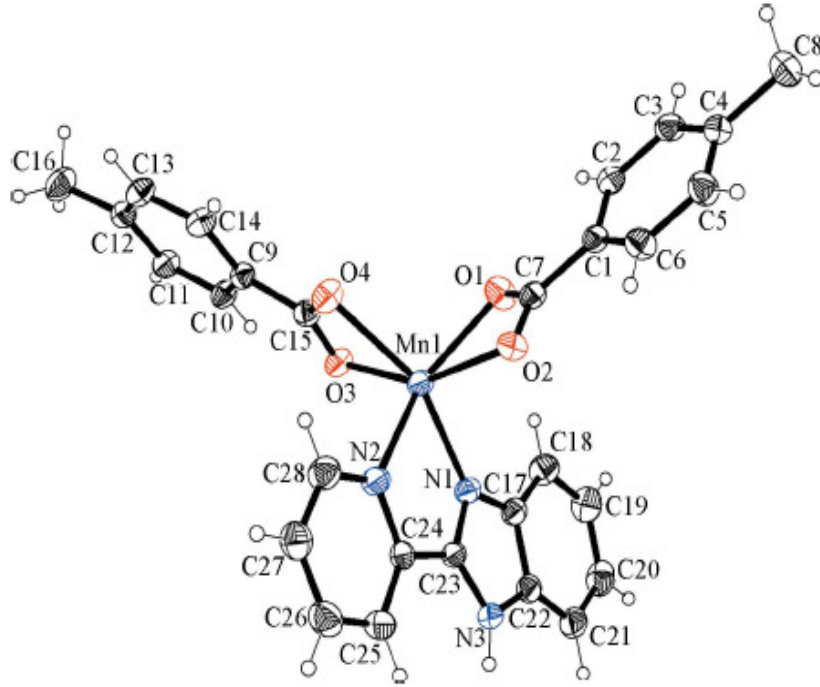
Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü [Mn(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(C<sub>10</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>)<sub>2</sub>], M<sub>A</sub> = 753,68 g/mol, kristal sistemi ortorombik, uzay grubu *Pccn* olan bileşiğin birim hücre parametreleri:  $a = 13,6159 (2) \text{ \AA}$ ,  $b = 14,2585 (2) \text{ \AA}$ ,  $c = 19,5732 (3) \text{ \AA}$ ,  $V = 3779,99 (10) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 4$ ,  $T = 273 \text{ K}$  (Şekil 2.9) [21].

Mononükleer kompleks olan [Mn(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(C<sub>10</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>)<sub>2</sub>] molekülünde, Mn(II) iyonu bir 2,2'-bipiridil ligandının iki N atomu ve dört 4-metilbenzoat anyonun dört karboksilat oksijen atomu ile bozuk oktahedral koordinasyon geometrisindedir. Kristal yapıda Moleküller arası hidrojen bağları ve  $\pi$ - $\pi$  etkileşimleri ile sağlamlaşmıştır [21].



Şekil 2.9.  $[\text{Mn}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N}_2)_2]$  kristalinin molekül yapısı [21].

Ma ve arkadaşları, mangan(II) klorür, 4-metilbenzoik asit ve 2-(2-Piridil)benzimidazol kullanarak  $[\text{Mn}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N}_2)_2]$  kompleksini sentezlemişlerdir [22].



Şekil 2.10.  $[\text{Mn}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_{12}\text{H}_9\text{N}_3)]$  kristalinin molekül yapısı [22].

Bu bileşikte Mn(II) merkezi üç bidentat şelat (iki *p*-toluat ligandı ve bir 2-(2-piridil)benzimidazol) ligandı ile çevrilidir. Bunlar çok bozulmuş oktahedral geometri göstermektedir (Şekil 2.10). *p*-Toluat ligandları arasındaki moleküller arası C-H $\cdots$ O hidrojen bağları ile moleküller sonsuz zincir şeklinde bağlıdır her iki komşu zincirler *p*-toluat ligandı ve 2-(2-Piridil)benzimidazol arasındaki N-H $\cdots$ O ve C-H $\cdots$ O hidrojen bağları ile daha fazla birbirine bağlanmıştır [22].

Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü [Mn(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(C<sub>10</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>)<sub>2</sub>], M<sub>A</sub> = 520,43 g/mol, kristal sistemi monoklinik, uzay grubu *P*2<sub>1</sub>/*c* olan bileşiğin birim hücre parametreleri: *a* = 7,582 (2) Å, *b* = 17,482 (5) Å, *c* = 18,731 (5) Å,  $\beta$  = 100,368 (4)°, *V* = 2442,3 (11) Å<sup>3</sup>, *Z* = 4, *T* = 295 K [22].

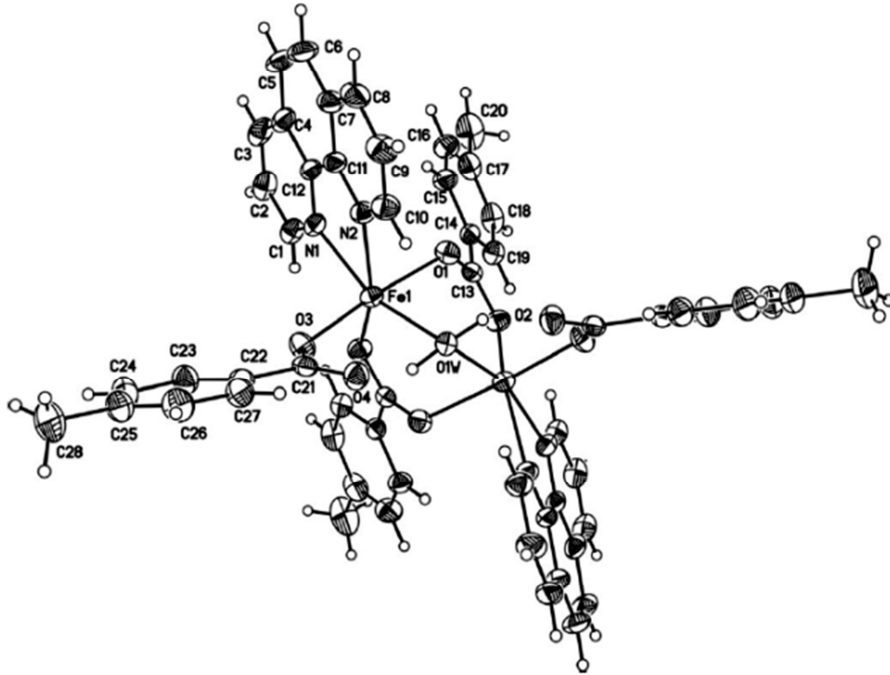
[Mn<sub>12</sub>O<sub>12</sub>(*p*-CH<sub>3</sub>-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-COO)<sub>16</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>]·3H<sub>2</sub>O ve [Mn<sub>12</sub>O<sub>12</sub>(*p*-CH<sub>3</sub>-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-COO)<sub>16</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>](*p*-CH<sub>3</sub>CC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-COOH) komplekslerini Sheila ve arkadaşları sentezlemişlerdir [23]. [Mn<sub>12</sub>O<sub>12</sub>(*p*-Me-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-COO)<sub>16</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>]·3H<sub>2</sub>O ve [Mn<sub>12</sub>O<sub>12</sub>(*p*-Me-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-COO)<sub>16</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>](*p*-Me-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-COOH) molekülleri, H<sub>2</sub>O ve karboksilat ligandının farklı pozisyonlarda oluşundan dolayı geometrik izomerdirler.

[Mn<sub>12</sub>O<sub>12</sub>(*p*-Me-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-COO)<sub>16</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>]·3H<sub>2</sub>O bileşiğinin kristal verileri: M<sub>A</sub> = 3139,46 g/mol, uzay grubu I2/a olan bileşiğin birim hücre parametreleri: *a* = 29,2794 (4) Å, *b* = 32,3271 (4) Å, *c* = 29,8738 (6) Å,  $\alpha$  = 90°,  $\beta$  = 99,2650 (10)°, *V* = 27907,2 (8) Å<sup>3</sup>, *Z* = 8, *T* = 223 K [23].

[Mn<sub>12</sub>O<sub>12</sub>(*p*-Me-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-COO)<sub>16</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>](*p*-Me-CC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>-COOH) bileşiğinin kristal verileri: M<sub>A</sub> = 3221,66 g/mol, uzay grubu C2/C olan bileşiğin birim hücre parametreleri: *a* = 40,4589 (5) Å, *b* = 18,2288 (2) Å, *c* = 26,5882 (4) Å,  $\alpha$  = 90°,  $\beta$  = 125,8359 (2)°, *V* = 15897,1 (4) Å<sup>3</sup>, *Z* = 4, *T* = 193 K.

## 2.2.8 *p*-Metilbenzoik Asidin Demir Kompleksleri

Feng [24] tarafından sentezlenen  $[\mu\text{-Aqua-bis}(\mu\text{-4-metilbenzoat-}\kappa^2\text{O},\text{O}')\text{bis}(4\text{-metilbenzoat-}\kappa\text{O})(1,10\text{-fenantrolin-}\kappa^2\text{N},\text{N}')]\text{demir(II)}$  binükleer komplekste Fe(II) iyonu, bir köprü su ligandı, iki 1,10-fenantrolin ligandının iki N atomu ve üç 4-metilbenzoat ligandının dört karboksilat O atomu ile bozulmuş oktahedral geometridir. Köprü ligand olan koordine su molekülü iki katlı eksene yerleşmiştir ve kompleks  $C_2$  moleküler simetrisi göstermektedir. Binükleer komplekste Fe $\cdots$ Fe mesafesi 3.490 (3) Å dur. Kristal yapı hidrojen bağı ve  $\pi\text{-}\pi$  etkileşimleri ile sağlamlaşmıştır (komşu kompleksin 4-metilbenzoat ünitesinin fenil halkası ve 1,10-fenantrolin halka arasındaki uzaklık 3,653 (2) Å ve diğer 1,10-fenantrolin halka sistemi arasındaki uzaklık ise 3.653 (2) Å dir).



Şekil 2.11.  $[\text{Fe}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})]$  kristalinin molekül yapısı [24].

Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü  $[\text{Fe}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})]$ ,  $M_A = 1030,67$  g/mol, kristal sistemi monoklinik, uzay grubu  $C2/c$  olan bileşiğin birim hücre parametreleri:  $a = 23,1987$  (6) Å,  $b = 15,7222$  (4) Å,  $c = 15,6464$  (4) Å,  $\beta = 121,0170$  (10)°,  $V = 4890,8$  (2) Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$ ,  $T = 296$  K (Şekil 2.11) [24].

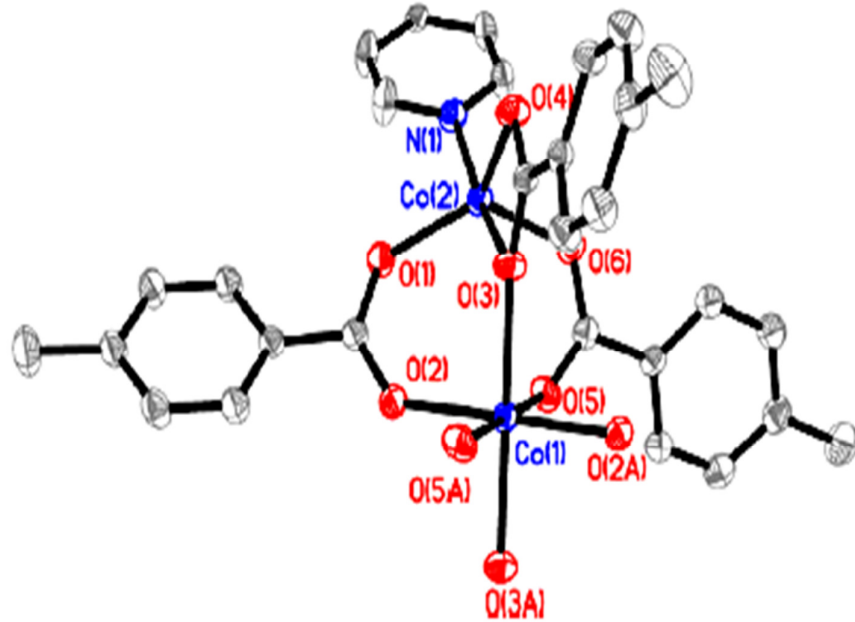


## 2.2.9 *p*-Metilbenzoik Asidin Kobalt Kompleksleri

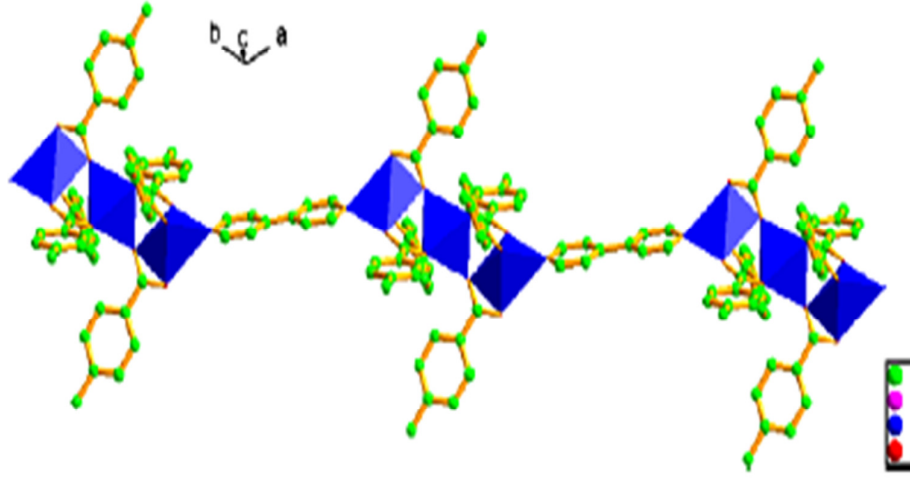
$\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ , 4,4'-bipiridin ve *p*-toluik asidin hidrotermal reaksiyonu yöntemi ile  $[\text{Co}_3(4,4'\text{-bipy})(4\text{-metilbenzoat})_6]$  koordinasyon polimeri Hu ve çalışma grubu tarafından elde edilmiştir (Şekil 2.12) [25].

Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü  $\text{C}_{58}\text{H}_{50}\text{N}_2\text{Co}_3\text{O}_{12}$ ,  $M_A = 1143,79$  g/mol, kristal sistemi triklinik, uzay grubu  $\bar{P}1$  olan bileşiğin birim hücre parametreleri:  $a = 10,115$  (2) Å,  $b = 12,000$  (2) Å,  $c = 12,392$  (3) Å,  $\alpha = 98,96$  (3)°,  $\beta = 108,94$  (3)°,  $\gamma = 107,91$  (3)°,  $V = 1298,01$  (5) Å<sup>3</sup>,  $Z = 1$ ,  $T = 293$  K [25].

Kompleksin kristallografik analizi yapının bir boyutlu polimer zinciri olduğunu göstermiştir. İki kristallografik Co(II) iyonu farklı koordinasyon düzenindedir. Co(1) altı karboksilat grubunun altı oksijen atomu ile biraz bozulmuş oktahedral geometrisi oluşturuyor iken, Co(2) ise üç karboksilat grubundan dört oksijen atomu ve bipiridin ligandından bir N atomu ile bipiramidal geometri oluşturmaktadır. Kristal yapıda hidrojen bağlarının bir boyutlu görünümü Şekil 2.13 de görülmektedir.

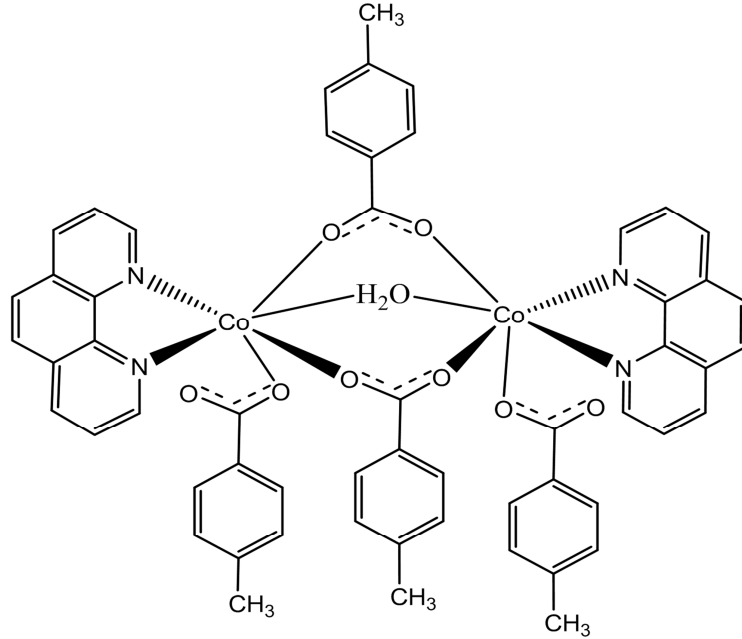


Şekil 2.12.  $[\text{Co}_3(4,4'\text{-bipy})(4\text{-metilbenzoat})_6]$  kristalinin molekül yapısı [25].



Şekil 2.13.  $[\text{Co}_3(4,4'\text{-bipy})(4\text{-metilbenzoat})_6]$  kompleksinin  $ac$  düzleminde bir boyutlu görünümü [25].

Zhang ve arkadaşlarının sentezlediği  $[\text{Co}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})]$  binükleer Co(II) kompleksi çift katlı eksene yerleşen koordine olmuş suyun oksijen atomu ile  $C_2$  simetrisi göstermektedir. İki Co(II) iyonu iki 4-metilbenzoat anyonları ve bir su molekülü ile köprü durumundadır (Şekil 2.14). Her Co(II) iyonu bozulmuş oktahedral koordinasyon geometrisi göstermektedir [26].

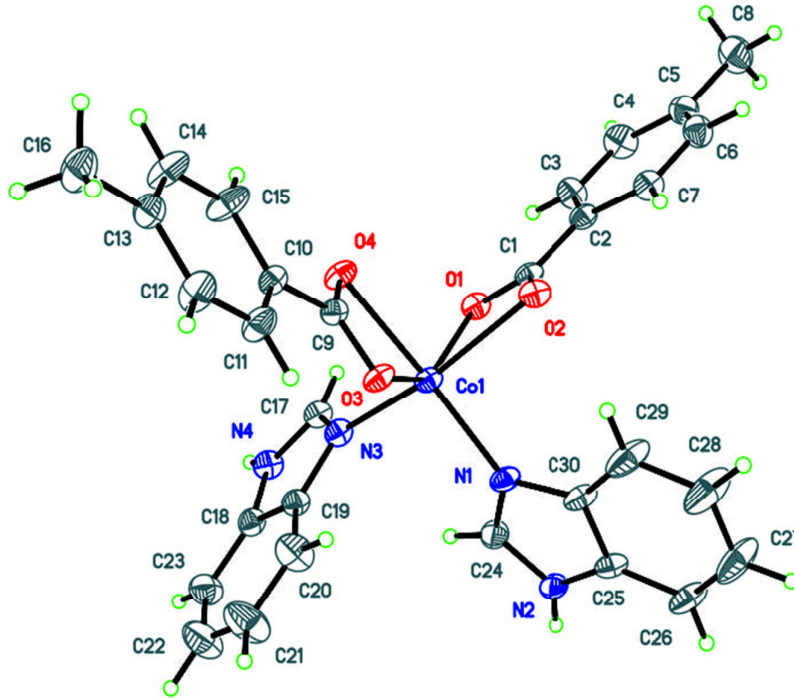


Şekil 2.14.  $[\text{Co}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})]$  kompleksinin molekül yapısı [26].

[Co(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>7</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>)<sub>2</sub>] kompleksinin yapısını Song ve arkadaşları aydınlatmışlardır [27].

Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü [Co(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>7</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>)<sub>2</sub>], M<sub>A</sub> = 565,48 g/mol, kristal sistemi triklinik, uzay grubu *P*2<sub>1</sub>/*n* olan bileşiğin birim hücre parametreleri: *a* = 13,3209 (4) Å, *b* = 14,5129 (4) Å, *c* = 15,2656 (4) Å, β = 107,020 (1)°, *V* = 2821,97 (14) Å<sup>3</sup>, *Z* = 4, *T* = 296 K [27].

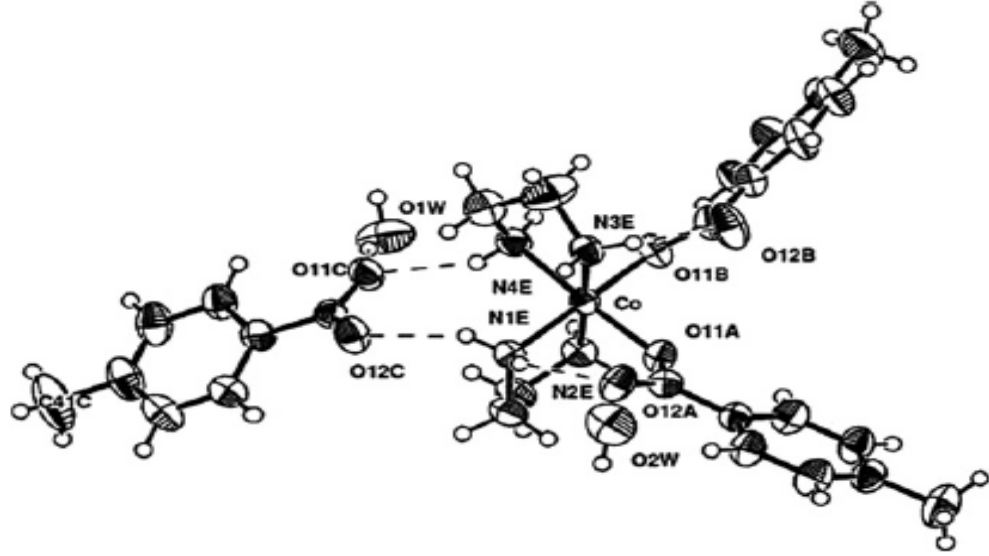
Mononükleer kompleks olan [Co(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>7</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>)<sub>2</sub>] bileşiğinde Co(II) iyonu iki 4-metilbenzoat anyonun dört karboksilat O atomu ve iki benzimidazolun iki N atomu ile oktahedral geometride koordine olmuştur. Kristal yapıda moleküller, moleküller arası N-H<sup>+</sup>⋯O hidrojen bağı vasıtasıyla üç boyutlu ağ biçimindedir (Şekil 2.15).



Şekil 2.15. [Co(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>7</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>)<sub>2</sub>] kristalinin molekül yapısı [27].

Sharma ve arkadaşları, [*trans*-Co(en)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>]Cl ile 3NaC<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub> kullanarak [*cis*-(Co(en)<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>)](C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)H<sub>2</sub>O kompleksini sentezlemiş ve tek kristal X-Ray yapı tayini ile karakterize etmişlerdir. Bu yapı iki *p*-metilbenzoat grubunun *cis*-biçiminde

olduğu kobalt(III) bileşiğinin ilk örneğidir. Katyon ve anyonlar zincirde kuvvetli N-H...O hidrojen bağları ile birleşmiştir (Şekil 2.16) [28].



Şekil 2.16.  $[cis(Co(en)_2(C_8H_7O_2)_2)](C_8H_7O_2) \cdot H_2O$  kristalinin molekül yapısı [28].

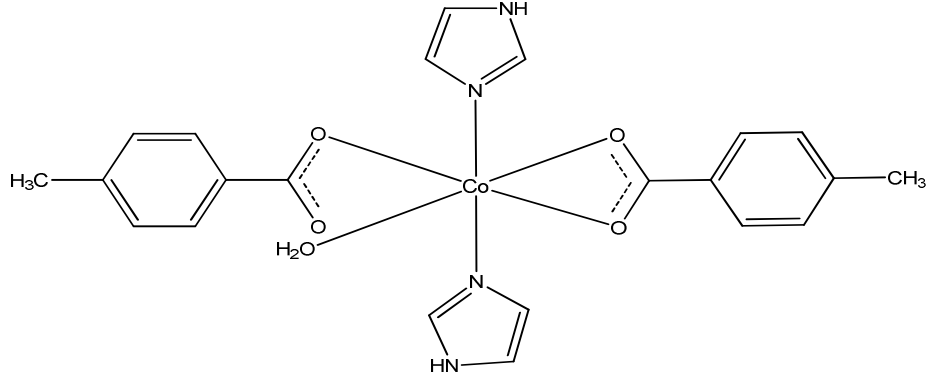
4-metilbenzoik asit ve 2,2'-bipiridin vasıtasıyla  $[Co(p-MB)_2(2,2'-bipy)(H_2O)] \cdot (H_2O)$  kompleksini sentezleyerek, elektrokimyasal özellikleri ve kristal yapısını Yang ve arkadaşları incelemişlerdir. Kristal yapıda, kobalt atomu iki 4-metilbenzoik asidin üç oksijen atomu, bir su molekülü ve 2,2'-bipiridin iki azot atomuyla koordine olarak bozulmuş kare-piramidal koordinasyon geometrisinde biçimlenmiştir [29].

Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü  $[Co(p-MB)_2(2,2'-bipy)(H_2O)]$ , kristal sistemi triklinik, uzay grubu  $\bar{P}1$  olan bileşiğin birim hücre parametreleri:  $a = 13,70479 (14) \text{ \AA}$ ,  $b = 1,1211 (2) \text{ \AA}$ ,  $c = 1,6718 (3) \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 103,806 (3)^\circ$ ,  $\beta = 90,795 (3)^\circ$ ,  $\gamma = 104,207 (3)^\circ$ ,  $V = 1,2399 (4) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 2$  [29].

Amineva ve arkadaşları, kobalt(II) toluatı sentezleyerek bileşiğin yapısını IR, UV ve termik analiz ile aydınlatmışlardır [30].

$[Co(C_8H_7O_2)_2(C_3H_4N_2)_2(H_2O)]$  kompleksini Song ve arkadaşları, kobalt(II) klorür, 4-metilbenzoat ve 1*H*-imidazol ligandı vasıtasıyla sentezlemişlerdir [31]. Aquabis(1*H*-imidazol- $\kappa N^3$ )bis(4-metilbenzoat- $\kappa^2 O, O'$ )kobalt(II) kompleksinde, Co(II) merkez atomu

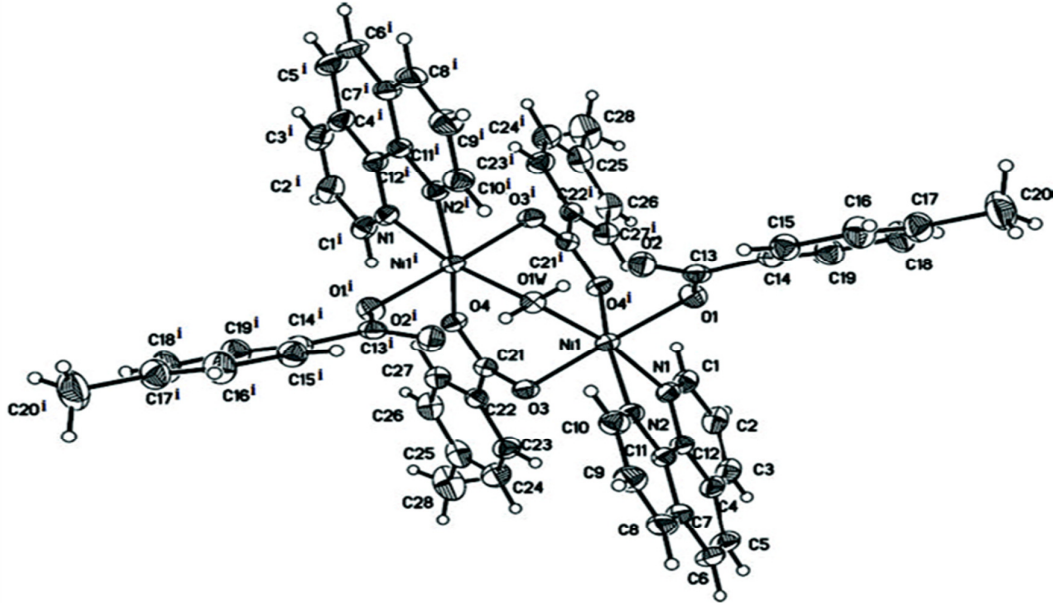
bir su molekülü, imidazol ligandının iki N atomu ve iki 4-metilbenzoatın üç O atomu ile bağlanarak bozuk oktahedral koordinasyon geometrisindedir. Moleküller arası O-H...O ve N-H...O hidrojen bağları ile  $\pi$ - $\pi$  etkileşimleriyle yapı sağlamlaşmıştır (Şekil 2.17) [31].



Şekil 2.17. [Co(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>N<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)] bileşiğinin molekül yapısı [31].

### 2.2.10 *p*-Metilbenzoik Asidin Nikel Kompleksleri

[Ni<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(C<sub>12</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>)<sub>2</sub>:H<sub>2</sub>O] kompleksini Song ve arkadaşları nikel(II) klorür, 4-metilbenzoat ve 1,10-fenantrolin vasıtasıyla sentezlemişler ve kristal yapısını X Ray ile aydınlatmışlardır [32].

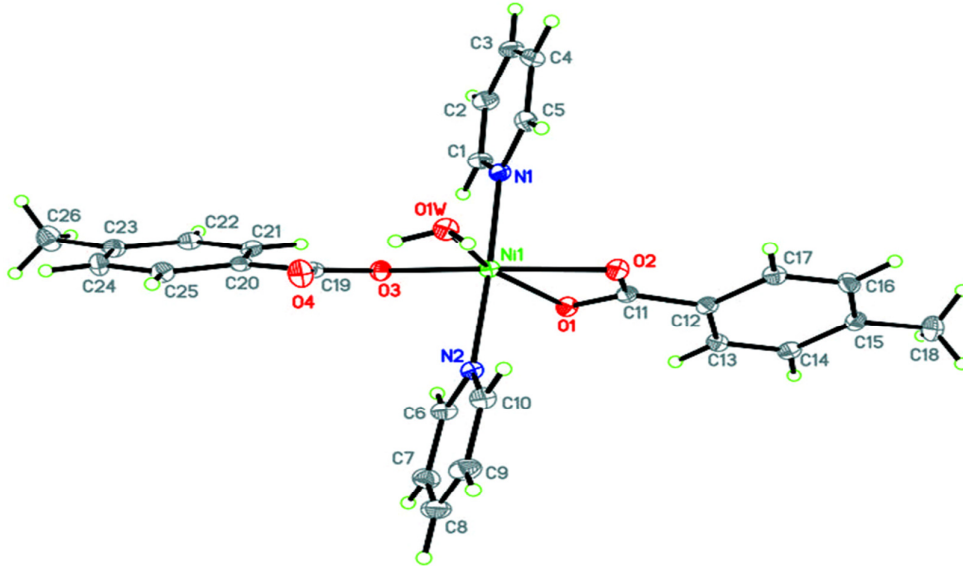


Şekil 2.18. [Ni<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(C<sub>12</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>)<sub>2</sub>:H<sub>2</sub>O] bileşiğinin kristal yapısı [32].

$\mu$ -Aqua- $\kappa^2O:O$ -di- $\mu$ -4-metilbenzoat- $\kappa^2O:O'$ -bis(4-metilbenzoat- $\kappa O$ )(1,10-fenantrolin- $\kappa^2N:N$ )nikel(II) dinükleer kompleksinde, bir köprü su molekülü, iki 1,10-fenantrolin ligandının iki azot atomu ve üç 4-metilbenzoat ligandının üç karboksilat oksijen atomu ile her bir Ni(II) atomunun koordinasyon sayısı altıdır. Dimerik kompleksde her bir Ni atomu bozuk oktahedral koordinasyon geometrisine sahiptir [32].

Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü  $[\text{Ni}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)_2\text{H}_2\text{O}]$ ,  $M_A = 1036,39$  g/mol, kristal sistemi triklinik, uzay grubu  $C2/c$  olan bileşiğin birim hücre parametreleri:  $a = 23,4180$  (6) Å,  $b = 15,4595$  (4) Å,  $c = 15,6140$  (3) Å,  $\beta = 122,351$  (1)°,  $V = 4775,4$  (2) Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$ ,  $T = 296$  K (Şekil 2.18) [32].

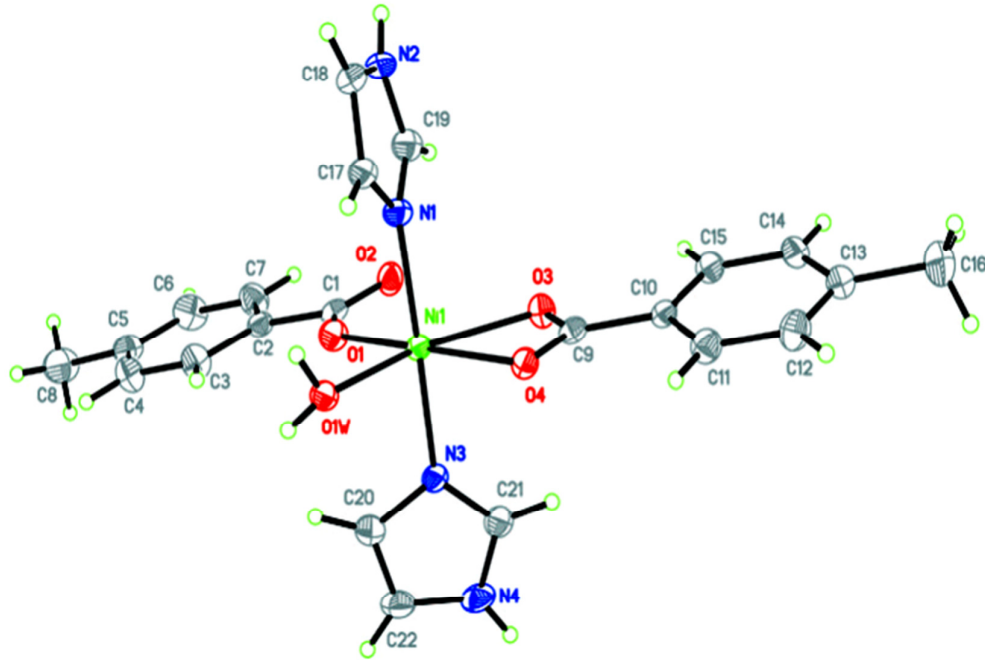
Song ve arkadaşlarının [33] sentezlediği aquabis(4-metilbenzoat)- $\kappa O;\kappa^2O,O'$ -bis(piridin- $\kappa O$ )nikel(II) mononükleer kompleksinde her bir Ni(II) iyonu, eksen pozisyonunda bir su molekülü, iki piridin ligandının iki N atomu ve biri tekdişli diğeri ise çiftişi olan 4-metilbenzoat ligandının üç karboksilat grubunun O atomuyla altı koordinelidir. Ekvator pozisyonundaki su molekülü ile koordine olmamış karboksilat grubunun oksijen atomu ile molekül içi hidrojen bağı vardır (Şekil 2.19).



Şekil 2.19.  $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_3\text{H}_5\text{N})_2\text{H}_2\text{O}]$  bileşiğinin kristal yapısı [33].

Bileşimin kristal verileri: molekül formülü  $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_5\text{H}_5\text{N})_2\text{H}_2\text{O}]$ ,  $M_A = 505,20$  g/mol, kristal sistemi triklinik, uzay grubu  $P2_1$  olan bileşimin birim hücre parametreleri:  $a = 13,6181$  (1) Å,  $b = 5,9526$  (1) Å,  $c = 15,1380$  (2) Å,  $\beta = 107,215$  (1)°,  $V = 1172,16$  (3) Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$ ,  $T = 296$  K [33].

Song ve arkadaşları tarafından nikel(II) klorür, 4-metilbenzoat ve imidazol vasıtasıyla  $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_3\text{H}_4\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})]$  sentezlenen aquabis(1*H*-imidazol- $\kappa\text{N}^3$ )bis(4-metilbenzoat)- $\kappa\text{O};\kappa\text{O},\text{O}'$ -nikel(II) mononükleer bileşiminde Ni atomu, oktahedral geometride bir su molekülü ve iki imidazolun iki N atomu, biri tekdişli diğeri iki dişli olan 4-metilbenzoat ligandının üç karboksilat O atomu ile koordinelidir [34].



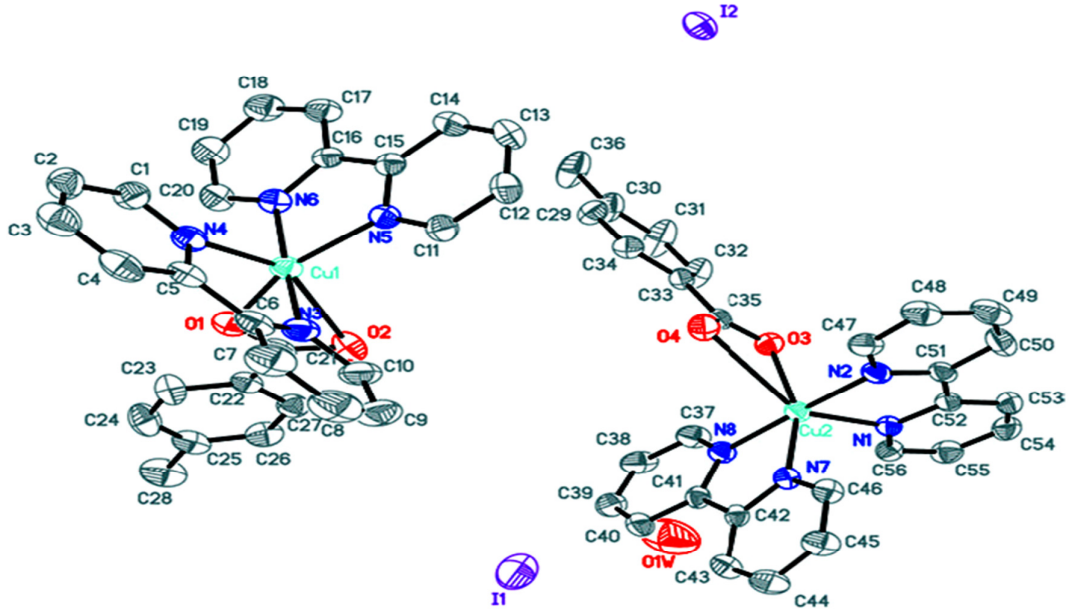
Şekil 2.20.  $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_3\text{H}_4\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})]$  bileşiminin kristal yapısı [34].

Bileşimin kristal verileri: molekül formülü  $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_3\text{H}_4\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})]$ ,  $M_A = 483,16$  g/mol, kristal sistemi triklinik, uzay grubu  $P2_1/n$  olan bileşimin birim hücre parametreleri:  $a = 18,9456$  (12) Å,  $b = 5,8756$  (4) Å,  $c = 20,3209$  (14) Å,  $\beta = 101,813$  (4)°,  $V = 2214,1$  (3) Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$ ,  $T = 296$  K (Şekil 2.20) [33].

## 2.2.11 *p*-Metilbenzoik Asidin Bakır Kompleksleri

Bakır(I) iyodür, 4-metilbenzoik asit ve 2,2'-bipiridin'in hidrotermal reaksiyonu yöntemi ile (2,2'-bipiridin- $\kappa^2N,N'$ )(4-metilbenzoat- $\kappa^2O,O'$ )bakır(II) iodat hemihidrat kompleksini Tang ve Deng sentezlemiştir [35].

Şekil 2.21.'de görülen bileşiğin asimetrik birimi, iki bağımsız kompleks molekülü, iki I<sup>-</sup> iyonu ve bir su molekülü ihtiva eder. Her bir Cu(II) atomu, iki 2,2'-bipiridin ligandından dört N atomları ve bir 4-metilbenzoat ligandından iki karboksilat O atomları vasıtasıyla düzensiz oktahedral koordinasyon geometrisine sahiptir. Kristal yapıda, Cu(I) başlangıç reaktantı, hidrotermal reaksiyonda Cu(II)'ye yükseltgenmiştir. Kristal yapıda benzen ve piridil halkası arasında (merkezler arası mesafe 3,79 (1) Å) ve diğer piridil halkası arasında (merkezler arası mesafe 3,87 (1) Å)  $\pi$ - $\pi$  etkileşmesi, ayrıca iyodür iyonu ve su molekülü arasında O-H...I hidrojen bağları bulunmaktadır.



Şekil 2.21. [Cu(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)(C<sub>10</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>)<sub>2</sub>]I·0.5H<sub>2</sub>O bileşiğinin kristal yapısı [35].

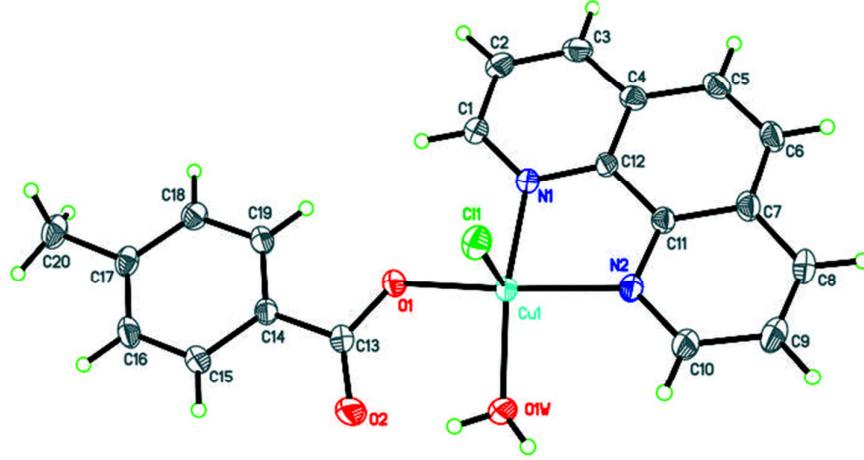
Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü [Cu(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)(C<sub>10</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>)<sub>2</sub>]I·0.5H<sub>2</sub>O, M<sub>A</sub> = 646,96 g/mol, kristal sistemi triklinik, uzay grubu  $\bar{P}1$  olan bileşiğin birim hücre parametreleri:  $a = 14,6698 (4) \text{ \AA}$ ,  $b = 15,3588 (4) \text{ \AA}$ ,  $c = 15,4224 (7) \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 100,943 (2)^\circ$ ,  $\beta = 114,345 (2)^\circ$ ,  $\gamma = 111,996 (2)^\circ$ ,  $V = 2680,64 (19) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 4$ ,  $T = 296 \text{ K}$  [35].



Song ve arkadaşları aquaklorido(4-metilbenzoat- $\kappa^2O$ )(1,10-fenantrolin- $\kappa^2N,N'$ )bakır(II) kompleksini sentezlemişlerdir [36].

Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü  $[\text{Cu}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)\text{Cl}(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)(\text{H}_2\text{O})]$ ,  $M_A = 423,35$  g/mol, kristal sistemi triklinik, uzay grubu  $P2_1/n$  olan bileşiğin birim hücre parametreleri:  $a = 10,9095$  (4) Å,  $b = 11,0546$  (4) Å,  $c = 15,2059$  (6) Å,  $\beta = 103,578$  (2)°,  $V = 1782,58$  (12) Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$ ,  $T = 296$  K [36].

Yapıda Cu(II) atomu, köşeli piramidal geometride olan, bir su, bir klorür anyonu, 1,1-fenantrolin ligandından, iki azot ve tekdişli 4-metilbenzoatın bir karboksilat oksijen atomuyla koordine olmuştur. Kristal yapıda C-H $\cdots$ Cl, C-H $\cdots$ O, O-H $\cdots$ Cl ve O-H $\cdots$ O hidrojen bağları, fenantrolin ve metil H atomları arasında C-H $\cdots$  $\pi$  etkileşimleri ve komşu 4-metilbenzoat birimleri ve fenantrolinin piridin halkalarının  $\pi$ -sistemleri arasında etkileşim (merkezler arası mesafe 3,79 (1) Å dir) görülmektedir (Şekil 2.22).

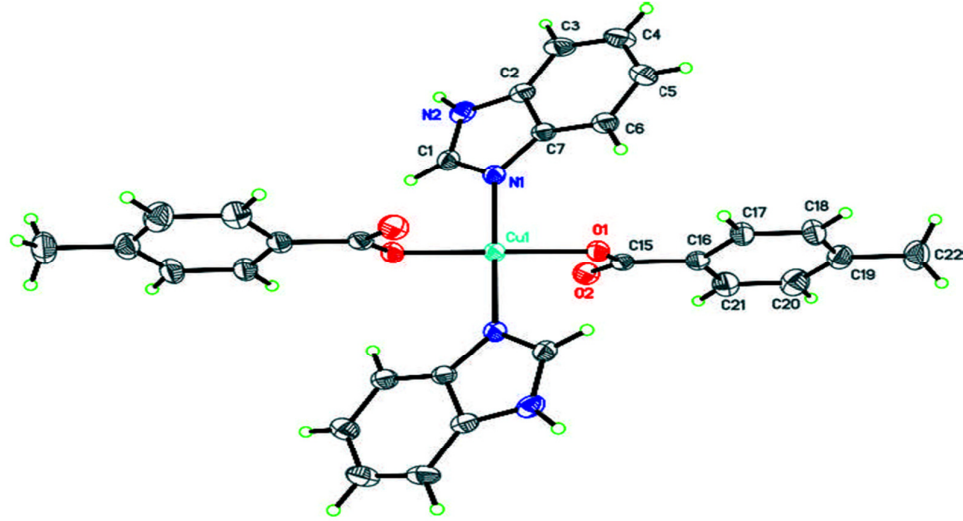


Şekil 2.22.  $[\text{Cu}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)(\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2)(\text{H}_2\text{O})]$  bileşiğinin kristal yapısı [36].

Song ve çalışma grubu, bakır(I) klorür, 4-metilbenzoat ve benzimidazol reaksiyonu vasıtasıyla bis(1*H*-benzimidazol- $\kappa^2N^3$ )bis(4-metilbenzoat- $\kappa^2O,O'$ )bakır(II) kompleksini sentezlemişlerdir [37].

Mononükleer kompleksde simetri merkezindeki Cu(II) atomu kare düzlem geometride iki benzimidazol ligandının iki azot atomu ve iki tekdişli 4-metilbenzoat ligandının iki

oksijen atomuyla koordine edilir. Kristal yapıda moleküller, moleküller arası N-H...O hidrojen bağları ve simetri merkezli imidazol halkalarının  $\pi$ - $\pi$  etkileşimleri (merkezler arasındaki mesafe 3.669 Å) ile *b* eksenine paralel biçimde zincir oluşturmaktadır (Şekil 2.23).



Şekil 2.23. [Cu(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>7</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>)] bileşiğinin kristal yapısı [37].

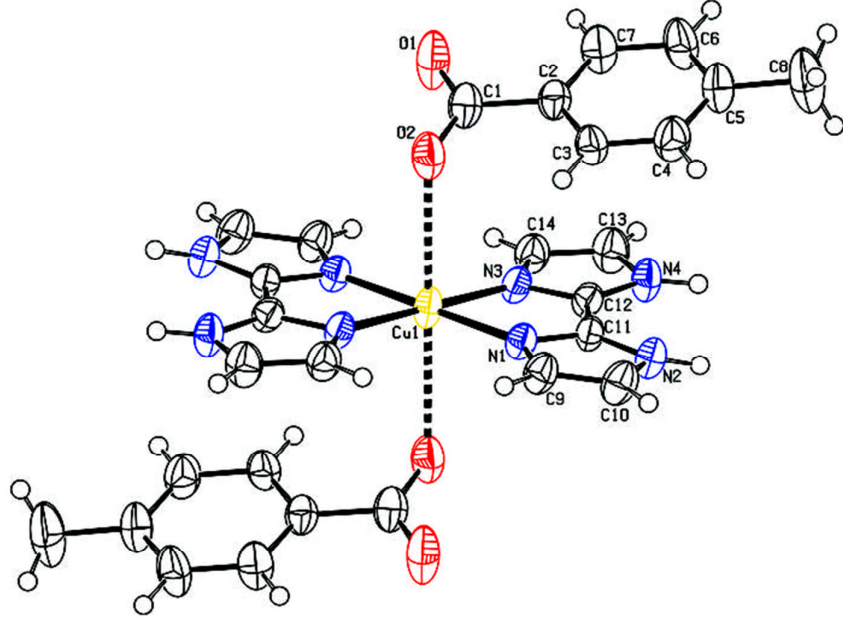
Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü [Cu(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>7</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>)<sub>2</sub>], M<sub>A</sub> = 570,10 g/mol, kristal sistemi triklinik, uzay grubu  $\bar{P}1$  olan bileşiğin birim hücre parametreleri: *a* = 7,2623 (2) Å, *b* = 7,6068 (1) Å, *c* = 12,9624 (2) Å,  $\alpha$  = 99,687 (2)°,  $\beta$  = 96,390 (1)°,  $\gamma$  = 104,776 (2)°, *V* = 673,54 (3) Å<sup>3</sup>, *Z* = 1, *T* = 296 [37].

Hui, bakır(II) klorür, 4-metilbenzoat ve 2,2'-biimidazol kullanarak bis(2,2'-bi-1*H*-imidazol- $\kappa^2N^3, N^3'$ )bis(4-metilbenzoat- $\kappa O$ )bakır(II) kompleksini sentezlemiştir [38].

Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü [Cu(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>4</sub>)<sub>2</sub>], M<sub>A</sub> = 602,11 g/mol, kristal sistemi triklinik, uzay grubu *P*2<sub>1</sub>/*n* olan bileşiğin birim hücre parametreleri: *a* = 12,2839 (9) Å, *b* = 7,3150 (5) Å, *c* = 14,9755 (11) Å,  $\beta$  = 93,673 (1)°, *V* = 1342,89 (17) Å<sup>3</sup>, *Z* = 2, *T* = 296 K [38].

Kompleksde Cu(II) iyonu, iki zayıf bağlı 4-metilbenzoat anyonu ve iki *N,N'* bidentat 2,2'-biimidazol ligandıyla koordine olarak *trans*-CuO<sub>2</sub>N<sub>4</sub> şeklinde oktahedral geometrisi

tamamlanmıştır. Kristalde komşu moleküller [010] düzleminde N-H...O hidrojen bağları ile zincir şeklinde bağlıdır (Şekil 2.24).



Şekil 2.24.  $[\text{Cu}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_4)_2]$  bileşiğinin kristal yapısı [38].

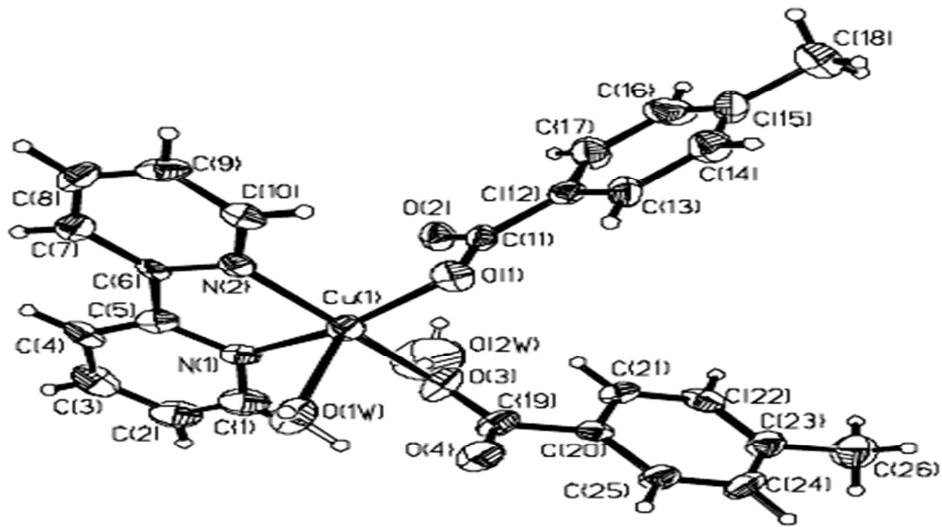
$[\text{Cu}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_{14}\text{NO}_3)_2]\cdot\text{H}_2\text{O}$  bileşiğini Kirilov ve arkadaşları sentezlemişlerdir. Bileşik simetri merkezli binükleer  $[\text{Cu}_2(\text{H}_2\text{tea})_2]^{+2}$  ile iki 4-metilbenzoat anyonundan oluşmaktadır.  $\text{H}_2\text{tea}$  ( $\text{H}_3\text{tea}$ -trietanolamin) ligandının tüm oksijen atomları, 4-metilbenzoat anyonunun bir oksijen atomu ve iki su molekülü O-H...O bağları ile bağlıdır. Böylece bir boyutlu hidrojen bağı zincirleri oluşmakta bu ise binükleer moleküler ünitesini sağlamlaştırmaktadır. Ayrıca her bakır atomu bozunmuş tetragonal bipiramidal geometriye sahiptir [39].

Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü  $[\text{Cu}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_{14}\text{NO}_3)_2]\cdot\text{H}_2\text{O}$ ,  $M_A = 729,75$  g/mol, kristal sistemi triklinik, uzay grubu  $\bar{P}1$  olan bileşiğin birim hücre parametreleri:  $a = 7,5137$  (5) Å,  $b = 7,9384$  (5) Å,  $c = 14,3761$  (10) Å,  $\alpha = 75,422$  (3)°,  $\beta = 87,976$  (4)°,  $\gamma = 70,805$  (4)°,  $V = 782,69$  (9) Å<sup>3</sup>,  $Z = 1$ ,  $T = 120$  K [39].

Manhas ve arkadaşları, bakır toluat ile piperazin türevlerini (1-metilpiperazin, 1,4-dimetilpiperazin, 2,6-dimetilpiperazin ve 1-fenilpiperazin) kullanarak [40] ve bakır toluat ile morfolin türevleri (4-metilmorfolin, 4-etilmorfolin ve 2,6-dimetilmorfolin) kullanarak yeni kompleksler sentezlemiş olup fizikokimyasal ve spektroskopik yöntemler ile komplekslerin yapısını aydınlatmışlardır [41].

Yang ve çalışma ekibi,  $[\text{Cu}(\text{PTA})(\text{Phen})_2(p\text{-MBA})(\text{H}_2\text{O})]$  (Phen = 1,10-fenantrolin, PTA = teraftalik asit, *p*-MBA = *p*-toluik asit) kompleksinin yapısını tek kristal X-Ray difraksiyonu ile çözmüşlerdir. Kristal yapısında bakır iyonları teraftalik asidin iki oksijen atomu ve iki 1,10-fenantrolin molekülünün dört azot atomu ile bozulmuş oktahedral koordinasyon yapısında koordine edilir. Kompleksin siklik voltametrik özelliği de incelenmiştir. Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü  $\text{C}_{48}\text{H}_{40}\text{CuN}_4\text{O}_{10}$ ,  $M_A = 896,38$  g/mol, kristal sistemi monoklinik, uzay grubu  $C2/c$  olan bileşiğin birim hücre parametreleri:  $a = 1,7786$  (3) Å,  $b = 1,9125$  (3) Å,  $c = 1,3899$  (2) Å,  $\beta = 114,686$  (2)°,  $V = 4,2957$  (12) Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$  [42].

$[\text{Cu}(\text{bipy})(p\text{-MBA})_2\text{H}_2\text{O}]$  (bipy = 2,2'-bipiridin, *p*-MBA = 4-metilbenzoat) bileşiğinin kristal yapısını Liu ve arkadaşları aydınlatmışlardır. Kompleksin doğal balık sperm DNA'sına etkisini elektronik absorpsiyon spektroskopisi, elektrokimyasal ve viskozite deneyleri ile incelemişlerdir. Kompleksin DNA ile etkileşimi, 2,2'-bipiridin halkaları ile DNA baz çiftleri arasında interkalasyon modunda gerçekleşmektedir [43].



Şekil 2.25.  $[\text{Cu}(\text{bpy})(\text{pba})_2\text{H}_2\text{O}]$  bileşiğinin kristal yapısı [43].

Bileşğin kristal verileri: molekül formülü  $C_{26}H_{25}CuN_2O_{5,5}$ ,  $M_A = 517,02$  g/mol, kristal sistemi triklinik, uzay grubu  $\bar{P}1$  olan bileşğin birim hücre parametreleri:  $a = 7,0230$  (14) Å,  $b = 11,167$  (2) Å,  $c = 16,700$  (3) Å,  $\alpha = 103,89(3)^\circ$ ,  $\beta = 90,77$  (3)°,  $\gamma = 104,28$  °,  $V = 1228,4$  (4) Å<sup>3</sup>,  $Z = 1$ ,  $T = 293$  K (Şekil 2.25) [43].

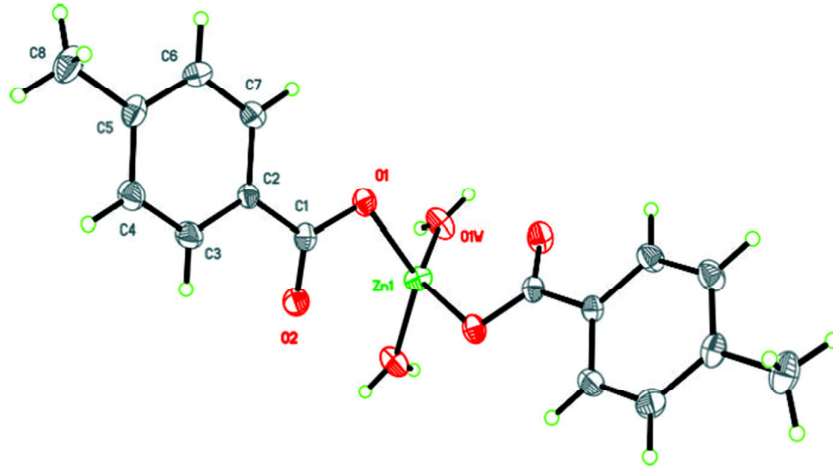
Molekülün kristal yapısında bakır(II) iyonu iki *p*-metilbenzoatın iki oksijen atomu ile 2,2'-bipiridin'in iki azot atomu ve bir su molekülü ile koordine edilir [43].

### 2.2.12 *p*-Metilbenzoik Asidin Gümüş Kompleksi

$[Ag_2(C_8H_7O_2)_2(C_{10}H_9N_3)]_n$  molekülünü Odoko ve arkadaşları sentezlemişlerdir. Polinükleer polimerik kompleks olan  $[Ag_2(C_8H_7O_2)_2(C_{10}H_9N_3)]_n$ 'de, iki Ag(I) atomu bozulmuş kare-düzlem koordinasyon göstermektedir [44].

### 2.2.13 *p*-Metilbenzoik Asidin Çinko Kompleksleri

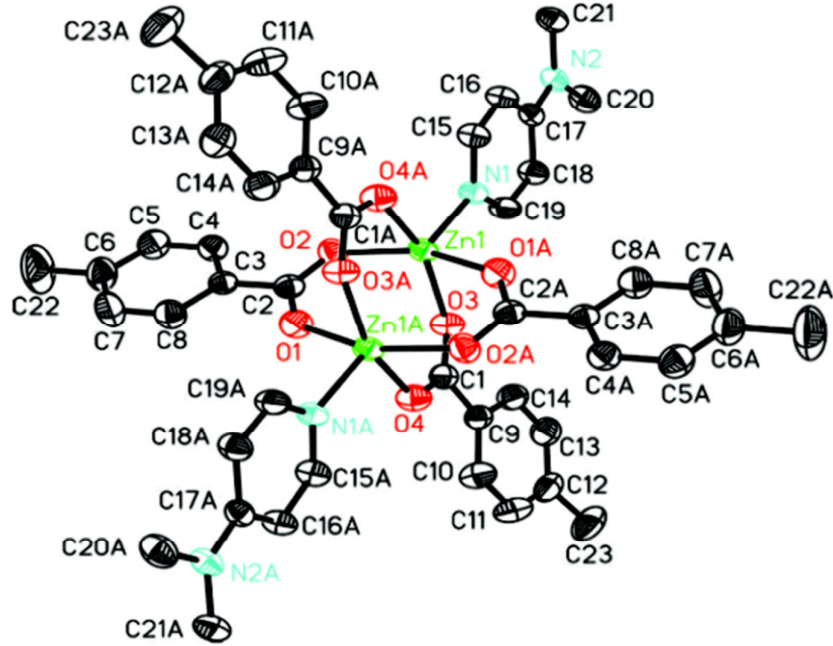
Diaquabis(4-metilbenzoat- $\kappa O$ )çinko(II) kompleksini Ma ve arkadaşları sentezlemişlerdir. Mononükleer kompleks olan [Diaquabis(4-metilbenzoat- $\kappa O$ )çinko(II)]'de, karboksilat grup tekdişli bağlanarak en iyi tetrahedral geometrisini oluşturmuştur. Komşu moleküller üç boyutlu ağ şeklinde O-H...O hidrojen bağı ile bağlanmıştır [45].



Şekil 2.26.  $[Zn(C_8H_7O_2)_2(H_2O)_2]$  bileşğinin kristal yapısı [45].

Bileşğin kristal verileri molekül formülü  $[\text{Zn}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ ,  $M_A = 371,70$  g/mol, kristal sistemi monoklinik, uzay grubu  $C2/c$  olan bileşğin birim hücre parametreleri:  $a = 26,8432$  (5) Å,  $b = 5,0600$  (1) Å,  $c = 12,0609$  (2) Å,  $\beta = 106,806$  (1)°,  $V = 1568,22$  (5) Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$ ,  $T = 273$  K (Şekil 2.26) [45].

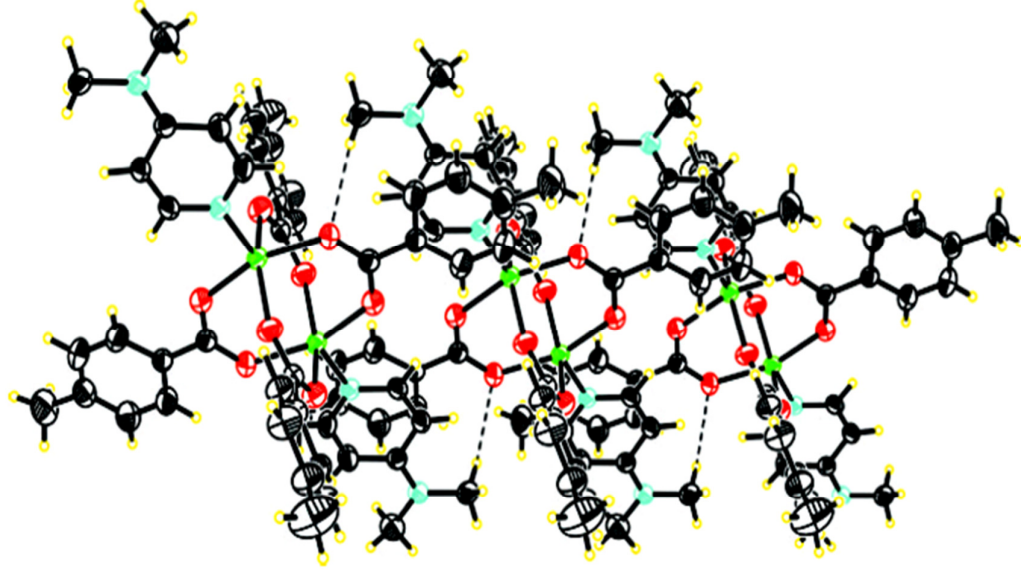
Bai ve arkadaşları Tetrakis(*μ*-4-metilbenzoat- $\kappa O:O'$ )-bis[4-(dimetilamino)piridin- $\kappa N^1$ ]çinko(II) kompleksinin yapısını X-Ray ile aydınlatmışlardır.  $[\text{Zn}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{C}_7\text{H}_{10}\text{N}_2)_2]$  binükleer kompleksinde iki Zn atomu [ $\text{Zn} \cdots \text{Zn} = 3.0287$  (6) Å] dört *p*-metilbenzoat ligandıyla köprü durumundadır (Şekil 2.26). Her bir Zn(II) atomu komşu dört oksijen atomu ile bozulmuş kare düzlem düzenindeyken 4-(dimetilamino)piridin ligandının piridin N atomu ile kare piramidal koordinasyona tamamlanmaktadır [46].



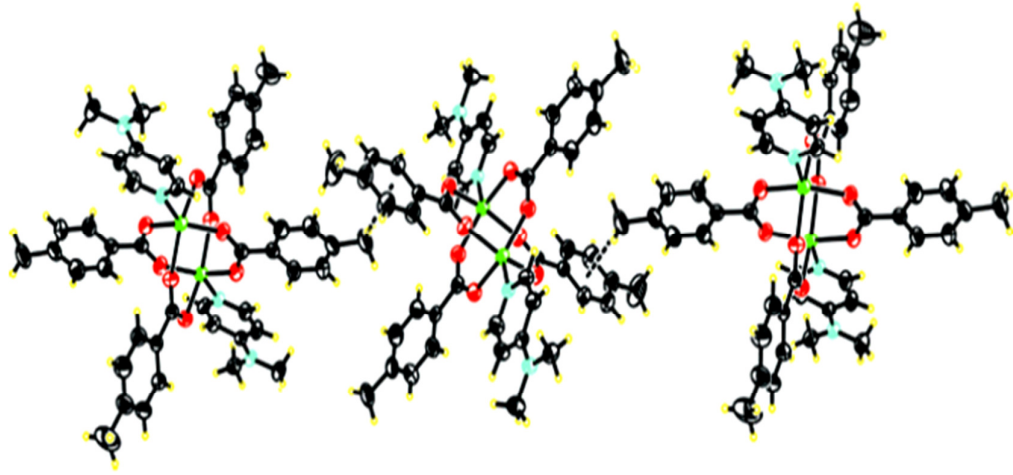
Şekil 2.27.  $[\text{Zn}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{C}_7\text{H}_{10}\text{N}_2)_2]$  bileşğinin kristal yapısı [46].

Bileşğın kristal verileri: molekül formülü  $[\text{Zn}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{C}_7\text{H}_{10}\text{N}_2)_2]$ ,  $M_A = 915,66$  g/mol, kristal sistemi monoklinik, uzay grubu  $P2_1/c$  olan bileşğın birim hücre parametreleri:  $a = 8,9311$  (18) Å,  $b = 9,967$  (2) Å,  $c = 24,756$  (5) Å,  $\beta = 90,64$  (3)°,  $V = 2203,5$  (5) Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$  [46] (Şekil 2.27).

Kristal yapıda, moleküller arası zayıf C-H $\cdots$ O etkileşimleri ile sınırsız zincir şeklinde moleküller birbirine bağlıdır (Şekil 2.28-29) [46].



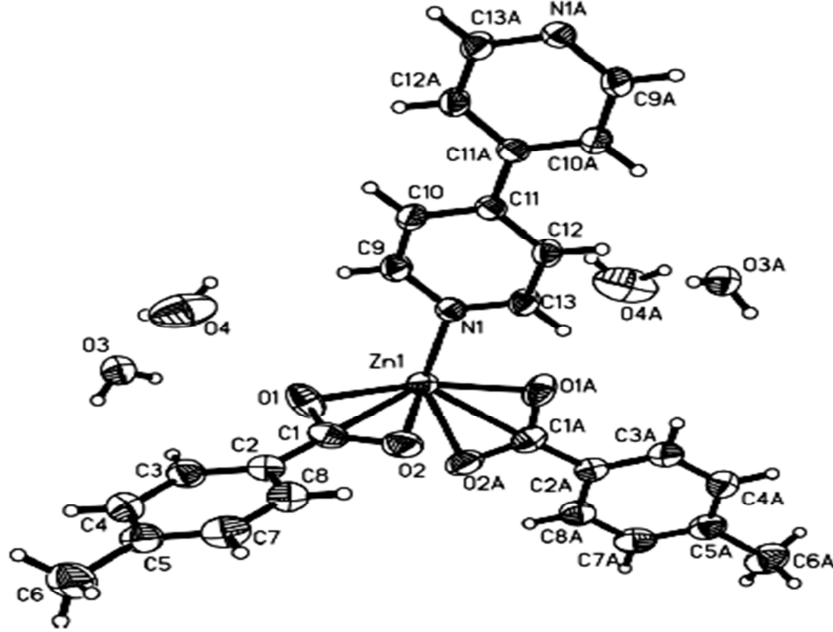
Şekil 2.28.  $[Zn_2(C_8H_7O_2)_4(C_7H_{10}N_2)_2]$  bileşiğinin moleküller arası C-H $\cdots$ O etkileşiminin gösterimi [46].



Şekil 2.29.  $[Zn_2(C_8H_7O_2)_4(C_7H_{10}N_2)_2]$  bileşiğinin moleküller arası C-H $\cdots$  $\pi$  etkileşiminin gösterimi [46].

$[Zn(C_7H_7O_2)_2(C_{10}H_8N_2)] \cdot 4H_2O$  kompleksini Li ve arkadaşları sentezleyerek kristal yapısını çözmüşlerdir. *Catena*-Poli[[[bis(4-metilbenzoat- $\kappa O:O'$ )çinko(II)]- $\mu$ -4,4'-bipiridin- $\kappa^2 N:N'$ ]tetrahidrat] kompleksinin asimetrik ünitesi, iki 4-metilbenzoat anyonları ile iki şelat 4,4'-bipiridin iki azot atomu ile kuvvetli koordine olarak aşırı

bozulmuş oktahedral geometrideki Zn(II) metalini içermektedir. Kristal yapısındaki su molekülleri C-H...O hidrojen bağı ile bir boyutlu zincir şeklinde biçimlenmektedir (Şekil 2.30) [47].

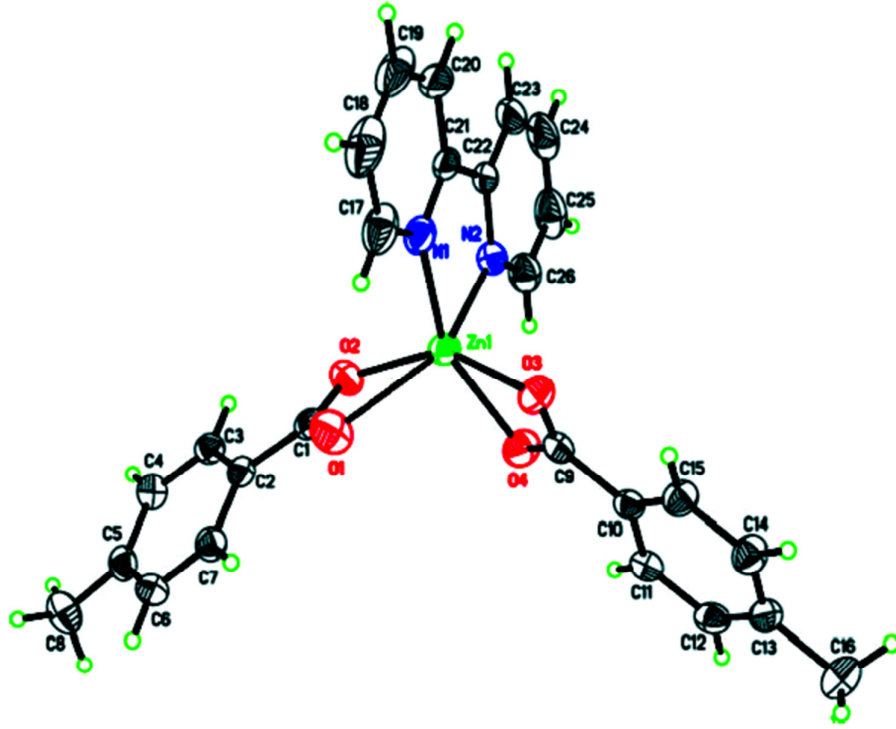


Şekil 2.30.  $\{[Zn(C_7H_7O_2)_2(C_{10}H_8N_2)] \cdot 4H_2O\}_n$  bileşiğinin kristal yapısı [47].

Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü  $[Zn(C_7H_7O_2)_2(C_{10}H_8N_2)] \cdot 4H_2O$ ,  $M_A = 563,89$  g/mol, kristal sistemi monoklinik, uzay grubu  $C2/c$  olan bileşiğin birim hücre parametreleri:  $a = 12,024 (5) \text{ \AA}$ ,  $b = 18,803 (8) \text{ \AA}$ ,  $c = 12,283 (5) \text{ \AA}$ ,  $\beta = 98,063 (6)^\circ$ ,  $V = 2750 (2) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 4$ ,  $T = 298 \text{ K}$  [47].

Çinko klorür, 4-metilbenzoik asit ve 2,2'-bipiridin kullanarak  $[Zn(C_7H_7O_2)_2(C_{10}H_8N_2)]$  kompleksini elde eden Shao ve arkadaşları kompleksin kristal yapısını çözmüşlerdir. (2,2'-Bipiridin- $\kappa^2N:N'$ )bis(4-metilbenzoat- $\kappa^2O:O'$ )çinko(II) kompleksinde, Zn(II) atomu, iki şelat 4-metilbenzoat ligandının dört oksijen atomu ve iki 2,2'-bipiridin ligandının iki azot atomu ile koordine olarak bozuk oktahedral geometrisini göstermektedir. C-H...O hidrojen bağları üç boyutlu supramoleküler yapıda molekülleri birbirlerine bağlamaktadır (Şekil 2.31) [48].

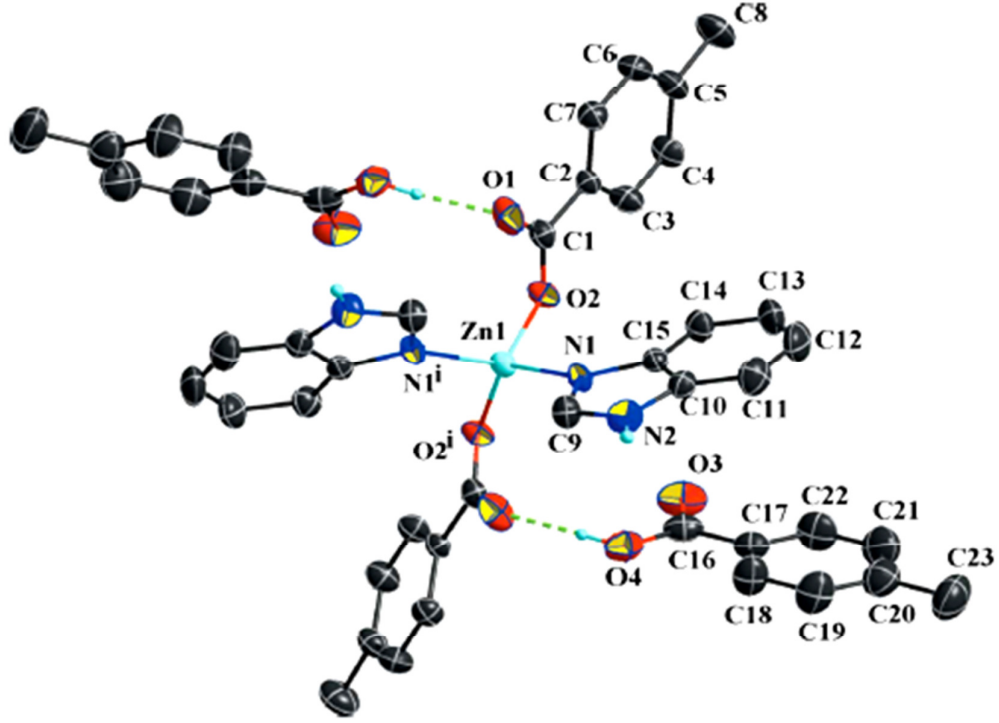




Şekil 2.31.  $[Zn(C_8H_7O_2)_2(C_{10}H_8N_2)]$  bileşiğinin kristal yapısı [48].

Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü  $[Zn(C_7H_7O_2)_2(C_{10}H_8N_2)]$ ,  $M_A = 491,83$  g/mol, kristal sistemi triklinik, uzay grubu  $\bar{P}1$  olan bileşiğin birim hücre parametreleri:  $a = 7,6172 (3) \text{ \AA}$ ,  $b = 9,8211 (4) \text{ \AA}$ ,  $c = 15,7595 (6) \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 79,130 (2)^\circ$ ,  $\beta = 83,977 (2)^\circ$ ,  $\gamma = 79,958 (2)^\circ$ ,  $V = 1136,90 (8) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 2$ ,  $T = 296 \text{ K}$  [48].

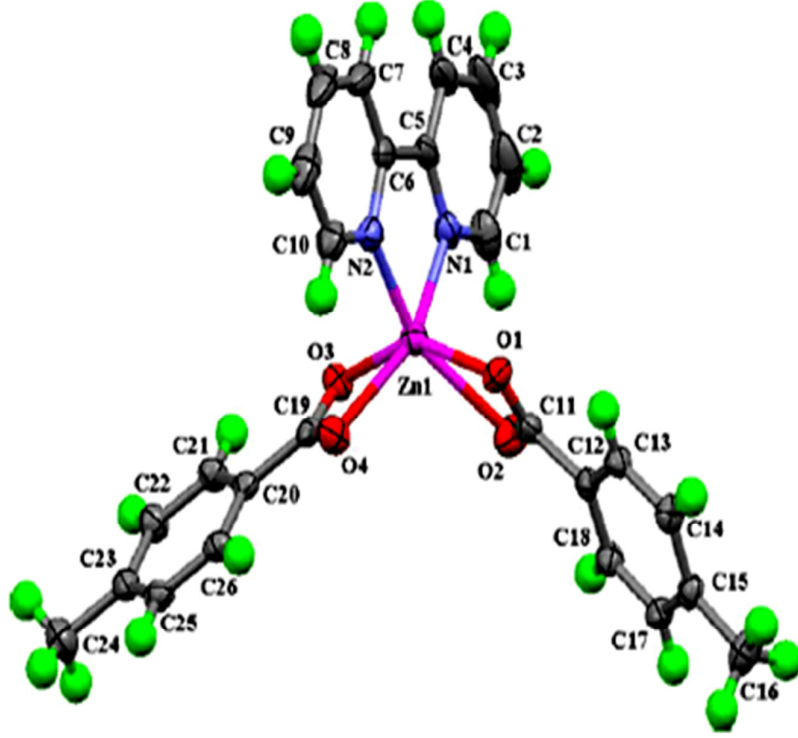
$[Zn(C_8H_7O_2)_2(C_7H_6N_2)_2] \cdot 2C_8H_8O_2$  kompleksini çinko asetat, 4-metilbenzoik asit ve benzimidazol vasıtasıyla Gu ve arkadaşları sentezlemiş ve kristal yapısını çözmüşlerdir. Bis(1*H*-imidazol- $\kappa N^3$ )bis(4-metilbenzoat- $\kappa O$ )çinko(II)4-metilbenzoik asit disolvat mononükleer kompleksinde Zn(II) atomu, iki monodentat 4-metilbenzoat ligandından iki oksijen atomu ve iki benzimidazol molekülünden iki azot atomu ile bozuk tetrahedral bir konfigürasyon göstermektedir. Ayrıca koordine olmamış iki 4-metilbenzoik asit molekülü bulunmaktadır. Kristal yapıda, 4-metilbenzoik asit molekülleri, N-H $\cdots$ O ve O-H $\cdots$ O hidrojen bağları ile moleküller birbirleri ile bağlanarak supramoleküler yapısı oluşturmaktadır (Şekil 2.32) [49].



Şekil 2.32.  $[Zn(C_8H_7O_2)_2(C_7H_6N_2)_2] \cdot 2C_8H_8O_2$  bileşiğinin kristal yapısı [49].

Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü  $[Zn(C_8H_7O_2)_2(C_7H_6N_2)_2] \cdot 2C_8H_8O_2$ ,  $M_A = 844,21$  g/mol, kristal sistemi monoklinik, uzay grubu  $C2/c$  olan bileşiğin birim hücre parametreleri:  $a = 27,8162$  (15) Å,  $b = 6,0773$  (3) Å,  $c = 24,8610$  (6) Å,  $\beta = 97,141$  (3)°,  $V = 4170,1$  (4) Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$ ,  $T = 293$  K [49].

Zhou ve arkadaşları, çinko klorat, 4-metilbenzoik asit ve 2,2'-bipy vasıtasıyla  $[Zn(p\text{-ba})_2(2,2'\text{-bipy})]$  kompleksini sentezlemişlerdir.  $[Zn(p\text{-ba})_2(2,2'\text{-bipy})]$  ( $p\text{-ba}$ = 4-metilbenzoik asit) kompleksinde, Zn(II) iyonu, iki 4-metilbenzoat ligandının dört O atomu (O1, O2 ve O3, O4) ve 2,2'-bipy molekülünün iki N atomu (N1 ve N2) ile altıkoordineli bozuk oktahedral geometri göstermektedir [50].



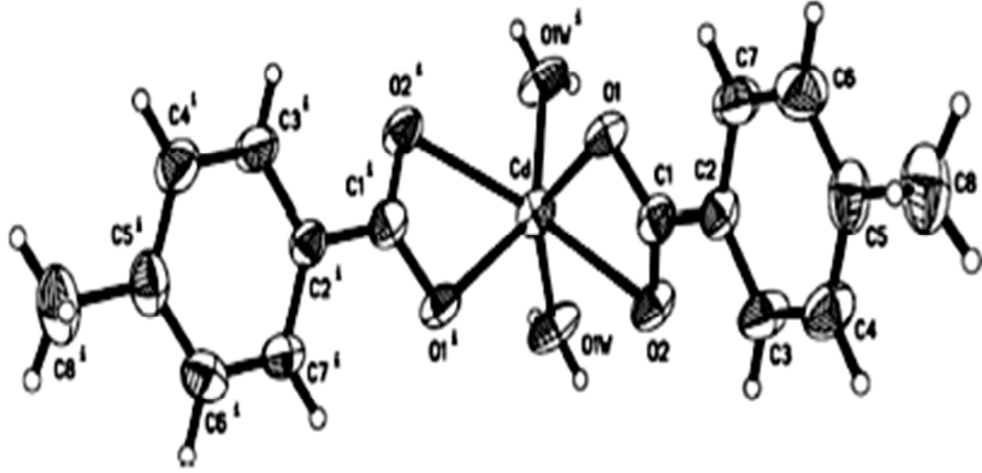
Şekil 2.33.  $[\text{Zn}(\text{p-MB})_2(2,2'\text{-bipy})]$  bileşiğinin kristal yapısı [50].

Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü  $[\text{Zn}(\text{p-MB})_2(2,2'\text{-bipy})]$ ,  $M_A = 491,83 \text{ g/mol}$ , kristal sistemi triklinik, uzay grubu  $\bar{P}1$  olan bileşiğin birim hücre parametreleri:  $a = 7,6208 (4) \text{ \AA}$ ,  $b = 9,8140 (6) \text{ \AA}$ ,  $c = 15,7439 (9) \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 79,936 (3)^\circ$ ,  $\beta = 83,929 (3)^\circ$ ,  $\gamma = 79,936 (3)^\circ$ ,  $V = 1135,1 (4) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 2$  (Şekil 2.33) [50].

Ma ve arkadaşları,  $[\text{Zn}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N}_2)]$  bileşiğini sentezlemişlerdir [51]. *Catena-*poli[[tris( $\mu$ -4-metilbenzoat)- $\kappa^2\text{O}:\text{O};\kappa^4\text{O}:\text{O}'$ -(4-metilbenzoat)- $\kappa^2\text{O},\text{O}'$ ]diçinko(II)]( $\mu$ -4,4'-bipiridin- $\kappa^2\text{N}:\text{N}'$ )] kompleksinde, asimetrik ünite benzersiz iki Zn(II) iyonu, dört 4-metilbenzoat ligandı ve bir 4,4'-bipy ligandı içerir. Dört 4-metilbenzoat ligandı iki Zn(II) merkezine dinükleer ünite biçiminde bağlıdır. Koordinasyon polimerinde moleküller üç boyutlu supramoleküler ağ yapısında  $\text{C-H}\cdots\text{O}$  hidrojen bağları ile birbirlerine bağlıdır [51].

### 2.2.14 *p*-Metilbenzoik Asidin Kadmiyum Kompleksleri

Huang ve arkadaşları,  $[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  molekülünü sentezlemişlerdir [52]. Mononükleer kompleksde Cd(II) atomu  $C_2$  simetrisine sahip olup iki su molekülü ve iki 4-metilbenzoat ligandının dört karboksilat oksijen atomu ile koordine olarak bozulmuş oktahedral geometrisi göstermektedir. Moleküller arası O-H $\cdots$ O hidrojen bağı vasıtası ile moleküller supramoleküler tarzda birbirine bağlıdır (Şekil 2.34) [52].



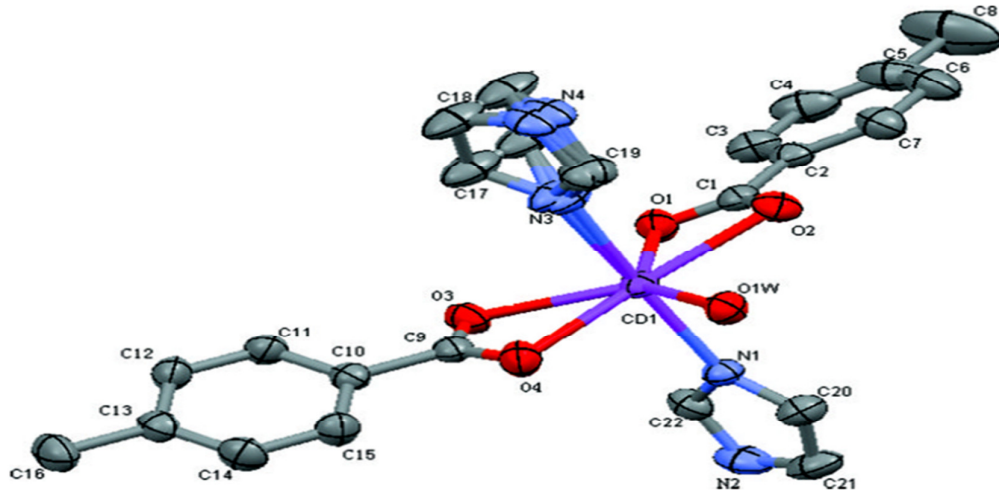
Şekil 2.34.  $[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  bileşiğinin kristal yapısı [52].

Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü  $[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ ,  $M_A = 418,70$  g/mol, kristal sistemi monoklinik, uzay grubu  $C2/c$  olan bileşiğin birim hücre parametreleri:  $a = 26,5836$  (8) Å,  $b = 5,3542$  (1) Å,  $c = 12,0625$  (3) Å,  $\beta = 107,414$  (3)°,  $V = 1638,21$  (8) Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$ ,  $T = 296$  K (Şekil 2.34) [52].

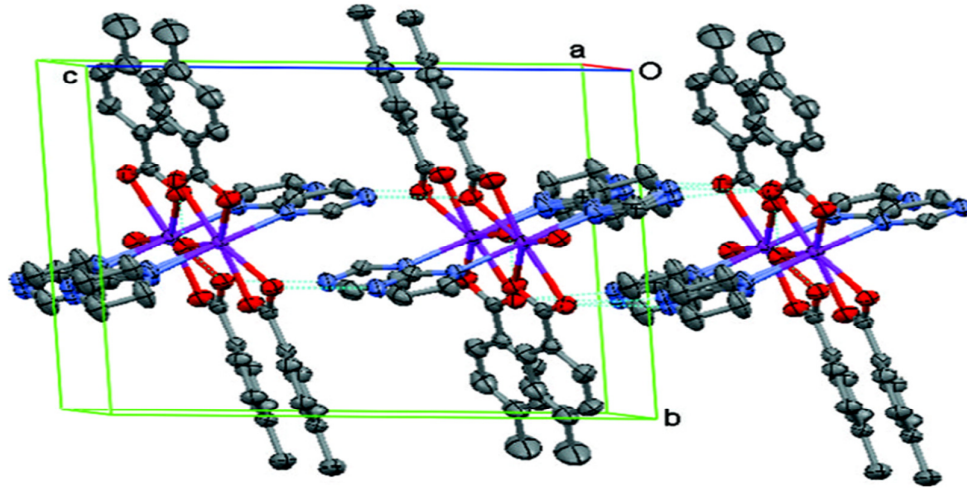
Song ve arkadaşları, kadmiyum(II) klorür, 4-metilbenzoik asit ve imidazol vasıtasıyla  $[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_3\text{H}_4\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})]$  kompleksini sentezlemişlerdir [53].

Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü  $[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_3\text{H}_4\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})]$ ,  $M_A = 536,85$  g/mol, kristal sistemi triklinik, uzay grubu  $P\bar{1}$  olan bileşiğin birim hücre parametreleri:  $a = 6,1355$  (1) Å,  $b = 12,4338$  (3) Å,  $c = 15,4771$  (3) Å,  $\alpha = 91,396$  (1)°,  $\beta = 107,414$  (3)°,  $\gamma = 98,304$  (1)°,  $V = 1156,46$  (4) Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$ ,  $T = 296$  K [53].

[Cd(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>N<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)] kompleksinde Cd(II) atomu bir su molekülü, iki imidazol ligandının iki N atomu ve iki bidentat şelat 4-metilbenzoat ligandının dört karboksilat O atomu ile koordine olarak bozulmuş pentagonal bipiramidal geometrisi göstermektedir (Şekil 2.35). 4-Metilbenzoatın karboksilatın karboksilat O atomları ve koordine su molekülü arasındaki Moleküller arası O-H...O hidrojen bağları ile sonsuz zincir oluşturmaktadır. Bu zincirler karboksilat grubu ve imidazol ligandı arasındaki N-H...O hidrojen bağları ile iki boyutlu olarak birleşmektedir (Şekil 2.36).



Şekil 2.35. [Cd(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>N<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)] bileşiğinin kristal yapısı [53].



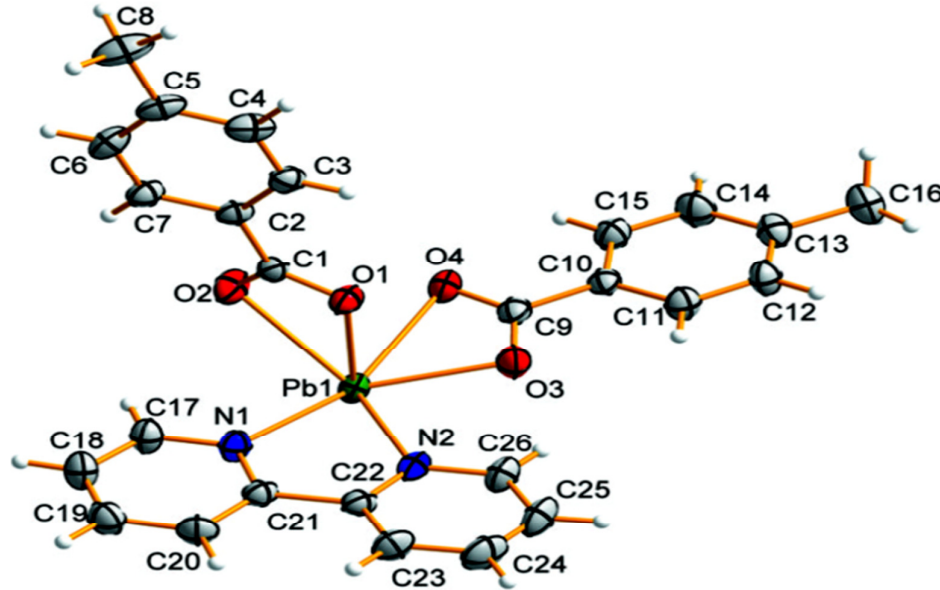
Şekil 2.36. [Cd(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>3</sub>H<sub>4</sub>N<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)] bileşiğinde moleküller arası hidrojen bağları [53].

Li ve arkadaşları, yeni bir kadmiyum kompleksi olan  $[\text{Cd}(\text{phen})_3](\text{ClO}_4)_2(p\text{-MB})_2(\text{H}_2\text{O})_2$  bileşimini kadmiyum perklorat, *p*-metilbenzoik asit ve 1,10-fenantrolinin hidrotermal reaksiyonu ile sentezlemişlerdir [54]. Kristal yapıda kadmiyum iyonu üç 1,10-fenantrolinin altı azot atomu ile koordine olarak bozuk oktahedral koordinasyon geometrisine sahiptir.

Bileşiğin kristal verileri: molekül formülü  $[\text{Cd}(\text{phen})_3](\text{ClO}_4)_2(p\text{-MB})_2(\text{H}_2\text{O})_2$ ,  $M_A = 536,85$  g/mol, kristal sistemi triklinik, uzay grubu  $\bar{P}1$  olan bileşiğin birim hücre parametreleri:  $a = 1,2809$  (3) Å,  $b = 1,3431$  (3) Å,  $c = 1,3734$  (3) Å,  $\alpha = 84,259$  (4)°,  $\beta = 71,603$  (3)°,  $\gamma = 74,424$  (3)°,  $V = 2,1594$  (8) Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$  [54].

### 2.2.15 *p*-Metilbenzoik Asidin Kurşun Kompleksleri

Dai ve arkadaşlarının [55] sentezlediği (2,2'-Bipiridin- $\kappa^2N,N'$ )bis(4-metilbenzoat- $\kappa^2O,O'$ )kurşun(II) kompleksinde, Pb(II) atomu, iki 4-metilbenzoat ligandının dört oksijen atomu ve 2,2'-bipy ligandının iki azot atomu ile koordine olarak bozulmuş pseudo-kare-piramidal geometri yapısındadır (Şekil 2.37) [55].

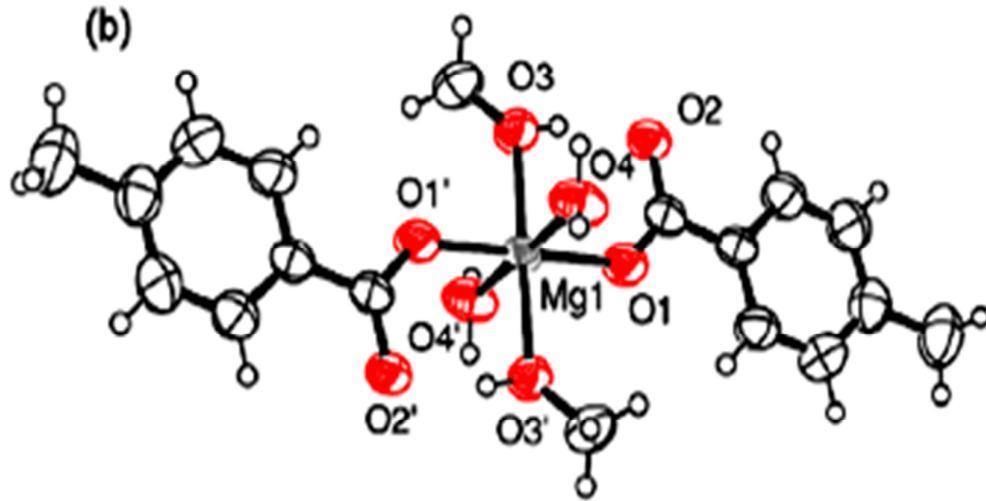


Şekil 2.37.  $[\text{Pb}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N}_2)]$  bileşiğinin kristal yapısı [55].

Bileşğin kristal verileri: molekül formülü  $[\text{Pb}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N}_2)]$ ,  $M_A = 633,65 \text{ g/mol}$ , kristal sistemi triklinik, uzay grubu  $\bar{P}1$  olan bileşğin birim hücre parametreleri:  $a = 9,5510 (11) \text{ \AA}$ ,  $b = 10,0805 (12) \text{ \AA}$ ,  $c = 13,2483 (9) \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 109,865 (1)^\circ$ ,  $\beta = 97,322 (1)^\circ$ ,  $\gamma = 90,643 (1)^\circ$ ,  $V = 1187,8 (2) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 2$ ,  $T = 296 \text{ K}$  [55].

Bikash ve arkadaşları,  $[(4\text{-CH}_3\text{-C}_6\text{H}_4\text{CO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  kompleksinin kristal yapısını aydınlatmışlardır [56].

Bileşğin kristal verileri: molekül formülü  $[(4\text{-CH}_3\text{-C}_6\text{H}_4\text{CO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ ,  $M_A = 394,7 \text{ g/mol}$  kristal sistemi monoklinik, uzay grubu  $P2_1/c$  olan bileşğin birim hücre parametreleri:  $a = 13,5869 (2) \text{ nm}$ ,  $b = 7,64960 (10) \text{ nm}$ ,  $c = 10,4735 (2) \text{ nm}$ ,  $\beta = 102,3940 (10)^\circ$ ,  $V = 1346,92 (9) \text{ nm}^3$ ,  $Z = 2$  (Şekil 2.38) [56].



Şekil 2.38.  $[(4\text{-CH}_3\text{-C}_6\text{H}_4\text{CO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  bileşğinin kristal yapısı [56].

### 3. MATERYAL VE YÖNTEM

#### 3.1. Materyal

##### 3.1.1. Kullanılan Kimyasal Maddeler

Bu çalışma Kafkas Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Anorganik Kimya Araştırma Laboratuvarında gerçekleştirilmiştir. Çalışmada kullanılan kimyasal maddeler Merck ve Aldrich firmalarından sağlanmıştır. Komplekslerin sentezinde, sodyum bikarbonat ( $\text{NaHCO}_3$ ), mangan(II)sülfat monohidrat ( $\text{MnSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ), kobalt(II)sülfat heptahidrat ( $\text{CoSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ ), nikel(II)sülfat heksahidrat ( $\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ), bakır(II)sülfat pentahidrat ( $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ ), çinko(II)sülfat monohidrat ( $\text{ZnSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ), trikadmiyum(II)sülfat oktahidrat ( $3\text{CdSO}_4 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ ), kurşun(II)nitrat ( $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ ) metal tuzları kullanılmıştır. Ligand olarak ise *p*-metilbenzoik asit, nikotinamid (NA), dietilnikotinamid (DENA) ve izonikotinamid (İNA) kullanılmıştır.

##### 3.1.2. Kullanılan Cihazlar

İnfrared (IR) Spektrometresi: Perkin Elmer PE 1600 FTIR, Balıkesir Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi, Balıkesir.

X-ışınları kırınım çekimleri  $\text{CuK}\alpha = 1.54056 \text{ \AA}$ , 30 mA, 45 kV radyasyonunda PANalytic X'Pert PRO marka X-ışınları difraktometresi ile elde edilmiştir.

Nükleer Magnetik Rezonans ( $^1\text{H-NMR}$ ,  $^{13}\text{C-NMR}$ ) Spektrometresi: Varian XL-200 (USA), Karadeniz Teknik Üniversitesi Merkez Araştırma Laboratuvarı, Trabzon.

UV / Vis: PG Instruments Ltd. T80 UV / Vis Spectrometer, Kafkas Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi, Kars.

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



Kütle Spektrometresi: Micromass Quatro LCULTIMA LC/MS/MS, Karadeniz Teknik Üniversitesi Merkez Araştırma Laboratuvarı, Trabzon.

Termik Analiz: Shimadzu DTG 60H (Argon atmosferi), Hacettepe Üniversitesi Fen Fakültesi Kimya Bölümü, Ankara.

X-Ray Tek kristal Analizi: Bruker Kappa APEX 2 CCD, Anadolu Üniversitesi Merkez Araştırma Laboratuvarı, Eskişehir.

### 3.2. Sentez

#### 3.2.1 [Mn(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>] (1) kompleksinin sentezi

Kompleks 30 ml MnSO<sub>4</sub>·H<sub>2</sub>O (0,84 g, 5 mmol) çözeltisi ve izonikotinamidin (1,22 g, 10 mmol) 20 ml sudaki çözeltisi ile sodyum *p*-metilbenzoat (1,88 g, 10 mmol)'ın 220 ml sudaki çözeltisinin karışımından hazırlandı. Karışım süzüldü ve oda sıcaklığında bir ay içinde ten renginde kristaller oluştu. Elde edilen kristaller saf suyla yıkayıp kurutularak (1) bileşiği olarak tanımlandı.

IR (KBr) : Ek Şekil 2

Termik Analiz (DTA-DTG-TG) : Ek Şekil 23

Elementel Analiz : [Mn(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>] (396,94) için, Ek Çizelge 45

Hesaplanan % : C: 48,33 H: 5,54 N: -

Bulunan % : C: 47,69 H: 5,29 N: -

#### 3.2.2 [Zn(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (2) kompleksinin sentezi

Kompleks 30 ml ZnSO<sub>4</sub>·H<sub>2</sub>O (0,90 g, 5 mmol) çözeltisi ve izonikotinamidin (1,22 g, 10 mmol) 20 ml sudaki çözeltisi ile sodyum *p*-metilbenzoat (1,88 g, 10 mmol)'ın 200 ml sudaki çözeltisinin karışımından hazırlandı. Karışım süzüldü ve oda sıcaklığında bir ay içinde renksiz kristaller oluştu. Elde edilen kristaller saf suyla yıkayıp kurutularak (2) bileşiği olarak tanımlandı.

IR (KBr)	:	Ek Şekil 3
Termik Analiz (DTA-DTG-TG)	:	Ek Şekil 24
<sup>1</sup> H-NMR (DMSO-d <sub>6</sub> )	:	Ek Şekil 55
<sup>13</sup> C-NMR (DMSO-d <sub>6</sub> )	:	Ek Şekil 56
Elementel Analiz	:	[Zn(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] (371,38) için, Ek Çizelge 46
Hesaplanan	% :	C: 51,72      H: 4,84      N: -
Bulunan	% :	C: 52,04      H: 4,78      N: -

### 3.2.3 [Cd(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (3) kompleksinin sentezi

Kompleks 50 ml 3CdSO<sub>4</sub>·8H<sub>2</sub>O (1,29 g, 5 mmol) çözeltisi ve DENA (1,78 g, 10 mmol)'in 50 ml sudaki çözeltisi ile sodyum *p*-metilbenzoat (1,88 g, 10 mmol)'ın 350 ml sudaki çözeltisinin karışımından hazırlandı. Karışım süzüldü ve oda sıcaklığında bir hafta içinde renksiz kristaller oluştu. Elde edilen kristaller saf suyla yıkanıp kurutularak (3) bileşiği olarak tanımlandı.

IR (KBr)	:	Ek Şekil 4
Termik Analiz (DTA-DTG-TG)	:	Ek Şekil 25
<sup>1</sup> H-NMR (DMSO-d <sub>6</sub> )	:	Ek Şekil 57
<sup>13</sup> C-NMR (DMSO-d <sub>6</sub> )	:	Ek Şekil 58
Elementel Analiz	:	[Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] (418,41) için, Ek Çizelge 47
Hesaplanan	% :	C: 45,89      H: 4,33      N: -
Bulunan	% :	C: 45,50      H: 4,22      N: -

### 3.2.4 [Pb(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (4) kompleksinin sentezi

Kompleks 50 ml Pb(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> (1,66 g, 5 mmol) çözeltisi ve izonikotinamidin (1,22 g, 10 mmol) 15 ml sudaki çözeltisi ile sodyum *p*-metilbenzoat (1,88 g, 10 mmol)'ın 200 ml sudaki çözeltisinin karışımından hazırlandı. Karışım süzüldü ve oda sıcaklığında bir hafta içinde beyaz kristaller oluştu. Elde edilen kristaller saf suyla yıkanıp kurutularak (4) bileşiği olarak tanımlandı.

IR (KBr) : Ek Şekil 5

Termik Analiz (DTA-DTG-TG) : Ek Şekil 26

Elementel Analiz : [Pb(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (495,2) için, Ek Çizelge 48

Hesaplanan	%	: C: 37,41	H: 3,11	N: -
Bulunan	%	: C: 38,61	H: 3,19	N: -

### 3.2.5 [Mn(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (5) kompleksinin sentezi

Kompleks 10 ml MnSO<sub>4</sub>·H<sub>2</sub>O (0,84 g, 5 mmol) çözeltisi ve nikotinamidin (1,22 g, 10 mmol) 10 ml sudaki çözeltisi ile sodyum *p*-metilbenzoat (1,88 g, 10 mmol)'ın 150 ml sudaki çözeltisinin karışımından hazırlandı. Karışım süzüldü ve oda sıcaklığında bir ay içinde ten renginde kristaller oluştu. Elde edilen kristaller saf suyla yıkanıp kurutularak (5) bileşiği olarak tanımlandı.

X-Ray : Şekil 5.1

IR (KBr) : Ek Şekil 6

Termik Analiz (DTA-DTG-TG) : Ek Şekil 27

Toz X-Ray ışını diffraktogramı : Ek Şekil 67

Elementel Analiz : [Mn(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (605,51) için, Ek Çizelge 49

Hesaplanan	%	: C: 55,49	H: 4,96	N: 9,25
Bulunan	%	: C: 55,14	H: 4,87	N: 9,45

### 3.2.6 [Co(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (6) kompleksinin sentezi

Kompleks 50 ml CoSO<sub>4</sub>·7H<sub>2</sub>O (1,41 g, 5 mmol) çözeltisi ve nikotinamidin (1,22 g, 10 mmol) 15 ml sudaki çözeltisi ile sodyum *p*-metilbenzoat (1,88 g, 10 mmol)'ın 175 ml sudaki çözeltisinin karışımından hazırlandı. Karışım süzüldü ve oda sıcaklığında bir hafta içinde kiremit renginde kristaller oluştu. Elde edilen kristaller saf suyla yıkanıp kurutularak (6) bileşiği olarak tanımlandı.

IR (KBr) : Ek Şekil 7

Termik Analiz (DTA-DTG-TG) : Ek Şekil 28

UV : Ek Şekil 44

Toz X-Ray ışını diffraktogramı : Ek Şekil 67

Elementel Analiz : [Co(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (608,93) için, Ek Çizelge 50

Hesaplanan % : C: 55,18 H: 4,93 N: 9,20

Bulunan % : C: 55,14 H: 4,96 N: 9,15

### 3.2.7 [Ni(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (7) kompleksinin sentezi

Kompleks 50 ml NiSO<sub>4</sub>·6H<sub>2</sub>O (1,32 g, 5 mmol) çözeltisi ve nikotinamidin (1,22 g, 10 mmol) 15 ml sudaki çözeltisi ile sodyum *p*-metilbenzoat (1,88 g, 10 mmol)'ın 300 ml sudaki çözeltisinin karışımından hazırlandı. Karışım süzüldü ve oda sıcaklığında bir hafta içinde yeşil kristaller oluştu. Elde edilen kristaller saf suyla yıkanıp kurutularak (7) bileşiği olarak tanımlandı.

X-Ray : Şekil 5.2

IR (KBr) : Ek Şekil 8

Termik Analiz (DTA-DTG-TG) : Ek Şekil 29

UV : Ek Şekil 45

Elementel Analiz : [Ni(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (608,97) için, Ek Çizelge 51

Hesaplanan % : C: 55,22 H: 4,92 N: 9,19

Bulunan % : C: 54,80 H: 4,93 N: 9,04

### 3.2.8 [Cu(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (8) kompleksinin sentezi

Kompleks 50 ml CuSO<sub>4</sub>·5H<sub>2</sub>O (1,25 g, 5 mmol) çözeltisi ve nikotinamidin (1,22 g, 10 mmol) 25 ml sudaki çözeltisi ile sodyum *p*-metilbenzoat (1,88 g, 10 mmol)'ın 150 ml sudaki çözeltisinin karışımından hazırlandı. Karışım süzüldü ve oda sıcaklığında bir hafta içinde mavi-yeşil kristaller oluştu. Elde edilen kristaller saf suyla yıkanıp kurutularak (8) bileşiği olarak tanımlandı.

IR (KBr) : Ek Şekil 9

Termik Analiz (DTA-DTG-TG) : Ek Şekil 30

UV : Ek Şekil 46

Elementel Analiz : [Cu(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (577,78) için, Ek Çizelge 52

Hesaplanan % : C: 58,20 H: 4,49 N: 9,69

Bulunan % : C: 57,57 H: 4,48 N: 9,75

### 3.2.9 [Zn<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>][Zn<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)]2H<sub>2</sub>O (9) kompleksinin sentezi

Kompleks 20 ml ZnSO<sub>4</sub>·H<sub>2</sub>O (0,90 g, 5 mmol) çözeltisi ve nikotinamidin (1,22 g, 10 mmol) 15 ml sudaki çözeltisi ile sodyum *p*-metilbenzoat (1,88 g, 10 mmol)'ın 150 ml sudaki çözeltisinin karışımından hazırlandı. Karışım süzüldü ve oda sıcaklığında bir hafta içinde renksiz kristaller oluştu. Elde edilen kristaller saf suyla yıkanıp kurutularak (9) bileşiği olarak tanımlandı.

X-Ray : Şekil 5.3

IR (KBr) : Ek Şekil 10

Termik Analiz (DTA-DTG-TG) : Ek Şekil 31

<sup>1</sup>H-NMR (DMSO-d<sub>6</sub>) : Ek Şekil 59

<sup>13</sup>C-NMR (DMSO-d<sub>6</sub>) : Ek Şekil 60

Elementel Analiz : [Zn<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>][Zn<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)]2H<sub>2</sub>O (1536,2)

Hesaplanan % : C: 54,68 H: 4,56 N: 1,82 Ek Çizelge 53

Bulunan % : C: 54,72 H: 4,56 N: 1,82

### 3.2.10 [Cd(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (10) kompleksinin sentezi

Kompleks 50 ml 3CdSO<sub>4</sub>·8H<sub>2</sub>O (1,29 g, 5 mmol) çözeltisi ve nikotinamidin (1,22 g, 10 mmol) 20 ml sudaki çözeltisi ile sodyum *p*-metilbenzoat (1,88 g, 10 mmol)'ın 400 ml sudaki çözeltisinin karışımından hazırlandı. Karışım süzüldü ve oda sıcaklığında bir hafta içinde renksiz kristaller oluştu. Elde edilen kristaller saf suyla yıkanıp kurutularak (10) bileşiği olarak tanımlandı.

IR (KBr) : Ek Şekil 11

Termik Analiz (DTA-DTG-TG) : Ek Şekil 32

<sup>1</sup>H-NMR (DMSO-d<sub>6</sub>) : Ek Şekil 61

<sup>13</sup>C-NMR (DMSO-d<sub>6</sub>) : Ek Şekil 62

Elementel Analiz : [Cd(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (670,69) için, Ek Çizelge 54

Hesaplanan % : C: 50,72 H: 4,53 N: 8,45

Bulunan % : C: 50,14 H: 4,47 N: 8,35

### 3.2.11 [Pb(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)]H<sub>2</sub>O (11) kompleksinin sentezi

Kompleks 50 ml Pb(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> (1,66 g, 10 mmol) çözeltisi ve nikotinamidin (1,22 g, 10 mmol) 10 ml sudaki çözeltisi ile sodyum *p*-metilbenzoat (1,88 g, 10 mmol)'ın 160 ml sudaki çözeltisinin karışımından hazırlandı. Karışım süzüldü ve oda sıcaklığında dört hafta içinde beyaz renkli kristaller oluştu. Elde edilen kristaller saf suyla yıkanıp kurutularak (11) bileşiği olarak tanımlandı.

X-Ray : Şekil 5.4

IR (KBr) : Ek Şekil 12

Termik Analiz (DTA-DTG-TG) : Ek Şekil 33

Elementel Analiz : [Pb(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)]H<sub>2</sub>O (617,42) için, Ek Çizelge 55

Hesaplanan % : C: 44,03 H: 3,34 N: 4,67

Bulunan % : C: 42,76 H: 3,56 N: 4,54

### 3.2.12 [Mn<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)] (12) kompleksinin sentezi

Kompleks 10 ml MnSO<sub>4</sub>·H<sub>2</sub>O (0,84 g, 5 mmol) çözeltisi ve DENA (1,78 g, 10 mmol)'in 50 ml sudaki çözeltisi ile sodyum *p*-metilbenzoat (1,88 g, 10 mmol)'in 250 ml sudaki çözeltisinin karışımından hazırlandı. Karışım süzüldü ve oda sıcaklığında bir hafta içinde ten renginde kristaller oluştu. Elde edilen kristaller saf suyla yıkanıp kurutularak (12) bileşiği olarak tanımlandı.

X-Ray : Şekil 5.5

IR (KBr) : Ek Şekil 13

Termik Analiz (DTA-DTG-TG) : Ek Şekil 34

Elementel Analiz : [Mn<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)] (1024,90) için, Ek Çizelge 56

Hesaplanan % : C: 60,88 H: 5,66 N: 5,46

Bulunan % : C: 60,97 H: 5,66 N: 5,47

### 3.2.13 [Co(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (13) kompleksinin sentezi

Kompleks 40 ml CoSO<sub>4</sub>·7H<sub>2</sub>O (1,78 g, 5 mmol) çözeltisi ve DENA (1,78 g, 10 mmol)'in 50 ml sudaki çözeltisi ile sodyum *p*-metilbenzoat (1,88 g, 10 mmol)'in 320 ml sudaki çözeltisinin karışımından hazırlandı. Karışım süzüldü ve oda sıcaklığında bir hafta içinde kiremit renginde kristaller oluştu. Elde edilen kristaller saf suyla yıkanıp kurutularak (13) bileşiği olarak tanımlandı.

X-Ray : Şekil 5.6

IR (KBr) : Ek Şekil 14

Termik Analiz (DTA-DTG-TG) : Ek Şekil 35

UV : Ek Şekil 47

Toz X-Ray ışını diffraktogramı : Ek Şekil 68

Elementel Analiz : [Co(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (721,70) için, Ek Çizelge 57

Hesaplanan % : C: 59,86 H: 5,82 N: 7,76

Bulunan % : C: 59,50 H: 6,22 N: 7,72

### 3.2.14 $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ (14) kompleksinin sentezi

Kompleks 50 ml  $\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  (1,32 g, 5 mmol) çözeltisi ve DENA (1,78 g, 10 mmol)'in 50 ml sudaki çözeltisi ile sodyum *p*-metilbenzoat (1,88 g, 10 mmol)'in 320 ml sudaki çözeltisinin karışımından hazırlandı. Karışım süzüldü ve oda sıcaklığında bir hafta içinde yeşil renkli kristaller oluştu. Elde edilen kristaller saf suyla yıkanıp kurutularak (14) bileşiği olarak tanımlandı.

IR (KBr) : Ek Şekil 15

Termik Analiz (DTA-DTG-TG) : Ek Şekil 36

UV : Ek Şekil 48

Toz X-Ray ışını diffraktogramı : Ek Şekil 68

Elementel Analiz :  $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$  (718,69) için, Ek Çizelge 58

Hesaplanan % : C: 59,94 H: 6,38 N: 7,79

Bulunan % : C: 59,96 H: 6,32 N: 7,78

### 3.2.15 $[\text{Cu}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})]\text{H}_2\text{O}$ (15) kompleksinin sentezi

Kompleks 20 ml  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  (1,25 g, 5 mmol) çözeltisi ve 50 ml DENA (1,78 g, 10 mmol)'in sudaki çözeltisi ile sodyum *p*-metilbenzoat (1,88 g, 10 mmol)'in 550 ml sudaki çözeltisinin karışımından hazırlandı. Karışım süzüldü ve oda sıcaklığında bir hafta içinde yeşil renkli kristaller oluştu. Elde edilen kristaller saf suyla yıkanıp kurutularak (15) bileşiği olarak tanımlandı.

IR (KBr) : Ek Şekil 16

Termik Analiz (DTA-DTG-TG) : Ek Şekil 37

UV : Ek Şekil 49

Elementel Analiz :  $[\text{Cu}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})]\text{H}_2\text{O}$  (725,5) için, Ek Çizelge 59

Hesaplanan % : C: 59,55 H: 6,34 N: 7,72

Bulunan % : C: 59,78 H: 6,36 N: 7,74



### 3.2.16 [Zn<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (16) kompleksinin sentezi

Kompleks 40 ml ZnSO<sub>4</sub>·H<sub>2</sub>O (0,90 g, 5 mmol) çözeltisi ve DENA (1,78 g, 10 mmol)'in 50 ml sudaki çözeltisi ile sodyum *p*-metilbenzoat (1,88 g, 10 mmol)'in 250 ml sudaki çözeltisinin karışımından hazırlandı. Karışım süzüldü ve oda sıcaklığında bir hafta içinde renksiz kristaller oluştu. Elde edilen kristaller saf suyla yıkanıp kurutularak (16) bileşiği olarak tanımlandı.

X-Ray : Şekil 5.7

IR (KBr) : Ek Şekil 17

Termik Analiz (DTA-DTG-TG) : Ek Şekil 38

<sup>1</sup>H-NMR (DMSO-d<sub>6</sub>) : Ek Şekil 63

<sup>13</sup>C-NMR (DMSO-d<sub>6</sub>) : Ek Şekil 64

Elementel Analiz : [Zn<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (1027,82) için, Ek Çizelge 60

Hesaplanan % : C: 60,71 H: 5,45 N: 5,45

Bulunan % : C: 60,50 H: 5,40 N: 5,37

### 3.2.17 [Co(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (17) kompleksinin sentezi

Kompleks 30 ml CoSO<sub>4</sub>·7H<sub>2</sub>O (1,41 g, 5 mmol) çözeltisi ve izonikotinamidin (1,22 g, 10 mmol) 20 ml sudaki çözeltisi ile sodyum *p*-metilbenzoat (1,88 g, 10 mmol)'in 200 ml sudaki çözeltisinin karışımından hazırlandı. Karışım süzüldü ve oda sıcaklığında iki hafta içinde kiremit renginde kristaller oluştu. Elde edilen kristaller saf suyla yıkanıp kurutularak (17) bileşiği olarak tanımlandı.

IR (KBr) : Ek Şekil 18

Termik Analiz (DTA-DTG-TG) : Ek Şekil 39

UV : Ek Şekil 50

Elementel Analiz : [Co(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] (573,21) için, Ek Çizelge 61

Hesaplanan % : C: 58,66 H: 4,53 N: 9,77

Bulunan % : C: 58,07 H: 4,54 N: 9,77

### 3.2.18 $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]\text{H}_2\text{O}$ (18) kompleksinin sentezi

Kompleks 30 ml  $\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  (1,31 g, 5 mmol) çözeltisi ve izonikotinamidin (1,22 g, 10 mmol)'in 20 ml sudaki çözeltisi ile sodyum *p*-metilbenzoat (1,88 g, 10 mmol)'in 340 ml sudaki çözeltisinin karışımından hazırlandı. Karışım süzüldü ve oda sıcaklığında bir hafta içinde açık yeşil renkli kristaller oluştu. Elde edilen kristaller saf suyla yıkanıp kurutularak (18) bileşiği olarak tanımlandı

IR (KBr) : Ek Şekil 19

Termik Analiz (DTA-DTG-TG) : Ek Şekil 40

UV : Ek Şekil 51

Elementel Analiz :  $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]\text{H}_2\text{O}$  (626,7) için, Ek Çizelge 62

Hesaplanan % : C: 53,64 H: 5,10 N: 8,93

Bulunan % : C: 54,64 H: 4,84 N: 8,42

### 3.2.19 $[\text{Cu}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]2\text{H}_2\text{O}$ (19) kompleksinin sentezi

Kompleks 50 ml  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  (1,25 g, 5 mmol) çözeltisi ve izonikotinamidin (2,44 g, 20 mmol) 15 ml sudaki çözeltisi ile sodyum *p*-metilbenzoat (1,58 g, 10 mmol)'in 500 ml sudaki çözeltisinin karışımından hazırlandı. Karışım süzüldü ve oda sıcaklığında üç hafta içinde mavi kristaller oluştu. Elde edilen kristaller saf suyla yıkanıp kurutularak (19) bileşiği olarak tanımlandı.

X-Ray : Şekil 5.8

IR (KBr) : Ek Şekil 20

Termik Analiz (DTA-DTG-TG) : Ek Şekil 41

UV : Ek Şekil 52

Kütle Analizi : Ek Şekil 54

Elementel Analiz :  $[\text{Cu}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]2\text{H}_2\text{O}$  (585,5) için, Ek Çizelge 63

Hesaplanan % : C: 54,78 H: 4,88 N: 9,12

Bulunan % : C: 53,90 H: 4,80 N: 8,83

### 3.2.20 $[\text{Cu}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$ (20) kompleksinin sentezi

Kompleks 50 ml  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  (1,25 g, 5 mmol) çözeltisi ve izonikotinamidin (1,22 g, 10 mmol) 20 ml sudaki çözeltisi ile sodyum *p*-metilbenzoat (1,58 g, 10 mmol)'ın 150 ml sudaki çözeltisinin karışımından hazırlandı. Karışım süzüldü ve oda sıcaklığında bir hafta içinde yeşil renkli kristaller oluştu. Elde edilen kristaller saf suyla yıkanıp kurutularak (20) bileşiği olarak tanımlandı.

X-Ray	:	Şekil 5.9
IR (KBr)	:	Ek Şekil 21
Termik Analiz (DTA-DTG-TG)	:	Ek Şekil 42
UV	:	Ek Şekil 53
Elementel Analiz	:	$[\text{Cu}_2(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_4(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2]$ (911,88) için, Ek Çizelge 64
Hesaplanan %	:	C: 57,95    H: 4,39    N: 6,14
Bulunan %	:	C: 57,71    H: 4,34    N: 6,12

### 3.2.21 $[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})] \cdot \text{H}_2\text{O}$ (21) kompleksinin sentezi

Kompleks 40 ml  $3\text{CdSO}_4 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$  (1,29 g, 5 mmol) çözeltisi ve izonikotinamidin (1,22 g, 10 mmol) 15 ml sudaki çözeltisi ile sodyum *p*-metilbenzoat (1,88 g, 10 mmol)'ın 350 ml sudaki çözeltisinin karışımından hazırlandı. Karışım süzüldü ve oda sıcaklığında bir hafta içinde renksiz kristaller oluştu. Elde edilen kristaller saf suyla yıkanıp kurutularak (21) bileşiği olarak tanımlandı.

X-Ray	:	Şekil 5.10
IR (KBr)	:	Ek Şekil 22
Termik Analiz (DTA-DTG-TG)	:	Ek Şekil 43
$^1\text{H-NMR}$ (DMSO- $d_6$ )	:	Ek Şekil 65
$^{13}\text{C-NMR}$ (DMSO- $d_6$ )	:	Ek Şekil 66
Elementel Analiz	:	$[\text{Cd}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})] \cdot \text{H}_2\text{O}$ (662,96) için, Ek Çizelge 65
Hesaplanan %	:	C: 50,68    H: 4,53    N: 8,45
Bulunan %	:	C: 50,75    H: 4,51    N: 8,39

## 4. BULGULAR

### 4.1 Elementel Analiz

İlk kez sentezlenen komplekslerin elementel analiz sonuçları Çizelge 4.1’de verilirken, komplekslerin deneysel elementel sonuçları ise Ek Çizelge 45-65’de verilmiştir.

Çizelge 4.1 Komplekslerin elementel analiz verileri

Kompleksler		%C	%H	%N
		<i>Teorik.-Den.</i>	<i>Teorik.-Den.</i>	<i>Teorik.-Den.</i>
Metal(II) <i>p</i> -metilbenzoat				
[Mn(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>4</sub> ]	(1)	48,33-47,69	5,54-5,29	-
[Zn(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(2)	51,72-52,04	4,84-4,78	-
[Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(3)	45,89-45,50	4,33-4,22	-
[Pb(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)]	(4)	37,41-38,61	3,11-3,19	-
Metal(II) <i>p</i> -metilbenzoat-nikotinamid				
[Mn(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(5)	55,49-55,14	4,96-4,87	9,25-9,45
[Co(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(6)	55,18-55,14	4,93-4,96	9,20-9,15
[Ni(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(7)	55,22-54,80	4,92-4,93	9,19-9,04
[Cu(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(8)	58,20-57,57	4,49-4,48	9,69-9,75
[Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ][Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O)]·2H <sub>2</sub> O	(9)	54,68-54,72	4,56-4,56	1,82-1,82
[Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(10)	50,72-50,14	4,53-4,47	8,45-8,35
[Pb(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O)]·H <sub>2</sub> O	(11)	44,03-42,76	3,34-3,56	4,67-4,54
Metal(II) <i>p</i> -metilbenzoat-dietilnikotinamid				
[Mn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)]	(12)	60,88-60,97	5,66-5,66	5,46-5,47
[Co(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(13)	59,86-59,50	5,82-6,22	7,76-7,72
[Ni(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(14)	59,94-59,96	6,38-6,32	7,77-7,78
[Cu(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)]·H <sub>2</sub> O	(15)	59,55-59,78	6,34-6,36	7,72-7,74
[Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(16)	60,71-60,50	5,45-5,40	5,45-5,37
Metal(II) <i>p</i> -metilbenzoat-izonikotinamid				
[Co(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(17)	58,66-58,07	4,53-4,54	9,77-9,77
[Ni(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ·H <sub>2</sub> O	(18)	53,64-54,64	5,10-4,84	8,93-8,42
[Cu(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ·2H <sub>2</sub> O	(19)	54,78-53,90	4,88-4,80	9,12-8,83
[Cu <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	(20)	57,95-57,71	4,39-4,34	6,14-6,12
[Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)]·H <sub>2</sub> O	(21)	50,68-50,75	4,53-4,51	8,45-8,39

## 4.2 Infrared Spektrumu

Sentezlenen komplekslerin IR spektrumları Ek Şekil 2-22’de verilirken, komplekslerin IR spektrum verileri ise Çizelge 4.2’de verilmiştir.

Çizelge 4.2. *p*-Metilbenzoik asit komplekslerinin IR spektrum verileri

GRUPLAR	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
$\nu(\text{OH})$	3310-2950	3250-2950	3403-3070	3200-3050	3250-3000	3317-3000	3321-3000	-	3315-3050	3319-3000	3390-3000
$\nu(\text{C}=\text{C})_{\text{halka}}$	1609	1608	1599	1606	1628	1627	1627	1626	1611	1610	1588
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{as}}$	1588	1562	1546	1559	1556	1596	1598	1596	1565	1588	1545
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{s}}$	1421	1415	1381	1385	1382	1403	1400	1382	1425	1406	1407
$\nu(\text{NH}_2)$	-	-	-	-	3312	3520	3526	3364	3379	3406	3374
$\nu(\text{C-N})_{\text{py}}$	-	-	-	-	1030	1031	1020	1032	1035	1034	1017
$\nu(\text{C-N})_{\text{amid}}$	-	-	-	-	1046	1048	1050	1055	1055	1049	1110
$\nu(\text{C}=\text{O})_{\text{amid}}$	-	-	-	-	1694	1697	1697	1687	1677	1679	1610
$\nu(\text{C-H})_{\text{alifatik}}$	2918	2921	2933	2966	2915	2913	2913	2916	2921	2920	2917
$\nu(\text{M-O})$	616	626	645	627	693	656	652	635	691	619	688
$\nu(\text{M-N})$	-	-	-	-	471	470	469	476	473	475	470

Çizelge 4.2 (Devam). *p*-Metilbenzoik asit komplekslerinin IR spektrum verileri

GRUPLAR	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
$\nu(\text{OH})$	3200-2950	3250-2950	3424-3070	3219-2927	-	3400-2920	3400-2920	3500-2920	-	3250-2950
$\nu(\text{C}=\text{C})_{\text{arom}}$	1600	1600	1601	1618	1628	1609	1626	1609	1609	1609
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{as}}$	1547	1565	1548	1565	1564	1556	1554	1554	1565	1592
$\nu(\text{COO}^-)_{\text{s}}$	1384	1385	1385	1406	1426	1401	1382	1380	1403	1385
$\nu(\text{NH}_2)$	-	-	-	-	-	3308	3364	3488	3439	3418
$\nu(\text{C-N})_{\text{py}}$	1050	1033	1034	1049	1059	1000	958	1020	1019	1096
$\nu(\text{C-N})_{\text{amid}}$	1104	1083	1083	1106	1074	1177	1139	1061	1113	1015
$\nu(\text{C}=\text{O})$	1630	1630	1615	1636	1667	1704	1687	1681	1697	1710
$\nu(\text{C-H})_{\text{alifatik}}$	2932	2932	2932	2927	2929	2919	2916	2900	2921	2921
$\nu(\text{M-O})$	638	614	647	630	638	619	635	633	631	637
$\nu(\text{M-N})$	477	477	427	455	429	463	476	433	455	468

### 4.3. Termik Analiz

Komplekslerin termik analiz eğrileri (DTA, DTG, TG) Ek Şekil 23-43'de verilirken komplekslerin termik analiz verileri kısaca Çizelge 4.3-4.23'de özetlenmiştir.

Çizelge 4.3 (1) kompleksinin termik analiz verileri							
<i>Bileşik</i>	<i>Sıcaklık Aralığı C</i>	<i>Max.Bozunma Sıc. C DTG Max.</i>	<i>Uzaklaşan Grup</i>	<i>Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Toplam Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Katı Bozunma Ürünü</i>	<i>Renk</i>
[Mn(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>4</sub> ] MA: 396,94							Ten Rengi
1	45-147	94(+)	4(H <sub>2</sub> O)	18.41-18.14		Mn(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	
2	371-525	470(+)	1.5(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> )	51.84-51.02		MnCO <sub>3</sub>	
					76.20-78.33	MnO <sub>2</sub>	Siyah
Çizelge 4.4 (2) kompleksinin termik analiz verileri							
<i>Bileşik</i>	<i>Sıcaklık Aralığı C</i>	<i>Max.Bozunma Sıc. C DTG Max.</i>	<i>Uzaklaşan Grup</i>	<i>Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Toplam Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Katı Bozunma Ürünü</i>	<i>Renk</i>
[Zn(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] MA: 371,38							Beyaz
1	125-175	143(+)	2(H <sub>2</sub> O)	8.92-9.69		Zn(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	
2	317-495	321(+)		55.84			
3		425(+)		15.08			
					79.83-78.09	ZnO	Beyaz

Çizelge 4.5 (3) kompleksinin termik analiz verileri							
<i>Bileşik</i>	<i>Sıcaklık Aralığı C</i>	<i>Max.Bozunma Sıc. C DTG Max.</i>	<i>Uzaklaşan Grup</i>	<i>Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Toplam Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Katı Bozunma Ürünü</i>	<i>Renk</i>
[Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] MA: 418,41							Beyaz
1	123-173	153(+)	2(H <sub>2</sub> O)	8.32-8.60		Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	
2	319-423	394(+)		54.42			
					82,44-69,38	CdO + kömür	Beyaz
Çizelge 4.6 (4) kompleksinin termik analiz verileri							
<i>Bileşik</i>	<i>Sıcaklık Aralığı C</i>	<i>Max.Bozunma Sıc. C DTG Max.</i>	<i>Uzaklaşan Grup</i>	<i>Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Toplam Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Katı Bozunma Ürünü</i>	<i>Renk</i>
[Pb(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] MA: 495,2							Beyaz
1	56-115	94(+)	(H <sub>2</sub> O)	4.24-3.64		Pb(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	
2	277-466	416(+)	1,5(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> )	37.72-40.89		PbCO <sub>3</sub>	
					54.02-54.93	PbO	Kiremit



Çizelge 4.7 (5) kompleksinin termik analiz verileri							
<i>Bileşik</i>	<i>Sıcaklık Aralığı C</i>	<i>Max.Bozunma Sıc. C DTG Max.</i>	<i>Uzaklaşan Grup</i>	<i>Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Toplam Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Katı Bozunma Ürünü</i>	<i>Renk</i>
[Mn(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] MA: 605,51							Ten rengi
1	88-176	109(+)	2(H <sub>2</sub> O)	6.80-5.95		[Mn(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	
2	185-347	238(+)		41.89			
3	358-496	466(+)		30.76			
					87.07-88.29	MnO	Siyah
Çizelge 4.8 (6) kompleksinin termik analiz verileri							
<i>Bileşik</i>	<i>Sıcaklık Aralığı C</i>	<i>Max.Bozunma Sıc. C DTG Max.</i>	<i>Uzaklaşan Grup</i>	<i>Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Toplam Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Katı Bozunma Ürünü</i>	<i>Renk</i>
[Co(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] MA: 608,93							Kiremit
1	88-165	147(+)	2(H <sub>2</sub> O)	6.56-5.91		[Co(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	
2	188-306	249(+)		41.35			
3	380-465	421(+)		25.04			
					89.49-87.67	CoO + kömür	Siyah

Çizelge 4.9 (7) kompleksinin termik analiz verileri							
<i>Bileşik</i>	<i>Sıcaklık Aralığı C</i>	<i>Max.Bozunma Sıc. C DTG Max.</i>	<i>Uzaklaşan Grup</i>	<i>Ağırlık Kaybı % Deneyssel - Teorik</i>	<i>Toplam Ağırlık Kaybı % Deneyssel -Teorik</i>	<i>Katı Bozunma Ürünü</i>	<i>Renk</i>
[Ni(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] MA: 608,97							Yeşil
1	165-186	176(+)	2(H <sub>2</sub> O)	5.91-5.94		[Ni(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	
2	253-327	299(+)		37.46			
3	330-412	396(+)		30.56			
					89.49-87.67	NiO + kömür	Siyah
Çizelge 4.10 (8) kompleksinin termik analiz verileri							
<i>Bileşik</i>	<i>Sıcaklık Aralığı C</i>	<i>Max.Bozunma Sıc. C DTG Max.</i>	<i>Uzaklaşan Grup</i>	<i>Ağırlık Kaybı % Deneyssel - Teorik</i>	<i>Toplam Ağırlık Kaybı % Deneyssel -Teorik</i>	<i>Katı Bozunma Ürünü</i>	<i>Renk</i>
Cu(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> MA: 577,78							Mavi- Yeşil
1	192-331	231(+)					
				74.74			
		255(+)			88.32-87.05	CuO + kömür	Siyah

Çizelge 4.11 (9) kompleksinin termik analiz verileri							
<i>Bileşik</i>	<i>Sıcaklık Aralığı C</i>	<i>Max.Bozunma Sic. C DTG Max.</i>	<i>Uzaklaşan Grup</i>	<i>Ağırlık Kaybı % Deneysel - Teorik</i>	<i>Toplam Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Katı Bozunma Ürünü</i>	<i>Renk</i>
[Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]- [Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] 2H <sub>2</sub> O MA: 1536,2							Beyaz
1	56-169	175(+)	4(H <sub>2</sub> O)+0.25(C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O)	5.99-6.20		[Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> ][Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> - (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>1.75</sub> ]	
2	181-227	206(+)		8.28			
3	236-300	259(+)		9.38			
4	377-471	421(+)		41.80	89.78-84.18	4Zn + kömür	Beyaz
Çizelge 4.12 (10) kompleksinin termik analiz verileri							
<i>Bileşik</i>	<i>Sıcaklık Aralığı C</i>	<i>Max.Bozunma Sic. C DTG Max.</i>	<i>Uzaklaşan Grup</i>	<i>Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Toplam Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Katı Bozunma Ürünü</i>	<i>Renk</i>
[Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] MA: 670,69							Beyaz
1	118-154	129(+)	2(H <sub>2</sub> O)	5.48-5.43		[Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	
2	229-316	267(+)		23.14			
3	331-429	401(+)		43.63			
4	473-637	613(-)		15.38	87.63-83.10	Cd + kömür	Beyaz

Çizelge 4.13 (11) kompleksinin termik analiz verileri							
<i>Bileşik</i>	<i>Sıcaklık Aralığı C</i>	<i>Max.Bozunma Sıc. C DTG Max.</i>	<i>Uzaklaşan Grup</i>	<i>Ağırlık Kaybı % Deneysel - Teorik</i>	<i>Toplam Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Katı Bozunma Ürünü</i>	<i>Renk</i>
[Pb(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O)]H <sub>2</sub> O MA: 617,42							Beyaz
1	70-169	95(+)	H <sub>2</sub> O	3.41-2.92		Pb(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub>	
2	233-400	252(+) 379(+)		26.52			
3	404-530	424(+)		22.18	59.33-61.27	PbO <sub>2</sub>	Siyah
Çizelge 4.14 (12) kompleksinin termik analiz verileri							
<i>Bileşik</i>	<i>Sıcaklık Aralığı C</i>	<i>Max.Bozunma Sıc. C DTG Max.</i>	<i>Uzaklaşan Grup</i>	<i>Ağırlık Kaybı % Deneysel - Teorik</i>	<i>Toplam Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Katı Bozunma Ürünü</i>	<i>Renk</i>
[Mn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)] MA: 1024,90							Ten Rengi
1	50-127	85(+)	H <sub>2</sub> O	5.01		Mn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub>	
2	131-292	200(+)		46.40			
3	396-512	463(+)	2(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> )	26.80-26.34	91.14-89.28	Mn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) Mn	Gri

Çizelge 4.15 (13) kompleksinin termik analiz verileri							
<i>Bileşik</i>	<i>Sıcaklık Aralığı C</i>	<i>Max.Bozunma Sıc. C DTG Max.</i>	<i>Uzaklaşan Grup</i>	<i>Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Toplam Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Katı Bozunma Ürünü</i>	<i>Renk</i>
[Co(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] MA: 721,70							Kiremit
1	104-177	170(+)	0.25(C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O)+2H <sub>2</sub> O	10.48-11.15		Co(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>1.75</sub>	
2	192-273	229(+)	(C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>1.75</sub>	42.73-43.16		Co(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	
3	315-477	413(+)		33.29	94.16-91.83	Co + kömür	Beyaz
Çizelge 4.16 (14) kompleksinin termik analiz verileri							
<i>Bileşik</i>	<i>Sıcaklık Aralığı C</i>	<i>Max.Bozunma Sıc. C DTG Max.</i>	<i>Uzaklaşan Grup</i>	<i>Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Toplam Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Katı Bozunma Ürünü</i>	<i>Renk</i>
Ni(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> MA: 718,69							Yeşil
1	92-204	136(+)	0.25(C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O)+2H <sub>2</sub> O	11.29-11.20		Ni(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>1.75</sub>	
2	217-286	247(+)		23.51			
3	338-427	379(+)		32.28	95.38-91.84	Ni + kömür	Beyaz

Çizelge 4.17 (15) kompleksinin termik analiz verileri							
<i>Bileşik</i>	<i>Sıcaklık Aralığı C</i>	<i>Max.Bozunma Sıc. C DTG Max.</i>	<i>Uzaklaşan Grup</i>	<i>Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Toplam Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Katı Bozunma Ürünü</i>	<i>Renk</i>
[Cu(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)]·H <sub>2</sub> O MA: 725,5							Yeşil
1	179-259	221(+)	2(C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O)(H <sub>2</sub> O)	57.03-54.20		Cu(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	
2	263-319	284(+)		16.28			
3	392-448	418(+)		6.43			
					91.80-91.25	Cu	Kızıl-Kahve
Çizelge 4.18 (16) kompleksinin termik analiz verileri							
<i>Bileşik</i>	<i>Sıcaklık Aralığı C</i>	<i>Max.Bozunma Sıc. C DTG Max.</i>	<i>Uzaklaşan Grup</i>	<i>Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Toplam Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Katı Bozunma Ürünü</i>	<i>Renk</i>
[Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] MA: 1027.82							Beyaz
1	142-180	162(+)		2.71			
2	200-327	281(+)	2(C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O)	34.35-34.66		Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub>	
3	357-504	419(+)	3(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> )	39.19-39.40		Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> )	
					89.84-87.28	Zn	Beyaz

Çizelge 4.19 (17) kompleksinin termik analiz verileri							
<i>Bileşik</i>	<i>Sıcaklık Aralığı C</i>	<i>Max.Bozunma Sıc. C DTG Max.</i>	<i>Uzaklaşan Grup</i>	<i>Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Toplam Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Katı Bozunma Ürünü</i>	<i>Renk</i>
[Co(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] MA: 573,21							Kiremit rengi
1	195-286	241(+)		45.34			
2	290-464	312(+) 405(+)		27,96			
					85.09- 84,13	CoO	Siyah
Çizelge 4.20 (18) kompleksinin termik analiz verileri							
<i>Bileşik</i>	<i>Sıcaklık Aralığı C</i>	<i>Max.Bozunma Sıc. C DTG Max.</i>	<i>Uzaklaşan Grup</i>	<i>Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Toplam Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Katı Bozunma Ürünü</i>	<i>Renk</i>
[Ni(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ].H <sub>2</sub> O MA: 626,70							Yeşil
1	35-185	75(+)	3(H <sub>2</sub> O)	8.66-8.61		Ni(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub>	
2	205-330	233(+) 299(+)		35.29			
3	340-435	385(+)		34.23	85.20-85.57	NiO	Siyah

Çizelge 4.21 (19) kompleksinin termik analiz verileri							
<i>Bileşik</i>	<i>Sıcaklık Aralığı C</i>	<i>Max.Bozunma Sıc. C DTG Max.</i>	<i>Uzaklaşan Grup</i>	<i>Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Toplam Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Katı Bozunma Ürünü</i>	<i>Renk</i>
[Cu(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] 2H <sub>2</sub> O MA: 585,5							Mavi
1	104-142	117(+)	2(H <sub>2</sub> O)	6.48-5.86		Cu(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub>	
2	192-323	217(+)		69.99			
		230(+)					
		287(+)					
					85.10-87.05	CuO	Siyah
Çizelge 4.22 (20) kompleksinin termik analiz verileri							
<i>Bileşik</i>	<i>Sıcaklık Aralığı C</i>	<i>Max.Bozunma Sıc. C DTG Max.</i>	<i>Uzaklaşan Grup</i>	<i>Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Toplam Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Katı Bozunma Ürünü</i>	<i>Renk</i>
[Cu <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ] MA: 911,88							Yeşil
1	170-270	222 (+)		52.99			
		247 (+)					
2	270-345	284 (+)		21,15			
					82,04-82,56	2CuO	Siyah



Çizelge 4.23 (21) kompleksinin termik analiz verileri							
<i>Bileşik</i>	<i>Sıcaklık Aralığı C</i>	<i>Max.Bozunma Sıc. C DTG Max.</i>	<i>Uzaklaşan Grup</i>	<i>Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Toplam Ağırlık Kaybı % Deneysel -Teorik</i>	<i>Katı Bozunma Ürünü</i>	<i>Renk</i>
[Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)](H <sub>2</sub> O) MA: 662,96							Beyaz
1	84-154	111(+)	2(H <sub>2</sub> O)	5.05-5.43		Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub>	
2	184-304	243(+)	2(C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O)	35.48-36.84		Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	
3	329-423	260(+)		30.72			
					76.20-78.33	CdO	Siyah

#### 4.4 NMR Spektroskopisi

Çizelge 4.24 Bazı Komplekslerin <sup>1</sup>H-NMR Spektrum Verileri (400 Mhz, DMSO-d<sub>6</sub>, δ/ppm)

Bileşik No	Bileşik Formülü	-CH <sub>3(et)</sub>	-CH <sub>2(et)</sub>	-CH <sub>3</sub>	H <sub>2</sub> O	NH <sub>2</sub>	Aromatik H	Piridin H
<b>2</b>	[Zn(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	-	-	2,32 (s,6H)	3,45 (bs,2H)	-	7,18-7,85 (m,8H)	-
<b>3</b>	[Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	-	-	2,30 (s,6H)	3,57 (bs,2H)	-	7,16-7,89 (m,8H)	-
<b>9</b>	[Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]- [Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O)]·2H <sub>2</sub> O	-	-	2,30 (s,6H)	3,61 (bs,2H)	7,55-7,59 (s,2H)	7,17-7,90 (m,8H)	8,31 (bs,2H) 8,77 (bs,4H)
<b>10</b>	[Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	-	-	2,31 (s,6H)	3,53 (bs,2H)	7,54-7,56 (s,2H)	7,16-7,90 (m,8H)	8,28 (bs,2H) 8,75 (bs,4H)
<b>16</b>	[Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	1,04;1, 12 (s,6H)	3,49 (s,4H)	2,30 (s,6H)	3,15 (bs,2H)	-	7,16-7,85 (m,8H)	8,63 (bs,2H) 8,69 (bs,4H)
<b>21</b>	[Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	-	-	2,31 (s,6H)	3,51 (bs,2H)	7,17-7,20 (s,2H)	7,81-7,90 (m,8H)	8,31 (bs,2H) 8,77 (bs,4H)

Çizelge 4.25 Bazı Komplekslerin <sup>13</sup>C-NMR Spektrum Verileri (100 Mhz, DMSO-d<sub>6</sub>, δ/ppm)

Bileşik No	Bileşik Formülü	-CH <sub>3</sub> (et)	-CH <sub>2</sub> (et)	-CH <sub>3</sub>	Aromatik C	C=O
<b>2</b>	[Zn(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]			21,74	122,484; 129,205; 130,317; 132,543; 141,417; 142,676; 150,803	166,822; 172,635
<b>3</b>	[Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]			21,04	128,478; 129,840; 131,919; 140,587	172,697
<b>9</b>	[Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]- [Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>6</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O)]·2H <sub>2</sub> O			21,71	122,396; 129,161; 130,493; 132,821; 141,153; 142,500;	166,954; 173,279
<b>14</b>	[Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	13,46; 14,88	41,36; 43,67	21,72	124,797; 129,190; 130,332; 132,529; 134,007; 135,794; 141,402; 14,318; 150,583	167,935; 172,679
<b>19</b>	[Zn <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> (C <sub>10</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]			21,72	124,636; 129,205; 130,347; 130,845; 132,485; 136,921; 141,461; 149,382; 152,326	166,822; 172,679
<b>21</b>	[Cd(C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> (C <sub>8</sub> H <sub>6</sub> N <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]			21,72	124,343; 129,161; 130,508; 130,596; 132,734; 136,409; 141,197; 149,602; 152,545	167,056; 173,338

#### 4.5 UV Görünür Bölge Spektrumu

Çizelge 4.26 Bazı komplekslerin UV-Görünür Bölge verileri

Bileşik Adı	$\lambda_{\max}$ (nm)	$\epsilon$ (L.mol <sup>-1</sup> .cm <sup>-1</sup> )	Ek Şekil No
[Co( <i>p</i> -MB) <sub>2</sub> (NA) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	556	4	49
[Ni( <i>p</i> -MB) <sub>2</sub> (NA) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	424	28	50
[Cu( <i>p</i> -MB) <sub>2</sub> (NA) <sub>2</sub> ]	730	245	51
[Co( <i>p</i> -MB) <sub>2</sub> (DENA) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	588	142	56
[Ni( <i>p</i> -MB) <sub>2</sub> (DENA) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ]	780, 422	14, 37	57
[Cu( <i>p</i> -MB) <sub>2</sub> (DENA) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O)]·H <sub>2</sub> O	734	290	58
[Co( <i>p</i> -MB) <sub>2</sub> (İNA) <sub>2</sub> ]	556	88	60
[Ni( <i>p</i> -MB) <sub>2</sub> (İNA) <sub>2</sub> (H <sub>2</sub> O) <sub>2</sub> ](H <sub>2</sub> O)	780, 422	13, 35	61
[Cu( <i>p</i> -MB) <sub>2</sub> (İNA) <sub>2</sub> ]·2H <sub>2</sub> O	732	230	62
[Cu <sub>2</sub> ( <i>p</i> -MB) <sub>4</sub> (İNA) <sub>2</sub> ]	732	540	63

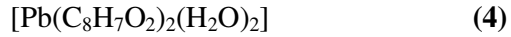
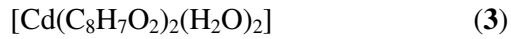
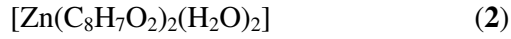
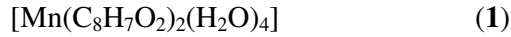
## 5. TARTIŞMA

### 5.1 Spektroskopik Değerlendirme

Çalışmada sentezlenen bileşiklerin IR spektrumları KBr tabletleri halinde alınmış ve spektrumlarında ortaya çıkan karakteristik pikler değerlendirilerek yeni bileşiklerin yapı aydınlatılmasında kullanılmış ve pik değerleri Çizelge 4.2’de verilmiştir.

#### 5.1.1 *p*-Metilbenzoat Komplekslerinin Spektrum Verilerinin Yorumu

İlk kez sentezlenen dört adet *p*-metilbenzoat komplekslerinde metal(II) katyonu: *p*-metilbenzoat mol oranlarının komplekslerde 1 : 2 olduğu anlaşılmıştır.



Sentezlenen metal(II) *p*-metilbenzoik asit komplekslerinin IR spektrum eğrileri Ek Şekil 2-22’de, spektrum verileri Çizelge 4.2’de verilmiştir. Karbonil grubu (C=O) için soğurma bandı asit için 1662 cm<sup>-1</sup> iken (Ek Şekil 1) komplekslerde sırasıyla 1588 cm<sup>-1</sup>-1421 cm<sup>-1</sup> (1), 1562-1415 cm<sup>-1</sup> (2), 1546 cm<sup>-1</sup>-1404 cm<sup>-1</sup> (3), 1559-1385 cm<sup>-1</sup> (4) ve alanlarında valans titreşimlere denk geldiği görülmektedir.

Asimetrik ve simetrik COO<sup>-</sup> titreşimleri arasındaki farklar komplekslerde sırasıyla 167 cm<sup>-1</sup> (1), 147 cm<sup>-1</sup> (2), 142 cm<sup>-1</sup> (3), 174 cm<sup>-1</sup> (4) olarak hesaplanmıştır.

Komplekslerin yapısındaki aromatik halka  $\nu(\text{C}=\text{C})$  titreşim frekansı asitte 1599 cm<sup>-1</sup> iken komplekslerde 1599-1609 cm<sup>-1</sup> aralığında görülmüştür.

Ayrıca tüm komplekslerde IR sonuçlarında kristallendirme sırasında oluşan safsızlıktan kaynaklanan 2360 cm<sup>-1</sup> de CO<sub>2</sub> ve H<sub>2</sub>O’dan kaynaklanan maksimum pik görülmüştür [57].

Komplekslerdeki CH<sub>3</sub> gruplarının C-H titreşim frekansları ise 2966-2918 cm<sup>-1</sup> aralığında valans titreşimlerini verirler.

Komplekslerin M-O bağlanmasına uygun gelen absorpsiyon bantları 645 cm<sup>-1</sup>- 616 cm<sup>-1</sup> aralığında valans titreşimlerini verirler.

Komplekslerin yapısındaki suyun –OH grubundan dolayı oluşabilecek olan soğurma pikleri 3403-2950 cm<sup>-1</sup> aralığında kuvvetli ve geniş bir bant şeklinde gözlenmiştir. Bu bölgedeki bant genişlemesi O-H ve N-H gruplarının hidrojen bağı yaptığını göstermektedir.

(2) nolu kompleksin <sup>1</sup>H-NMR spektrumlarında (Ek Şekil 55) δ2,32 ppm civarında asidin CH<sub>3</sub> protonları, δ3,45 ppm civarında H<sub>2</sub>O protonları, δ7,18-7,85 ppm aralığında aromatik hidrojenler gözlemlenmiştir (Çizelge 4.24).

Aynı bileşiğin <sup>13</sup>C-NMR spektrumlarında ise δ21,74 ppm civarında asidin CH<sub>3</sub> karbonları, aromatik karbonlar δ120-153 ppm aralığında ve C=O grubu karbonları ise δ166-173 ppm aralığında gözlemlenmiştir (Ek Şekil 56) (Çizelge 4.25).

(3) nolu kompleksin <sup>1</sup>H-NMR spektrumlarında (Ek Şekil 57) δ2,30 ppm civarında asidin CH<sub>3</sub> protonları, δ3,57 ppm civarında H<sub>2</sub>O protonları, δ7,17 ve 7,89 ppm civarında aromatik hidrojenleri gözlemlenmiştir (Çizelge 4.24).

Aynı bileşiğin <sup>13</sup>C-NMR spektrumlarında ise δ21,04 ppm civarında asidin CH<sub>3</sub> karbonları, aromatik karbonlar δ128-141 ppm aralığında ve C=O grubu karbonları ise δ166-173 ppm aralığında gözlemlenmiştir (Ek Şekil 58) (Çizelge 4.25). Böylece dietilnikotinamid ligandının olmadığı belirlenmiştir.

(1) kompleksinin DTA eğrisinde (Ek Şekil 23) 94 ve 470°C maksimum sıcaklıklara denk gelen iki basamaklı bir bozunma göstermektedir. Bu bozunmalara karşılık gelen DTA pikleri endotermiktir. Kompleksin yapısındaki 4 mol su 94°C sıcaklığında ilk basamakta ayrılmaktadır (deneysel 18,41-teorik 18,14). İkinci basamakta asit ligandı

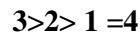
bozularak kompleksten geriye  $MnO_2$  kaldığı hesaplanmıştır (deneysel 23,80-teorik 21,67) (Çizelge 4.3).

(2) kompleksinin DTA eğrisinde (Ek Şekil 24) 143, 321 ve 425°C maksimum sıcaklıklara denk gelen üç basamaklı bir bozunma göstermektedir. Bu bozunmalara karşılık gelen DTA pikleri endotermiktir. İlk basamakta kompleksten 2 mol su ayrılmaktadır(deneysel 8,92-teorik 9,69). Kompleksten geriye ZnO kalmıştır (deneysel 20,17-teorik 21,91) (Çizelge 4.4).

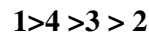
(3) kompleksinin DTA eğrisinde (Ek Şekil 25) 153°C ve 394°C (endotermik) maksimum sıcaklıklara denk gelen iki basamaklı bir bozunma gösteriyor. 123-173°C sıcaklık aralığında önce 2 mol suyunu kaybeden (deneysel 8,32-teorik 8,60) kompleksten geriye kalan ürünler bozularak kompleksten geriye CdO+kömür kaldığı tahmin edilmektedir (deneysel 37,26-teorik 30,69) (Çizelge 4.5).

(4) kompleksinin DTA eğrisinde (Ek Şekil 26) iki basamaklı bir bozunma göstermektedir. Bu bozunmalara karşılık gelen 94 ve 416°C deki DTA pikleri endotermiktir. Kompleksin yapısındaki 1 mol koordinasyon suyu ilk basamakta 94°C maksimum sıcaklıkta ayrılırken (deneysel 4,24-teorik 3,64), diğer basamakta ise asit ligandı ayrılarak kompleksten geriye PbO kalmıştır (deneysel 45,98-teorik 45,07) (Çizelge 4.6).

Sulu komplekslerin dayanıklılığı aşağıdaki sıraya göre değişmektedir:

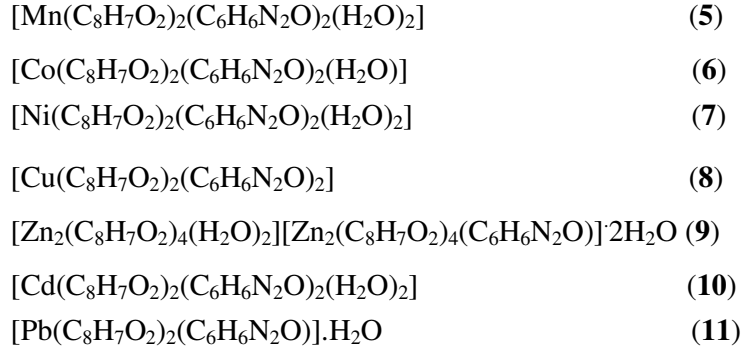


Susuz komplekslerin termal kararlılıkları ise aşağıdaki sıraya göre değişmektedir:



### **5.1.2 *p*-Metilbenzoat-Nikotinamid Karışık Komplekslerinin Spektrum Verilerinin Yorumu**

İlk kez sentezlenen yedi adet *p*-metilbenzoat-nikotinamid karışık komplekslerinde metal(II) kasyonu: *p*-metilbenzoat : nikotinamid oranları **9** ve **11** nolu komplekslerde 1 : 2 : 1, diğerlerinde ise 1 : 2 : 2 oldukları belirlenmiştir.



Sentezlenen metal(II) *p*-metilbenzoik asit komplekslerinin IR spektrum eğrileri Ek Şekil 1-22'de spektrum verileri Çizelge 4'de verilmiştir. Karbonil grubu (C=O) için soğurma bandı asit için  $1662 \text{ cm}^{-1}$  iken (Ek Şekil 1) komplekslerde sırasıyla  $1556\text{-}1382 \text{ cm}^{-1}$  (5),  $1596\text{-}1403 \text{ cm}^{-1}$  (6),  $1598\text{-}1400 \text{ cm}^{-1}$  (7),  $1596\text{-}1382 \text{ cm}^{-1}$  (8),  $1565\text{-}1425 \text{ cm}^{-1}$  (9),  $1588\text{-}1406 \text{ cm}^{-1}$  (10),  $1545\text{-}1407 \text{ cm}^{-1}$  (11) alanlarında valans titreşimlere denk geldiği görülmektedir.

Asimetrik ve simetrik  $\text{COO}^-$  titreşimleri arasındaki farklar komplekslerde  $174 \text{ cm}^{-1}$  (5),  $193 \text{ cm}^{-1}$  (6),  $198 \text{ cm}^{-1}$  (7),  $214 \text{ cm}^{-1}$  (8),  $140 \text{ cm}^{-1}$  (9),  $182 \text{ cm}^{-1}$  (10),  $138 \text{ cm}^{-1}$  (11) olarak hesaplanmıştır. Nikotinamid komplekslerinde  $\Delta\nu > 140 \text{ cm}^{-1}$  değeri *p*-MB ligandının monodentat bağlandığına işaret etmektedir [58-59].

(11) nolu kompleks hariç diğer komplekslerde literatüre [60-68] uygun olarak nikotinamidin karbonil gruplarının değişikliğe uğramadığı görülmektedir. Nikotinamid ligandı içeren komplekslerde karbonil grubu titreşimleri  $1610\text{-}1697 \text{ cm}^{-1}$  aralığında görülmüştür. Nikotinamid bileşiğinin karbonil grubu titreşim frekansı  $1679 \text{ cm}^{-1}$  iken kurşun bileşiğinde (11)  $\nu(\text{C}=\text{O})$   $1610 \text{ cm}^{-1}$  titreşim frekansı değeri nikotinamidin karbonil grubundan koordinasyona katılma olduğunu göstermektedir.

Piridin halkasının C-N grubunun absorpsiyon bantları da komplekslerde sırasıyla  $1030 \text{ cm}^{-1}$  (5),  $1031 \text{ cm}^{-1}$  (6),  $1020 \text{ cm}^{-1}$  (7),  $1032 \text{ cm}^{-1}$  (8),  $1035 \text{ cm}^{-1}$  (9),  $1034 \text{ cm}^{-1}$  (10),  $1017 \text{ cm}^{-1}$  (11) alanlarında deformasyon pikleri verdiği saptanmıştır.



Nikotinamid moleküllerinin NH<sub>2</sub> gruplarının N-H gerilme pikleri komplekslerde 3526-3312 cm<sup>-1</sup> aralığında ortaya çıkmıştır.

Komplekslerin yapısındaki aromatik halka  $\nu(\text{C}=\text{C})$  titreşim frekansı asitte 1599 cm<sup>-1</sup> iken komplekslerde 1588-1628 cm<sup>-1</sup> aralığında görülmüştür.

Komplekslerdeki CH<sub>3</sub> gruplarının C-H titreşim frekansları ise 2973-2900 cm<sup>-1</sup> aralığında valans titreşimlerini verirler.

Komplekslerin M-O bağlanmasına uygun gelen absorpsiyon bantları 693 cm<sup>-1</sup> - 614 cm<sup>-1</sup> aralığında ve komplekslerin temelini oluşturan M-N bağlanmaları da literatüre uygun olarak 477 cm<sup>-1</sup>–427 cm<sup>-1</sup> aralığında valans titreşimlerini verirler.

Komplekslerin yapısındaki suyun –OH grubundan dolayı oluşan soğurma pikleri 3424-2950 cm<sup>-1</sup> aralığında kuvvetli ve geniş bir bant şeklinde gözlenmiştir. Bu bölgedeki bant genişlemesi O-H ve N-H gruplarının hidrojen bağı yaptığını göstermektedir.

(9) nolu kompleksin <sup>1</sup>H-NMR spektrumlarında (Ek Şekil 59)  $\delta$ 2,30 ppm civarında asidin CH<sub>3</sub> protonları,  $\delta$ 3,61 ppm civarında H<sub>2</sub>O protonları,  $\delta$ 7,55-7,59 ppm aralığında nikotinamidin NH<sub>2</sub> protonları,  $\delta$ 7,17 ve 7,90 ppm civarında aromatik hidrojenler ve  $\delta$ 8,31-8,77 ppm aralığında piridin halkasının hidrojenleri gözlemlenmiştir (Çizelge 4.24).

Aynı bileşiğin <sup>13</sup>C-NMR spektrumlarında ise  $\delta$ 21,72 ppm civarında asidin CH<sub>3</sub> karbonları, aromatik karbonlar  $\delta$ 124-153 ppm aralığında ve C=O grubu karbonları ise  $\delta$ 166-173 ppm aralığında gözlemlenmiştir (Ek Şekil 60) (Çizelge 4.25).

(10) nolu kompleksin <sup>1</sup>H-NMR spektrumlarında (Ek Şekil 61)  $\delta$ 2,31 ppm civarında asidin CH<sub>3</sub> protonları,  $\delta$ 3,53 ppm civarında H<sub>2</sub>O protonları,  $\delta$ 7,54-7,56 ppm aralığında nikotinamidin NH<sub>2</sub> protonları,  $\delta$ 7,16 ve 7,90 ppm civarında aromatik hidrojenler ve  $\delta$ 8,28-8,75 ppm aralığında piridin halkasının hidrojenleri gözlemlenmiştir (Çizelge 4.24).

Aynı bileşiğin  $^{13}\text{C}$ -NMR spektrumlarında ise  $\delta$ 21,72 ppm civarında asidin  $\text{CH}_3$  karbonları, aromatik karbonlar  $\delta$ 124-153 ppm aralığında ve  $\text{C}=\text{O}$  grubu karbonları ise  $\delta$ 167-174 ppm aralığında gözlemlenmiştir (Ek Şekil 62) (Çizelge 4.25).

(5) kompleksinin DTA eğrisinde (Ek Şekil 27)  $109^\circ\text{C}$ ,  $238^\circ\text{C}$  ve  $466^\circ\text{C}$  maksimum sıcaklıklara denk gelen üç basamaklı bir bozunma gösteriyor. Kompleksten  $88$ - $176^\circ\text{C}$  sıcaklık aralığında 2 mol su ayrıldığı hesaplanmıştır (deneysel 6,80-teorik 5,95). Son basamakta da asidin parçalanması ile kompleksten geriye  $\text{MnO}$  kaldığı hesaplanmıştır (deneysel 12,93-teorik 11,71) (Çizelge 4.7).

(6) kompleksinin DTA eğrisinde (Ek Şekil 28)  $88$ - $165^\circ\text{C}$ ,  $188$ - $306^\circ\text{C}$  ve  $380$ - $465^\circ\text{C}$  sıcaklık aralığında  $147$ ,  $249$  ve  $421^\circ\text{C}$  (endotermik) maksimum sıcaklıklara denk gelen üç basamaklı bozunmada birinci basamakta kompleksin iki mol su ayrılmakta (deneysel 6,56-teorik 5,91) ve kompleksten geriye  $\text{CoO}$ +kömür kalmaktadır (deneysel 13,79-teorik 12,33) (Çizelge 4.8).

(7) kompleksinin DTA eğrisinde (Ek Şekil 29) üç basamaklı bir bozunma göstermektedir. Bu bozunmalara karşılık gelen  $176$ ,  $299$  ve  $396^\circ\text{C}$  de endotermik DTA pikleri görülmüştür. Kompleksin yapısındaki 2 mol koordinasyon suyu ilk basamakta  $165$ - $186^\circ\text{C}$  sıcaklık aralığında ortamdan çıkarken (deneysel 5,91-teorik 5,94), ikinci basamakta ve üçüncü basamakta organik ligandlar birlikte ayrılmakta ve kompleksten geriye  $\text{NiO}$  + kömür kalmıştır (deneysel 10,51-teorik 12,33) (Çizelge 4.9).

(8) kompleksinin DTA eğrisinde (Ek Şekil 30)  $231$  ve  $255^\circ\text{C}$  maksimum sıcaklıklara denk gelen bir basamaklı bir bozunma göstermektedir. Bu bozunmalara karşılık gelen DTA piki endotermiktir. Kompleksten geriye  $\text{CuO}$  + kömür kalmıştır (deneysel 11,68-teorik 12,95)(Çizelge 4.10).

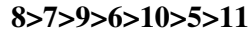
(9) kompleksinin DTA eğrisinde (Ek Şekil 31)  $175$ ,  $206$ ,  $259$  ve  $421^\circ\text{C}$  de endotermik DTA pikleri görülmüştür. Kompleks dört basamaklı bir bozunma gösteriyor. Birinci basamakta 4 mol su ve 0.25 mol nikotinamid ayrılmakta ve kompleksten geriye 4 mol  $\text{Zn}$  + kömür kaldığı düşünülmektedir (deneysel 10,21-teorik 15,82) (Çizelge 4.11).

(10) kompleksinin DTA eğrisinde (Ek Şekil 32) dört basamaklı bir bozunma göstermektedir. Bu bozunmalara karşılık gelen 129, 267, 401°C (endotermik) ve 613°C (ekzotermik) de DTA pikleri görülmüştür. Kompleksin koordinasyon yapısı dışındaki 2 mol su ilk basamakta 118-154°C sıcaklık aralığında ortamdan çıkarken diğer basamaklardaki ayrışmalar belirgin değildir. DTA eğrisindeki su molekülü için ağırlık kaybı teorik değerle uyumludur (deneysel 5,48-teorik 5,43). Kompleksten geriye Cd + kömür kaldığı düşünülmektedir (deneysel 12,37-teorik 16,90) (Çizelge 4.12).

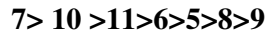
(11) kompleksinin DTA eğrisinde (Ek Şekil 33) 95, 252, 379 ve 446°C maksimum sıcaklıklara denk gelen üç basamaklı bir bozunma gösteriyor. Kompleksten 70-169°C sıcaklık aralığında önce 2 mol su ayrılmıştır (deneysel 3,41-teorik 2,92). Kompleksten geriye PbO<sub>2</sub> kaldığı hesaplanmıştır (deneysel 40,67-teorik 38,73) (Çizelge 4.13).

Komplekslerin toz X ışını diffraktogram verileri mukayese edildiğinde (5) ile (6) komplekslerinin eş yapılı oldukları düşünülmektedir (Ek Şekil 67) (Ek Çizelge 41 ve 42) [68-70].

Sulu komplekslerin dayanıklılığı aşağıdaki sıraya göre değişmektedir:

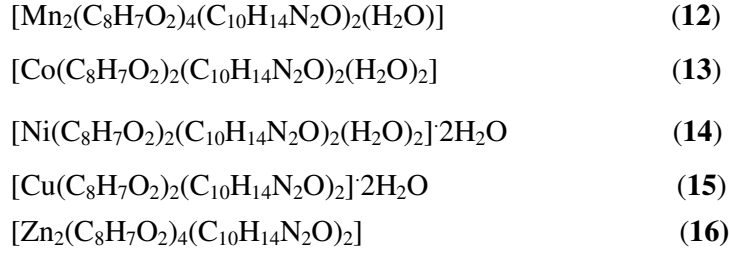


Susuz komplekslerin termal kararlılıkları ise aşağıdaki sıraya göre değişmektedir:



### 5.1.3 *p*-Metilbenzoat-Dietilnikotinamid Karışık Komplekslerinin Spektrum Verilerinin Yorumu

İlk kez sentezlenen beş adet *p*-metilbenzoat-dietilnikotinamid karışık komplekslerinde Metal(II) katyonu: *p*-metilbenzoat : dietilnikotinamid oranları **12** ve **16** nolu komplekslerde 1 : 2 : 1, diğerlerinde ise 1 : 2 : 2 oldukları belirlenmiştir.



Sentezlenen metal(II) *p*-metilbenzoat-dietilnikotinamid komplekslerinin IR spektrum eğrileri Ek Şekil 1-22’de spektrum verileri Çizelge 4’de verilmiştir. Karbonil grubu (C=O) için soğurma bandı asit için  $1662 \text{ cm}^{-1}$  iken (Ek Şekil 1) komplekslerde sırasıyla  $1547\text{-}1384 \text{ cm}^{-1}$  (12),  $1565\text{-}1385 \text{ cm}^{-1}$  (13),  $1548\text{-}1385 \text{ cm}^{-1}$  (14),  $1565\text{-}1406 \text{ cm}^{-1}$  (15),  $1564\text{-}1426 \text{ cm}^{-1}$  (16) alanlarında valans titreşimlere denk geldiği görülmektedir.

Asimetrik ve simetrik  $\text{COO}^-$  titreşimleri arasındaki farklar komplekslerde sırasıyla  $161 \text{ cm}^{-1}$  (12),  $162 \text{ cm}^{-1}$  (13),  $163 \text{ cm}^{-1}$  (14),  $156 \text{ cm}^{-1}$  (15),  $138 \text{ cm}^{-1}$  (16) olarak hesaplanmıştır. Dietilnikotinamid komplekslerinde  $\Delta\nu < 162 \text{ cm}^{-1}$  değeri *p*-MB ligandının bidendat bağlandığına işaret etmektedir [58-59].

Bütün komplekslerde amidin karbonil gruplarının da yine pek değişikliğe uğramadığı görülmektedir. Dietilnikotinamid ligandı içeren komplekslerde karbonil grubu titreşimleri  $1615\text{-}1704 \text{ cm}^{-1}$  aralığında görülmüştür. Bu sonuçlar bize literatüre [60-68] uygun olarak dietilnikotinamid ligandlarının amid grubundan koordinasyona herhangi bir katılmanın olmadığını gösterir.

Piridin halkasının C-N grubunun absorpsiyon bantları da komplekslerde sırasıyla  $1050 \text{ cm}^{-1}$  (12),  $1033 \text{ cm}^{-1}$  (13),  $1034 \text{ cm}^{-1}$  (14),  $1049 \text{ cm}^{-1}$  (15),  $1059 \text{ cm}^{-1}$  (16) alanlarında deformasyon pikleri verdiği saptanmıştır.

Komplekslerin yapısındaki aromatik halka  $\nu(\text{C}=\text{C})$  titreşim frekansı asitte  $1599 \text{ cm}^{-1}$  iken komplekslerde  $1588\text{-}1628 \text{ cm}^{-1}$  aralığında görülmüştür.

Komplekslerdeki  $\text{CH}_3$  gruplarının C-H titreşim frekansları ise  $2973\text{-}2900 \text{ cm}^{-1}$  aralığında valans titreşimlerini verirler.

Komplekslerin M-O bağlanmasına uygun gelen absorpsiyon bantları  $693\text{ cm}^{-1}$  -  $614\text{ cm}^{-1}$  aralığında ve komplekslerin temelini oluşturan M-N bağlanmaları da literatüre uygun olarak  $477\text{ cm}^{-1}$ – $427\text{ cm}^{-1}$  aralığında valans titreşimlerini verirler.

Komplekslerin yapısındaki suyun –OH grubundan dolayı oluşabilecek olan soğurma pikleri  $3424\text{--}2950\text{ cm}^{-1}$  aralığında kuvvetli ve geniş bir bant şeklinde gözlenmiştir. Bu bölgedeki bant genişlemesi O-H ve N-H gruplarının hidrojen bağı yaptığını göstermektedir.

**16** nolu kompleksin  $^1\text{H-NMR}$  spektrumlarında (Ek Şekil 63)  $\delta 1,04\text{--}1,12$  ppm civarında etil grubunun  $\text{CH}_3$  protonları ile  $\delta 3,49$  ppm aralığında  $\text{CH}_2$  protonları,  $\delta 2,30$  ppm civarında asidin  $\text{CH}_3$  protonları,  $\delta 3,15$  ppm civarında  $\text{H}_2\text{O}$  protonları,  $\delta 7,16\text{--}7,85$  ppm aralığında aromatik hidrojenler ve  $\delta 8,63\text{--}8,69$  ppm aralığında piridin halkasının hidrojenleri gözlemlenmiştir (Çizelge 4.24).

Aynı bileşiğin  $^{13}\text{C-NMR}$  spektrumlarında ise alifatik karbonlar  $\delta 13,46\text{--}14,88$  ppm civarında dietilnikotinamidin etil grubunun  $\text{CH}_3$  protonları ile  $\delta 41,36\text{--}43,67$  ppm civarında dietilnikotinamidin etil grubunun  $\text{CH}_2$  karbonları,  $\delta 21,72$  ppm civarında asidin  $\text{CH}_3$  karbonları, aromatik karbonlar  $\delta 124\text{--}151$  ppm aralığında ve C=O grubu karbonları ise  $\delta 167\text{--}173$  ppm aralığında gözlemlenmiştir (Ek Şekil 64) (Çizelge 4.25).

(**12**) kompleksinin DTA eğrisinde (Ek Şekil 34)  $85$ ,  $200$  ve  $463^\circ\text{C}$  maksimum sıcaklıklara denk gelen üç basamaklı bir bozunma göstermektedir. Bu bozunmalara karşılık gelen DTA pikleri endotermiktir. Birinci basamaktaki ayrışmalar belirgin değildir. Kompleksten geriye Mn kalmıştır (deneysel  $8,86$ -teorik  $10,72$ ) (Çizelge 4.14).

(**13**) kompleksinin DTA eğrisinde (Ek Şekil 35)  $170$ ,  $229$  ve  $413^\circ\text{C}$  maksimum sıcaklıklarda üç bozunma göstermekteyken bu bozunmalara karşılık gelen DTA pikleri endotermiktir. Kompleksin yapısındaki  $2$  mol su ve  $0,25$  mol dietilnikotinamid ilk basamakta ayrışmaktadır (deneysel  $10,48$ -teorik  $11,15$ ). İkinci basamakta

dietilnikotinamidin tamamı ayrılmakta (deneysel 42,73-teorik 43,16) ve kompleksten geriye son olarak Co + kömür kaldığı düşünülmektedir (Çizelge 4.15).

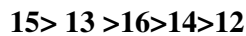
(14) kompleksi DTA eğrisinde (Ek Şekil 36) 136, 247 ve 379°C maksimum sıcaklıklara denk gelen üç basamaklı bir bozunma göstermektedir. Bu bozunmalara karşılık gelen DTA pikleri endotermiktir. Kompleksin yapısındaki 2 mol su ve 0.25 mol dietilnikotinamid ilk basamakta ayrılmaktadır (deneysel 11,29-teorik 11,20). Son basamakta geriye kalan ürünler de bozularak final ürününün Ni + kömür olduğu düşünülmektedir (deneysel 4,62-teorik 8,16) (Çizelge 4.16).

(15) kompleksinin DTA eğrisinde (Ek Şekil 37) üç basamaklı bir bozunma göstermektedir. Bu bozunmalara karşılık gelen 221, 284 ve 418°C deki DTA pikleri endotermiktir. Kompleksin yapısındaki 2 mol su ve 2 mol dietilnikotinamid ilk basamakta 84-154°C sıcaklık aralığında ayrılmaktadır (deneysel 57,03-teorik 54,20) ve son basamakta ise metal(II)benzoat bozularak kompleksten geriye Cu kaldığı hesaplanmıştır (deneysel 8,20-teorik 8,75) (Çizelge 4.17).

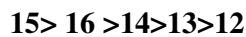
(16) kompleksinin DTA eğrisinde (Ek Şekil 38) 162, 281 ve 419°C maksimum sıcaklıklara denk gelen üç basamaklı bir bozunma göstermektedir. Bu bozunmalara karşılık gelen DTA pikleri endotermiktir. Birinci basamaktaki ayrışmalar belirgin değildir. İkinci basamakta 2 mol dietilnikotinamid ayrılmakta (deneysel 34,35-teorik 34,66) ve üçüncü basamakta ise 3 mol asit ligandının ayrıldığı hesaplanmıştır (deneysel 39,19-teorik 39,40). Kompleksten geriye Zn kalmıştır (deneysel 10,16-teorik 12,72) (Çizelge 4.18).

Komplekslerin toz X ışını diffraktogram verileri mukayese edildiğinde (13) ile (14) komplekslerinin eş yapıları oldukları düşünülmektedir (Ek Şekil 68) (Ek Çizelge 43 ve 44) [69-71].

Sulu komplekslerin dayanıklılığı aşağıdaki sıraya göre değişmektedir:

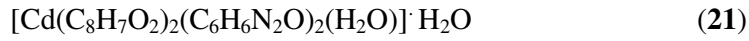
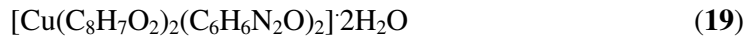
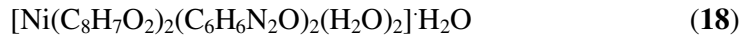
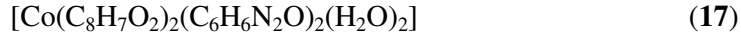


Susuz komplekslerin termal kararlılıkları ise aşağıdaki sıraya göre değişmektedir:



### 5.1.4 *p*-Metilbenzoat-İzonikotinamid Karışık Komplekslerinin Spektrum Verilerinin Yorumu

Sentezlenen metal(II)-*p*-metilbenzoat-izonikotinamid komplekslerinde metal: *p*-metilbenzoat : izonikotinamid oranlarının **20** kompleksinde 1 : 2 : 1, diğerlerinde ise 1 : 2 : 2 oldukları belirlenmiştir.



Sentezlenen metal(II)-*p*-metilbenzoat-izonikotinamid komplekslerinin IR spektrum eğrileri Ek Şekil 1-22' de spektrum verileri Çizelge 4'de verilmiştir. Karbonil grubu (C=O) için soğurma bandı asit için 1662 cm<sup>-1</sup> iken (Ek Şekil 1) komplekslerde 1556-1401 cm<sup>-1</sup> (**17**), 1554-1382 cm<sup>-1</sup> (**18**), 1554-1380 cm<sup>-1</sup> (**19**), 1565 cm<sup>-1</sup>-1403 cm<sup>-1</sup> (**20**), 1592-1385 cm<sup>-1</sup> (**21**) alanlarında valans titreşimlere denk geldiği görülmektedir.

Asimetrik ve simetrik COO<sup>-</sup> titreşimleri arasındaki farklar komplekslerde sırasıyla 155 cm<sup>-1</sup> (**17**), 172 cm<sup>-1</sup> (**18**), 178 cm<sup>-1</sup> (**19**), 162 cm<sup>-1</sup> (**20**), 142 cm<sup>-1</sup> (**21**) olarak hesaplanmıştır. İzonikotinamid moleküllerinin NH<sub>2</sub> gruplarının N-H gerilme pikleri komplekslerde 3526-3308 cm<sup>-1</sup> aralığında ortaya çıkmıştır.

Bütün komplekslerde amidin karbonil gruplarının da yine pek değişikliğe uğramadığı görülmektedir. İzonikotinamid ligandı içeren komplekslerde karbonil grubu titreşimleri 1681-1704 cm<sup>-1</sup> aralığında görülmüştür. Bu sonuçlar bize literatüre [60-68] uygun olarak izonikotinamid ligandlarının amid grubundan koordinasyona herhangi bir katılmanın olmadığını gösterir.

Piridin halkasının C-N grubunun absorpsiyon bantları da komplekslerde sırasıyla 1000 cm<sup>-1</sup> (**17**), 958 cm<sup>-1</sup> (**18**), 1020 cm<sup>-1</sup> (**19**), 1019 cm<sup>-1</sup> (**20**) 1096 cm<sup>-1</sup> (**21**) alanlarında deformasyon pikleri verdiği saptanmıştır. İzonikotinamid moleküllerinin NH<sub>2</sub>

gruplarının N-H gerilme pikleri komplekslerde 3488-3308  $\text{cm}^{-1}$  aralığında ortaya çıkmıştır.

Komplekslerin yapısındaki aromatik halka  $\nu(\text{C}=\text{C})$  titreşim frekansı asitte 1599  $\text{cm}^{-1}$  iken komplekslerde 1588-1628  $\text{cm}^{-1}$  aralığında görülmüştür. Komplekslerdeki  $\text{CH}_3$  gruplarının C-H titreşim frekansları ise 2973-2900  $\text{cm}^{-1}$  aralığında valans titreşimlerini verirler. Komplekslerin M-O bağlanmasına uygun gelen absorpsiyon bantları 693  $\text{cm}^{-1}$ -614  $\text{cm}^{-1}$  aralığında ve komplekslerin temelini oluşturan M-N bağlanmaları da literatüre uygun olarak 477  $\text{cm}^{-1}$ -427  $\text{cm}^{-1}$  aralığında valans titreşimlerini verirler. Komplekslerin yapısındaki suyun -OH grubundan dolayı oluşabilecek olan soğurma pikleri 3424-2950  $\text{cm}^{-1}$  aralığında kuvvetli ve geniş bir bant şeklinde gözlenmiştir. Bu bölgedeki bant genişlemesi O-H ve N-H gruplarının hidrojen bağı yaptığını göstermektedir.

(21) nolu kompleksin  $^1\text{H-NMR}$  spektrumlarında (Ek Şekil 65)  $\delta$ 2,31 ppm civarında asidin  $\text{CH}_3$  protonları,  $\delta$ 3,51 ppm civarında asidin  $\text{H}_2\text{O}$  protonları,  $\delta$ 7,17-7,20 ppm aralığında izonikotinamidin  $\text{NH}_2$  protonları,  $\delta$ 7,81-7,90 ppm aralığında aromatik hidrojenler ve  $\delta$ 8,31-8,77 ppm aralığında piridin halkasının hidrojenleri gözlemlenmiştir (Çizelge 4.24).

Aynı bileşiğin  $^{13}\text{C-NMR}$  spektrumlarında ise  $\delta$ 21,71 ppm civarında asidin  $\text{CH}_3$  karbonları, aromatik C'lar  $\delta$  122-143 ppm aralığında ve C=O grubu karbonları ise  $\delta$ 166-174 ppm aralığında gözlemlenmiştir (Ek Şekil 66) (Çizelge 4.25).

(17) kompleksinin DTA eğrisinde (Ek Şekil 39) 241, 312 ve 405°C maksimum sıcaklıklara denk gelen iki basamaklı bir bozunma göstermektedir. Bu bozunmalara karşılık gelen DTA pikleri endotermiktir. Kompleksten geriye CoO kalmaktadır (deneysel 14,91-teorik 15,87) (Çizelge 4.19).

(18) kompleksinin DTA eğrisinde (Ek Şekil 40) 75, 233, 299, 385°C maksimum sıcaklıklarda endotermik DTA piklerine denk gelen üç basamaklı bir bozunma göstermektedir. Kompleksteki 3 mol su 75°C de ayrılmaktadır (deneysel 8,66-teorik 8,61). Kompleksten geriye NiO kalmıştır (deneysel 14,80-teorik 14,43) (Çizelge 4.20).



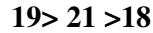
(19) kompleksinin DTA eğrisinde (Ek Şekil 41) 117, 217, 230, 287°C maksimum sıcaklara denk gelen iki bozunma göstermektedir. Bu bozunmalara karşılık gelen DTA pikleri endotermiktir. Kompleksin yapısındaki 2 mol koordinasyon suyu 104-142°C sıcaklık aralığında ilk basamakta ayrılmaktadır (deneysel 6,48-teorik 5,86). Kompleksten geriye CuO kaldığı hesaplanmıştır (deneysel 14,90-teorik 12,95) (Çizelge 4.21).

(19) kompleksinin (MA= 677,55) m/z 550-700 aralığında alınan kütle spektrumunda m/z 677,1 de molekül piki görülmektedir. m/z 640,2 de koordinasyon dışı 2 mol su ayrılışına uygun gelen pik ve sırasıyla m/z 621,8 de ve m/z 602,2 de diğer su moleküllerinin ayrılışına denk gelen pikler görülmüştür (Ek Şekil 54).

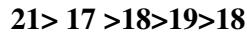
(20) kompleksinin DTA eğrisinde (Ek Şekil 42) 222, 247 ve 284°C maksimum sıcaklıklara denk gelen iki basamaklı bir bozunma göstermektedir. Bu bozunmalara karşılık gelen DTA pikleri endotermiktir. Kompleksten geriye 2 mol CuO kalmaktadır (deneysel 17,96-teorik 17,44) (Çizelge 4.22).

(21) kompleksinin DTA eğrisinde (Ek Şekil 43) üç basamaklı bir bozunma göstermektedir. Bu bozunmalara karşılık gelen 111, 243 ve 260°C deki DTA pikleri endotermiktir. Kompleksin yapısındaki 2 mol su ilk basamakta 84-154°C sıcaklık aralığında ayrılmaktadır (deneysel 5,05-teorik 5,54). İkinci basamakta izonikotinamid ligandı ayrılmakta (deneysel 35,48-teorik 36,84) ve kompleksten geriye CdO kaldığı hesaplanmıştır (deneysel 13,80-teorik 11,61) (Çizelge 4. 23).

Sulu komplekslerin dayanıklılığı aşağıdaki sıraya göre değişmektedir:



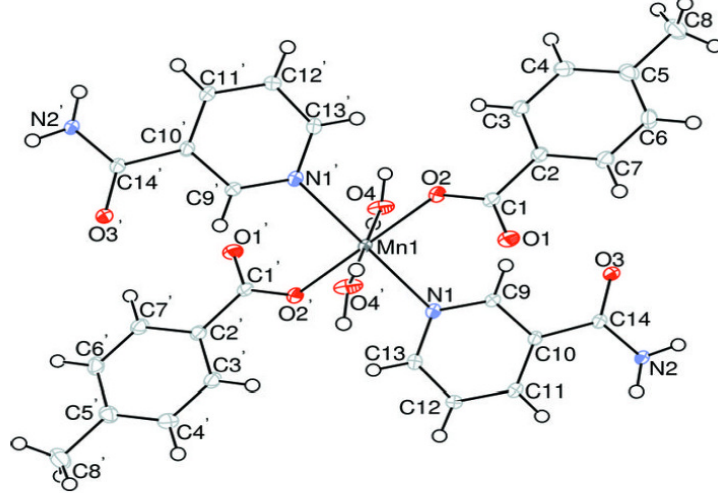
Susuz komplekslerin termal kararlılıkları ise aşağıdaki sıraya göre değişmektedir:



## 5.2 X-Ray Analiz Sonuçları

### 5.2.1 Diaquabis(4-metilbenzoat- $\kappa O$ )bis(nikotinamid- $\kappa N^I$ )mangan(II) (5)

Diaquabis(4-metilbenzoat)bis(nikotinamid)mangan(II) (5) kompleksinde mangan iyonu simetri merkezindedir (Şekil 5.1). Asimetrik birim bir *p*-metilbenzoat anyonu, bir nikotinamid ligandı ve koordine olmuş bir su molekülü içermektedir. Mangan(II) iyonu ekvator düzlemindeki dört oksijen atomu ile az bozulmuş kare düzlem düzenindeyken, NA ligandının iki piridinik eksen pozisyonundaki N atomları ile az bozulmuş oktahedral koordinasyon tamamlanmaktadır. Piridin ve benzen halkaları arasındaki dihedral açı  $42.44 (5)^\circ$  iken, karboksilat grubu ile komşu benzen halkası arasındaki dihedral açı  $9.01 (7)^\circ$  dir. Kristalin atomik uzaklık ve geometrik parametreleri Ek Çizelge 1-3'de verilmiştir. Kristal yapıda moleküller molekül içi O-H $\cdots$ O, N-H $\cdots$ O ve C-H $\cdots$ O hidrojen bağları ve O-H $\cdots$  $\pi$  ve C-H $\cdots$  $\pi$  etkileşimleri ile (001) düzlemine paralel iki boyutlu ağ biçiminde bağlıdırlar (Ek Çizelge 4) [72].

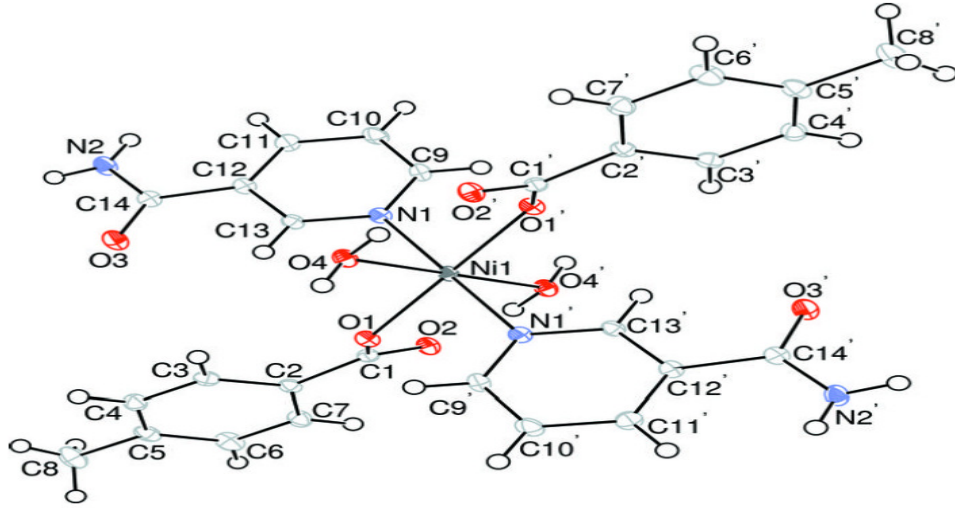


Şekil 5.1. (5) kompleksinin kristal yapısı [72].

Kristal verileri: molekül formülü  $[\text{Mn}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ ,  $M_A = 605,51$  g/mol, kristal sistemi triklinik, renksiz, uzay grubu  $\overline{P1}$ , birim hücre boyutları  $a = 7,3289 (2) \text{ \AA}$ ,  $b = 10,1768 (3) \text{ \AA}$ ,  $c = 10,6292 (3) \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 66,852 (2)^\circ$ ,  $\beta = 78,232 (4)^\circ$ ,  $\gamma = 70,206 (3)^\circ$ ,  $V = 683,58 (6) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 1$ , Mo K $\alpha$  radyasyonu,  $\mu = 0,54 \text{ mm}^{-1}$ ,  $T = 100 \text{ K}$  [72].

### 5.2.2 Diaquabis(4-metilbenzoat- $\kappa O$ )bis(nikotinamid- $\kappa N^1$ )nikel(II) (7)

Diaquabis(4-metilbenzoat)bis(nikotinamid)nikel(II) (7) kompleksinde nikel atomu simetri merkezinde bulunmaktadır. Molekül iki *p*-metilbenzoat ligandı, iki NA ve iki koordine olmuş su molekülü içerir, tüm ligandlar tekdişlidir. Nikel atomu ekvator düzlemindeki dört oksijen atomu ile biraz bozulmuş kare düzlemsel düzenindeyken, NA ligandlarının eksen pozisyonundaki iki N atomu ile biraz bozulmuş oktahedral koordinasyon oluşmaktadır (Şekil 5.2). Piridin ve benzen halkaları arasındaki dihedral açı  $87.81(4)^\circ$  iken, karboksil grupları ile komşu benzen halkaları arasındaki dihedral açı  $26.10(10)^\circ$  dir. Kristalin atomik uzaklık ve geometrik parametreleri Ek Çizelge 5-7’de verilmiştir. Kristal yapıda moleküller O-H $\cdots$ O ve N-H $\cdots$ O hidrojen bağları ile üç boyutlu ağ biçiminde bağlıdır. Benzen halkaları arasındaki  $\pi$ - $\pi$  etkileşimi kristal yapıyı daha dayanıklı yapmaktadır. Piridin halkaları arasında zayıf C-H $\cdots$  $\pi$  etkileşimi de görülür (Ek Çizelge 8) [73].

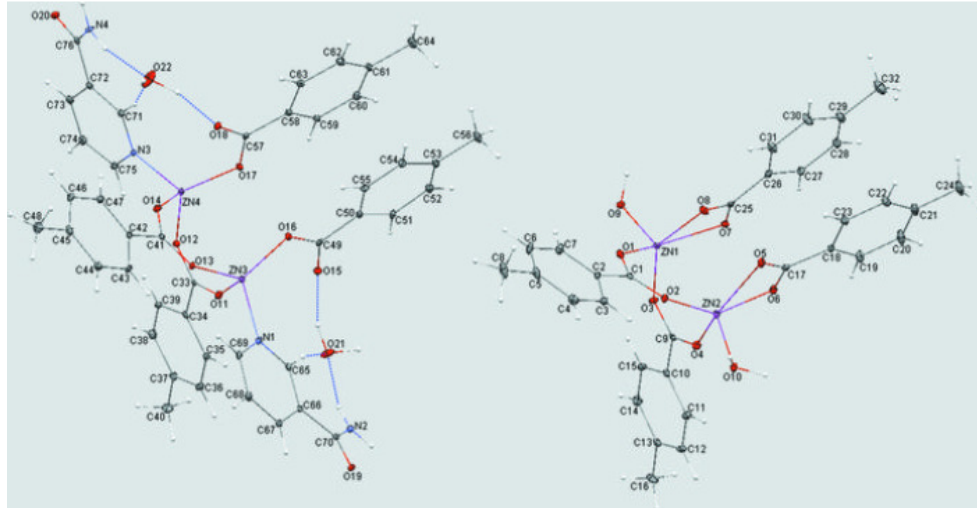


Şekil 5.2. (7) kompleksinin kristal yapısı [73].

[Ni(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] kompleksinin kristal verileri: M<sub>A</sub> = 609,26 g/mol, kristal sistemi triklinik, mavi renkli, uzay grubu  $\bar{P}1$  olan bileşiğin birim hücre parametreleri  $a = 7,7324(2) \text{ \AA}$ ,  $b = 9,7335(3) \text{ \AA}$ ,  $c = 9,8198(3) \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 78,440(2)^\circ$ ,  $\beta = 86,475(3)^\circ$ ,  $\gamma = 71,662(2)^\circ$ ,  $V = 687,31(4) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 1$ , Mo K $\alpha$  radyasyonu,  $\mu = 0,76 \text{ mm}^{-1}$ ,  $T = 99 \text{ K}$  [73].

### 5.2.3 Bis( $\mu$ -4-metilbenzoat- $\kappa^2O:O'$ )-bis[aqua(4-metilbenzoat- $\kappa^2O:O'$ )]çinko(II)-bis( $\mu$ -4-metilbenzoat- $\kappa^2O:O'$ )-bis[(4-metilbenzoat- $\kappa O$ )nikotinamid- $\kappa N$ ]çinko(II)-dihidrat(1/1/2) (9)

[Zn<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>][Zn<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]2H<sub>2</sub>O (9) bileşiğinin kristal yapısı koordine olmamış su molekülü ve iki türlü çift çekirdekli Zn(II) kompleksi içermektedir (kompleks A ve kompleks B). [Zn<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>], A kompleksinde her Zn(II) katyonu şelat durumundaki bir *p*-MB ve koordine olmuş bir su molekülü ve köprü durumundaki iki *p*-MB anyonu ile trigonal-bipiramidal geometridir (Şekil 5.3). [Zn<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]2H<sub>2</sub>O, B kompleksinde her Zn (II) katyonu bir monodentat *p*-MB ve bir nikotinamid ligandı ve ayrıca köprü durumundaki iki *p*-MB anyonu ile koordine olarak tetrahedral geometri oluşturmaktadır. B kompleksinde komşu benzen halkaları arasında zayıf molekül içi  $\pi$ - $\pi$  istiflenmesi gözlenmiştir. Kristalin atomik uzaklık ve geometrik parametreleri Ek Çizelge 9-11'de verilmiştir. Ayrıca O-H...O ve N-H...O hidrojen bağları ve zayıf C-H...O hidrojen bağları kristal yapıda bulunmaktadır (Ek Çizelge 12) [74].

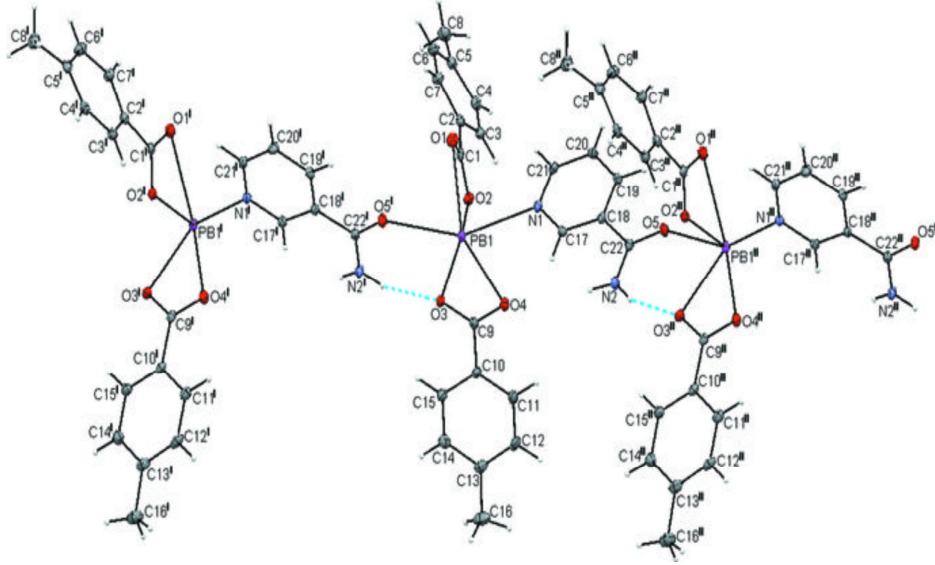


Şekil 5.3. (9) kompleksinin kristal yapısı [74].

Kristal verileri: [Zn<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>][Zn<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]2H<sub>2</sub>O, M<sub>A</sub> = 1658,97 g/mol, kristal sistemi monoklinik, renksiz, uzay grubu *Pc*, *a* = 19,7038 (3) Å, *b* = 12,2884 (2) Å, *c* = 15,4477 (3) Å,  $\beta$  = 98,708 (1)°, *V* = 3697,21 (11) Å<sup>3</sup>, Mo *K* $\alpha$  radyasyonu,  $\mu$  = 1,36 mm<sup>-1</sup>, *Z* = 1, *T* = 100 K olarak belirlenmiştir [74].

### 5.2.4 *Catena-poli*[[bis(4-metilbenzoat- $\kappa^2 O:O'$ )kurşun(II)]- $\mu$ -nikotinamid- $\kappa^2 N^1:O^3$ ] (11)

*Catena-poli*[[bis(4-metilbenzoat)kurşun(II)]- $\mu$ -nikotinamid] (11) kompleksinde Pb(II) iyonu, iki *p*-MB ve NA ligandı ile koordine eder ki, simetrik NA ligandı bitişik Pb(II) iyonuna köprü durumundadır ve *c* eksenini boyunca polimer zincir şeklinde biçimlenmektedir (Şekil 5.4). İki *p*-MB anyonundaki karboksilat grupları bitişik benzen halkasından  $22.9 (2)^\circ$  ve  $4.6 (2)^\circ$  bükülmüştür. *p*-MB iyonlarının iki benzen halkaları arasındaki dihedral açı  $83.7 (1)^\circ$  dir. Kristalin atomik uzaklık ve geometrik parametreleri Ek Çizelge 13-15'de verilmiştir. Polimerik zincirde NA ligandı *p*-MB anyonuna molekül içi N-H $\cdots$ O hidrojen bağları sayesinde bağlıdır. Kristal yapıda komşu polimerik zincirler N-H $\cdots$ O ve C-H $\cdots$ O hidrojen bağları sayesinde etkileşerek *bc* düzlemine paralel iki boyutlu ağ şeklinde biçimleniyorlar (Ek Çizelge 16) [75].

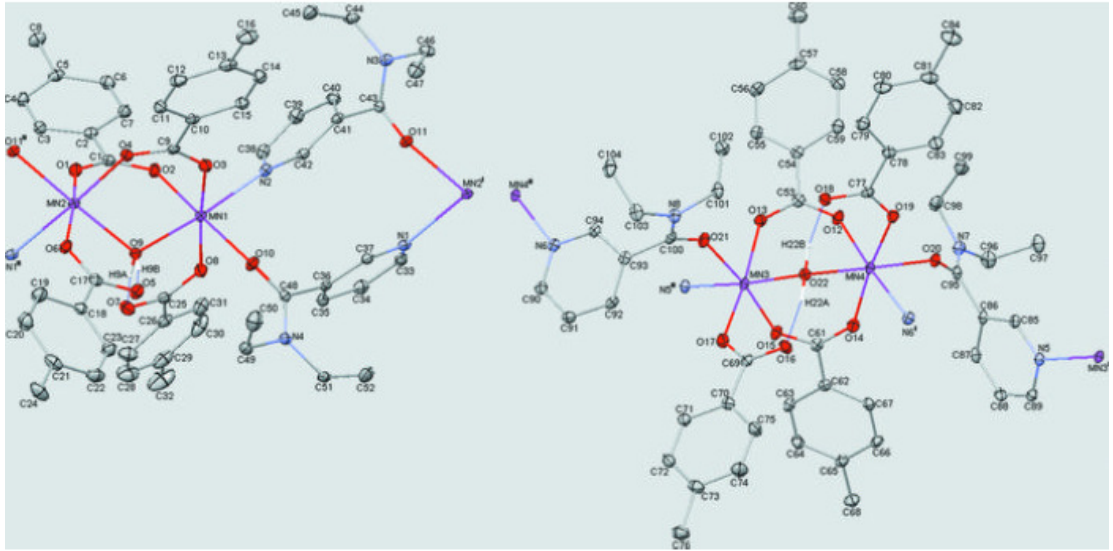


Şekil 5.4. (11) kompleksinin kristal yapısı [75].

Kristal verileri: molekül formülü  $[\text{Pb}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O})]$ ,  $M_A = 599,60$  g/mol, kristal sistemi monoklinik, renksiz, uzay grubu  $P2_1/c$  olan bileşiğin birim hücre parametreleri  $a = 14,1146 (3) \text{ \AA}$ ,  $b = 7,7431 (2) \text{ \AA}$ ,  $c = 19,2165 (4) \text{ \AA}$ ,  $\beta = 102,322 (2)^\circ$ ,  $V = 2051,81 (6) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 4$ , Mo  $K\alpha$  radyasyonu,  $\mu = 8,26 \text{ mm}^{-1}$ ,  $T = 100 \text{ K}$  [75].

**5.2.5 Catena-poli[[*(4*-metilbenzoat- $\kappa$ O)mangan(II)]- $\mu$ -aqua-bis(*(4*-metilbenzoat- $\kappa^2$ O: $O'$ )](*(4*-metilbenzoat- $\kappa$ O)mangan(II)]bis(*(N,N*-dietilnikotinamid)- $\kappa^2$ N<sup>3</sup>:O;O:N<sup>3</sup>)] (12)**

[Mn<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)] (12) kompleksinin asimetric ünitesi iki kristallografik bağımsız ünite içerir. Her birinde, mangan (II) iyonu iki *p*-MB ligandı ve bir su molekülü ile köprü durumundadır. Kristal yapıda her Mn(II) iyonu üç *p*-MB ligandları, bir su molekülü ve birbiriyle simetrik iki *N,N*-dietilnikotinamid ligandları ile koordine (Şekil 5.5). Simetrik Mn(II) iyonları simetrik DENA ligandlarının O ve N atomu ile köprü oluşturmakta ve [100] düzlemine paralel olarak polimer zincir şeklinde biçimlenmektedirler. Kristalin atomik uzaklık ve geometrik parametreleri Ek Çizelge 17-19'da verilmiştir. Mn(II) iyonu için koordinasyon çevresi biraz bozulmuş oktahedral geometridir. Komşu polimerik zincirin karboksilat O atomuna köprü su molekülleri molekül içi O-H...O hidrojen bağları ile bağlıdır. Kristal yapıda benzen halkaları arasında  $\pi$ - $\pi$  etkileşimleri ve zayıf C-H... $\pi$  etkileşimleri gözlemlenmektedir (Ek Çizelge 20) [76].

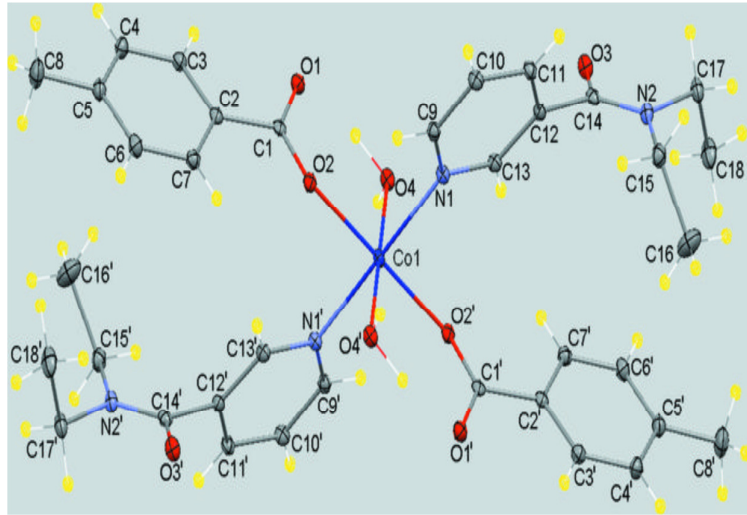


Şekil 5.5. (12) kompleksinin kristal yapısı [76].

[Mn<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(C<sub>10</sub>H<sub>14</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)] kompleksinin kristal verileri: M<sub>A</sub> = 1024,90 g/mol, kristal sistemi triklinik, renksiz, uzay grubu  $\bar{P}1$ , birim hücre parametreleri  $a = 10,5228$  (2) Å,  $b = 19,1361$  (3) Å,  $c = 26,6008$  (4) Å,  $\alpha = 70,537$  (2)°,  $\beta = 78,836$  (3)°,  $\gamma = 88,435$  (3)°,  $V = 4950,63$  (17) Å<sup>3</sup>,  $Z = 4$ , Mo K $\alpha$  radyasyonu,  $\mu = 0,57$  mm<sup>-1</sup>,  $T = 100$  K [76].

### 5.2.6 Diaquabis(*N,N*-dietilnikotinamid- $\kappa N'$ )bis(4-metilbenzoat- $\kappa O$ )kobalt(II) (**13**)

Simetri merkezli tek çekirdekli diaquabis(*N,N*-dietilnikotinamid)bis(4-metilbenzoat)kobalt(II) (**13**) kompleksinde kobalt atomu simetri merkezinde bulunmaktadır. Asimetrik birim bir DENA ligandı, bir *p*-metilbenzoat ve koordine olmuş bir su molekülünden oluşmuştur. Dört oksijen atomu kobalt(II) iyonu etrafında az bozulmuş kare düzlem oluşturuyorken, DENA ligandlarının eksen pozisyonundaki iki piridin N atomu ile az bozulmuş oktahedral koordinasyon çevresi tamamlanmaktadır (Şekil 5.6). Piridin ve benzen halkası arasındaki açı  $77.28(6)^\circ$  iken, karboksil grubu ile komşu benzen halkası arasındaki dihedral açı  $3.73(14)^\circ$  dir. Kristalin atomik uzaklık ve geometrik parametreleri Ek Çizelge 21-23'de verilmiştir. Kristal yapıda moleküller arası O-H $\cdots$ O ve C-H $\cdots$ O hidrojen bağları molekülleri (001) yönüne paralel iki boyutlu ağ biçiminde zincir oluşturmaktadır. Benzen halkasındaki zayıf C-H $\cdots$  $\pi$  etkileşimi ve piridin halkaları arasındaki  $\pi$ - $\pi$  etkileşimleri kristal yapıyı sağlamlaştırmaktadır (Ek Çizelge 24) [77].

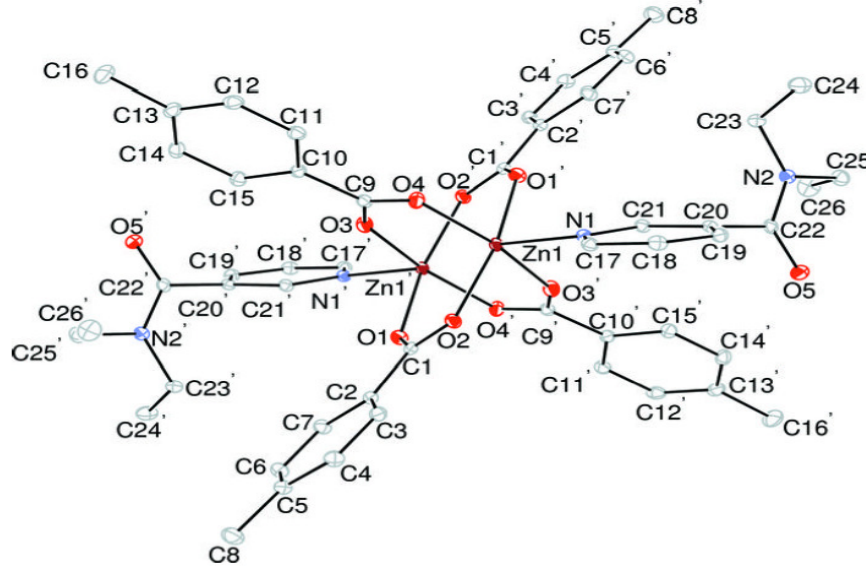


Şekil 5.6. (**13**) kompleksinin kristal yapısı [77].

Kristal verileri: Molekül formülü  $[\text{Co}(\text{C}_8\text{H}_7\text{O}_2)_2(\text{C}_{10}\text{H}_{14}\text{N}_2\text{O})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ , pembe renkli, uzay grubu  $\overline{P1}$ , kristal sistemi triklinik,  $M_A = 721,70$  g/mol, birim hücre parametreleri  $a = 7,2791(2)$  Å,  $b = 8,5453(2)$  Å,  $c = 16,0438(4)$  Å,  $\alpha = 84,090(3)^\circ$ ,  $\gamma = 67,271(2)^\circ$ ,  $\beta = 77,583(3)^\circ$ ,  $V = 898,71(9)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 1$ , Mo K $\alpha$  radyasyonu,  $\mu = 0,53$  mm<sup>-1</sup>,  $T = 100$  K [77].

### 5.2.7 Tetrakis( $\mu$ -4-metilbenzoat- $\kappa^2O:O'$ )-bis(*N,N*-dietilnikotinamid- $\kappa N^1$ )çinko(II) (16)

Simetri merkezli çift çekirdekli (16) kompleksinde çinko atomları [ $Zn \cdots Zn' = 2.9494$  (3) Å] dört *p*-metilbenzoat anyonu ile köprü oluşturmaktadır. Her Zn(II) iyonu etrafındaki dört O atomu ile biraz bozulmuş kare-düzlem düzenindeyken DENA ligandlarının iki piridin azot atomu ile oktahedral koordinasyon oluşturmaktadır (Şekil 5.7). Her bir Zn(II) iyonu dört O atomunun düzleminde 0.3530 (1) Å sapmaktadır. Karboksilat grupları ve komşu benzen halkaları arasındaki dihedral açılar  $5.88$  ( $10^\circ$ ) ve  $11.89$  ( $9^\circ$ ) iken, benzen halkaları arasındaki dihedral açı  $75.19$  ( $4^\circ$ ) dir. Piridin halkası benzen halkalarına uygun olarak  $38.28$  ( $4^\circ$ ) ve  $49.17$  ( $4^\circ$ ) dihedral açı yönündedir. Kristalin atomik uzaklık ve geometrik parametreleri Ek Çizelge 25-27'de verilmiştir. Kristal yapıda moleküller arası zayıf C-H $\cdots$ O hidrojen bağları ile moleküller üç boyutlu ağ biçiminde birleşmektedir. Paralel benzen halkaları ve paralel piridin halkaları arasındaki  $\pi$ - $\pi$  etkileşimleri kristal yapıyı dayanıklı hale getirir (Ek Çizelge 28) [78].



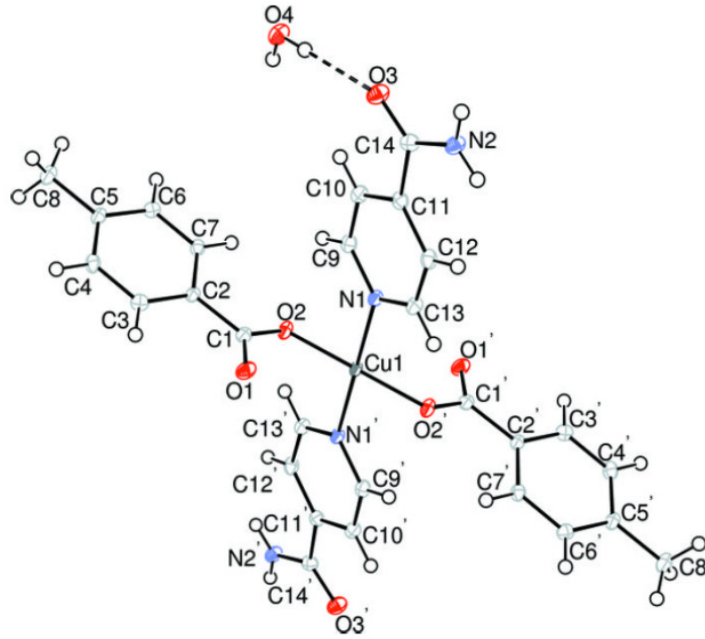
Şekil 5.7. (16) kompleksinin kristal yapısı [78].

[ $Zn_2(C_8H_7O_2)_2(C_{10}H_{14}N_2O)_2$ ] kompleksinin kristal verileri:  $M_A = 1027,82$  g/mol, kristal sistemi triklirik, renksiz, uzay grubu  $\bar{P}1$ , birim hücre parametreleri  $a = 9,8603$  (2) Å,  $b = 10,5272$  (2) Å,  $c = 12,3514$  (3) Å,  $\alpha = 97,346$  ( $3^\circ$ ),  $\beta = 93,525$  ( $3^\circ$ ),  $\gamma = 106,342$  ( $5^\circ$ ),  $V = 1213,78$  (6) Å<sup>3</sup>,  $Z = 1$ , Mo  $K\alpha$  radyasyonu,  $\mu = 1,05$  mm<sup>-1</sup>,  $T = 100$  K [78].



### 5.2.8 Bis(izonikotinamid- $\kappa N^1$ )bis(4-metilbenzoat- $\kappa O$ )bakır(II) dihidrat (19)

Bis(izonikotinamid)bis(4-metilbenzoat)bakır(II) dihidrat (19) monomer kompleksinde bakır atomu simetri merkezindedir. Asimetrik birim bir izonikotinamid ligandı, bir *p*-metilbenzoat ve koordine olmamış bir su molekülünden oluşmaktadır. Tüm ligandlar monodentatdır. İki oksijen atomu ve iki azot atomu, bakır(II) iyonu etrafında hafif bozulmuş kare düzlemde biçiminde bulunmaktadır (Şekil 5.8). Kristalin atomik uzaklık ve geometrik parametreleri Ek Çizelge 29-31'de verilmiştir. Piridin ve benzen halkaları arasındaki dihedral açı  $86.08 (5)^\circ$  iken, karboksil grubu ile komşu benzen halkası arasındaki dihedral açı  $13.86 (9)^\circ$  dir. Koordine olmamış su molekülleri, izonikotinamid (İNA) ligandına O-H $\cdots$ O hidrojen bağları ile bağlanmaktadır. Kristal yapıda moleküller O-H $\cdots$ O, N-H $\cdots$ O ve C-H $\cdots$ O hidrojen bağları ile üç boyutlu ağ biçiminde sınırsız zincir oluşturmaktadır (Ek Çizelge 32) [79].

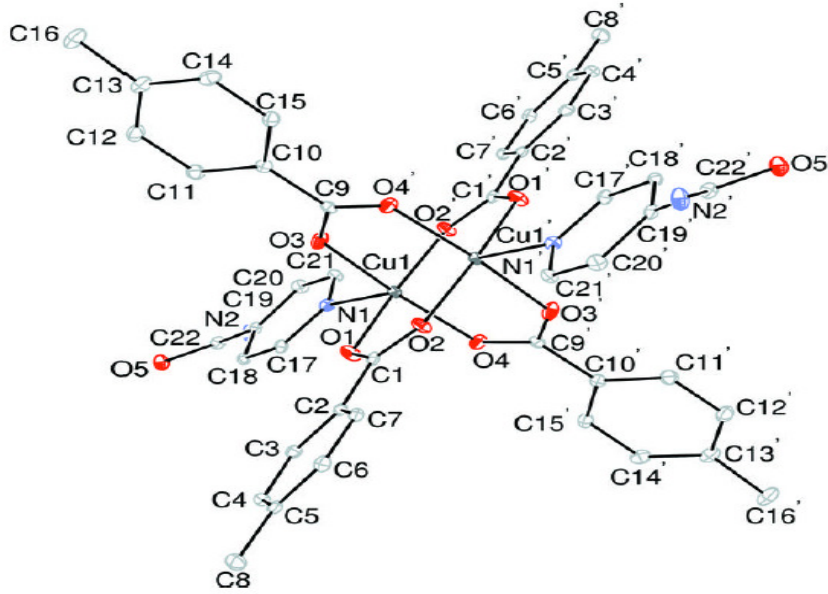


Şekil 5.8. (19) kompleksinin kristal yapısı [79].

[Cu(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>].2H<sub>2</sub>O kompleksinin kristal verileri: M<sub>A</sub> = 614,11, kristal sistemi monoklinik, mavi renkli, uzay grubu *P2<sub>1</sub>/c* olan bileşiğin birim hücre parametreleri  $a = 5,7138 (2) \text{ \AA}$ ,  $b = 18,9948 (4) \text{ \AA}$ ,  $c = 11,9671 (3) \text{ \AA}$ ,  $\beta = 95,906 (3)^\circ$ ,  $V = 1291,92 (6) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 2$ , Mo K $\alpha$  radyasyonu,  $\mu = 0,91 \text{ mm}^{-1}$ ,  $T = 100 \text{ K}$  [79].

### 5.2.9 Tetrakis( $\mu$ -4-metilbenzoat- $\kappa^2 O:O'$ )bis[(izonikotinamid- $\kappa N$ )bakır(II)] (20)

Tetrakis( $\mu$ -4-metilbenzoat)bis[(izonikotinamid)bakır(II)] (20) binükleer kompleksinde bakır atomları simetri merkezinde bulunmaktadır. Kompleks iki izonikotinamid ligandı ve dört *p*-metilbenzoat anyonundan oluşmuştur. Her bir bakır atomu ekvator düzlemindeki dört oksijen atomu ile bozuk kare düzlemde iken, eksen pozisyonunda bulunan iki izonikotinamidin iki azot atomu ile kare-piramidal geometri tamamlanmaktadır (Şekil 5.9). Kristalin atomik uzaklık ve geometrik parametreleri Ek Çizelge 33-35'de verilmiştir. Karboksil grupları ile komşu benzen halkaları arasındaki açı 7.88 (19) ve 9.68 (10) $^\circ$  dir. Kristal yapıda moleküller N-H $\cdots$ O hidrojen bağları üç boyutlu ağ biçiminde sınırsız zincir oluşturmaktadır. Benzen ve piridin halkaları arasındaki  $\pi$ - $\pi$  etkileşimleri kristal yapıyı sağlamlaştırmaktadır (Ek Çizelge 36) [80].

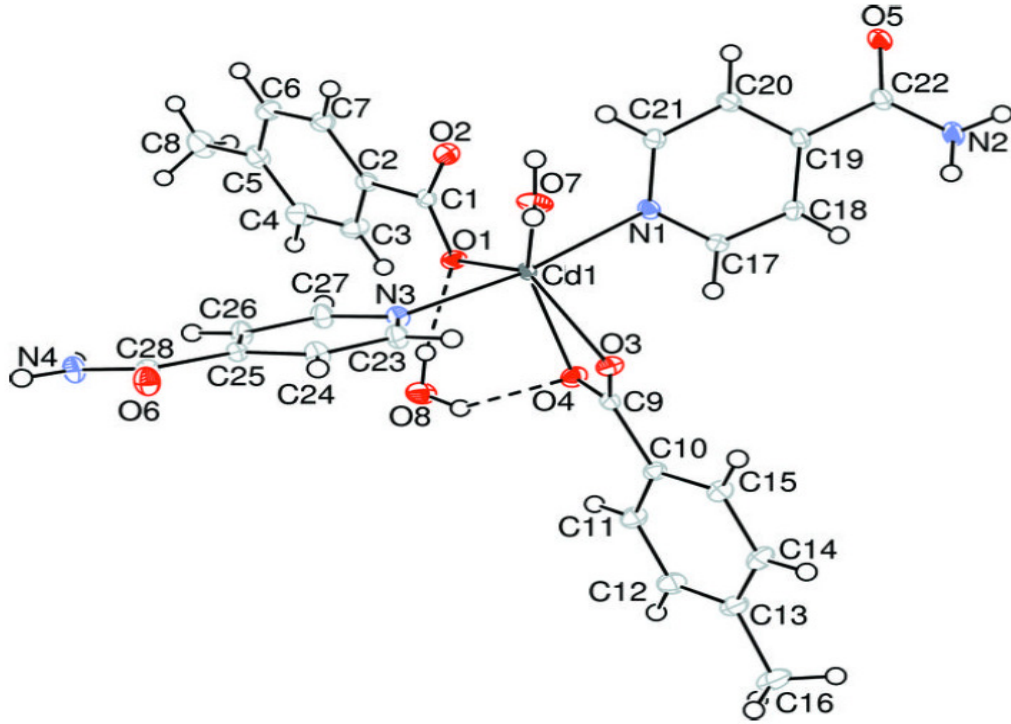


Şekil 5.9. (20) kompleksinin kristal yapısı [80].

[Cu<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] kompleksinin kristal verileri: M<sub>A</sub> = 911,88 g/mol, kristal sistemi monoklinik, kristal rengi yeşil, uzay grubu  $P2_{1/c}$  olan bileşiğin birim hücre parametreleri  $a = 11,2305 (2) \text{ \AA}$ ,  $b = 23,4691 (4) \text{ \AA}$ ,  $c = 8,0087 (1) \text{ \AA}$ ,  $\beta = 102,128 (1)^\circ$ ,  $V = 2063,74 (6) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 2$ , Mo K $\alpha$  radyasyonu,  $\mu = 1,10 \text{ mm}^{-1}$ ,  $T = 101 \text{ K}$  [80].

### 5.2.10 Aquabis(izonikotinamid- $\kappa N^1$ )bis(4-metilbenzoat)- $\kappa O$ ; $\kappa^2 O, O'$ kadmiyum(II) monohidrat (21)

Aquabis(izonikotinamid)bis(4-metilbenzoat) kadmiyum(II) monohidrat (21) kompleksinde kadmiyum atomu, iki *p*-metilbenzoat anyonu, iki izonikotinamid ligandı ve bir su molekülü ile koordine olarak bozulmuş oktahedral geometriye sahiptir. *p*-Metilbenzoat anyonlarından biri bidentat bağlı iken, diğeri monodentatdır. Koordine olmamış su molekülü O-H $\cdots$ O hidrojen bağı ile kompleksin karbonil gruplarına bağlanmıştır (Şekil 5.10). Kristalin atomik uzaklık ve geometrik parametreleri Ek Çizelge 37-39'da verilmiştir. Kristal yapıda moleküller O-H $\cdots$ O ve N-H $\cdots$ O hidrojen bağları ile supramoleküler bir yapı oluşturmaktadır. Benzen halkaları arasında  $\pi$ - $\pi$  etkileşimleri kristal yapıyı dayanıklı hale getirmektedir (Ek Çizelge 40) [81].

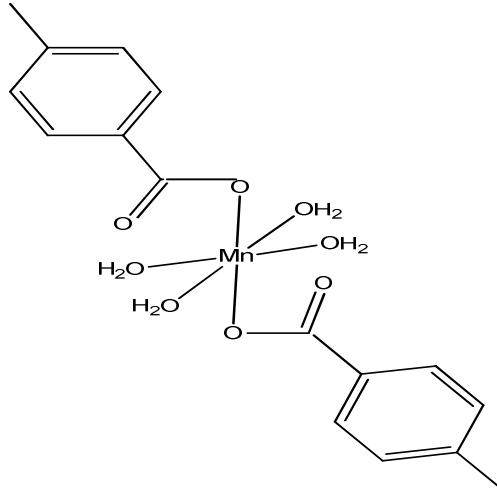


Şekil 5.10. (21) kompleksinin kristal yapısı [81].

[Cd(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)]H<sub>2</sub>O kompleksinin kristal verileri: renksiz, M<sub>A</sub> = 662,97 g/mol, kristal sistemi triklirik, uzay grubu  $P\bar{1}$ , birim hücre parametreleri  $a = 9,5032(2) \text{ \AA}$ ,  $b = 12,3543(3) \text{ \AA}$ ,  $c = 13,6134(3) \text{ \AA}$ ,  $\alpha = 78,278(3)^\circ$ ,  $\beta = 69,776(2)^\circ$ ,  $\gamma = 71,746(3)^\circ$ ,  $V = 1416,18(6) \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 2$ , Mo K $\alpha$  radyasyonu,  $T = 102 \text{ K}$  [81].

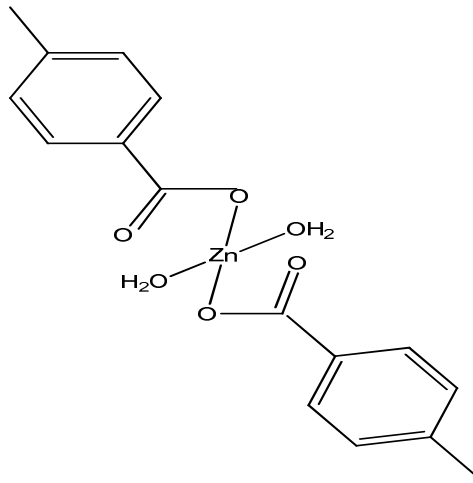
Yapılan analiz sonuçlarına göre ve daha önce sentezlenen literatürdeki benzer yapılara dayanılarak diğer komplekslerin muhtemel yapıları ise Şekil 5.11-5.21’de verilmiştir.

(1) kompleksinin molekülleri iki *p*-metilbenzoat ligandı ve koordineli olarak dört su molekülü içermektedir. *p*-Metilbenzoat anyonu monodentat ligandır. Molekülün geometrisi oktahedral yapıdadır (Şekil 5.11).



Şekil 5.11. (1) kompleksinin muhtemel yapısı.

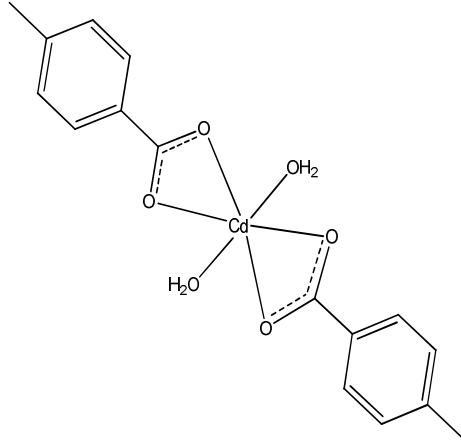
(2) kompleksinin biri çift dişli diğeri tek dişli iki *p*-metilbenzoat ligandı ve iki su molekülü içermektedir. Kompleksin tetrahedral geometrisine sahip olduğu düşünülmektedir (Şekil 5.12).



(2)

Şekil 5.12. (2) kompleksinin muhtemel yapısı.

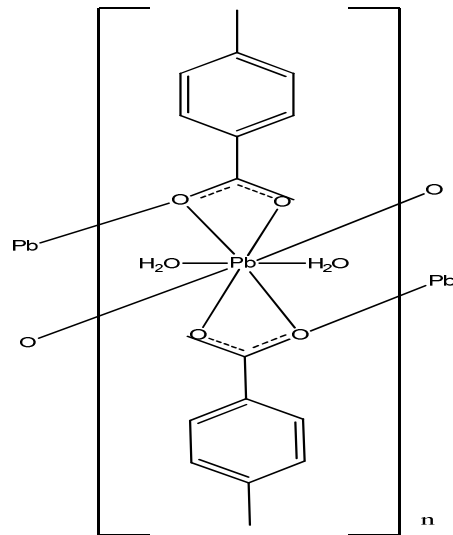
(3) kompleksinin molekülleri iki *p*-metilbenzoat ligandı ve koordineli olarak iki su molekülü içermektedir. *p*-Metilbenzoat anyonu çift dişli liganttır. Metal *p*-metilbenzoat anyonun dört oksijen atomu ve iki su molekülünün iki oksijen atomu ile oktahedral geometrisini tamamlamaktadır (Şekil 5.13).



(3)

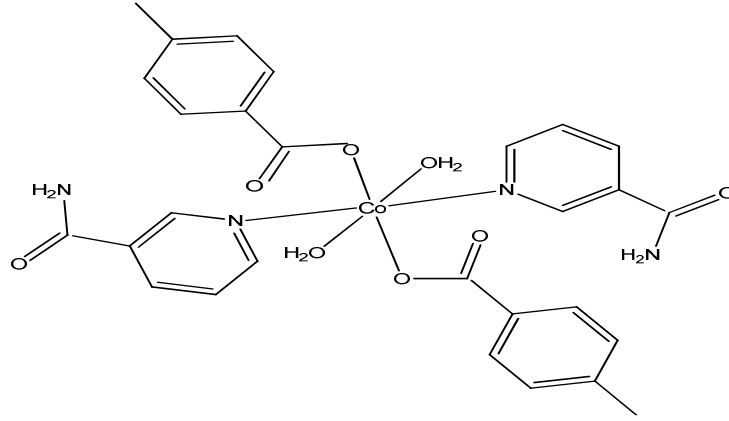
Şekil 5.13. (3) kompleksinin muhtemel yapısı

(4) kompleksinin molekülleri iki *p*-metilbenzoat ligandı ve koordineli olarak iki su molekülü içermektedir. *p*-Metilbenzoat anyonu üç dişli liganttır. Her kurşun atomu 8 koordineli olup, bunlardan ikisi su molekülleri, beşi ise *p*-MB anyonlarının karboksil oksijenleridir. Kurşun atomları karboksil oksijenler yardımı ile polimer zincir oluşturmaktadır. (Şekil 5.14).



Şekil 5.14. (4) kompleksinin muhtemel yapısı

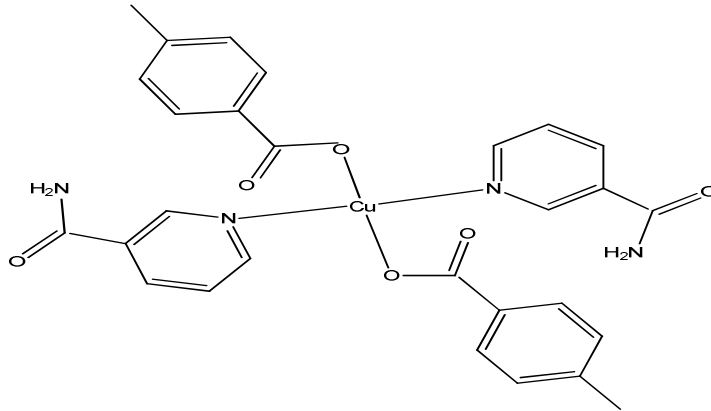
Toz X-ray analiz sonucu (6) nolu kompleks ile (5) nolu kompleksin eş yapılı olduğunu göstermektedir. Buna göre (6) nolu kompleks te simetri merkezli olup iki *p*-metilbenzoat ligandı, iki nikotinamid ligandı ve iki su molekülünden oluşmaktadır. Co(II) atomunun koordinasyon geometrisinin literatüre uygun olarak [82-83]. Metal atomları çevresinde ekvator düzlemindeki dört oksijen atomu ile kare düzlem düzenindeyken eksen pozisyonundaki iki nikotinamid ligandının iki piridin azot atomu ile oktahedral geometrisine tamamlanmaktadır (Şekil 5.15).



(6)

Şekil 5.15. (6) kompleksinin muhtemel yapıları

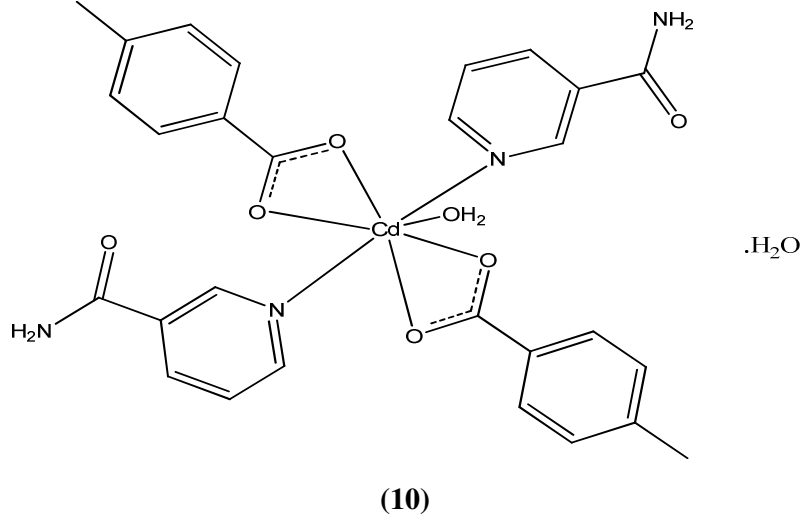
(8) kompleksinin molekül yapısının (19) kompleksinin molekül yapısına benzer olduğu düşünülmektedir. Buna göre Cu(II) atomu iki *p*-metilbenzoat ligandının iki oksijen atomu ve iki nikotinamid ligandının iki azot atomu ile kare düzlem geometrisini oluşturmaktadır (Şekil 5.16).



(8)

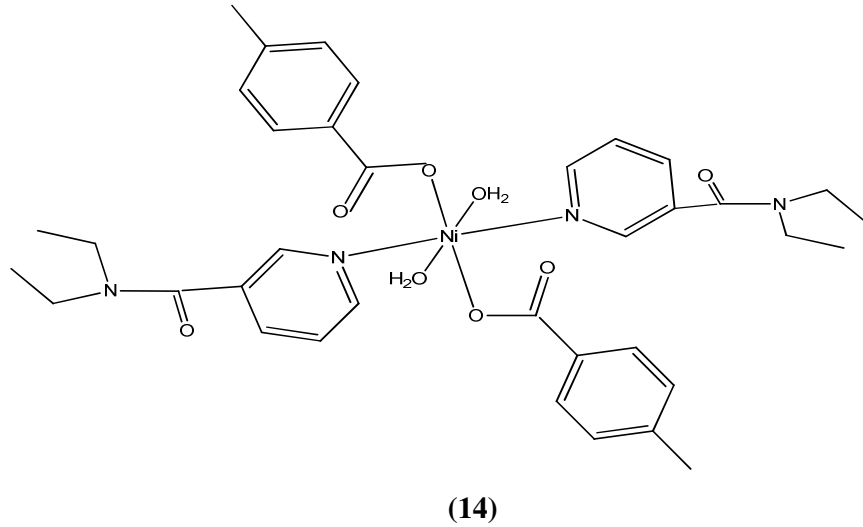
Şekil 5.16. (8) kompleksinin muhtemel yapısı.

(10) kompleksinin molekülü tek dişli olan iki *p*-metilbenzoat ligandı ve iki nikotinamid ligandından oluşmaktadır. Cd(II) atomunun koordinasyon geometrisinin literatüre uygun olarak koordinasyon sayısı yedidir (Şekil 5.17).



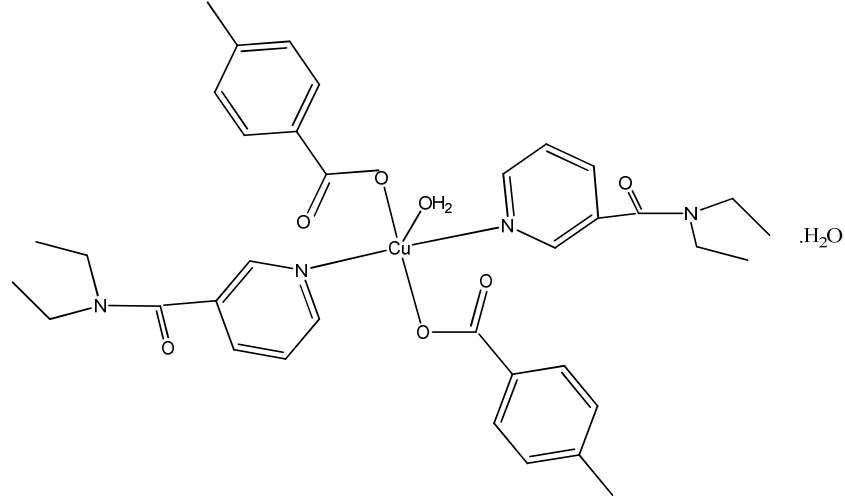
Şekil 5.17. (10) kompleksinin muhtemel yapısı.

(14) kompleksi (13) kompleksi ile eş yapıda olup molekülü simetri merkezli iki *p*-metilbenzoat ligandı, iki dietilnikotinamid ligandı ve dört su molekülünden oluşmaktadır. Ni(II) atomu literatüre uygun olarak [84-87] çevresinde ekvator düzlemindeki dört oksijen atomu ile bozulmuş kare düzleminde iken eksen pozisyonunda iki dietilnikotinamid ligandının iki piridin azot atomu ile oktahedron geometrisinin tamamlandığı düşünülmektedir (Şekil 5.18).



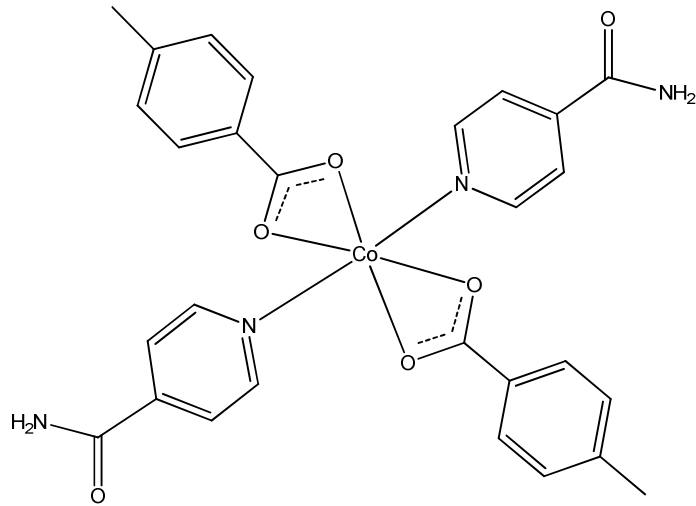
Şekil 5.18.(14) kompleksinin muhtemel yapıları.

(15) kompleksinin molekülü iki *p*-metilbenzoat ligandı, iki dietilnikotinamid ligandı ve iki su molekülünden oluşmaktadır. Cu(II) atomunun iki dietilnikotinamidin iki azot atomu iki *p*-metilbenzoat anyonunun iki oksijen atomu ve bir koordine olmuş su molekülünün oksijen atomu ile kare piramidal geometri oluşturmaktadır (Şekil 5.19).



Şekil 5.19. (15) kompleksinin muhtemel yapısı.

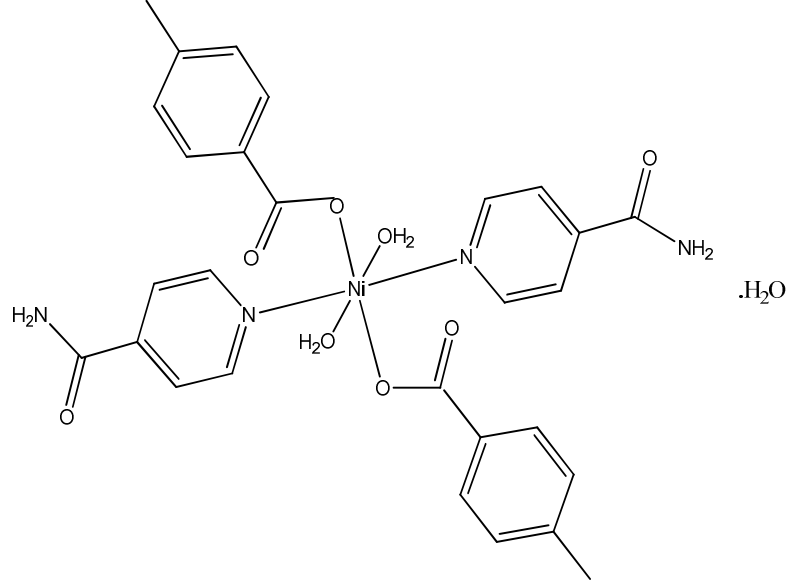
(17) kompleksinde Co(II) atomu iki bidentat *p*-metilbenzoat ligandı ve iki izonikotinamid ligandı ile koordine olmuştur. Co(II) atomu ekvator düzlemindeki karboksilat gruplarının dört oksijen atomu ile kare düzlem düzenindeyken, iki izonikotinamid ligandının iki azot atomu ile bozulmuş oktahedral koordinasyon geometrisi tamamlanmaktadır (Şekil 5.20).



Şekil 5.20. (17) kompleksinin muhtemel yapısı



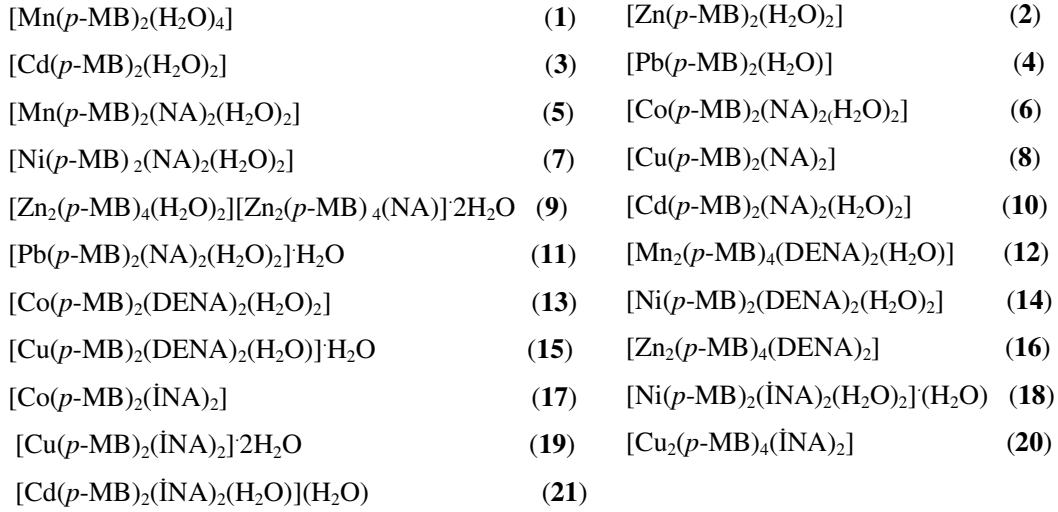
(18) kompleksinin molekülü iki *p*-metilbenzoat anyonu, iki izonikotinamid molekülü ve iki su molekülü ve koordine olmamış bir su molekülünden oluşmaktadır. Tüm ligandlar monodentattır. Ni(II) atomu ekvator düzlemindeki dört oksijen atomu ile bozuk kare düzlemsel düzenindeyken iki izonikotinamidin iki piridin azot atomu ile oktahedral geometri oluşturur (Şekil 5.21).



Şekil 5.21. (18) kompleksinin muhtemel molekül yapısı.

## 6. SONUÇ

Bu çalışmada Mn(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Cd(II) ve Pb(II) metallerinin *p*-metilbenzoik asit (*p*-MBA) ve biyolojik öneme sahip nikotinamid (NA) ve türevleri [dietilnikotinamid (DENA) ve izonikotinamid (İNA)] ile 21 adet yeni kompleksleri sentezlendi:



Bulgular ve tartışma kısmında metal komplekslerin yapıları, kütle spektrum (MS) değerleri, elementel analiz, termik analiz verileri (DTA-DTG-TG), IR, UV, NMR, toz X-Ray ve tek kristal X-Ray spektroskopik verileri ile aydınlatılmaya çalışılmıştır. Elde edilen sonuçlar önerilen yapıları desteklemektedir. X-Ray analizi ile on adet kompleksin kristal yapısı aydınlatılmıştır.

Komplekslerin IR spektrumlarında asitlere ait karakteristik  $-\text{COOH}$  grubunun piki yerine,  $\nu\text{COO}_{\text{as}}^-$  ve  $\nu\text{COO}_{\text{s}}^-$  piklerinin olması karboksil grubunun protonunu kaybettiği ve metal ile bağlandığını göstermiştir. Nikotinamid ve türevleri bulunan komplekslerde literatürde ender rastlanan bir durum olan karbonil grubundan bağlanarak köprü rolü oynaması **11** ve **12** nolu komplekslerde görülmüştür.

Ayrıca tüm komplekslerde IR sonuçlarında kristallendirme sırasında oluşan safsızlıktan kaynaklanan  $2360 \text{ cm}^{-1}$  de  $\text{CO}_2$  ve  $\text{H}_2\text{O}$ 'dan kaynaklanan maksimum pik görülmüştür.

Komplekslerin UV spektrumlarında 422-780 nm arasında d-d geçişlerine ait geniş pikler görülmüştür.

Komplekslerin toz X-Ray analizi diffraktogram verileri mukayese edildiğinde **(5)** ile **(6)** (Ek Şekil 67)(Ek Çizelge 41 ve 42) nikotinamid komplekslerinin ve **(13)** ile **(14)** (Ek Şekil 68)(Ek Çizelge 43 ve 44) dietilnikotinamid komplekslerinin eş yapıları oldukları düşünülmektedir.

Komplekslerin <sup>1</sup>H-NMR spektrumlarında karakteristik gruplara ait pikler uygun bölgelerde görülmüştür. δ2,30-2,32 ppm civarında asidin CH<sub>3</sub> protonları, δ7,17-7,59 ppm aralığında nikotinamid ve izonikotinamidin NH<sub>2</sub> protonları, δ7,16 ve 7,90 ppm civarında aromatik hidrojenler ve δ8,28-8,77 ppm aralığında piridin halkasının hidrojenleri gözlemlenmiştir.

<sup>13</sup>C-NMR spektrumlarında ise δ21,04-21,74 ppm aralığında asidin CH<sub>3</sub> karbonları, δ13,46-14,88 ppm aralığında dietilnikotinamidin CH<sub>3</sub> karbonları ve δ41,36-43,67 ppm aralığında dietilnikotinamidin CH<sub>2</sub> karbonları, aromatik karbonlar δ122-153 ppm aralığında ve C=O grubu karbonları ise δ166-174 ppm aralığında gözlemlenmiştir.

Termik analiz ve kütle analiz sonuçları birleştirilerek komplekslerin ligand oranlarının doğruluğu, bozunma sonucu geriye kalan ürünler ve komplekslerin termal kararlılık sıraları belirlenmiştir. Buna göre komplekslerden önce su ligandlarının, sonra nikotinamid ve türevi ligandlarının ayrıldığı daha sonra asit ligandlarının da bozunmasıyla geriye en son metal veya uygun metal oksitlerinin kaldığı hesaplanmıştır.

Kurşun kompleksleri polimer yapıları olup bunlardan **4** nolu kompleksin merkezi atomunun sekiz, **11** nolu kompleksinin merkezi atomunun ise altı koordinasyonlu oldukları düşünülmektedir. **8** ve **19** nolu komplekslerin kare düzlemsel, **15**, **16** ve **20** nolu komplekslerin kare piramidal, **9** nolu kompleksin trigonal bipiramidal ve tetrahedral, diğer komplekslerin ise oktahedral geometriye sahip oldukları belirlenmiştir.

## 7. KAYNAKLAR

- [1] Takwale, By M. G. and Pant, L.M. Structure of *p*-Toluic Acid, Acta Cryst. B27, m1152 (1971).
- [2] [http://www.sigmaaldrich.com/catalog/product/4-Methylbenzoic\\_acid](http://www.sigmaaldrich.com/catalog/product/4-Methylbenzoic_acid) (2.2010).
- [3] Zakzeski, J. J., Bell. A. T., “Oxidative carbonylation of toluene to *p*-toluic acid catalyzed by rhodium in the presence of vanadium and oxygen”, Journal of Molecular Catalysis A: Chemical 276: 8-16 (2007).
- [4] Li, D., Liu, D. and Wang, F., “Solubility of 4-Methylbenzoic acid between 288 K and 370 K”, J. Chem. Eng. Data 46: 234-236 (2001).
- [5] Ammar, H. O. and El-Nahhas, S. A., “Effect of Aromatic Hydrotropes on the Solubility of Allopurinol: Part 3”, Pharmazie, Volume: 48 (10), Pp. 751-754 (1993).
- [6] Ferguson, P. D., Goodall, D. M., Loran, J. S., “Systematic approach to link between separation in capillary electrophoresis and liquid chromatography IV. Application of binding constant-retention factor relationship to the separation as 2-, 3- and 4-methylbenzoate anions using  $\beta$ -cyclodextrin as selector”, Journal of Chromatography A, 768: 29-38 (1997).
- [7] Sudhakar, P., Srivijaya, R., Sreekanth, B. R., Jayanthi, P. K., Vishweshwar, P., Babu, M. J., Vyas, K., Iqbal, J., “Carboxylic acid-pyridine Supramolecular heterocatermer in a co-crystal”, Journal of Molecular Structure 885: 45-49 (2008).
- [8] Ichihara, A., Adacki, K., Hosokawa, K. and Takeda, Y., “The enzymatic hydroxylation of aromatic carboxylic acids; substrate specificities of anthranilate and benzoate oxidases”, The Journal of Biological Chemistry Vol.237: No.7, July (1962).
- [9] Kovář, P., Melánová, K., Zima, V., Beneš, L., Čapková, P., “Layered double hydroxide intercalated with *p*-methylbenzoate and *p*-bromobenzoate: Molecular simulations and XRD analysis”, Journal of Colloids and Interface Science 319: 19-24 (2008).

- [10] Misaki, S., Kashino, S. and Haisa, M., “Study short hydrogen bonds. I. Structure of 4-methylpiperidinium hydrogen bis(*p*-methylbenzoate) and piperidinium hydrogen bis(*p*-methylbenzoate)”, *Bull. Chem. Soc. Jpn*, 59: 1059-1065 (1986).
- [11] Brzyska, Z., Kurpiel-Gorgol R. and Dabkowska, M., “Thermal decomposition of scandium(III) benzoate, *p*-methylbenzoate, *p*-methoxybenzoate, *p*-nitrobenzoate and, *p*-chlorobenzoate in air and nitrogen atmospheres”, *Journal of Thermal Analysis*, Vol. 29, 1299-1307 (1984).
- [12] Zhang, J. J., Wang, R. F., Bai, J. H., Wang, S. P., “Thermal decomposition mechanism and non-isothermal kinetics of complex of  $[\text{La}_2(p\text{-MBA})_6(\text{Phen})_2]_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ , *Journal of Rare Earths* Volume:20 Issue:5 Pages:449-452 (Oct 2002).
- [13] Feng, S., “*catena*-Poly[bis( $\mu$ -4-methylbenzoato- $\kappa^2 O, O'$ )heptakis( $\mu$ -4-methylbenzoato- $\kappa^3 O:O':O$ )trisamarium(III)”, *Acta Cryst. E*64, m816 (2008).
- [14] Zhang, J. Jun., Ren, N., Xe, S. L.,” Synthesis and Thermal Decomposition Kinetics of the Complex of Samarium *p*-Methylbenzoate with 1,10-Phenanthroline”, *Chinese Journal Of Chemistry*, 25, 125-128 (2007).
- [15] Zhang, C. H., Hong, P. Z. and Song, W. D., “*catena*-Poly[[hexakis( $\mu$ -4-methylbenzoato- $\kappa^2 O, O'; \kappa^{15} O, O': O$ -trieuropium(III)]-tris( $\mu$ -4-methylbenzoato- $\kappa^2 O, O'; \kappa^6 O: O': O$ )”, *Acta Cryst. E*64, m1059 (2008).
- [16] Zhan, X., Xiao, Z., Zhan, H., Zhao, X., Zhanou, S., LI. F., “Syntheses and fluorescent properties of Complexes of Eu(III) with HTTA, TPPO and benzoic acid”, *Journal of Rare Earths*, Vol. 27, No. 3, p.368, (Jun. 2009).
- [17] Jin, Q. H., Li, X., Zu, Y. Q. and Yu, K. B.,”*catena*-Poly[europium-tri- $\mu$ -4-methylbenzoato]”. *Acta Cryst. E*57, m676-m677 (2001).
- [18] Li, C. H., Guo, D. C., Yang, Y. Q., Li, W., Kuang, Y. F.,”Synthesis, crystal structure and luminescent property of one-dimensional chain coordination polymer of terbium  $\{[\text{Tb}(p\text{-MBA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]_2(4,4'\text{-bipi})_2\}_n$ ”. *Chinese Journal Of Chemistry*, Volume: 22, Issue: 11, Pages: 2085-2089 (Nov 2006).
- [19] Zhang, J. J., Wang, R. F., Bai, J. H., Wang, S. P., “Non-isothermal kinetics of the first-stage decomposition reaction of the complex of terbium *p*-methylbenzoate with 1,10-phenanthroline  $[\text{Tb}_2(p\text{-MBA})_6(\text{Phen})_2]$ ”. *Chinese Journal Of Chemistry*, Volume: 23, Issue: 5, Pages: 646-650 (May 2005).

- [20] Li, X. F., Zhang, Z. Y., Wang, D. Y., Song, H. B., and Zou, Y. O., "Dimeric hexakis(4-methylbenzoato)bis(1,10-phenanthroline)dysprosium(III)". Acta Cryst. C61, m81-m83 (2005).
- [21] Song, W. D., Wang, H., Ma, D. Y., "(2,2'-bipyridyl- $\kappa^2N,N'$ )tetrakis(4-methylbenzoato- $\kappa O$ )manganese(II)", Acta Cryst. E64, m677 (2008).
- [22] Ma, C. B., Chen, C. N. and Liu, Q. T., "[2-(2-Pyridyl)-1*H*-benzimidazole- $\kappa^2N^2,N^3$ ]bis(*p*-toluato- $\kappa^2O,O'$ )manganese(II)", Acta Cryst. C63, m618-m621 (2007).
- [23] Aubin, S. M. J., Sun, Z., Eppley, H. J., Rumberger, E. M., Guzei, I. A., Folting, K., Gantzel, P. K., Rheingold, A. L., Christou, G., Hendrickson, D. N., "Single-molecule magnets: Jahn-Teller isomerism and the origin of two magnetization relaxation processes in Mn<sub>12</sub> complexes", Polyhedron 20, 1139-1145 (2001).
- [24] Feng, S., " $\mu$ -Aqua-bis( $\mu$ -4-methylbenzoato- $\kappa^2O,O'$ )bis(4-methylbenzoato- $\kappa O$ )(1,10-phenanthroline- $\kappa^2N,N'$ )iron(II)", Acta Cryst. E64, m817-m818 (2008).
- [25] Hu, D. X., Chen, P. K., Luo, F., Xue, L., Che, Y., Zheng, Y. M., "Three Ni/Co(II) Complexes with 4,4'-bipyridine and benzoic acid derivatives as mixed coligands: Hydrothermal syntheses, structures, and magnetisms", Inorganica Chimica Acta 360; 4077-4084 (2007).
- [26] Zhang, B. Y., Xu, T. G. and Xu, D. J., " $\mu$ -Aqua-bis( $\mu$ -4-methylbenzoato- $\kappa^2O:O'$ )bis[(4-methylbenzoato- $\kappa O$ )(phenanthroline- $\kappa^2N,N'$ )cobalt(II)]", Acta Cryst. E62, m2186-m2188 (2006).
- [27] Song, W. D., Gu, C. S., Hao, X. M. and Yan, J. B., "Bis(1*H*-benzimidazole- $\kappa N^3$ )bis(4-methylbenzoato- $\kappa^2O,O'$ )cobalt(II)", Acta Cryst. E64, m522 (2008).
- [28] Sharma, R., Sharma, R. P., Bala, R., Quirós, M., Salas, J. M. "First X-ray structure of a *cis*-isomer of cobalt(III) aromatic carboxylate: Synthesis, and characterization of [*cis*-Co(en)<sub>2</sub>(C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>)<sub>2</sub>] $\cdot$ 2H<sub>2</sub>O, where C<sub>8</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>= *p*-methylbenzoate", Inorganic Chemistry Communications 9, 1075-1078 (2006).
- [29] Yang, Y. Q., Li, C. H., Li, W., Kuang, Y. F., "Solvothermal synthesis, crystal structure and electrochemical property of complex[Co(*p*-MBA)<sub>2</sub>(2,2'-bipy)(H<sub>2</sub>O)] $\cdot$ (H<sub>2</sub>O)", Chinese Journal of structural Chemistry :26 Issue:10 Pages:1175-1178 Published: (2007).

- [30] Amineva, N. A., Kolosnitsyn, V. S., Karaseva, E. V., “Synthesis and properties of cobalt toluate”, Russian Journal of Inorganic Chemistry Volume:45 Issue:8 Pages:1213-1217 Published: Aug (2000).
- [31] Song, W. D., Gu, C. S., Hao, X. M. and Liu, J. W., “Aquabis(1*H*-imidazole  $\kappa N^3$ )bis(4-methylbenzoato- $\kappa^2 O, O'$ )cobalt(II)”, Acta Cryst. E63, m1023-m1024 (2007).
- [32] Song, W. D., Yan, J. B., Hao, X. M., “ $\mu$ -Aqua- $\kappa^2 O:O$ -di- $\mu$ -4-methylbenzoato- $\kappa^2 O:O'$ -bis[(4-methylbenzoato- $\kappa O$ )(1,10-phenanthroline- $\kappa^2 N:N'$ ) nickel(II)]”, Acta Cryst. E64, m919-m920 (2008).
- [33] Song, W. D., Wang, H. and Ji, L. L., “Aquabis(4-methylbenzoato)- $\kappa O; \kappa^2 O, O'$ -bis(pyridine- $\kappa O$ )nickel(II)”, Acta Cryst. E64, m548 (2008).
- [34] Song, W. D., Fan, R. Z. and Wu, H. M., “Aquabis(1*H*-imidazole- $\kappa N^3$ )bis(4-methylbenzoato)- $\kappa O; \kappa O, O'$  nickel(II)”, Acta Cryst. E64, m648 (2008).
- [35] Tang, C. M. and Deng, G. H., “Bis(2,2'-bipyridine- $\kappa^2 N, N'$ )(4-methylbenzoato- $\kappa^2 O, O'$ )copper(II) iodide hemihydrate”, Acta Cryst. E64, m1111-m1112 (2008).
- [36] Song, W. D., Wang, H. and Miao, Y. L., “Aquachlorido(4-methylbenzoato- $\kappa^2 O$ )(1,10-phenanthroline- $\kappa^2 N, N'$ )copper(II)”, Acta Cryst. E64, m716 (2008).
- [37] Song, W. D., Huang, X. H. and Wang, H., “Bis(1*H*-benzimidazole- $\kappa N^3$ )bis(4-methylbenzoato- $\kappa^2 O, O'$ )copper(II)”, Acta Cryst. E64, m764 (2008).
- [38] Hui, Z., “Bis(2,2'-bi-1*H*-imidazole- $\kappa^2 N^3, N^3$ )bis(4-methylbenzoato- $\kappa O$ )copper(II)”, Acta Cryst. E65, m498 (2009).
- [39] Kirilov, A. M., Haukka, M., Kopylovich, M. N. and Pombeiro, A. J. L., “Bis{ $\mu$ -2-[bis(2-hydroxyethyl)amino]ethanolato}-bis(4-methylbenzoato) dicopper(II) dihydrate”, Acta Cryst. E63, m526-m528 (2007).
- [40] Manhas, B. S., Sardana, A. K., Kalia, S. B., “Synthesis, magnetic and spectroscopic characterization of copper(II)toluate Complexes with substituted piperazines”, Synthesis and Reactivity in Inorganic Metal-Organic and Nano-Metal Chemistry, volume:35 issue:2 pages:171-179 published: (2005).
- [41] Manhas, B. S., Sardana, A. K., Kalia, S. B., “Synthesis of copper(III)toluate adducts with substituted morpholines”, Journal of The Indian Chemical Society, volume:80 issue:8 pages:747-750 published: (Aug 2003).

- [42] Yang, Y. Q., Chen, Z. M., Kuang, D. Z., Li, W., Chen, M. S., “Synthesis, crystal structure and electrochemical properties of copper(II) complex [CU(PTA)(Phen)<sub>2</sub>](*p*-MBA)(H<sub>2</sub>O)”, Chinese Journal of Inorganic Chemistry, Volume:22 Issue:6 pages:1103-1107 Published: (Jun 2006).
- [43] Liu, F. Q., Wang, Q. X., Jiao, K., Jian, F. F., Liu, G. Y., Li, R. X., “Synthesis, crystal structure, and DNA-binding properties of a new copper(II) complex containing mixed-ligands of 2,2'-bipyridine and *p*-methylbenzoate”, Inorganica Chimica Acta 359, 1524-1530, (2006).
- [44] Odoko, M., Ise, T. and Okabe, N., “*catena*-Poly[[bis( $\mu_2$ -4-methylbenzoato- $\kappa^2O, O'$ )disilver(I)(Ag-Ag)- $\mu_2$ -di-2-pyridylamine- $\kappa^2N^2, N^2'$ ] and *catena*-poly[(di-2-pyridylamine- $\kappa N^2$ )( $\mu_2$ -4-nitrobenzoato- $\kappa^2O, O'$ )disilver(I)(Ag-Ag)]- $\mu_3$ -4-nitrobenzoato  $\kappa^3O:O':O'$ ”], Acta Cryst. C63, m22-m26 (2007).
- [45] Ma, D. Y., Deng, G. H. and Song, W. D., “Diaquabis(4-methylbenzoato- $\kappa O$ )zinc(II)”, Acta Cryst. E64, m32 (2008).
- [46] Bai, L. S., Liu, X. H. and Xiao, Z. P., “Tetrakis( $\mu$ -4-methylbenzoato- $\kappa O:O'$ )-bis{[4-(dimethylamino)pyridine- $\kappa N^1$ ]zinc(II)”, Acta Cryst. E65, m948-m949 (2009).
- [47] Li, X. Y., Han, Y. F. and Li, J. K., “*catena*-Poly[[[bis(4-methylbenzoato- $\kappa O:O'$ )zinc(II)]- $\mu$ -4,4'-bipyridine- $\kappa^2N:N'$ ]tetrahydrate]”, Acta Cryst. E65, m354 (2009).
- [48] Shao, Y. Q., “(2,2'-Bipyridine- $\kappa^2N:N'$ )bis(4-methylbenzoato- $\kappa^2O:O'$ )zinc(II)”, Acta Cryst. E64, m655 (2008).
- [49] Gu, C. S., Hao, X. M., Song, W. D. and Yan, J. B., “Bis(1*H*-imidazole- $\kappa N^3$ )bis(4-methylbenzoato- $\kappa O$ )zinc(II)4-methylbenzoic acid disolvate”, Acta Cryst. E63, m895-m897 (2007).
- [50] Zhou, X. X., Liu, M. S., Lin, X. M., Fang, H. C., Chen, J. Q., Yang, D. Q., Cai, Y. P., “Construction of three low dimensional Zn(II) Complexes based on different organic-carboxylic acids”, Inorganica Chimica Acta 362: 1441-1447 (2009).
- [51] Ma, D. Y. and Deng, G. H., “A novel one-dimensional zinc coordination polymer containing 4-methylbenzoate and 4,4'-bipyridine”, Acta Cryst. C64, m271-m273 (2008).



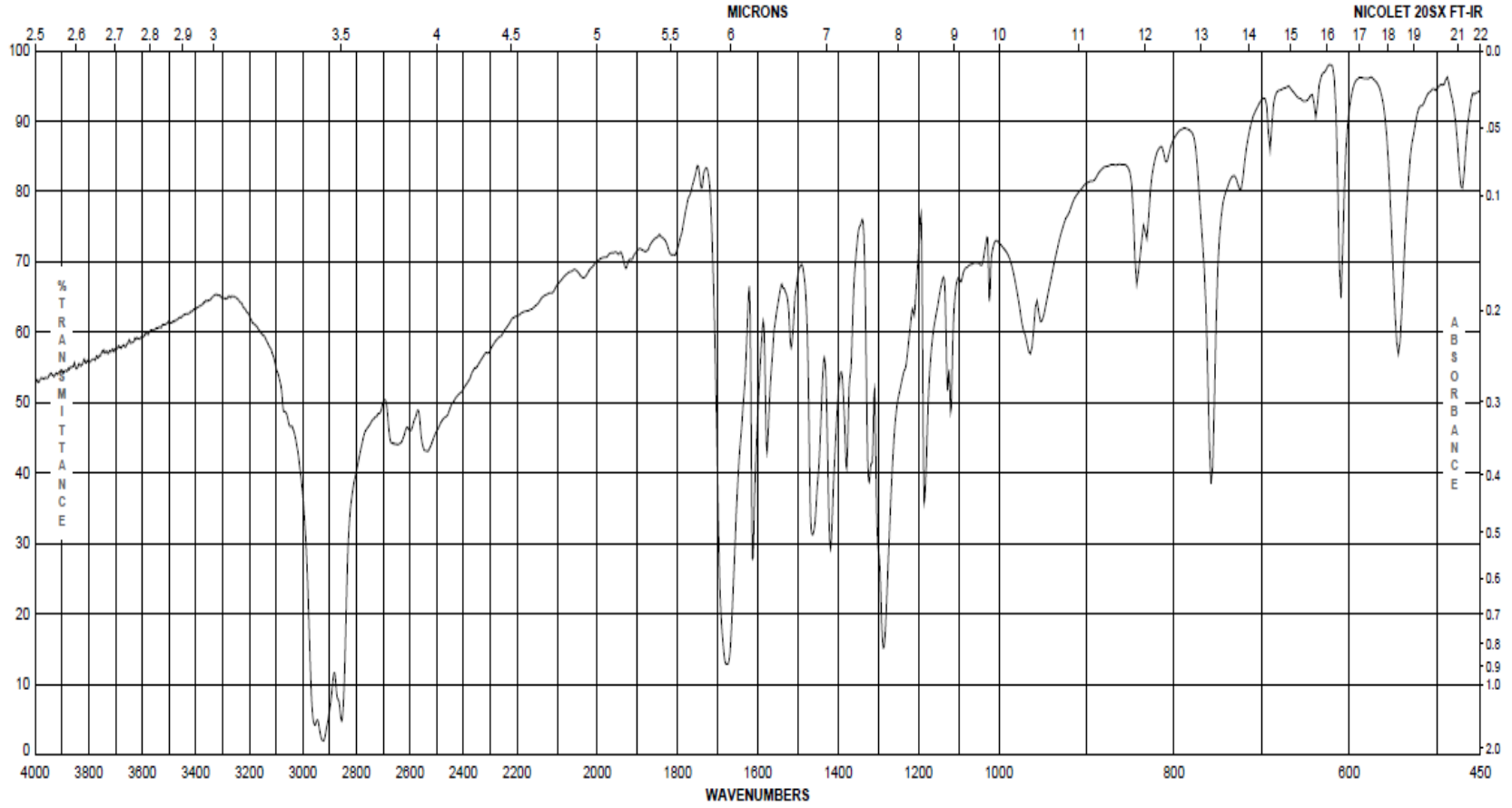
- [52] Huang, X. H., Hong, P. Z. and Song, W. D., “Diaquabis(4-methylbenzoato- $\kappa^2O,O'$ )cadmium(II)”, *Acta Cryst.* E64, m175 (2008).
- [53] Song, W. D., Ji, L. L. and Huang, X. H., “Aquabis(1*H*-imidazole- $\kappa N^3$ )bis(4-methylbenzoato- $\kappa^2O,O'$ )cadmium(II)”, *Acta Cryst.* E64, m714-m715 (2008).
- [54] Li, W., Li, C. H., Yang, Y. Q., Kuang, Y. F., “Hydrothermal synthesis, crystal structure and electrochemical properties of complex  $[Cd(phen)_3](ClO_4)_2(p-MBA)_2(H_2O)_2$ ”, *Chinese Journal of Structural Chemistry*, 26, (11): 1267-1270 (2007).
- [55] Dai, J., Yang, J. and Li, Y., “(2,2'-Bipyridine- $\kappa^2N,N'$ )bis(4-methylbenzoato- $\kappa^2O,O'$ )lead(II)”, *Acta Cryst.* E66, m298 (2010).
- [56] Dey, K. B., Karmakar, A., Baruah, B. J., “Characterisation of magnesium carboxylates and Their catalytic C-C formation reactions”. *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical* 303:137-140 (2009).
- [57] Hsu, C. P. S., “Infrared Spectroscopy”. *Separation Sciences Research and Product Development Mallinckrodt, Inc. Mallinckrodt Baker Division.*, chap. 15 (2010).
- [58] Nakamoto, K., “Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds”. John Wiley and Sons, Toronto, 5 th edn., part B, chap. 3 (1997).
- [59] Köse, D. A., Gökçe, G., Gökçe, S., Uzun, İ., “Bis(*N,N*-Diethylnicotinamide)*p*-chlorobenzoate Complexes of Ni(II), Zn(II) and Cd(II), Synthesis And Characterization”, *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 95 (1): 247–251 (2009).
- [60] Hökelek, T. and Necefoğlu, H., “*trans*-Diaquabis(nicotinamide)bis(*p*-hydroxybenzoato)cobalt(II)”, *Acta Cryst.*, C55: 1438-1440 (1999).
- [61] Hökelek, T. and Necefoğlu, H., “*trans*-Diaquabis(nicotinamide)bis(*p*-nitrobenzoato)cobalt(II)”, *Acta Cryst.*, C54: 1242-1244 (1998).
- [62] Hökelek, T. and Necefoğlu, H., “Crystal structure of [triaqua(salicylato)(nicotinamide)zinc(II)] salicylate”, *Analytical Sciences*, 17: 1241 (2001).
- [63] Hökelek, T., Dal, H., Tercan, B., Özbek, F. E., Necefoğlu, H., “Diaquabis(2-chlorobenzoato- $\kappa O$ )bis(*N,N*-diethylnicotinamide- $\kappa N^1$ )manganese(II)”, *Acta Cryst.* E65: 513–514 (2009).

- [64] Necefoğlu, H., İçbudak, H., Köse, D. A., and Uyanık, A., “Thermal Behaviour of the Nicotinamide Adducts of Co(II), Ni(II), Cu(II) and Zn(II) Arylcarboxylates, Challenges for Coord.” Chem. in the New Century, Slovak Technical University pres. Bratislava, 427-432 (2001).
- [65] Köse, D. A.,” Bakır(II), Nikel(II), Kobalt(II) ve Çinko(II) Asetilsalisilatların Nikotinamid ve Dietilnikotinamid Komplekslerinin Sentezi ve Yapılarının İncelenmesi (Yüksek Lisans Tezi)”, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, (2001).
- [66] Köse, D. A., Kaya, A., Necefoğlu, H., “Synthesis And Characterization of bis(*N,N*-Diethylnicotinamide) *m*-Hydroxybenzoate Complexes of Co(II), Ni(II), Cu(II) and Zn(II)”, Russian Journal of Coordination Chemistry, 33 (6): 422-427 (2007).
- [67] Necefoğlu, H., Hökelek, T., Ersanlı, C. C., Erdönmez, A., “Bis(4-Hydroxybenzoato- $\kappa O$ )bis(Nicotinamide- $\kappa N$ ) Zinc(II)”, Acta Crystallographica, E58: 758 (2002).
- [68] Kaya, A. A., “Bakır(II), Nikel(II), Kobalt(II) ve Çinko(II) 3-Hidroksibenzoatların Nikotinamid ve Dietilnikotinamid Komplekslerinin Sentezi ve Özellikleri (Yüksek Lisans Tezi)”, Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, (2004).
- [69] Aybirdi, Ö., Köse, D. A., Necefoğlu, H., “Synthesis of the 4-*N,N*-Dimethylaminobenzoic Acid Complexes of Mn(II), Co(II), Ni(II), and Cu(II). Spectroscopic and Thermal Characterization”, Hacettepe J. İ& Chem., 36 (1): 31-39 (2008).
- [70] Köse, D. A., Zümreoğlu-Karan, B., Şahin, O. and Büyükgüngör, “Transition metal(II) complexes of vitamin B13 with monodentate orotate(1<sup>-</sup>) ligands”, Jurnal of Molecular Structure, Volume 789 (1-3): 147-151 (2006).
- [71] Tanabe, Y., Sugano, S., “On the absorption spectra of complex ions. I”. Journal of the Physical Society of Japan, 9 (5): 753-766 (1954).
- [72] Necefoğlu, H., Çimen, E., Tercan, B., Dal, H., Hökelek, T., “Diaquabis(4-methylbenzoato- $\kappa O$ )bis-(nicotinamide- $\kappa N^I$ )manganese(II)”, Acta Cryst. E66, m490-m491 (2010).

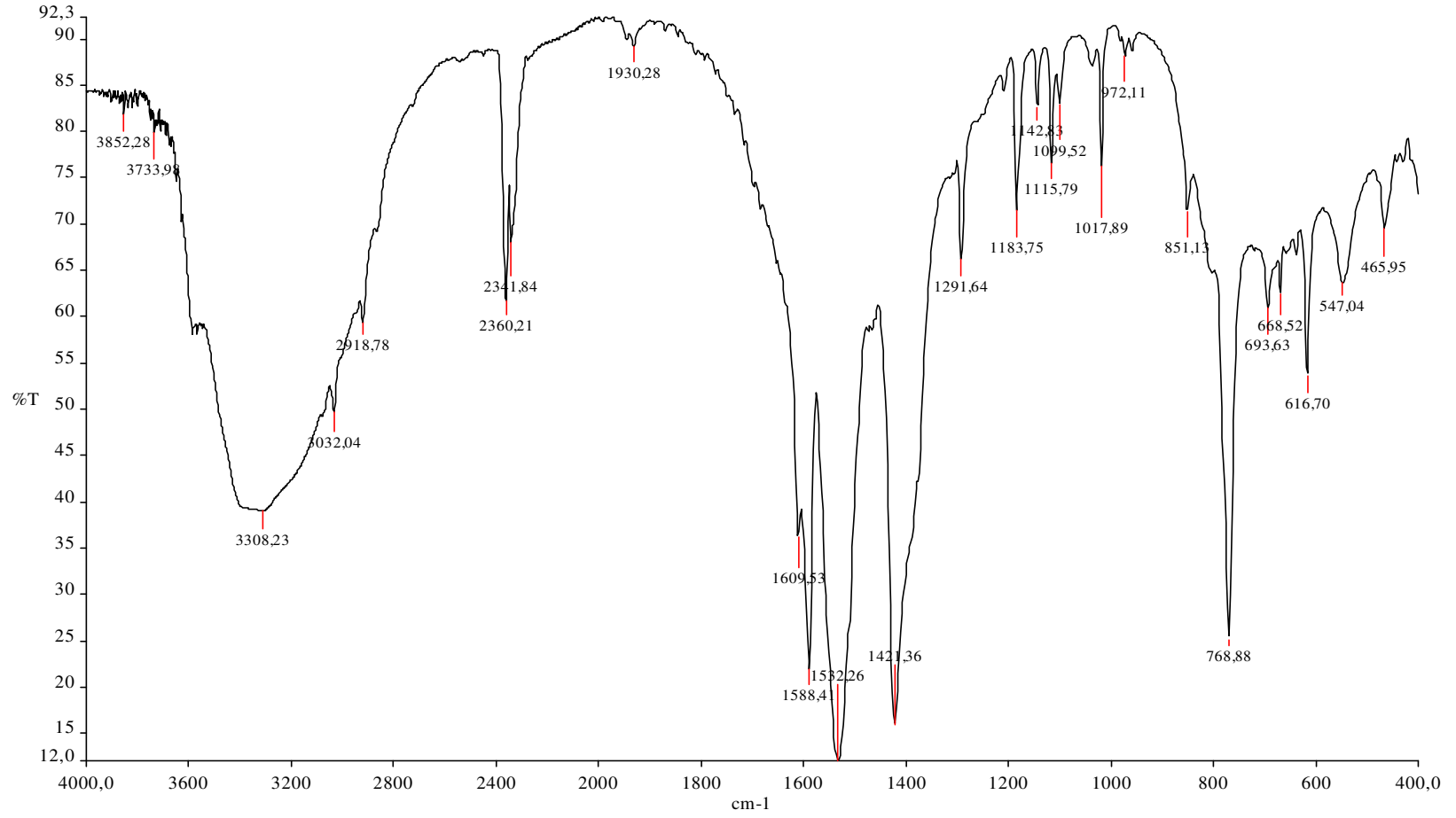
- [73] Necefoğlu, H., Çimen, E., Tercan, B., Ermiş, E., Hökelek, T., “Diaquabis(4-methylbenzoato- $\kappa O$ )bis-(nicotinamide- $\kappa N^I$ )nickel(II)”, Acta Cryst. E66, m361-m362 (2010).
- [74] Hökelek, T., Ermiş, E., Tercan, B., Çimen, E., Necefoğlu, H., “Bis( $\mu$ -4-methylbenzoato- $\kappa^2 O, O'$ )bis[aqua(4-methylbenzoato- $\kappa^2 O, O'$ )zinc(II)]-bis( $\mu$ -4-methylbenzoato- $\kappa^2 O, O'$ )bis[4-methylbenzoato- $\kappa O$ )-(nicotinamide)- $\kappa N$ ]zinc(II)-water (1/1/2)”, Acta Cryst. E66, m841-m842 (2010).
- [75] Hökelek, T., Dal, H., Tercan, B., Çimen, E., Necefoğlu, H., “*catena*-Poly[[bis(4-methylbenzoato- $\kappa^2 O, O'$ )lead(II)]- $\mu$ -nicotinamide)- $\kappa^2 N^I:O$ ]", Acta Cryst. E66, m953-m954 (2010).
- [76] Hökelek, T., Dal, H., Tercan, B., Çimen, E., Necefoğlu, H., “*catena*-Poly[[4-methylbenzoato- $\kappa O$ )manganese(II)]- $\mu$ -aqua-bis( $\mu$ -4-methylbenzoato- $\kappa^2 O, O'$ )[(4-methylbenzoato- $\kappa O$ )manganese(II)]-bis( $\mu$ -*N,N*-diethylnicotinamide)- $\kappa^2 N^3:O;O:N^3$ ]", Acta Cryst. E66, m734-m735 (2010).
- [77] Necefoğlu, H., Çimen, E., Tercan, B., Ermiş, E., Hökelek, T., “Diaquabis(*N,N*-diethylnicotinamide- $\kappa N^I$ )bis(4-methylbenzoato- $\kappa O$ )cobalt(II)”, Acta Cryst. E66, m556-m557 (2010).
- [78] Necefoğlu, H., Çimen, E., Tercan, B., Dal, H., Hökelek, T., “Tetrakis( $\mu$ -4-methylbenzoato- $\kappa^2 O, O'$ )bis[(*N,N*-diethylnicotinamide- $\kappa N^I$ )zinc(II)]”, Acta Cryst. E66, m485-m486 (2010)
- [79] Hökelek, T., Güner, S., Tercan, B., Çimen, E., Necefoğlu, H., “Bis(isonicotinamide- $\kappa N^I$ )bis(4-methylbenzoato- $\kappa O$ )copper(II) dihydrate”, Acta Cryst. E66, m955-m956 (2010).
- [80] Necefoğlu, H., Çimen, E., Tercan, B., Dal, H., Hökelek, T., “Tetrakis( $\mu$ -4-methylbenzoato- $\kappa^2 O, O'$ )bis[(isonicotinamide- $\kappa N^I$ )copper(II)]”, Acta Cryst. E66, m334-m335 (2010).
- [81] Necefoğlu, H., Çimen, E., Tercan, B., Süzen, Y., Hökelek, T., “Aquabis(isonicotinamide- $\kappa N^I$ )bis(4-methylbenzoato)- $\kappa O; \kappa^2 O, O'$ -cadmium(II)monohydrate”, Acta Cryst. E66, m392-m393 (2010).

- [82] Aydın, Ö., Delibaş, Ç., N., Necefoğlu, H., Hökelek, T. “Diaquabis(2-iodobenzoato- $\kappa O$ )bis(nicotinamide- $\kappa N^I$ )cobalt(II)”, Acta Cryst. E68, 521-522 (2012).
- [83] Necefoğlu, H., Aybirdi, Ö., Tercan, B., Ermiş, E., Hökelek, T., “Diaquabis(4-methylaminobenzoato- $\kappa O$ )bis(nicotinamide- $\kappa N^I$ )cobalt(II)”, Acta Cryst. E66, m448-m449 (2010).
- [84] Hökelek, T., Dal, H., Tercan, B., Özbek, F. E., Necefoğlu H., “Diaquabis(2-chlorobenzoato- $\kappa O$ )bis(*N,N*-diethylnicotinamide- $\kappa N^I$ )nickel(II)”, Acta Cryst. E65, m545-m546 (2009).
- [85] Hökelek, T., Süzen, Y., Tercan, B., Aybirdi, Ö., Necefoğlu, H., “Diaquabis(*N,N*-diethylnicotinamide- $\kappa N^I$ )bis[4-(dimethylamino)benzoato- $\kappa O$ ]]nickel(II)”, Acta Cryst. E65: m1015-m1016 (2009).
- [86] Hökelek, T., Yılmaz, F., Tercan, B., Özbek, F. E., Necefoğlu, H., “Diaquabis(2-bromobenzoato- $\kappa O$ )bis(*N,N*-diethylnicotinamide- $\kappa N^I$ )nickel(II)”, Acta Cryst. E65, m766-m767 (2009).
- [87] Sertçelik, M., Tercan, B., Şahin, E., Necefoğlu, H., Hökelek, T., “Diaquabis(*N,N*-diethylnicotinamide- $\kappa N^I$ )(4-formylbenzoato- $\kappa O$ )nickel(II)”, Acta Cryst. E65, m326-m327 (2009).

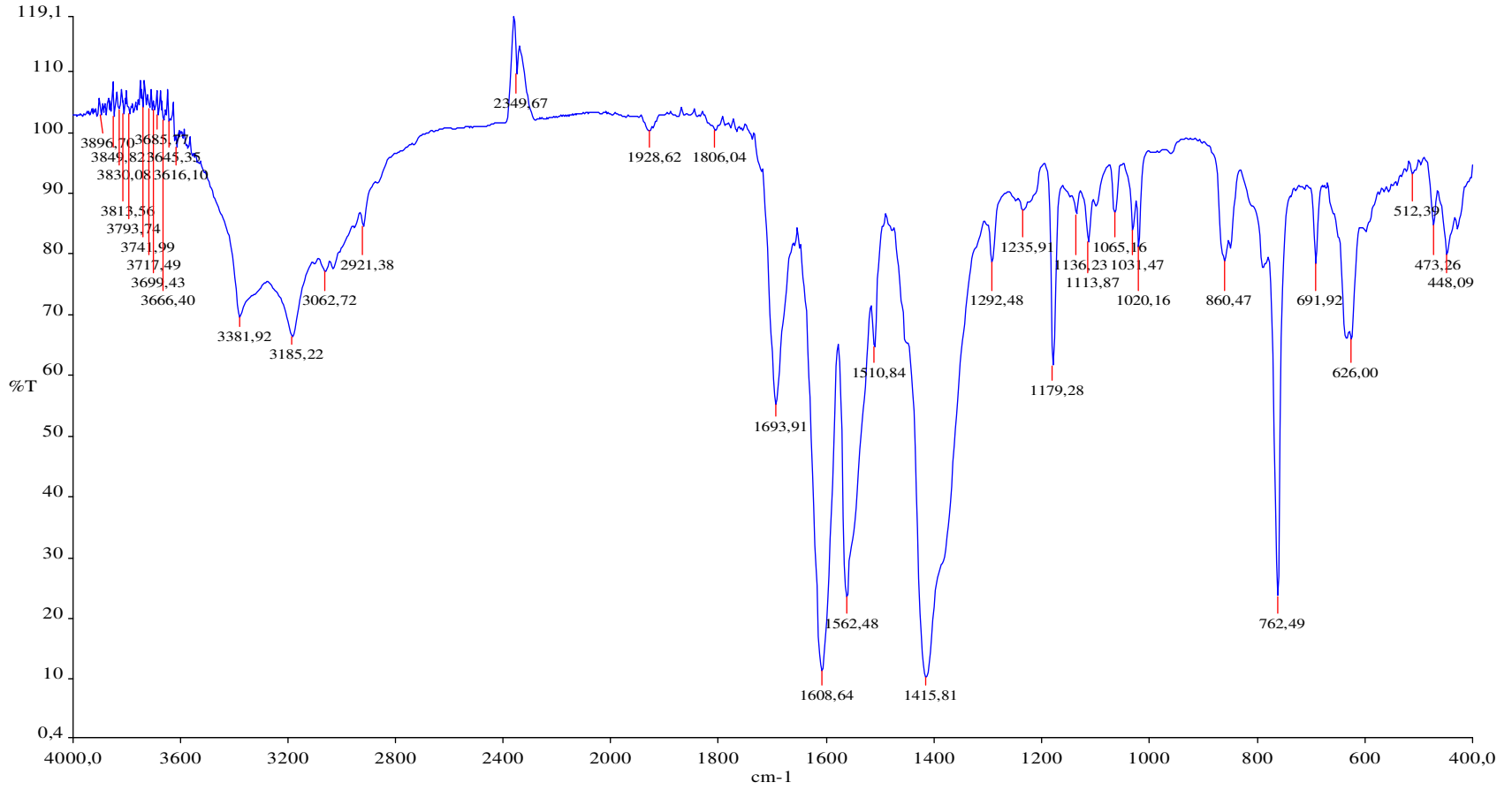
## **7. EKLER**



Ek Şekil 1. *p*-Metilbenzoik asit bileşiğinin IR spektrumu.

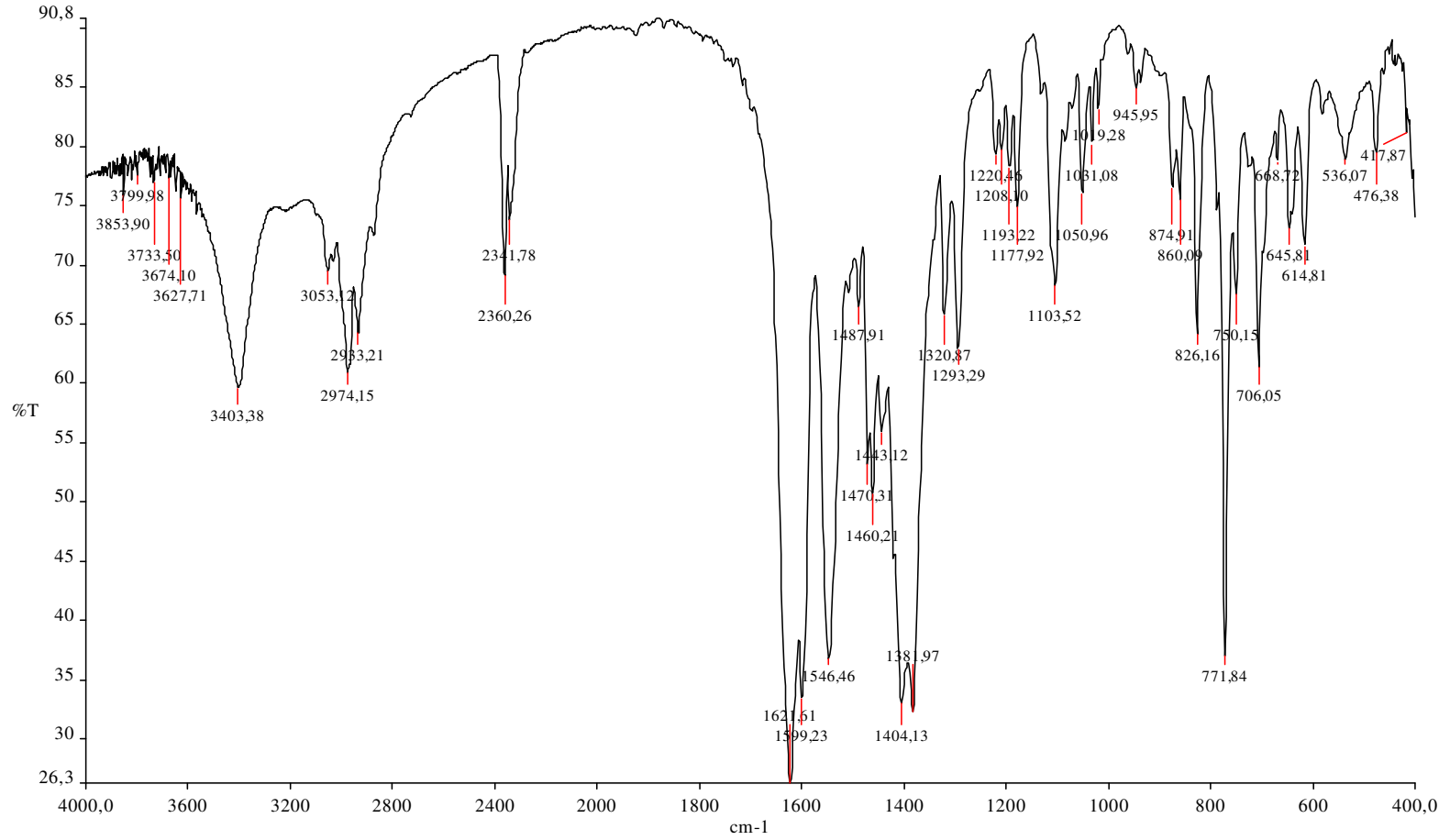


Ek Şekil 2. (1) kompleksinin IR spektrumu.

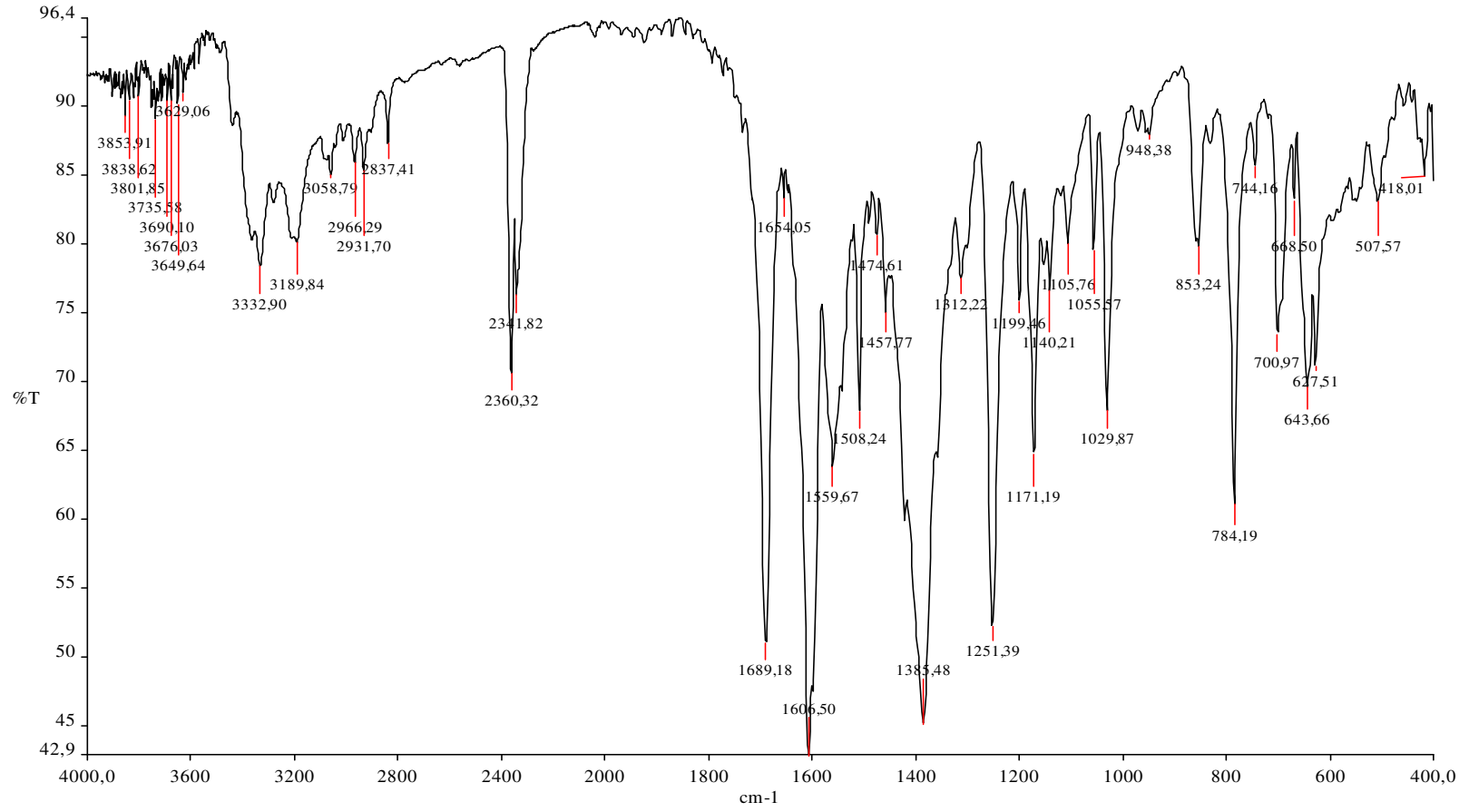


Ek Şekil 3. (2) kompleksinin IR spektrumu.

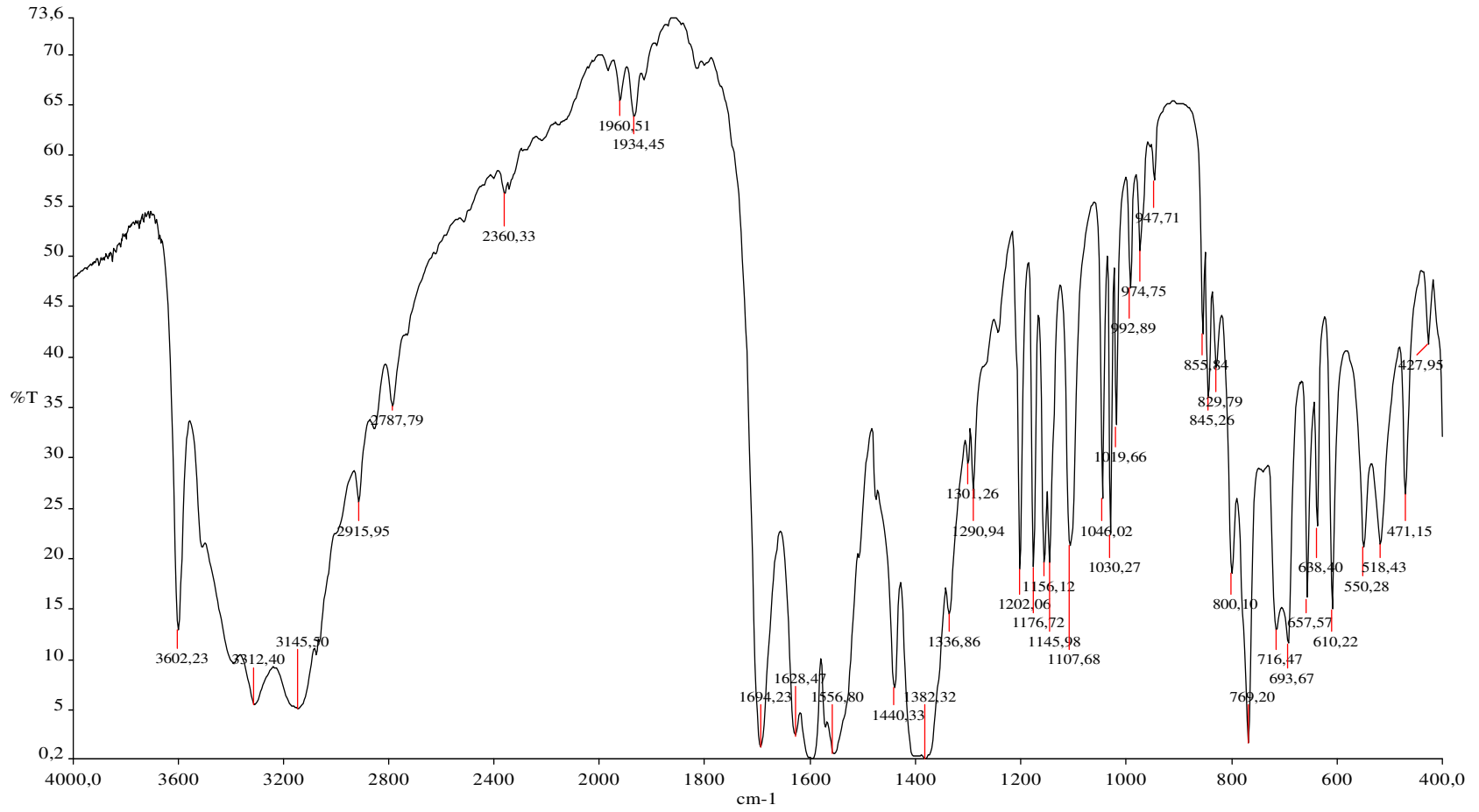




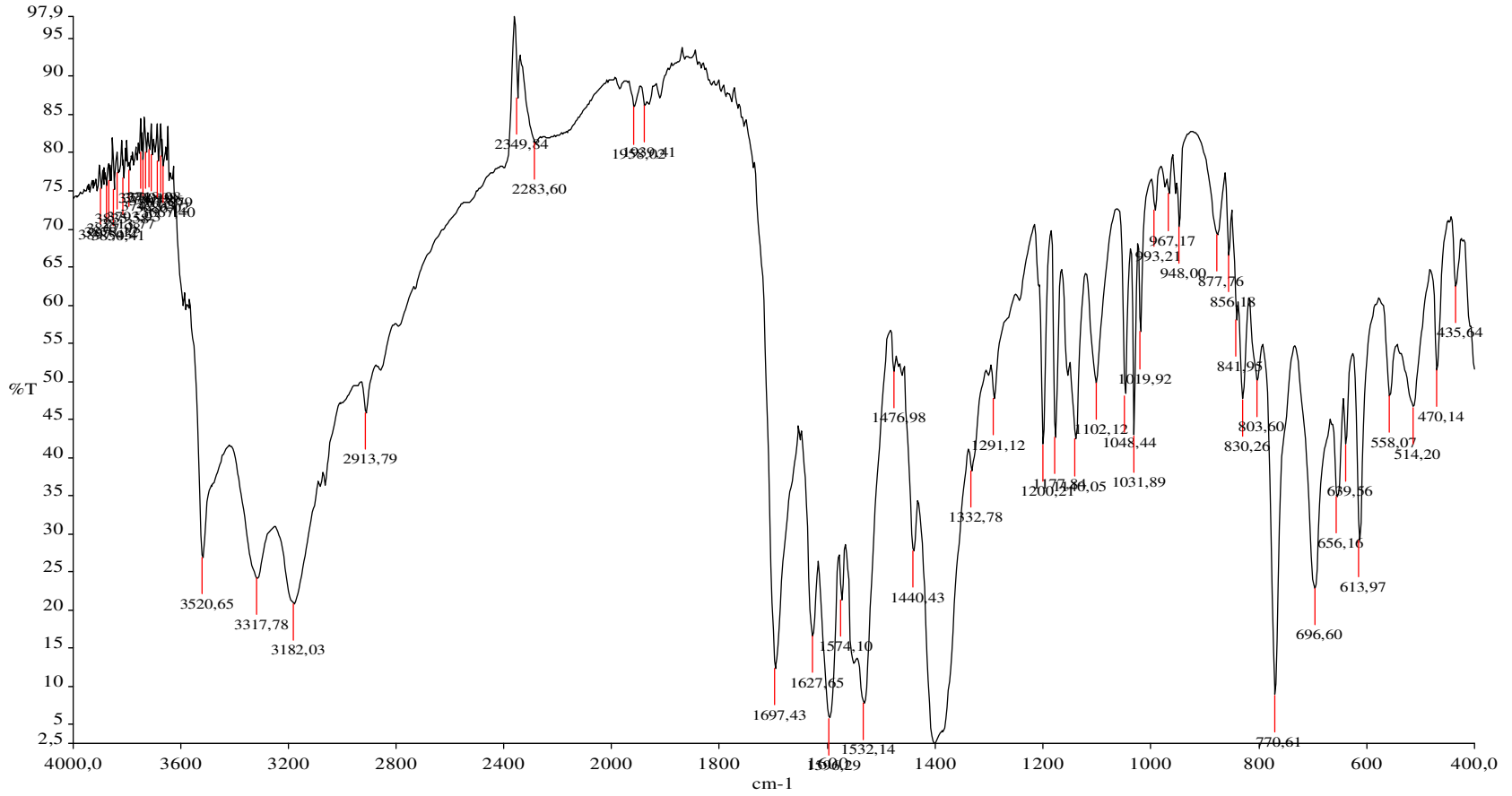
Ek Şekil 4. (3) kompleksinin IR spektrumu.



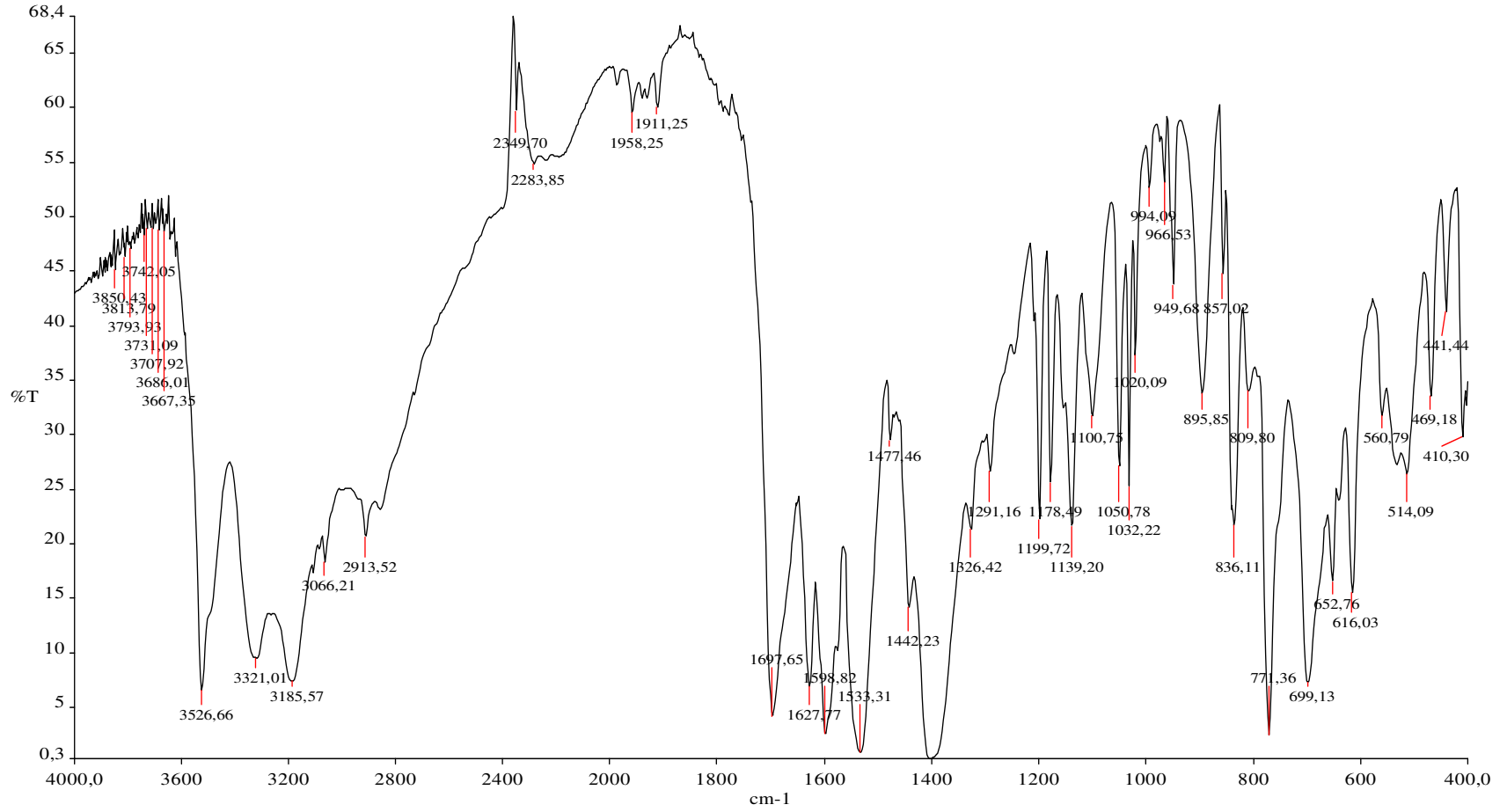
Ek Şekil 5. (4) kompleksinin IR spektrumu.



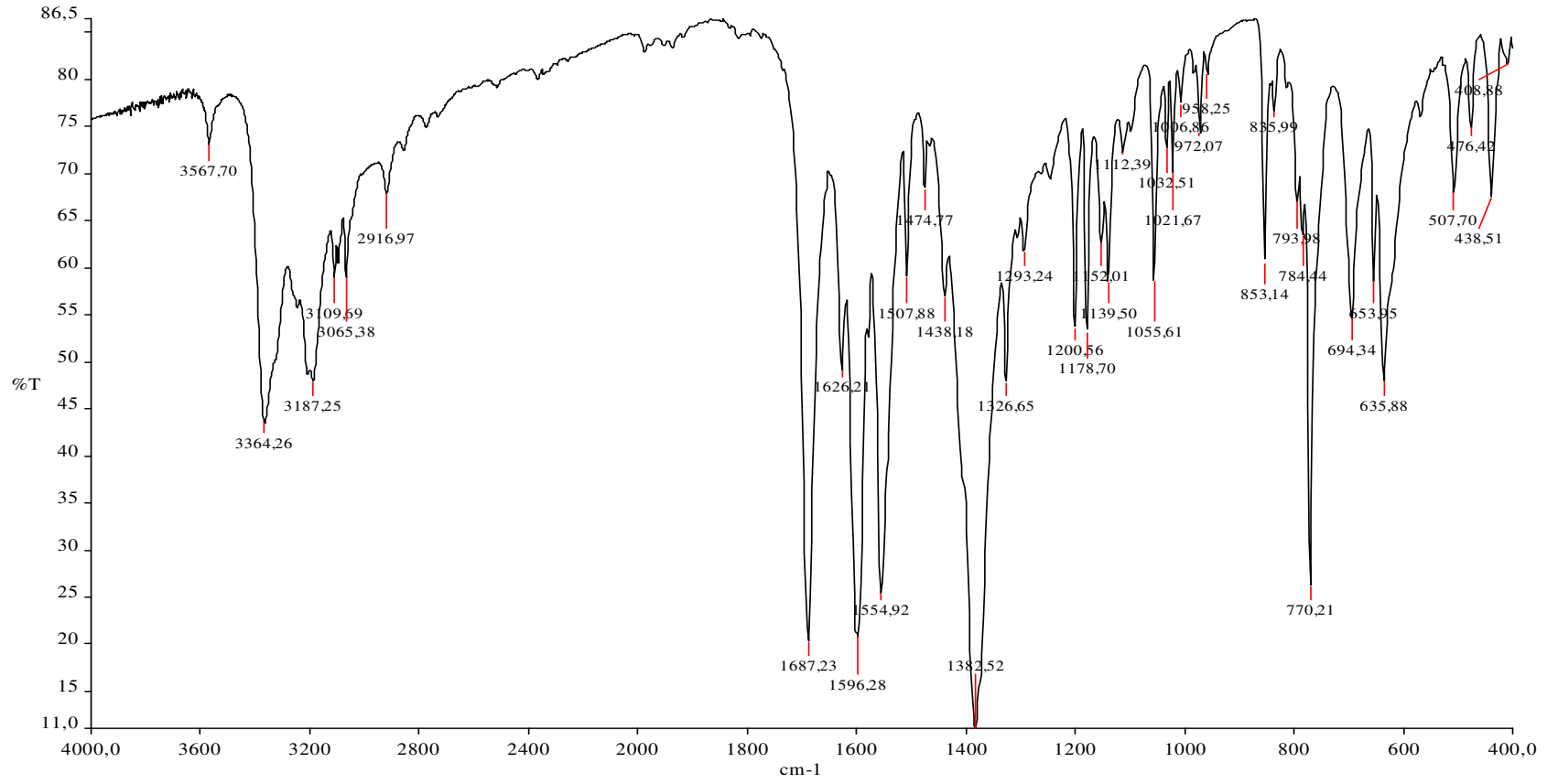
Ek Şekil 6. (5) kompleksinin IR spektrumu.



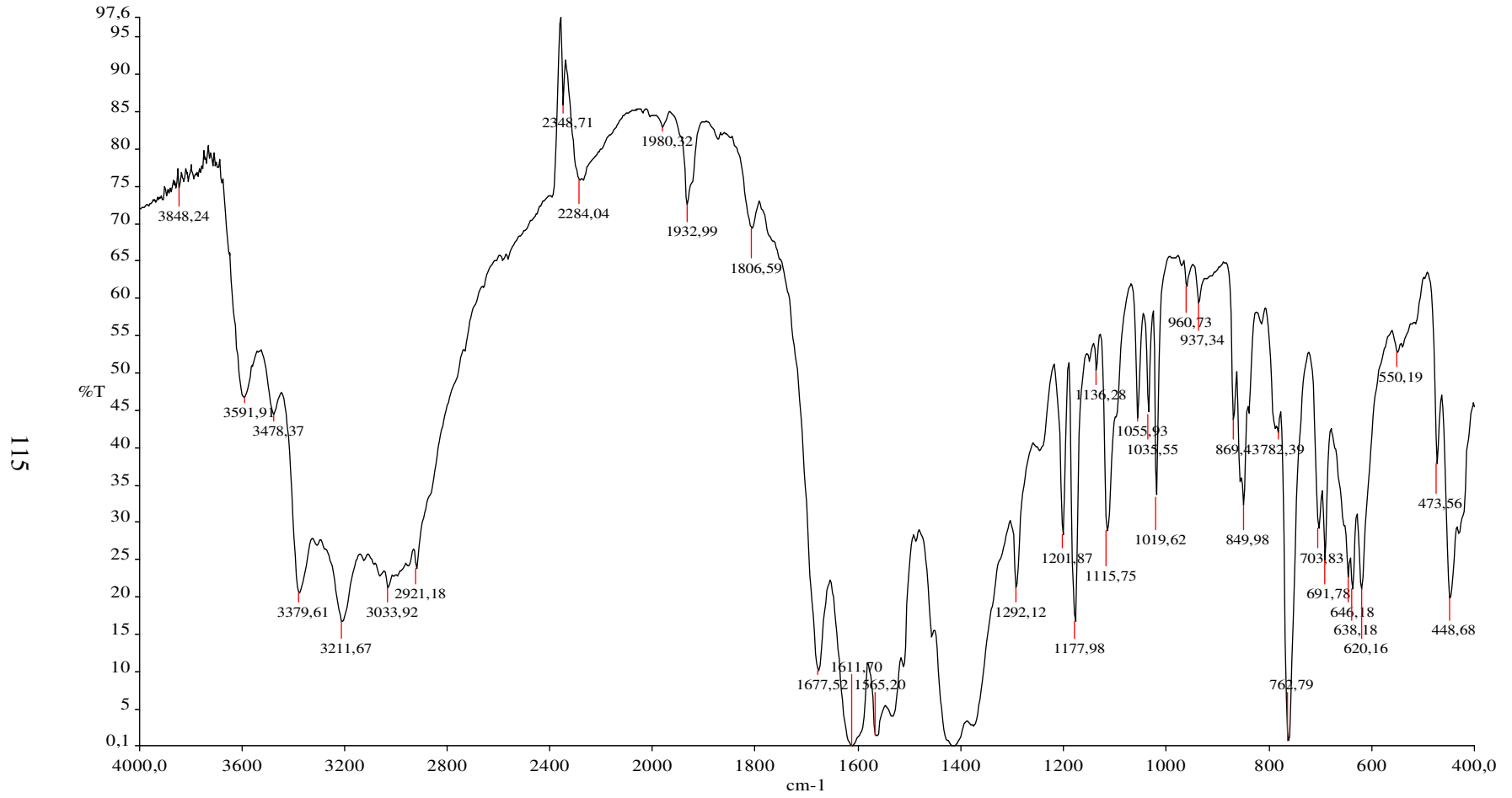
Ek Şekil 7. (6) kompleksinin IR spektrumu.



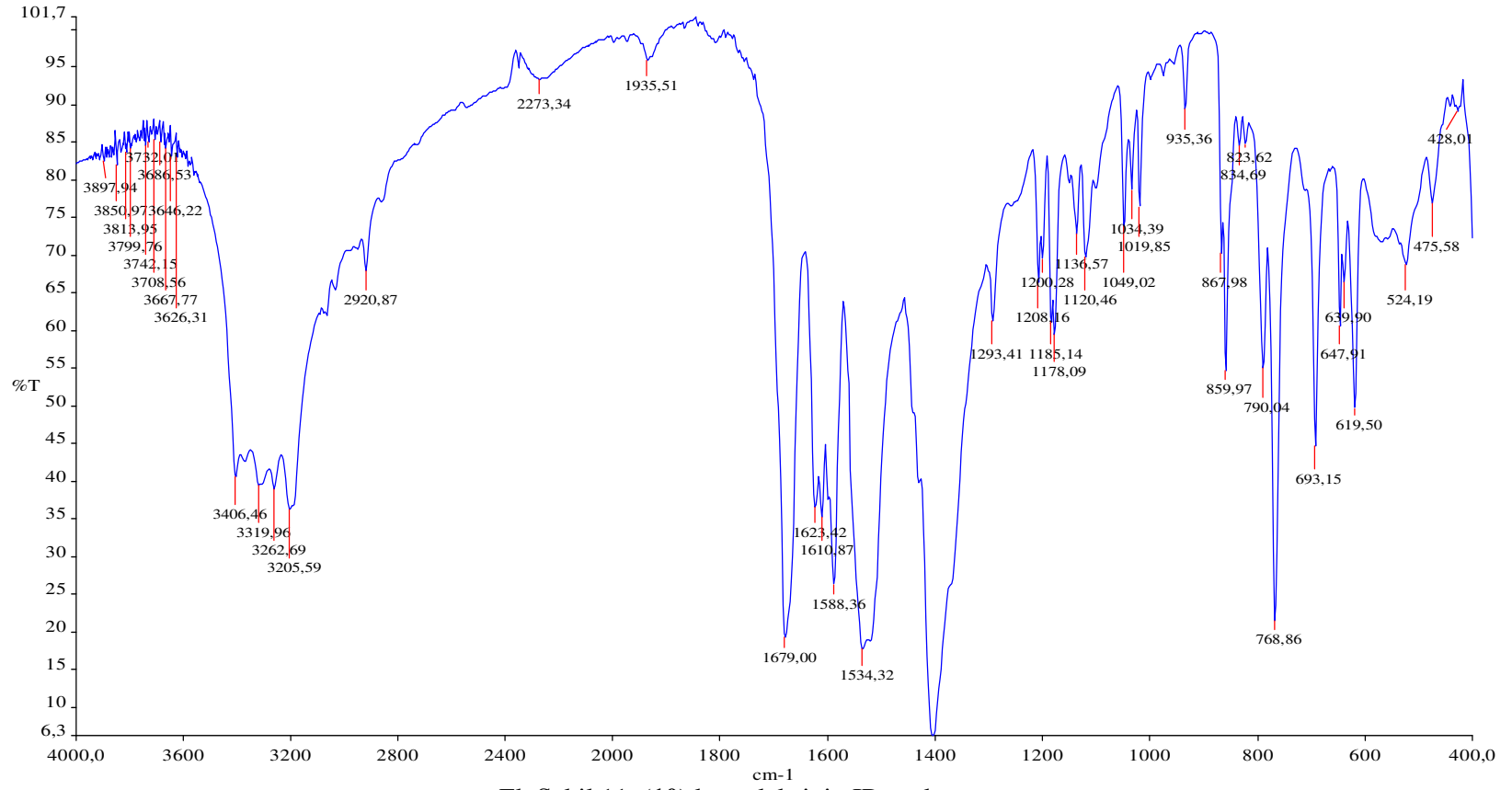
Ek Şekil 8. (7) kompleksinin IR spektrumu.



Ek Şekil 9. (8) kompleksinin IR spektrumu.

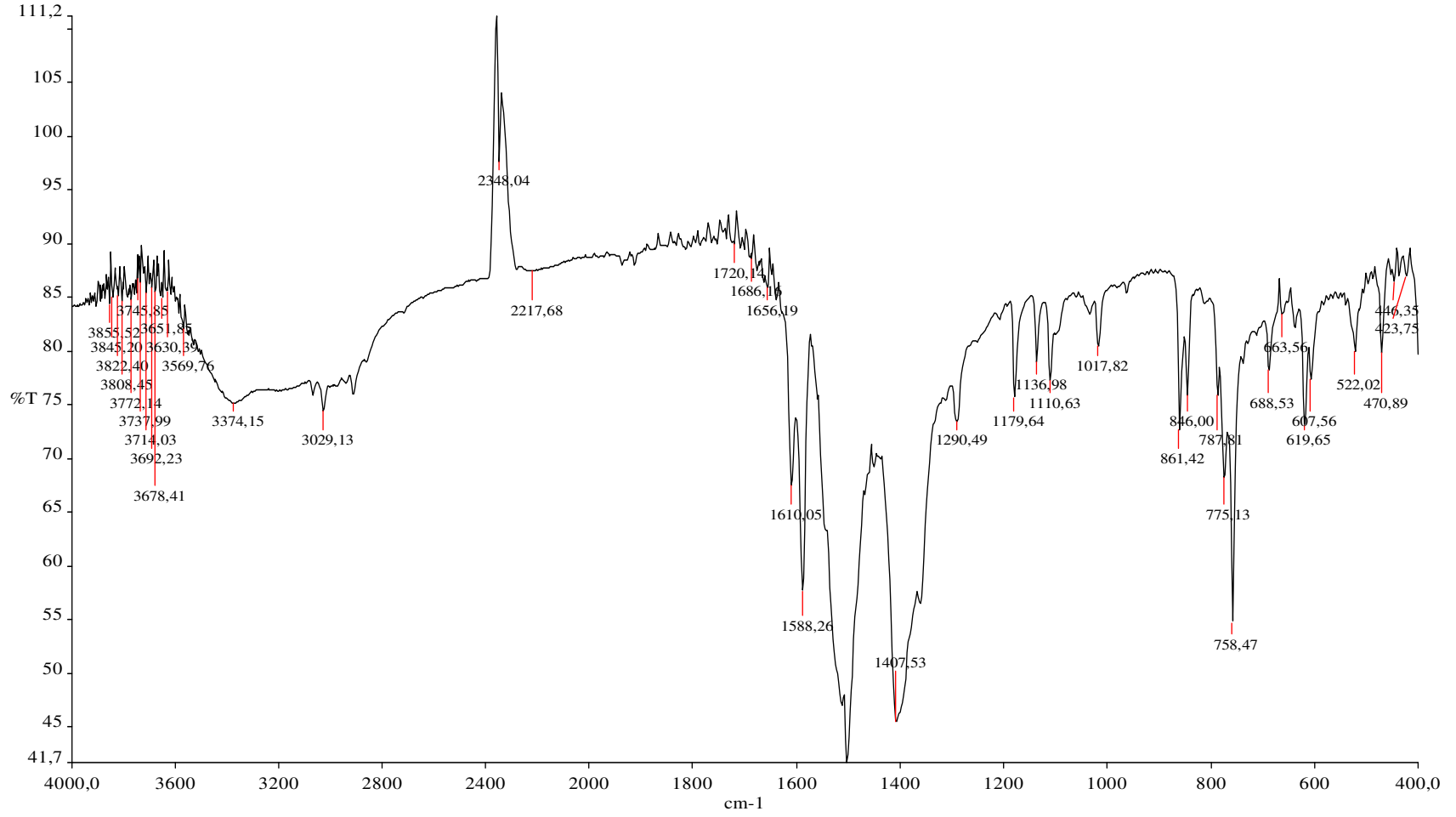


Ek Şekil 10. (9) kompleksinin IR spektrumu.

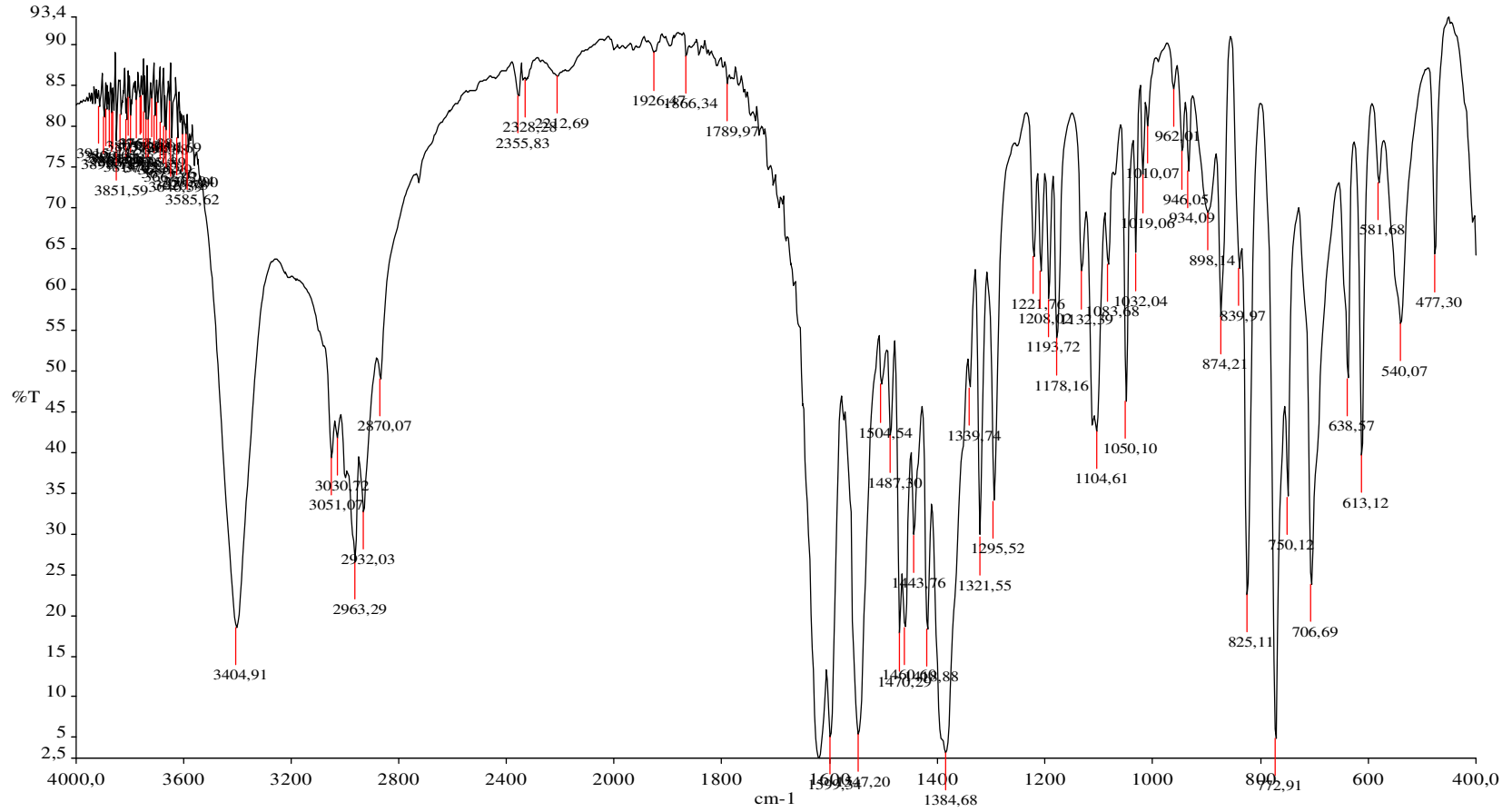


Ek Şekil 11. (10) kompleksinin IR spektrumu.

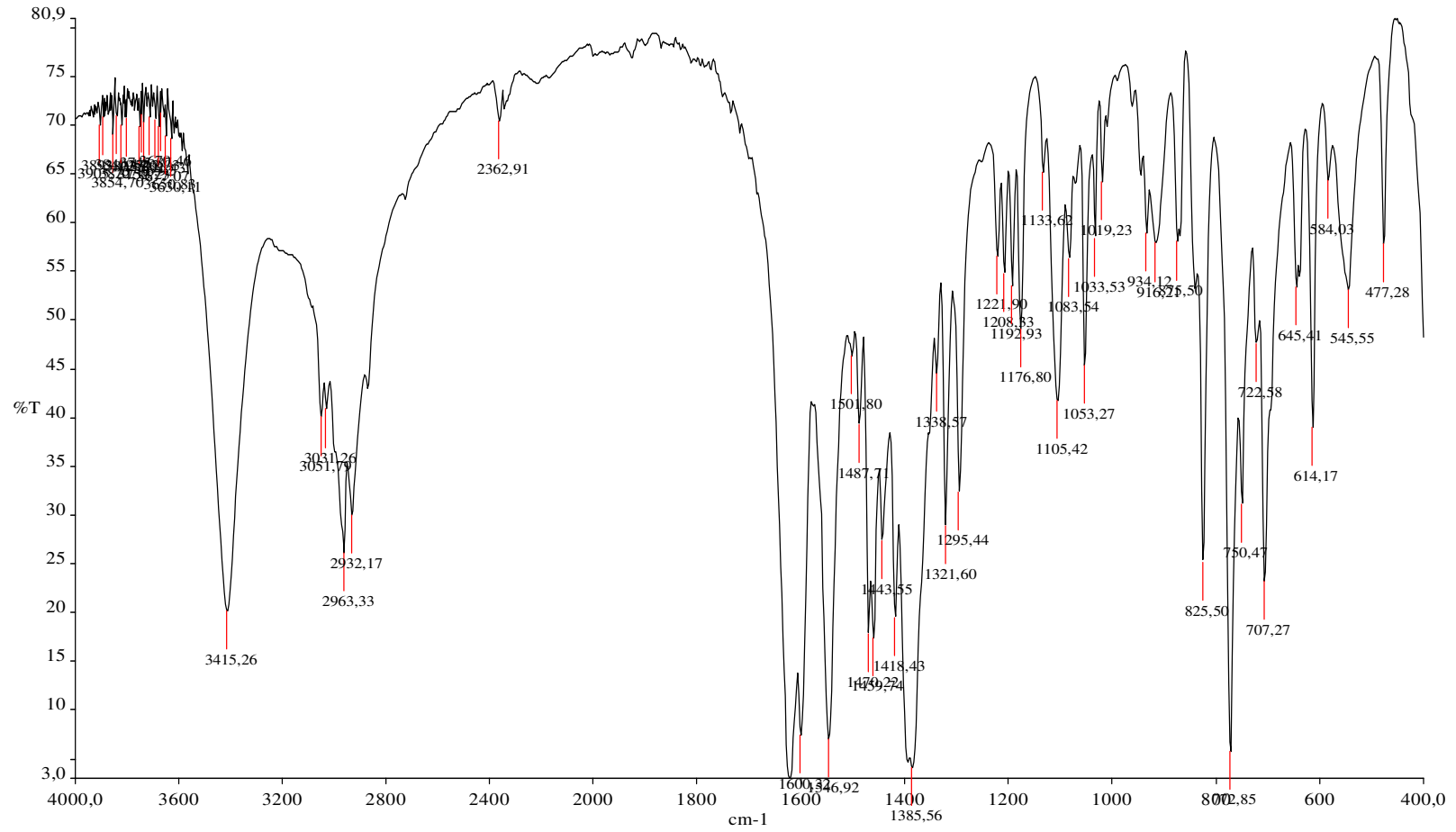




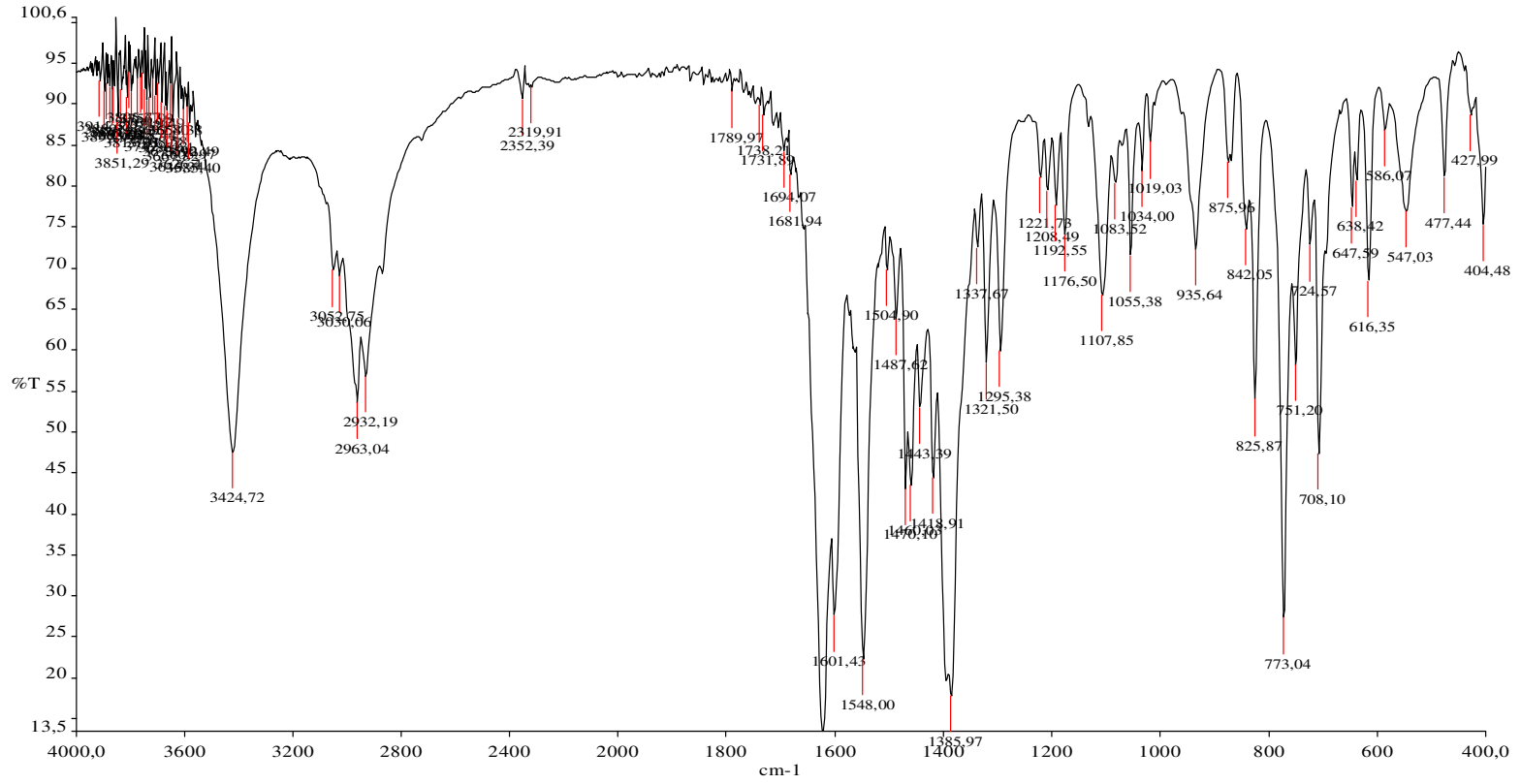
Ek Şekil 12. (11) kompleksinin IR spektrumu.



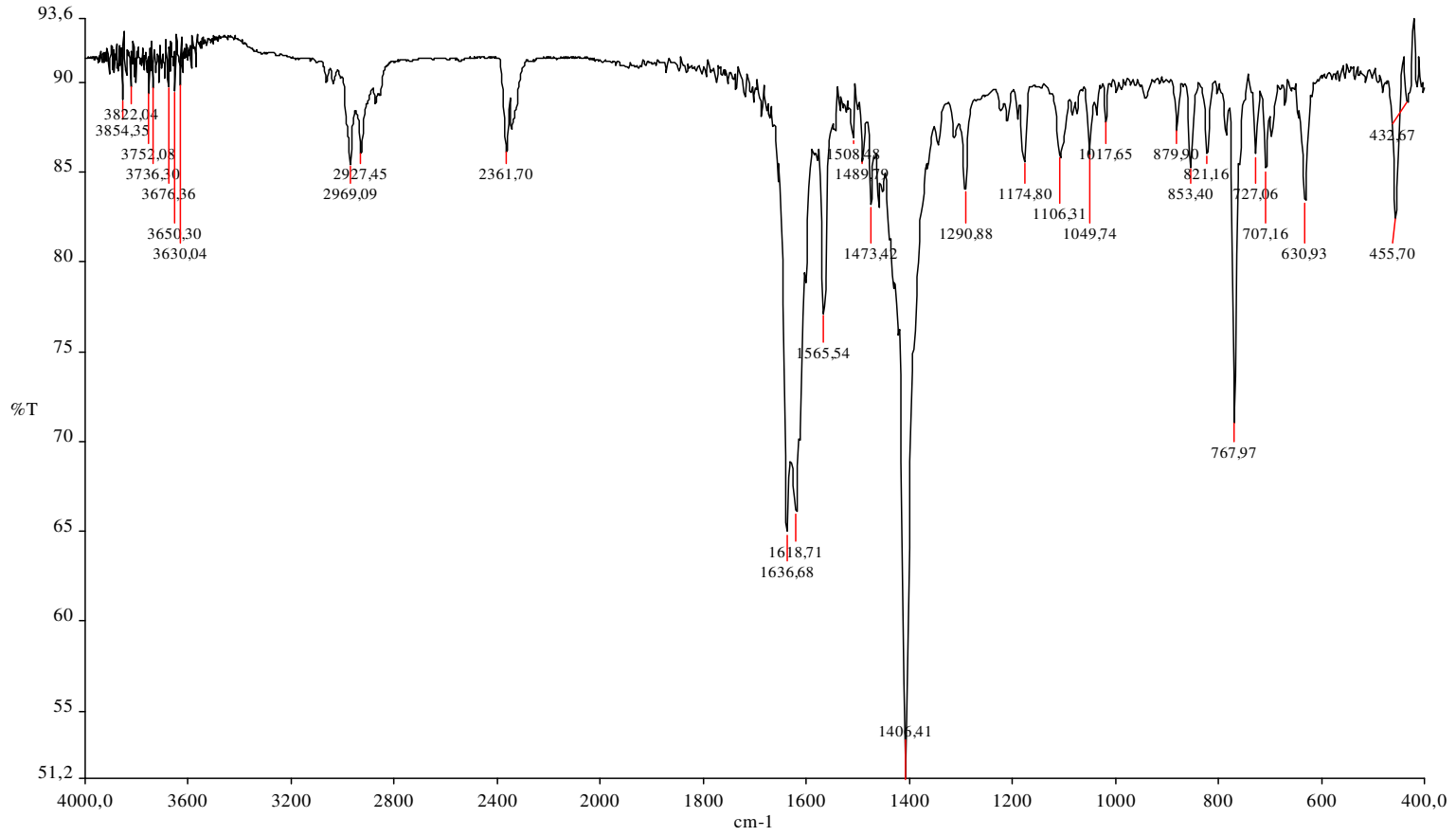
Ek Şekil 13. (12) kompleksinin IR spektrumu.



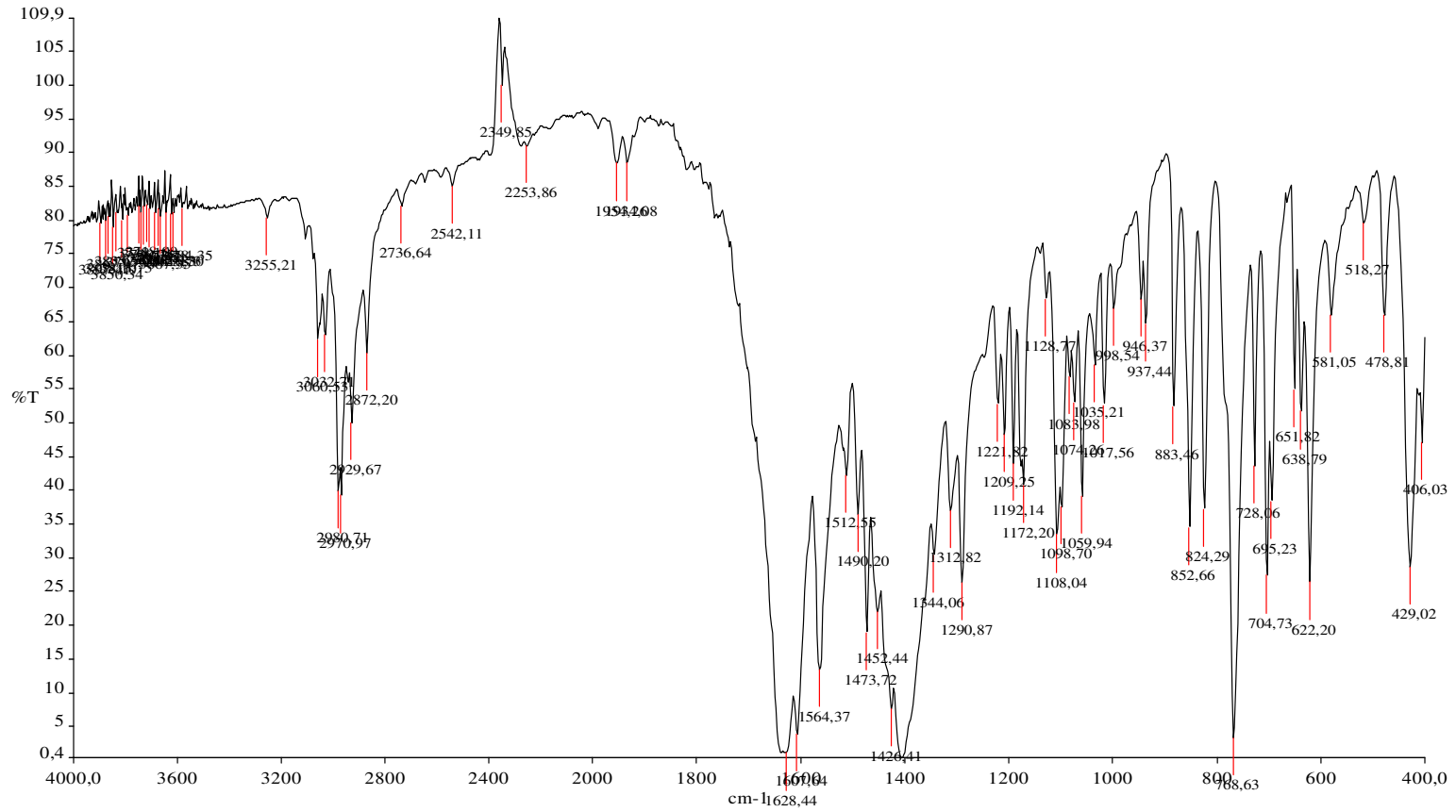
Ek Şekil 14. (13) kompleksinin IR spektrumu



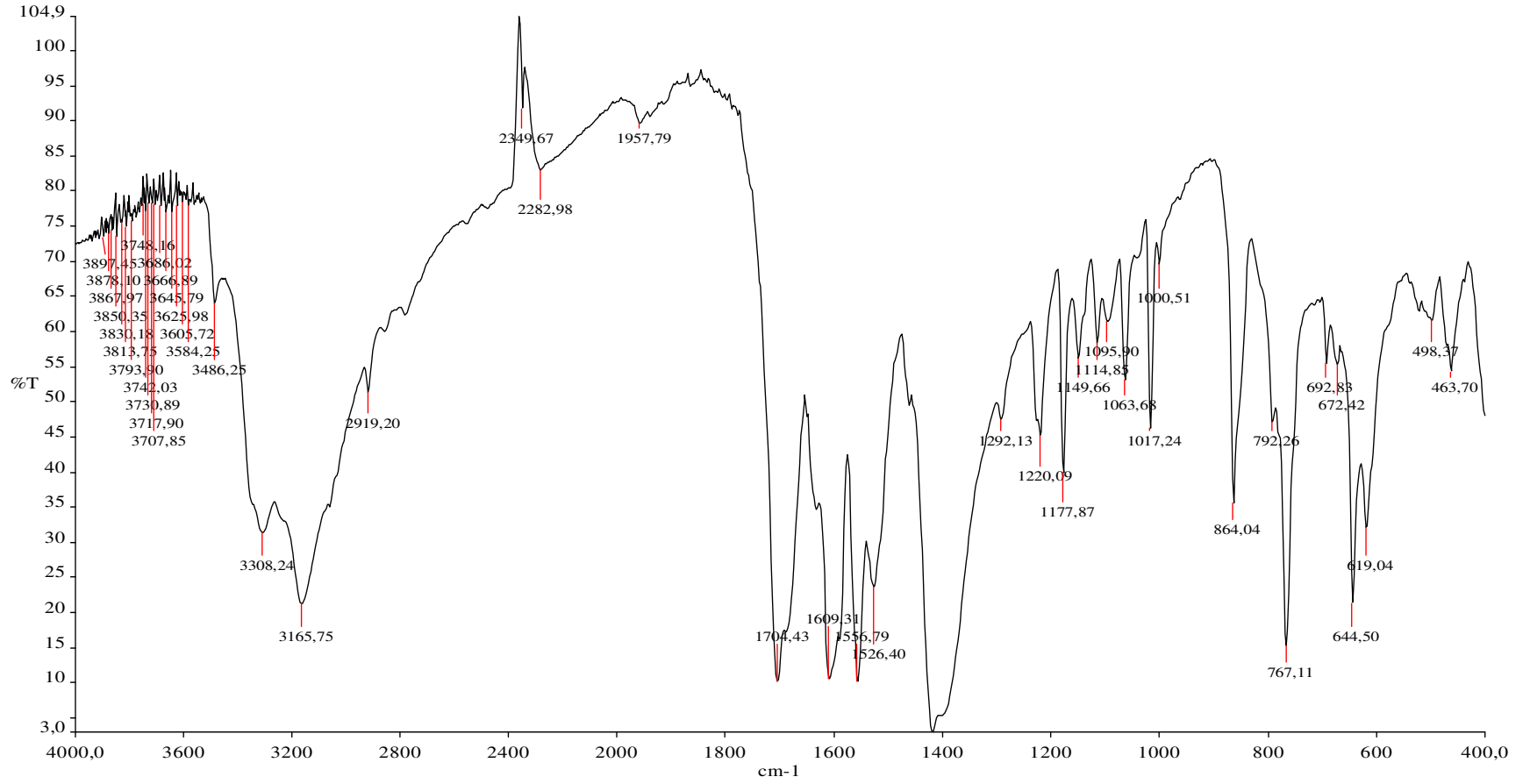
Ek Şekil 15. (14) kompleksinin IR spektrumu.



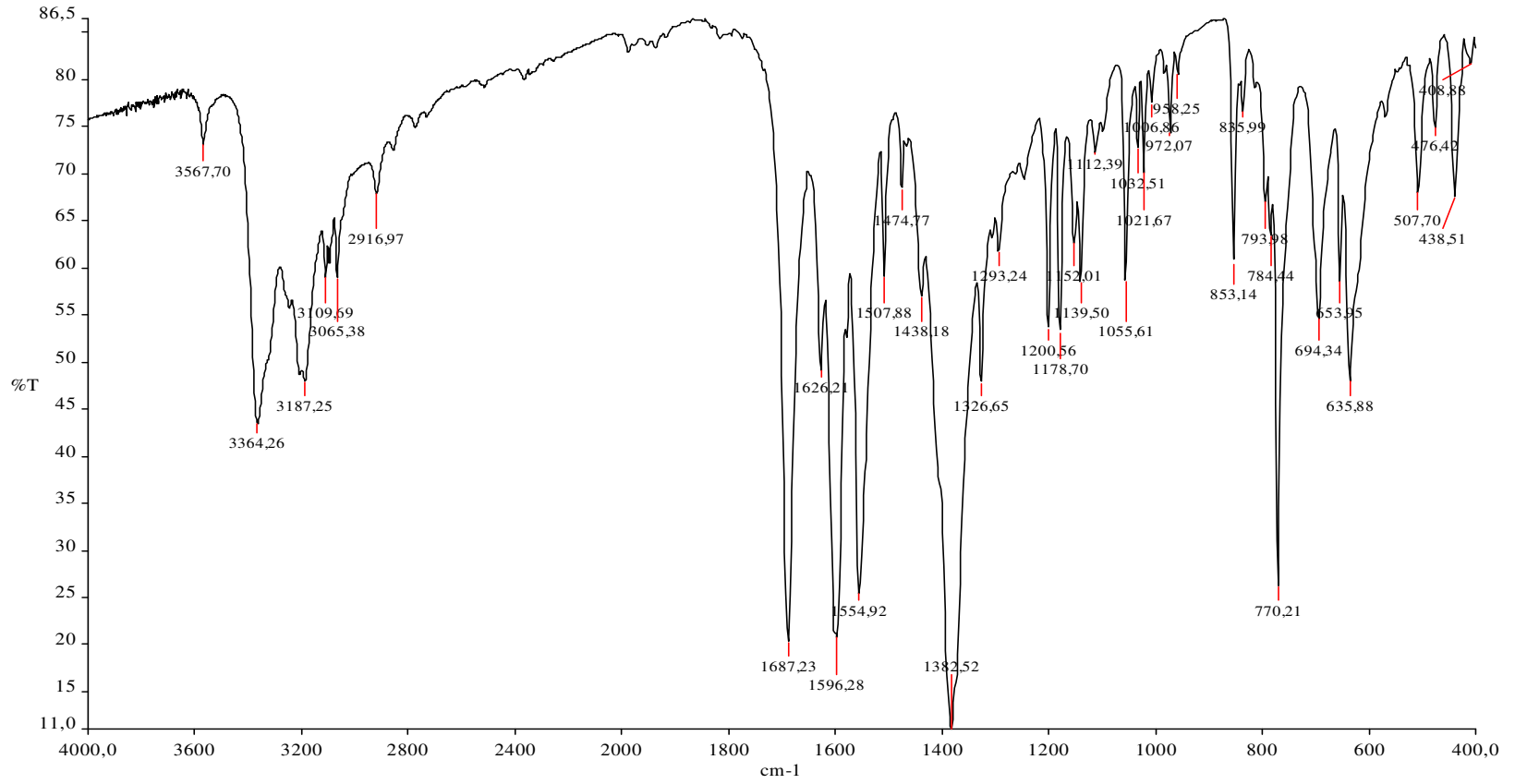
Ek Şekil 16. (15) kompleksinin IR spektrumu.



Ek Şekil 17. (16) kompleksinin IR spektrumu.

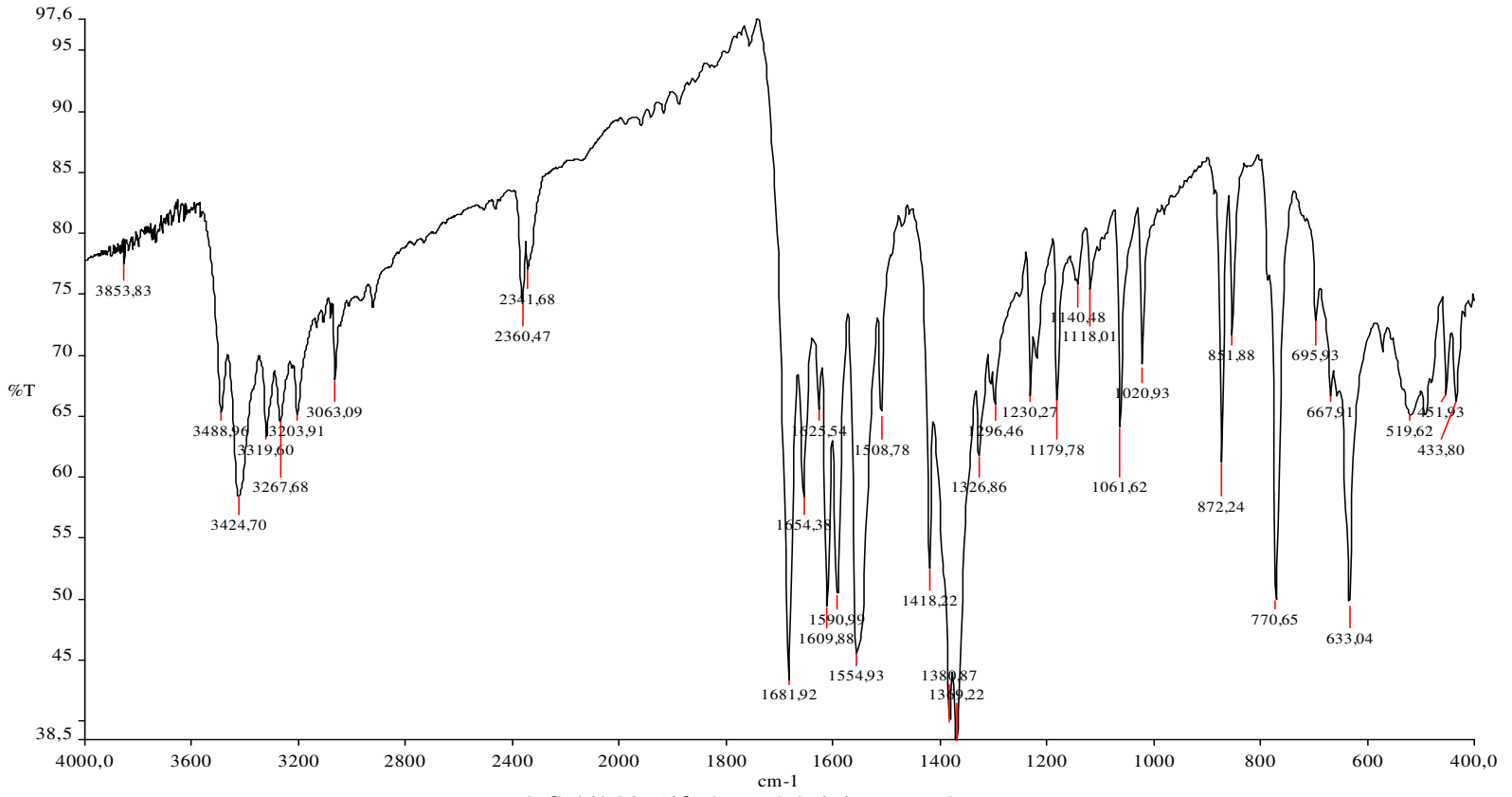


Ek Şekil 18. (17) kompleksinin IR spektrumu.

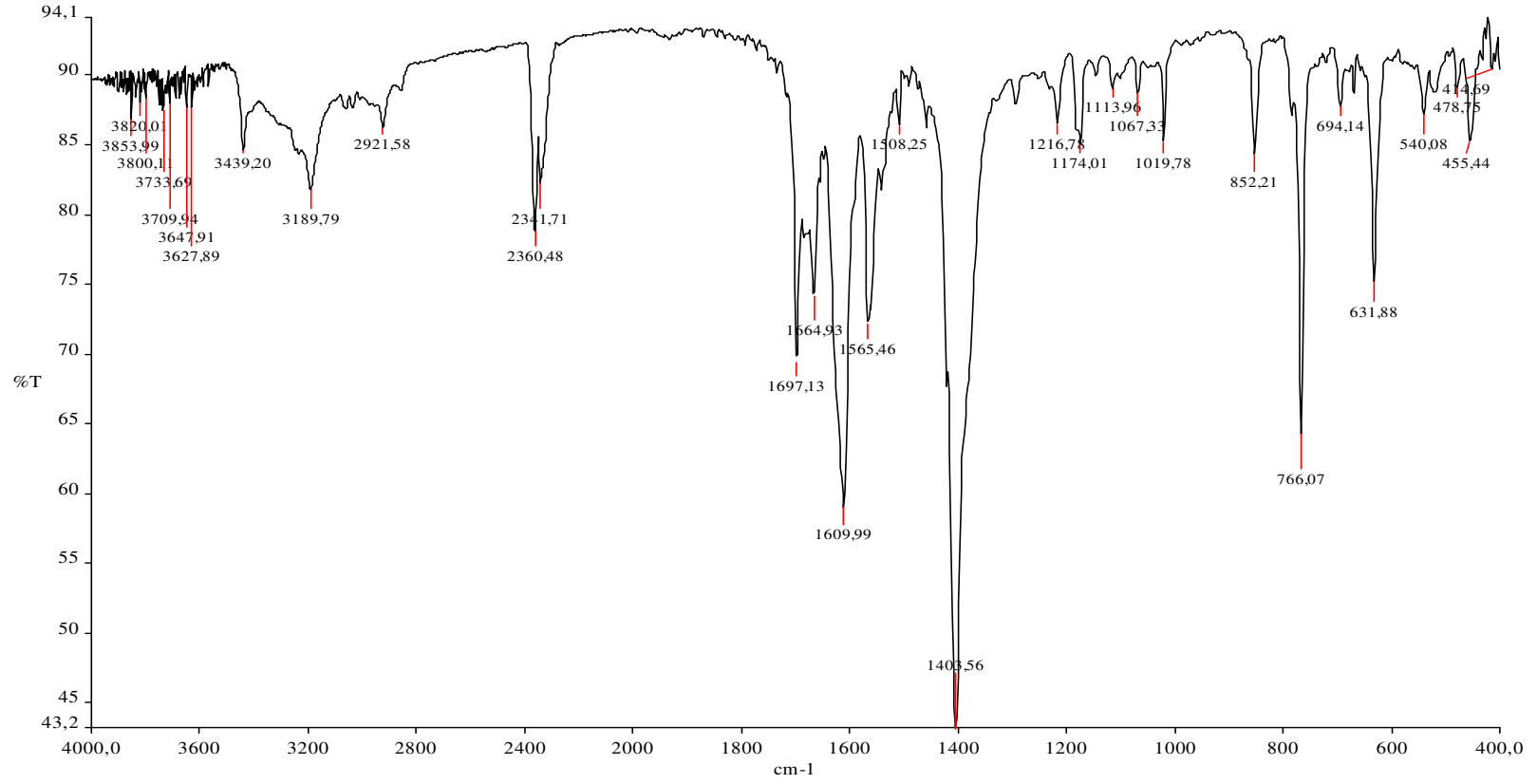


Ek Şekil 19. (18) kompleksinin IR spektrumu.

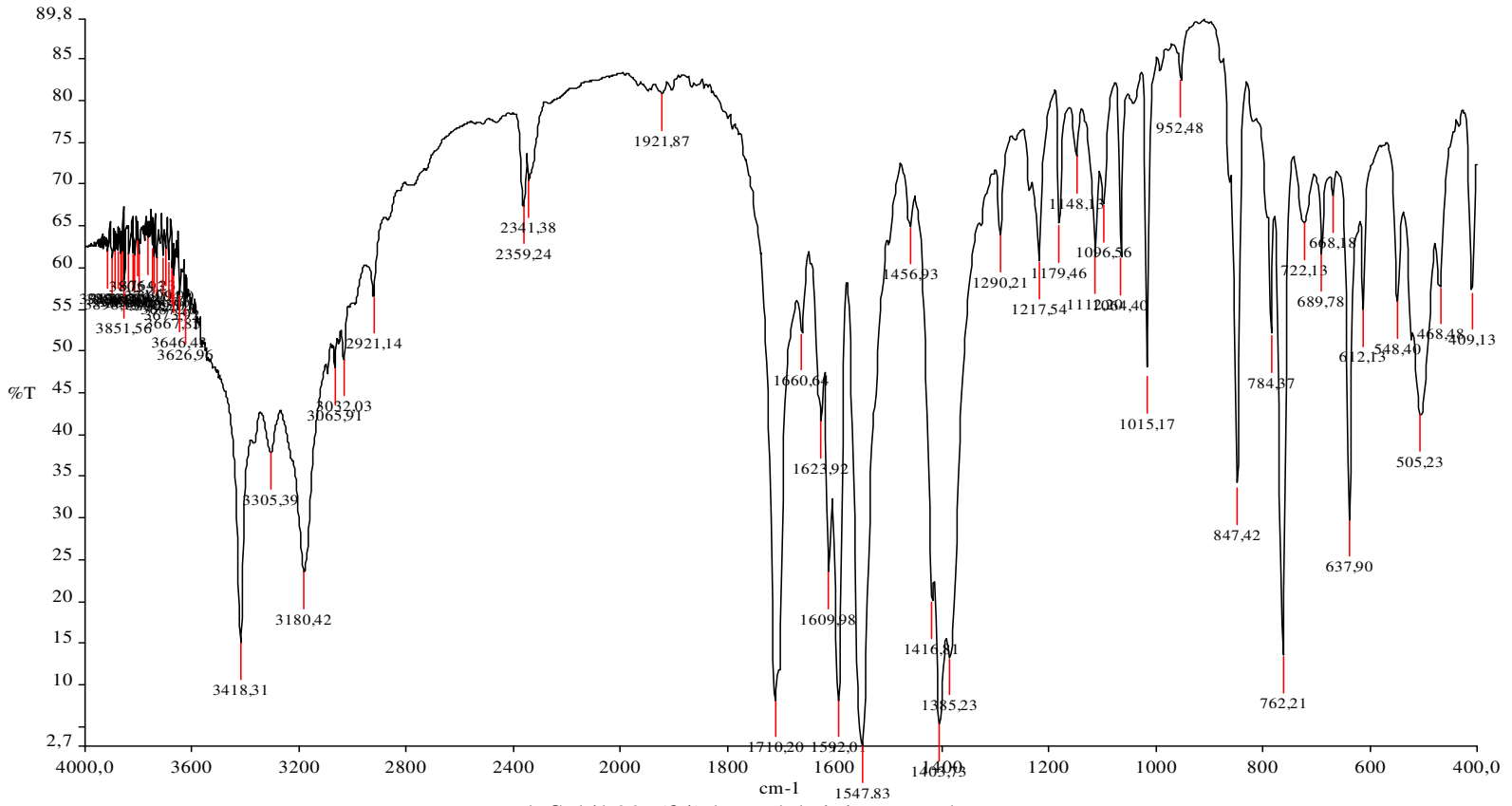




Ek Şekil 20. (19) kompleksinin IR spektrumu.



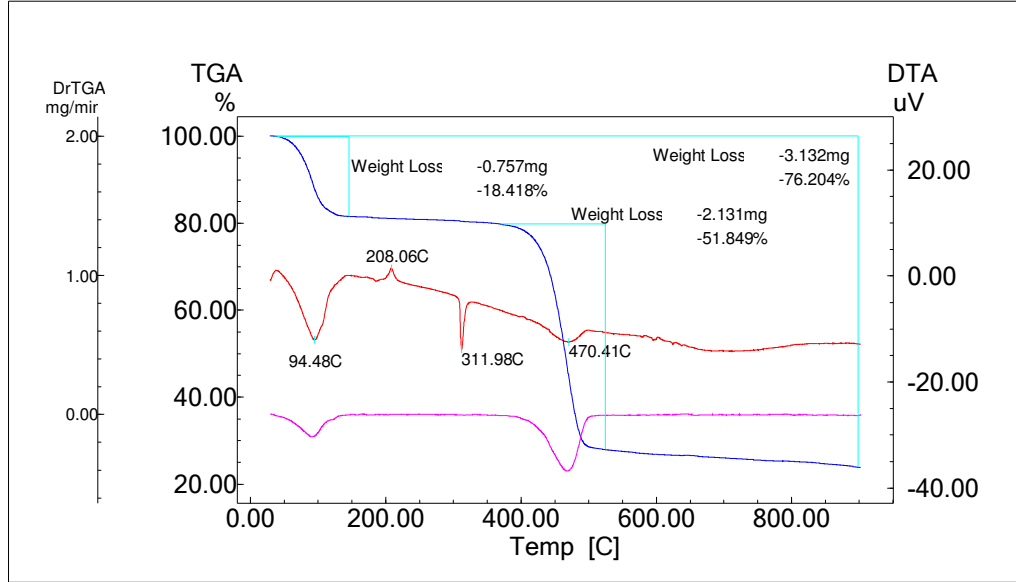
Ek Şekil 21. (20) kompleksinin IR spektrumu.



Ek Şekil 22. (21) kompleksinin IR spektrumu.

File Name: B20.tad  
 Detector: DTG-60H  
 Acquisition Date 10/12/22  
 Acquisition Time 12:01:47(+0200)  
 Sample Name: B20  
 Sample Weight: 4.110[mg]

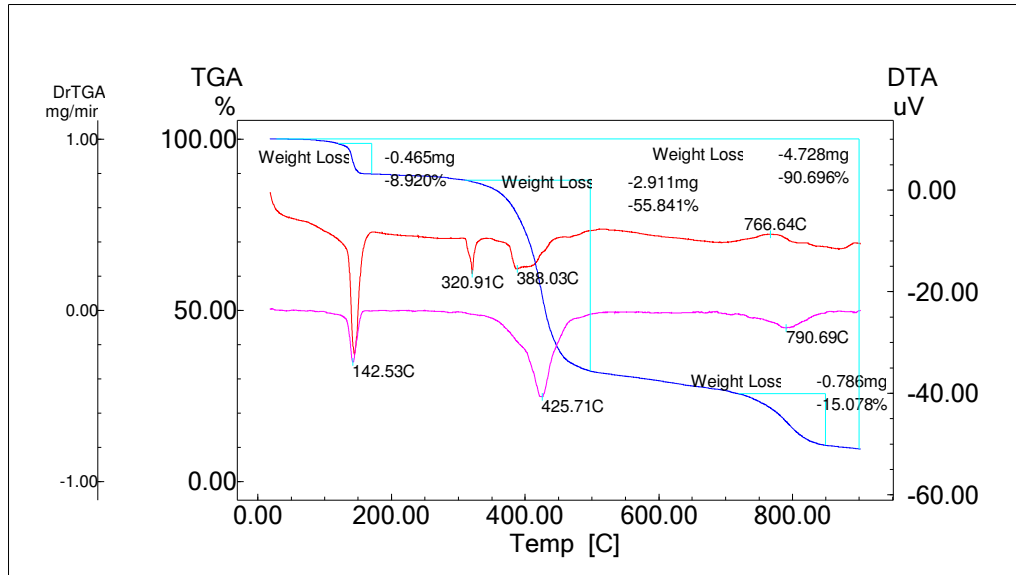
[Temp Program]  
 Temp Rate Hold Temp Hold Time Gas  
 [C/min] [ C ] [ min ]  
 B20.tad DTA 10.00 900.0 0  
 B20.tad TGA  
 B20.tad DrTGA



Ek Şekil 23. (1) kompleksinin DTA-TGA-DTG eğrileri.

File Name: B17.tad  
 Detector: DTG-60H  
 Acquisition Date 11/01/11  
 Acquisition Time 09:47:29(+0200)  
 Sample Name: B17  
 Sample Weight: 5.213[mg]

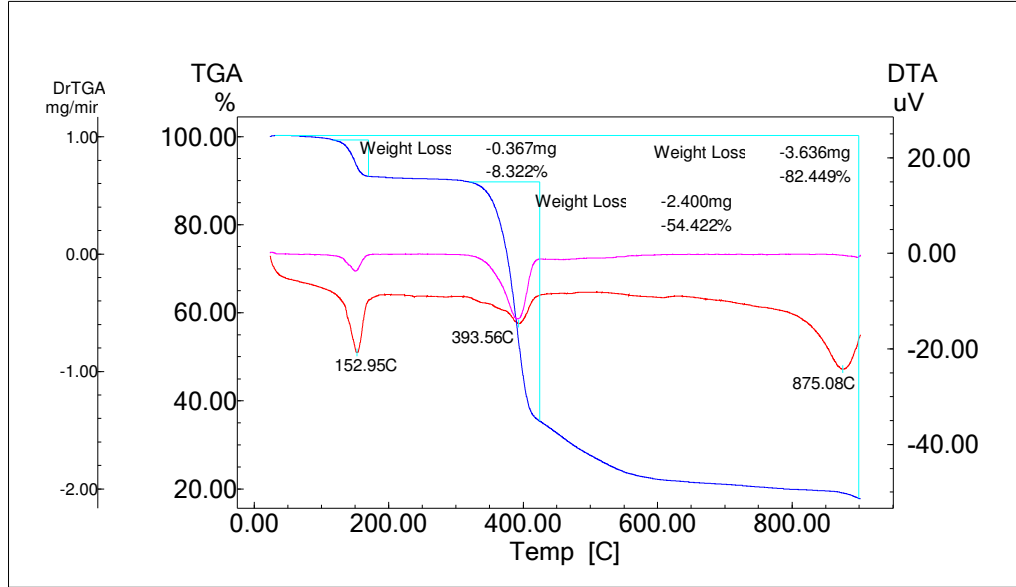
[Temp Program]  
 Temp Rate Hold Temp Hold Time Gas  
 [C/min] [ C ] [ min ]  
 B17.tad DTA 10.00 900.0 0  
 B17.tad TGA  
 B17.tad DrTGA



Ek Şekil 24. (2) kompleksinin DTA-TGA-DTG eğrileri.

File Name: B7.tad  
 Detector: DTG-60H  
 Acquisition Date 11/01/05  
 Acquisition Time 15:02:55(+0200)  
 Sample Name: B7  
 Sample Weight: 4.410[mg]

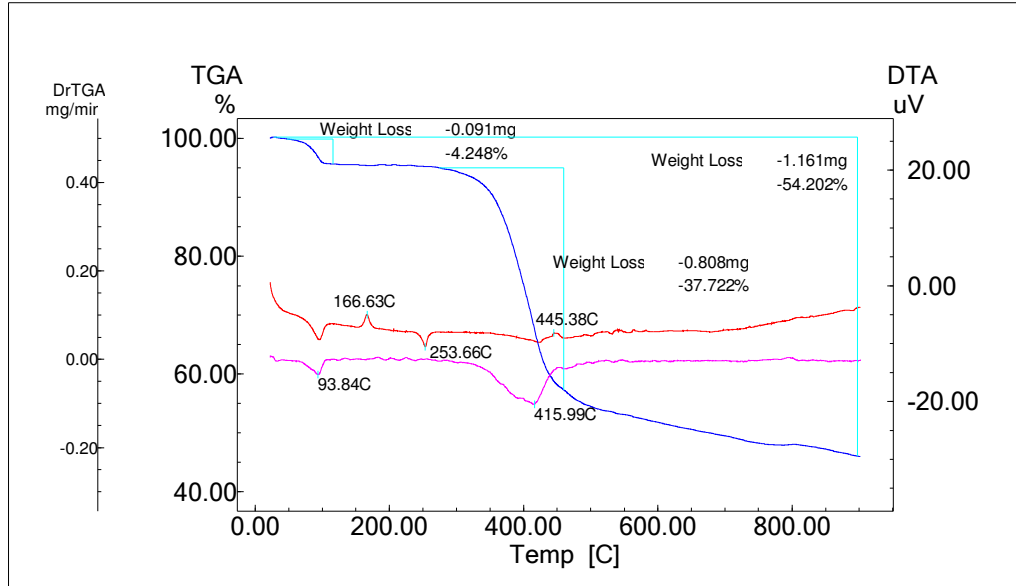
[Temp Program]				
	Temp Rate	Hold Temp	Hold Time	Gas
	[C/min]	[ C ]	[ min ]	
B7.tad DTA	10.00	900.0	0	
B7.tad TGA				
B7.tad DrTGA				



Ek Şekil 25. (3) kompleksinin DTA-TGA-DTG eğrileri.

File Name: B26.tad  
 Detector: DTG-60H  
 Acquisition Date 11/01/05  
 Acquisition Time 12:16:43(+0200)  
 Sample Name: B26  
 Sample Weight: 2.142[mg]

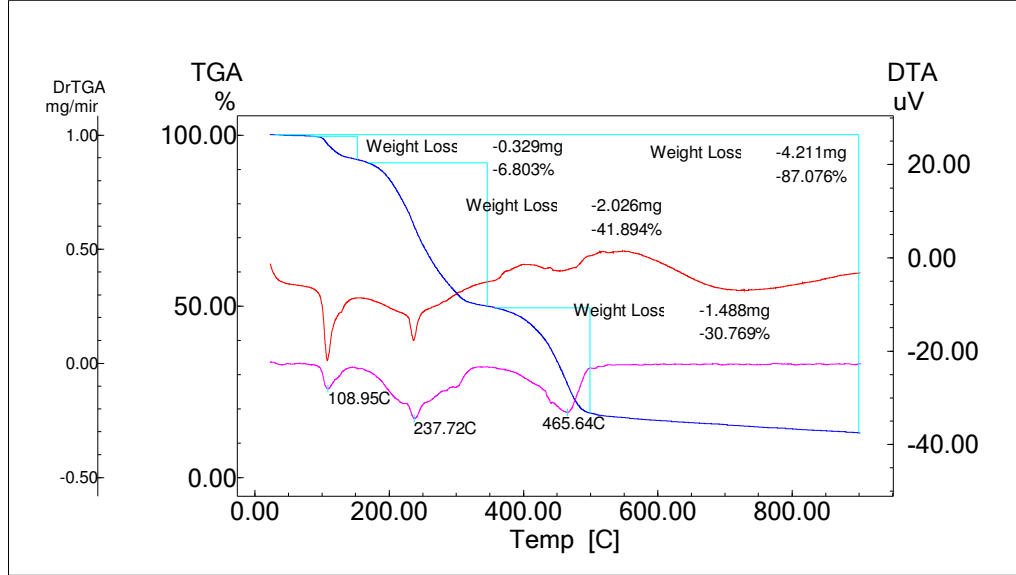
[Temp Program]				
	Temp Rate	Hold Temp	Hold Time	Gas
	[C/min]	[ C ]	[ min ]	
B26.tad DTA	10.00	900.0	0	
B26.tad TGA				
B26.tad DrTGA				



Ek Şekil 26. (4) kompleksinin DTA-TGA-DTG eğrileri.

File Name: B18.tad  
 Detector: DTG-60H  
 Acquisition Date 10/12/30  
 Acquisition Time 11:53:55(+0200)  
 Sample Name: B18  
 Sample Weight: 4.836[mg]

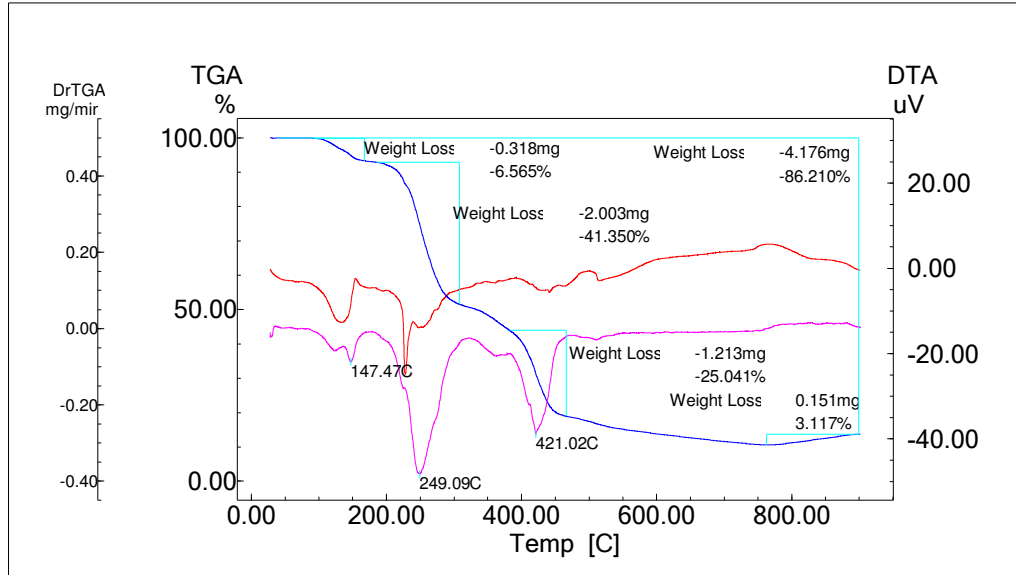
[Temp Program]  
 Temp Rate Hold Temp Hold Time Gas  
 [C/min] [ C ] [ min ]  
 10.00 900.0 0



Ek Şekil 27. (5) kompleksinin DTA-TGA-DTG eğrileri

File Name: B12.tad  
 Detector: DTG-60H  
 Acquisition Date 10/12/31  
 Acquisition Time 08:41:11(+0200)  
 Sample Name: B12  
 Sample Weight: 4.844[mg]

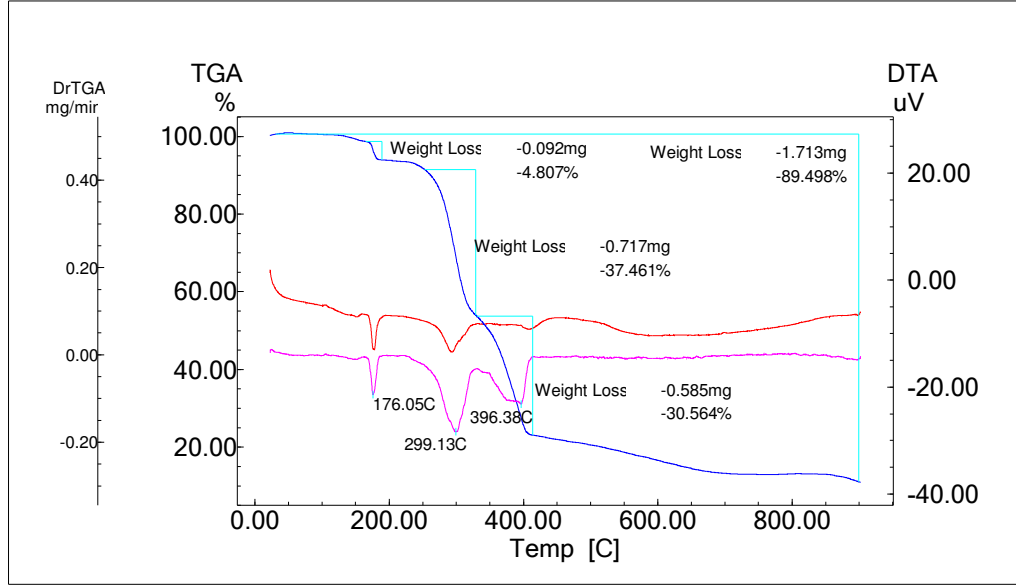
[Temp Program]  
 Temp Rate Hold Temp Hold Time Gas  
 [C/min] [ C ] [ min ]  
 10.00 900.0 0



Ek Şekil 28. (6) kompleksinin DTA-TGA-DTG eğrileri.

File Name: B11.tad  
 Detector: DTG-60H  
 Acquisition Date 11/01/06  
 Acquisition Time 08:59:30(+0200)  
 Sample Name: B11  
 Sample Weight: 1.914[mg]

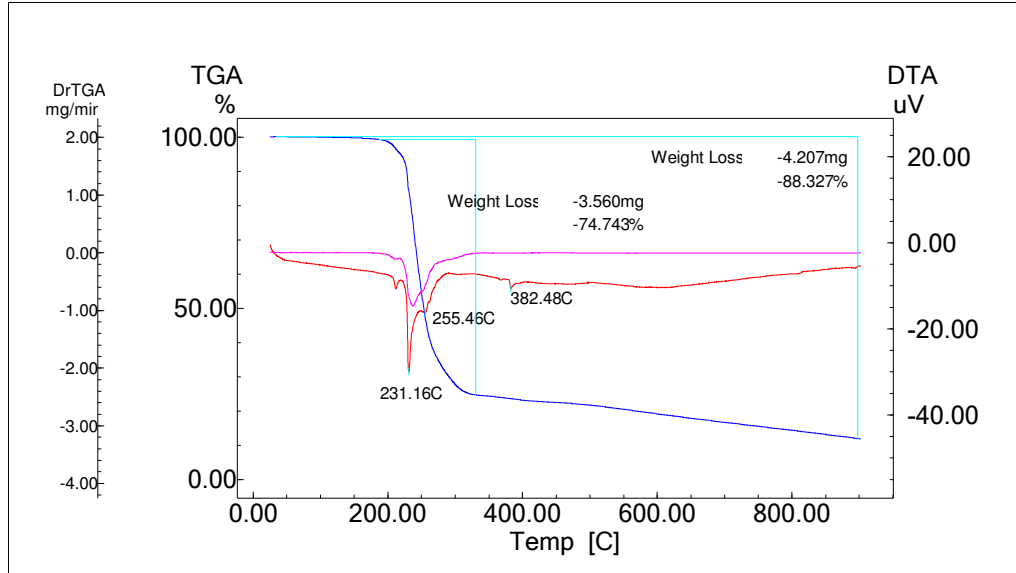
[Temp Program]  
 B11.tad DTA Temp Rate Hold Temp Hold Time Gas  
 B11.tad TGA [C/min] [ C ] [ min ]  
 B11.tad DrTGA 10.00 900.0 0



Ek Şekil 29. (7) kompleksinin DTA-TGA-DTG eğrileri.

File Name: B3.tad  
 Detector: DTG-60H  
 Acquisition Date 10/12/28  
 Acquisition Time 10:31:15(+0200)  
 Sample Name: B3  
 Sample Weight: 4.763[mg]

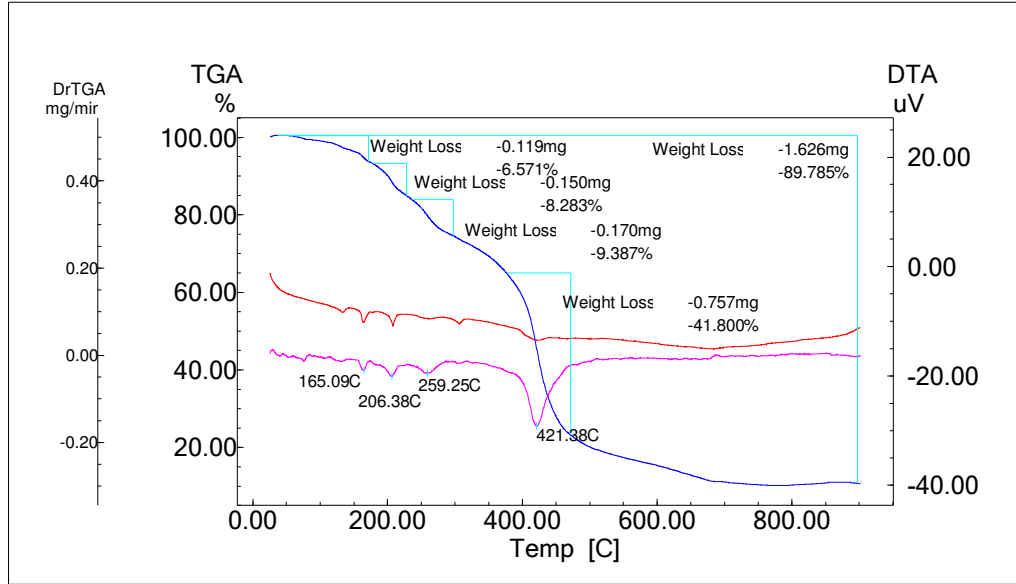
[Temp Program]  
 B3.tad DTA Temp Rate Hold Temp Hold Time Gas  
 B3.tad TGA [C/min] [ C ] [ min ]  
 B3.tad DrTGA 10.00 900.0 0



Ek Şekil 30. (8) kompleksinin DTA-TGA-DTG eğrileri.

File Name: B15.tad  
 Detector: DTG-60H  
 Acquisition Date 11/01/11  
 Acquisition Time 13:24:37(+0200)  
 Sample Name: B15  
 Sample Weight: 1.811[mg]

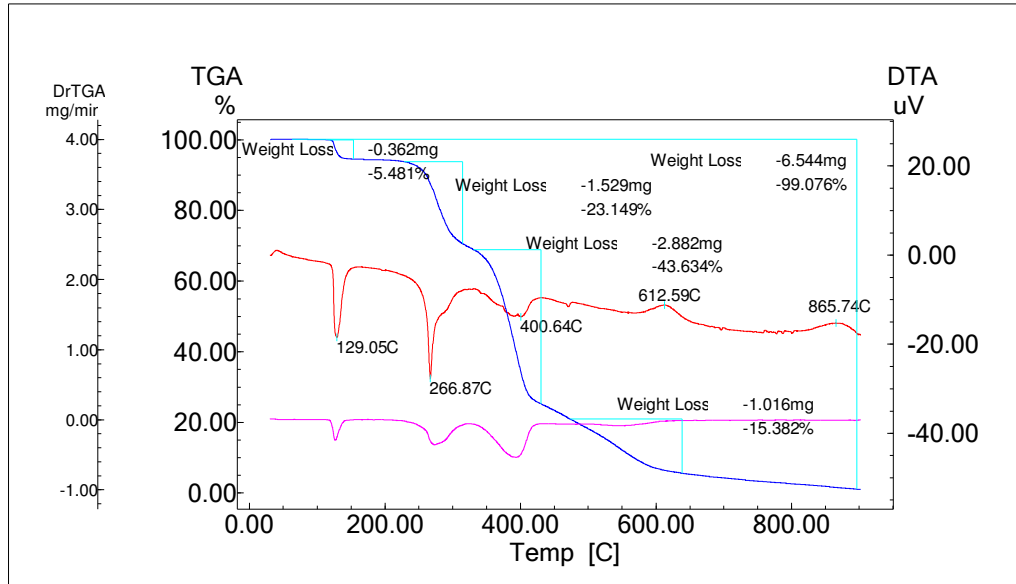
[Temp Program]  
 B15.tad DTA Temp Rate Hold Temp Hold Time Gas  
 B15.tad TGA [C/min] [ C ] [ min ]  
 B15.tad DrTGA 10.00 900.0 0



Ek Şekil 31. (9) kompleksinin DTA-TGA-DTG eğrileri.

File Name: B6T.tad  
 Detector: DTG-60H  
 Acquisition Date 10/12/23  
 Acquisition Time 12:18:09(+0200)  
 Sample Name: B6T  
 Sample Weight: 6.605[mg]

[Temp Program]  
 B6T.tad DTA Temp Rate Hold Temp Hold Time Gas  
 B6T.tad TGA [C/min] [ C ] [ min ]  
 B6T.tad DrTGA 10.00 900.0 0

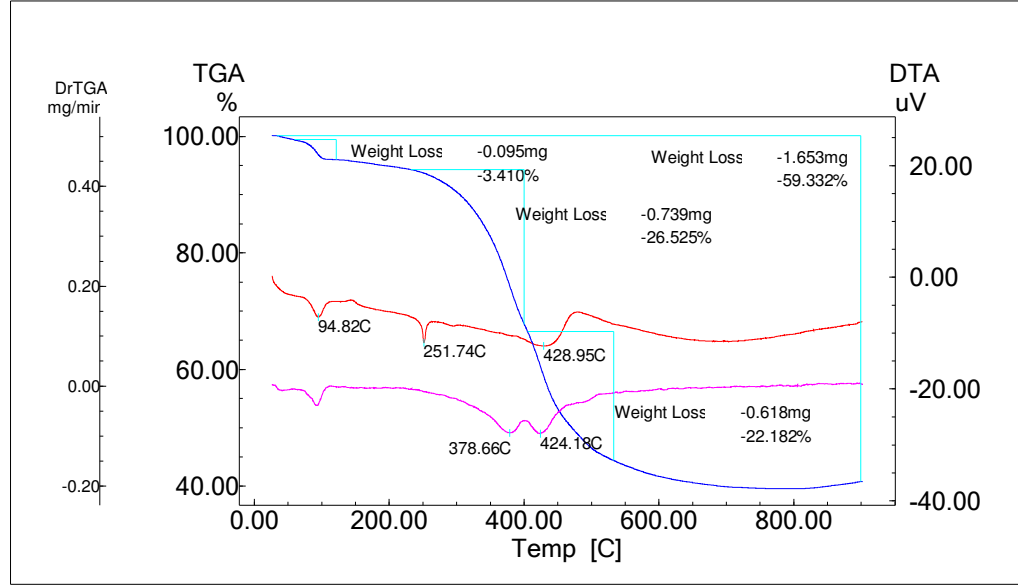


Ek Şekil 32. (10) kompleksinin DTA-TGA-DTG eğrileri.



File Name: B24.tad  
 Detector: DTG-60H  
 Acquisition Date 10/12/27  
 Acquisition Time 11:13:04(+0200)  
 Sample Name: B24  
 Sample Weight: 2.786[mg]

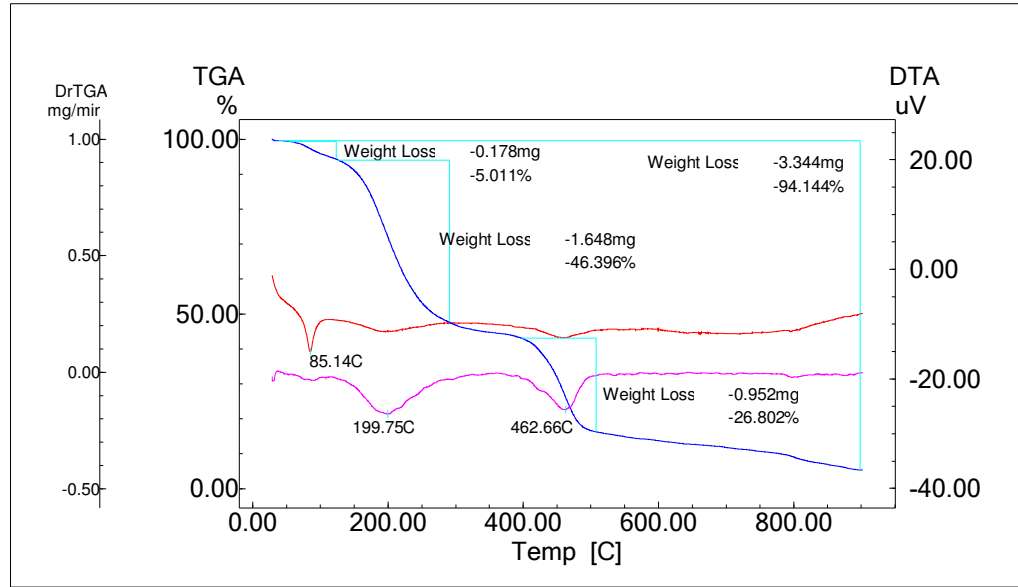
[Temp Program]  
 Temp Rate Hold Temp Hold Time Gas  
 [C/min] [ C ] [ min ]  
 10.00 900.0 0



Ek Şekil 33. (11) kompleksinin DTA-TGA-DTG eğrileri

File Name: B19.tad  
 Detector: DTG-60H  
 Acquisition Date 11/01/07  
 Acquisition Time 12:27:59(+0200)  
 Sample Name: B19  
 Sample Weight: 3.552[mg]

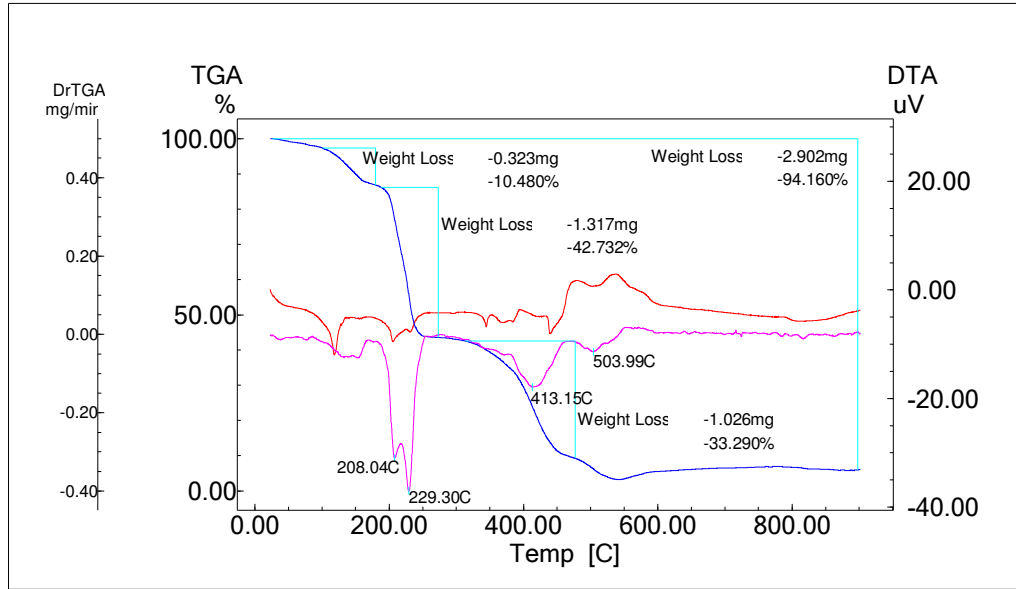
[Temp Program]  
 Temp Rate Hold Temp Hold Time Gas  
 [C/min] [ C ] [ min ]  
 10.00 900.0 0



Ek Şekil 34. (12) kompleksinin DTA-TGA-DTG eğrileri.

File Name: B13.tad  
Detector: DTG-60H  
Acquisition Date 11/01/03  
Acquisition Time 09:01:16(+0200)  
Sample Name: B13  
Sample Weight: 3.082[mg]

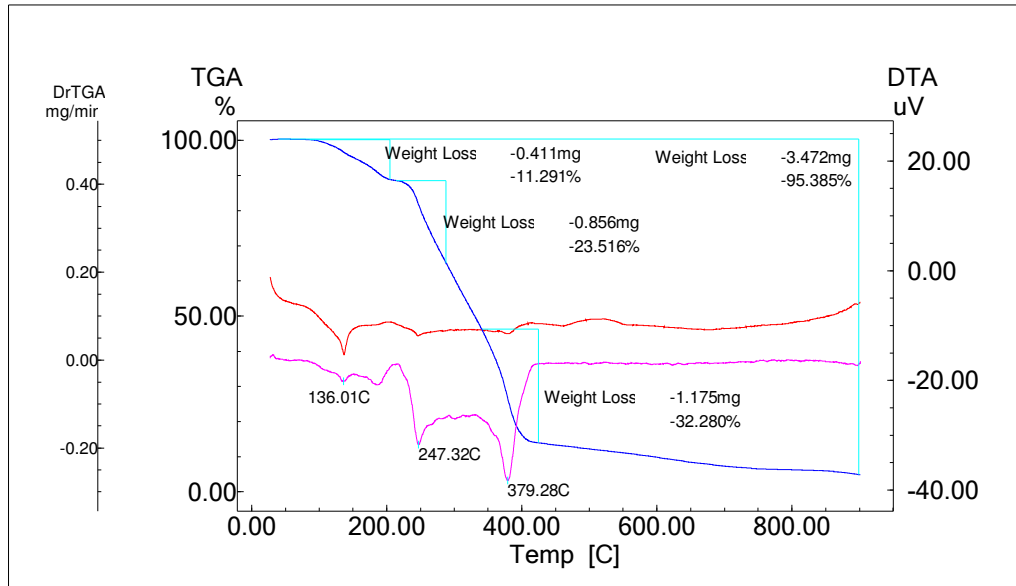
[Temp Program]  
Temp Rate Hold Temp Hold Time Gas  
B13.tad DTA [C/min] [ C ] [ min ]  
B13.tad TGA 10.00 900.0 0  
B13.tad DrTGA



Ek Şekil 35. (13) kompleksinin DTA-TGA-DTG eğrileri

File Name: B10.tad  
Detector: DTG-60H  
Acquisition Date 11/01/06  
Acquisition Time 13:29:48(+0200)  
Sample Name: B10  
Sample Weight: 3.640[mg]

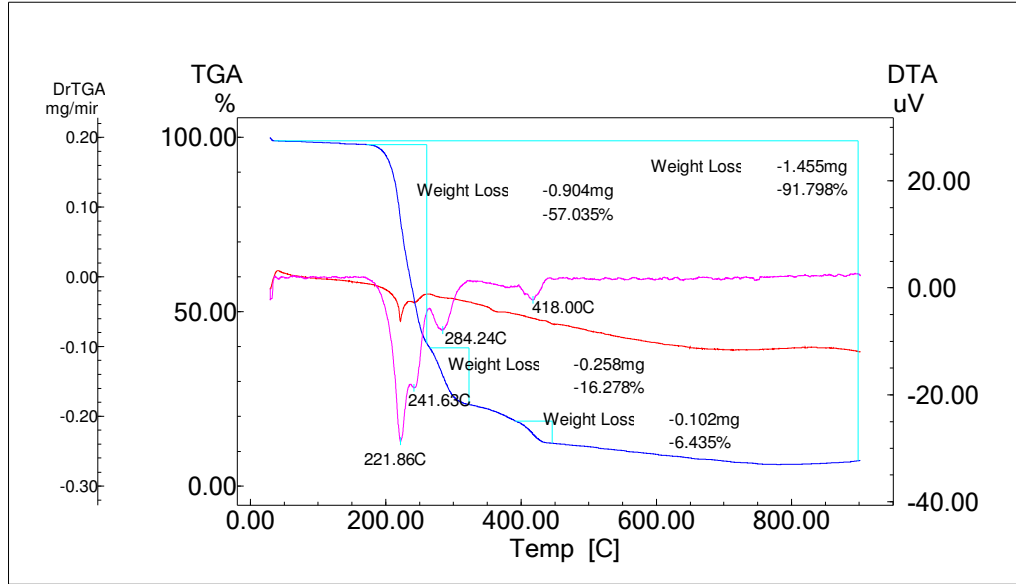
[Temp Program]  
Temp Rate Hold Temp Hold Time Gas  
B10.tad DTA [C/min] [ C ] [ min ]  
B10.tad TGA 10.00 900.0 0  
B10.tad DrTGA



Ek Şekil 36. (14) kompleksinin DTA-TGA-DTG eğrileri.

File Name: B4T.tad  
 Detector: DTG-60H  
 Acquisition Date 10/12/22  
 Acquisition Time 14:43:39(+0200)  
 Sample Name: B4T  
 Sample Weight: 1.585[mg]

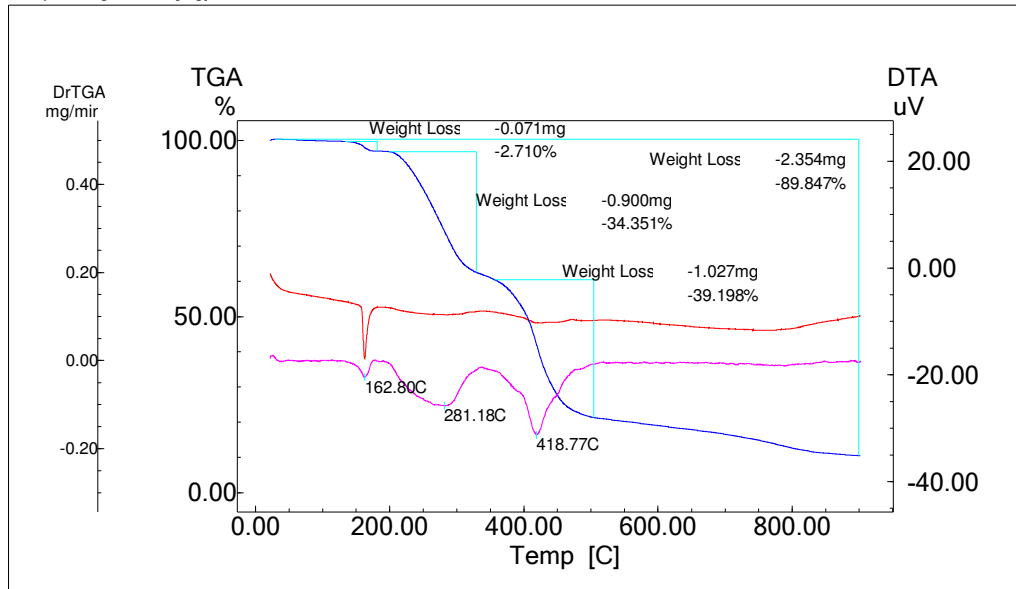
[Temp Program]  
 Temp Rate Hold Temp Hold Time Gas  
 [C/min] [ C ] [ min ]  
 10.00 900.0 0



Ek Şekil 37. (15) kompleksinin DTA-TGA-DTG eğrileri.

File Name: B16.tad  
 Detector: DTG-60H  
 Acquisition Date 11/01/10  
 Acquisition Time 11:42:00(+0200)  
 Sample Name: B16  
 Sample Weight: 2.620[mg]

[Temp Program]  
 Temp Rate Hold Temp Hold Time Gas  
 [C/min] [ C ] [ min ]  
 10.00 900.0 0

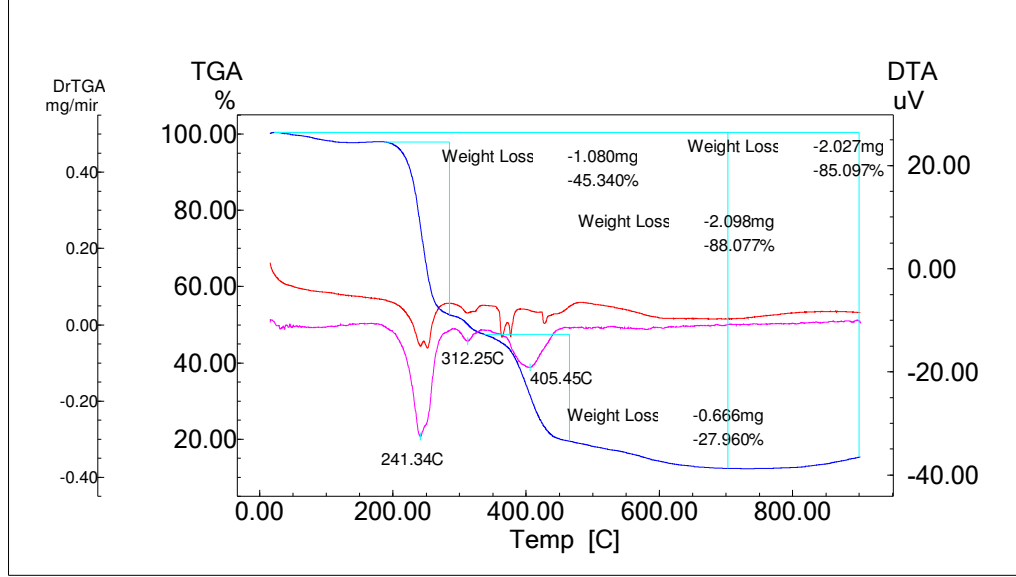


Ek Şekil 38. (16) kompleksinin DTA-TGA-DTG eğrileri.

File Name: B14T.tad  
Detector: DTG-60H  
Acquisition Date 11/01/10  
Acquisition Time 09:05:25(+0200)  
Sample Name: B14T  
Sample Weight: 2.382[mg]

[Temp Program]  
Temp Rate Hold Temp Hold Time Gas  
[C/min] [C] [min]  
10.00 900.0 0

— B14T.tad DTA  
— B14T.tad TGA  
— B14T.tad DrTGA

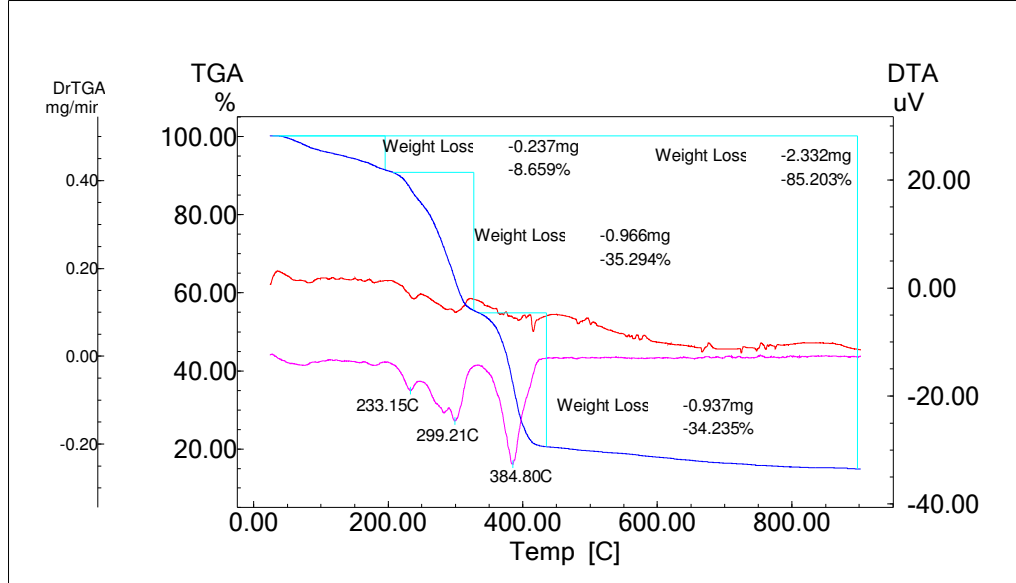


Ek Şekil 39. (17) kompleksinin DTA-TGA-DTG eğrileri.

File Name: B9.tad  
Detector: DTG-60H  
Acquisition Date 10/12/22  
Acquisition Time 09:08:49(+0200)  
Sample Name: B9  
Sample Weight: 2.737[mg]

[Temp Program]  
Temp Rate Hold Temp Hold Time Gas  
[C/min] [C] [min]  
10.00 900.0 0

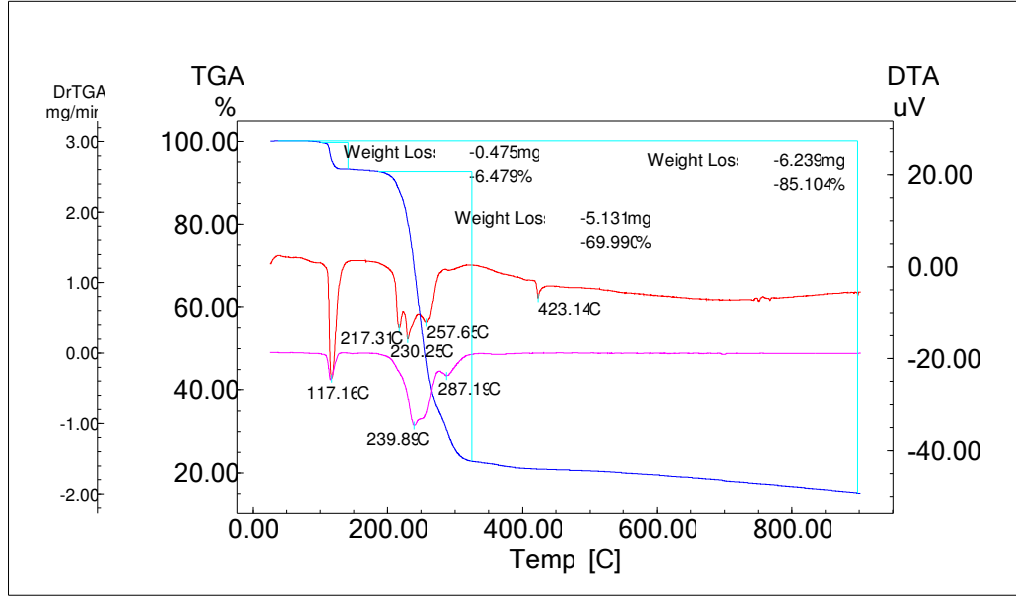
— B9.tad DTA  
— B9.tad TGA  
— B9.tad DrTGA



Ek Şekil 40. (18) kompleksinin DTA-TGA-DTG eğrileri.

File Name: B5T.tac  
 Detector: DTG-60F  
 Acquisition Date: 10/12/2023  
 Acquisition Time: 09:04:00(+0200)  
 Sample Name: B5T  
 Sample Weight: 7.331[mg]

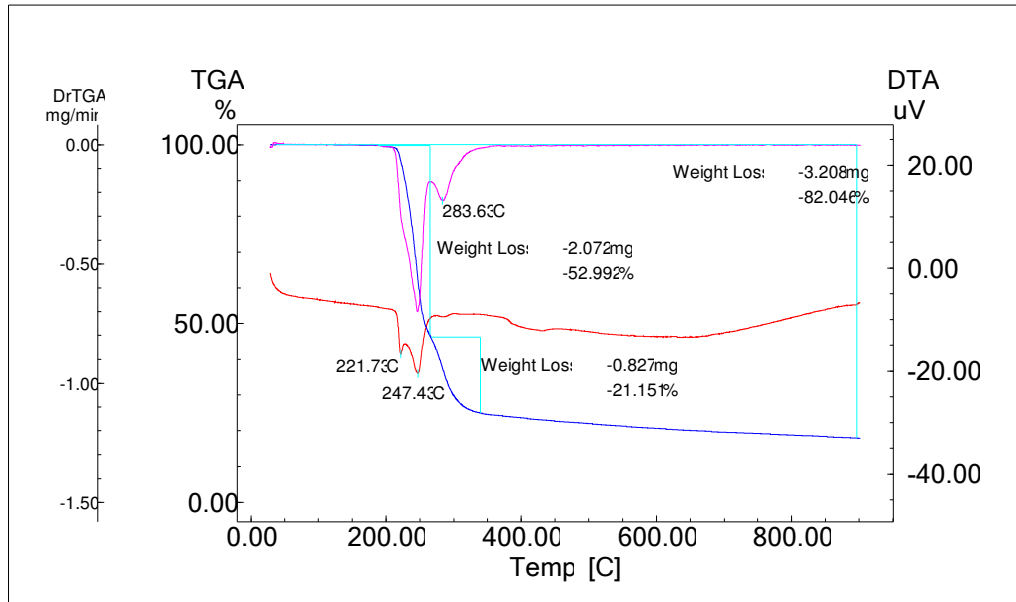
[Temp Program  
 Temp Rate Hold Temp Hold Time Gas  
 [C/min] [ C ] [ min ]  
 10.00 900.0 0



Ek Şekil 41. (19) kompleksinin DTA-TGA-DTG eğrileri.

File Name: B5.tac  
 Detector: DTG-60F  
 Acquisition Date: 10/12/2023  
 Acquisition Time: 2:59:01(+0200)  
 Sample Name: B5  
 Sample Weight: 3.910[mg]

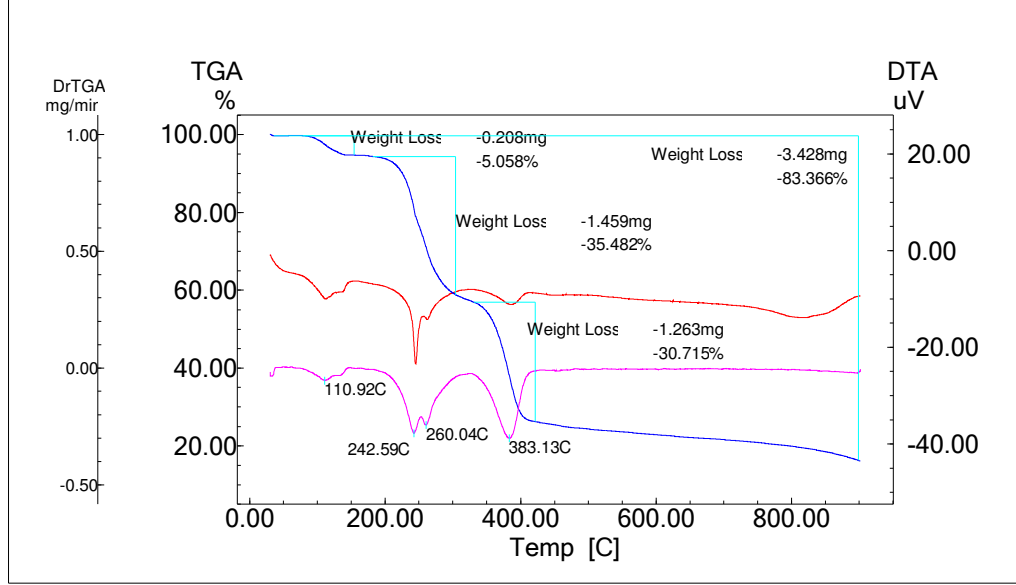
[Temp Program  
 Temp Rate Hold Temp Hold Time Gas  
 [C/min] [ C ] [ min ]  
 10.00 900.0 0



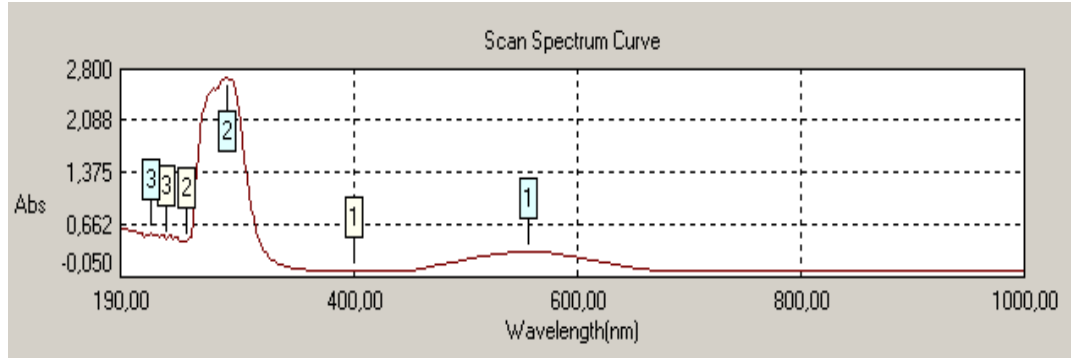
Ek Şekil 42. (20) kompleksinin DTA-TGA-DTG eğrileri.

File Name: B8.tad  
Detector: DTG-60H  
Acquisition Date 11/01/10  
Acquisition Time 13:56:09(+0200)  
Sample Name: B8  
Sample Weight: 4.112[mg]

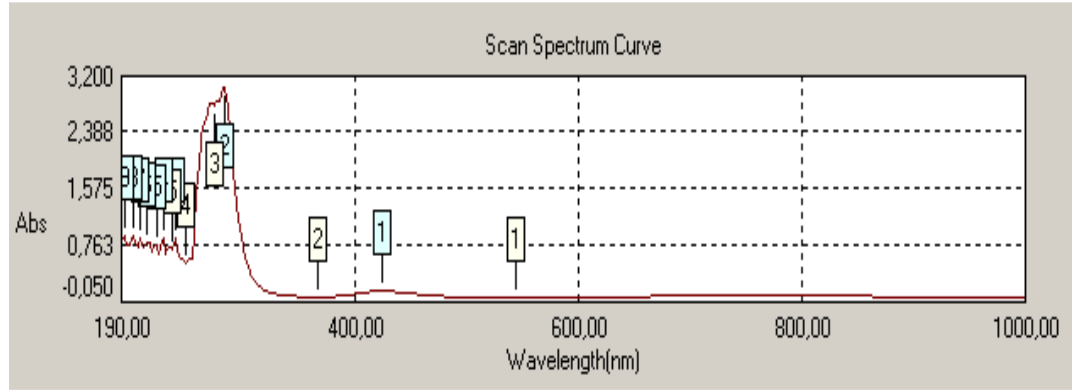
	[Temp Program]	Temp Rate	Hold Temp	Hold Time	Gas
		[C/min]	[ C ]	[ min ]	
B8.tad DTA		10.00	900.0	0	
B8.tad TGA					
B8.tad DrTGA					



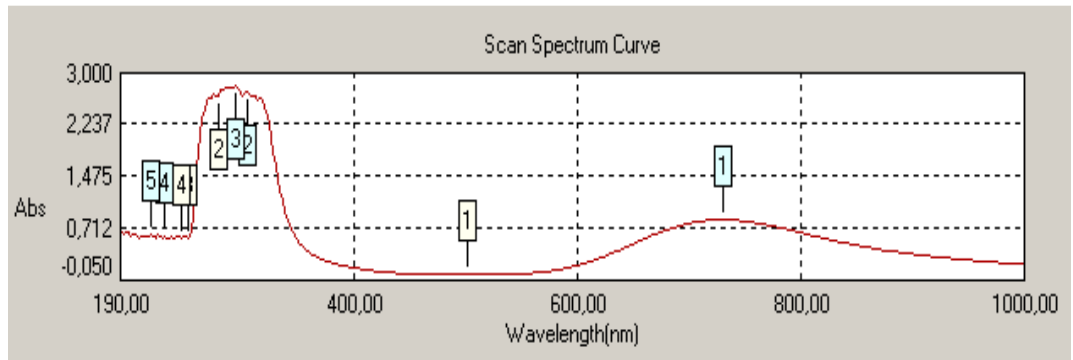
Ek Şekil 43. (21) kompleksinin DTA-TGA-DTG eğrileri.



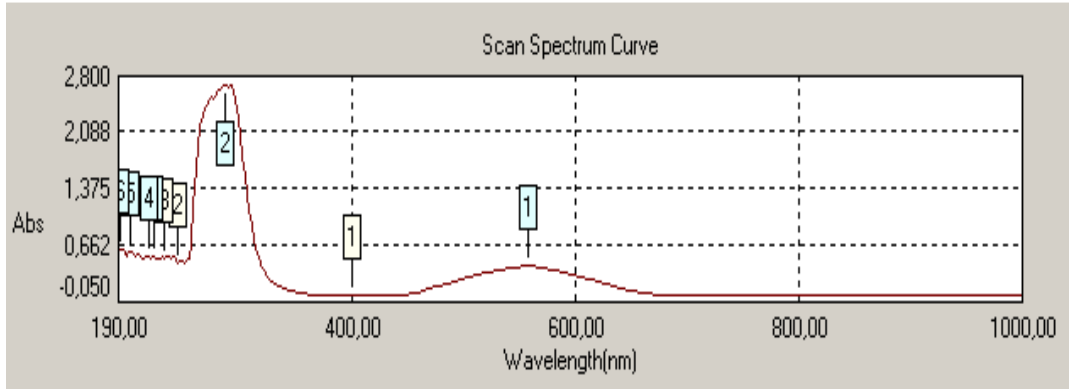
Ek Şekil 44. (6) kompleksinin UV spektrumu.



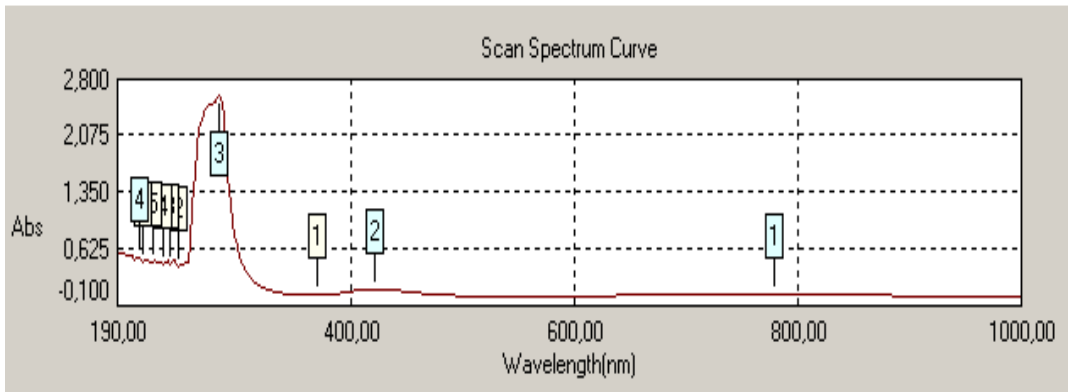
Ek Şekil 45. (7) kompleksinin UV spektrumu.



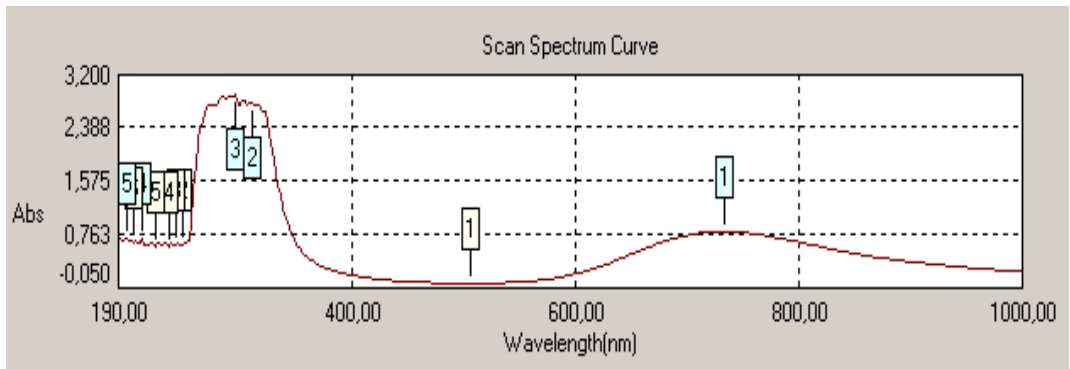
Ek Şekil 46. (8) kompleksinin UV spektrumu



Ek Şekil 47. (13) kompleksinin UV spektrumu.

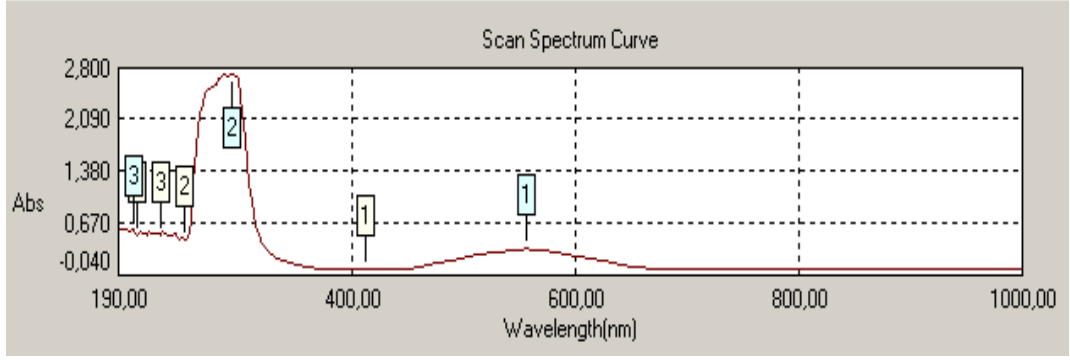


Ek Şekil 48. (14) kompleksinin UV spektrumu.

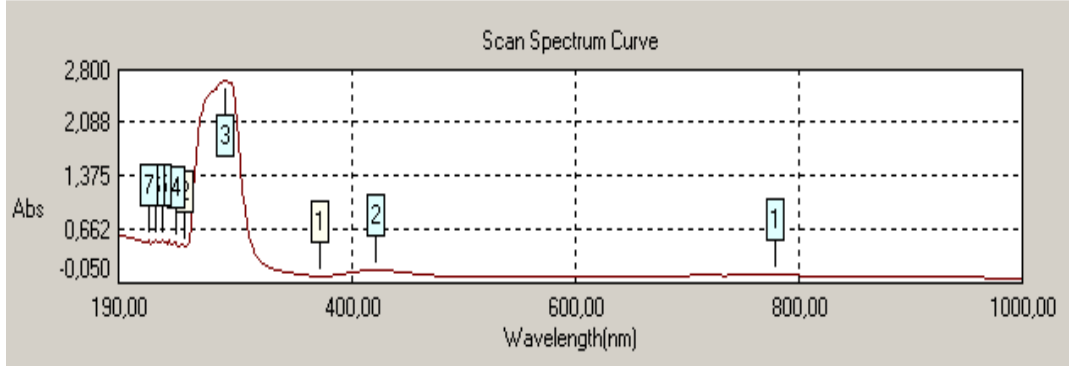


Ek Şekil 49. (15) kompleksinin UV spektrumu.

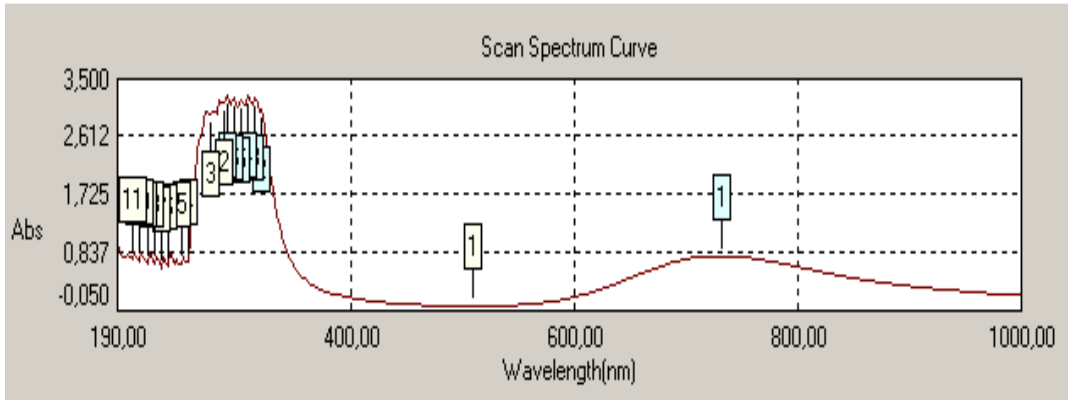




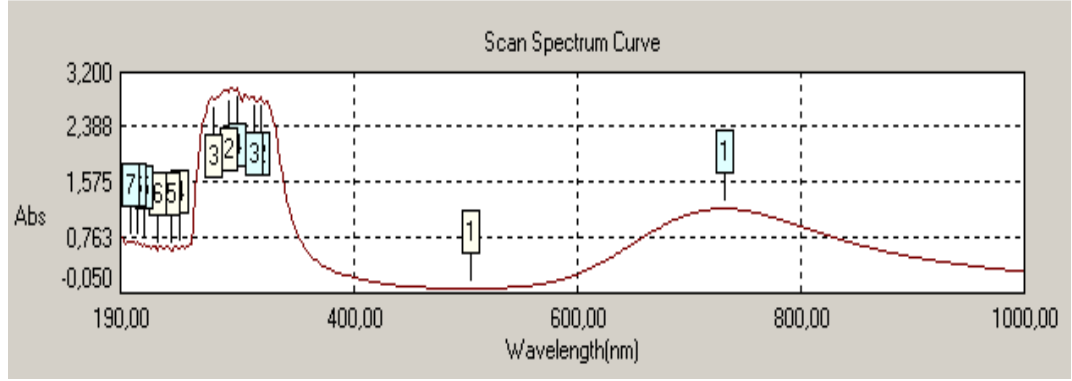
Ek Şekil 50. (17) kompleksinin UV spektrumu.



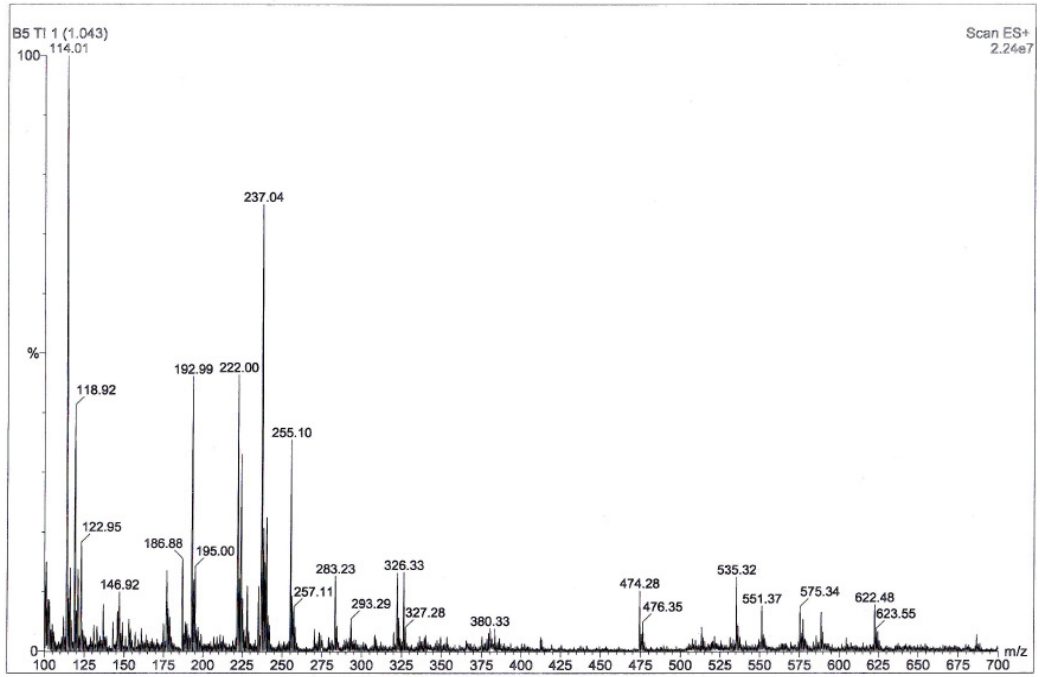
Ek Şekil 51. (18) kompleksinin UV spektrumu.



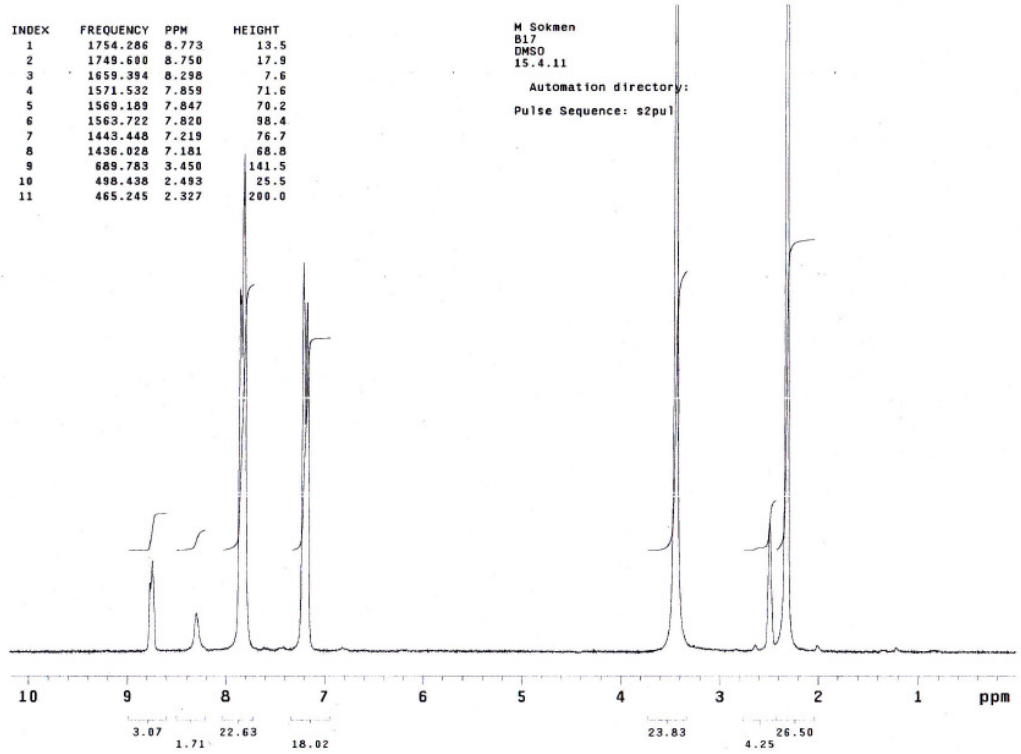
Ek Şekil 52. (19) kompleksinin UV spektrumu.



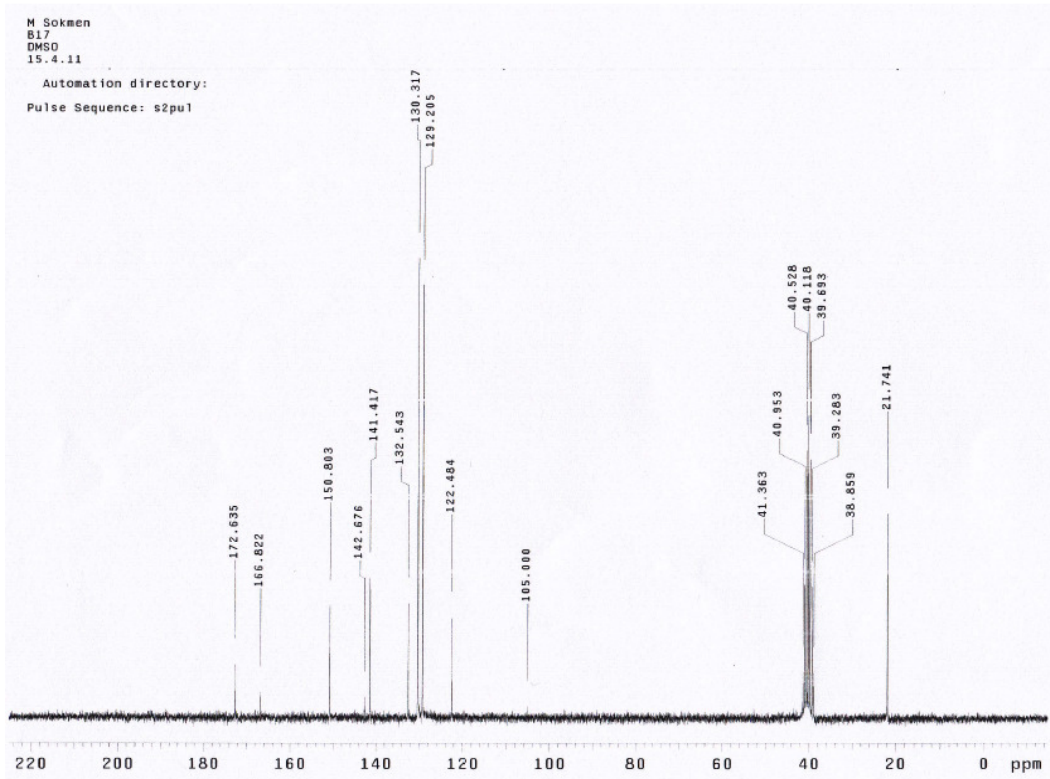
Ek Şekil 53. (20) kompleksinin UV spektrumu.



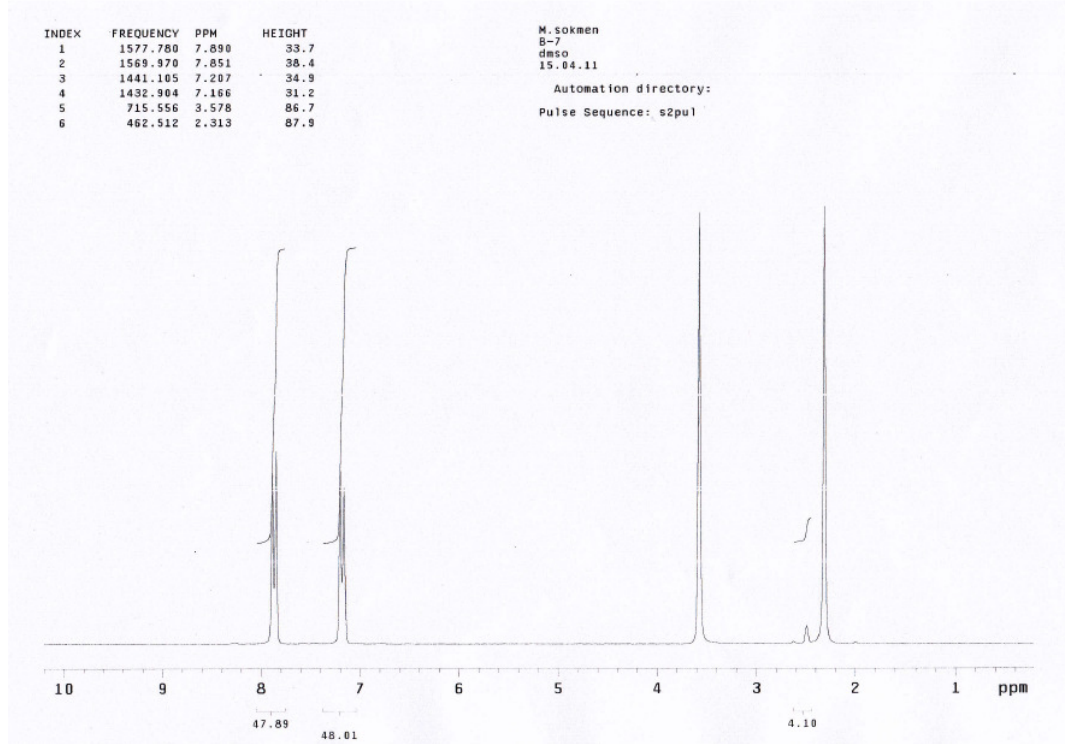
Ek Şekil 54. (19) kompleksinin kütle spektrumu.



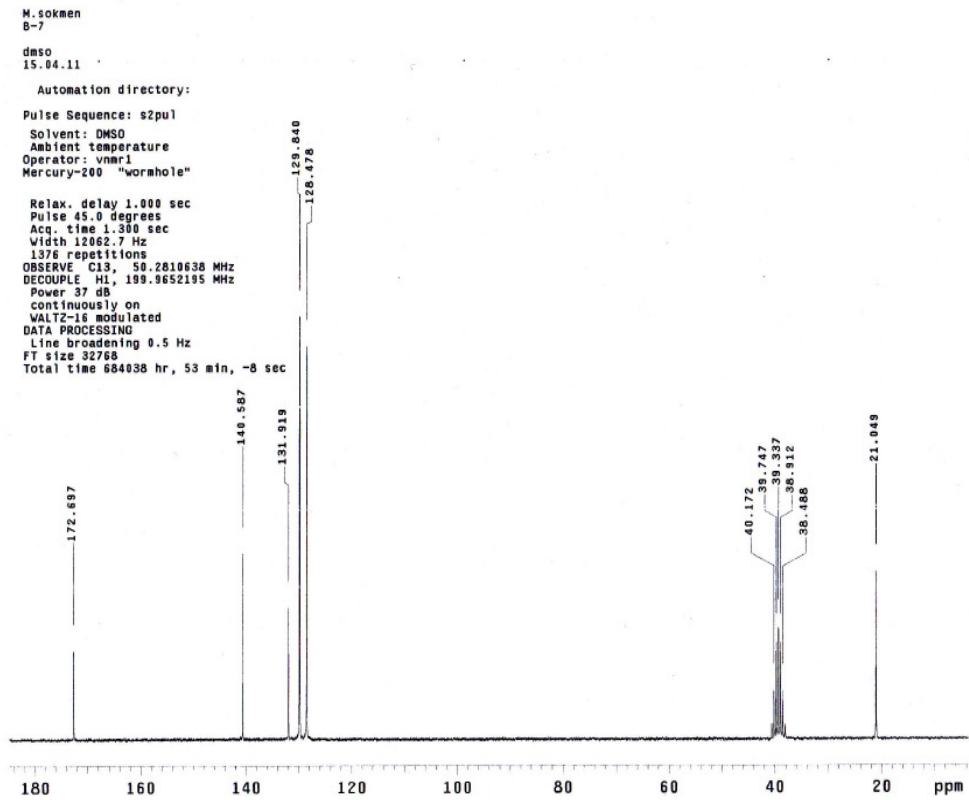
Ek Şekil 55. (2) kompleksinin  $^1\text{H}$  NMR (DMSO- $d_6$ ) spektrumu.



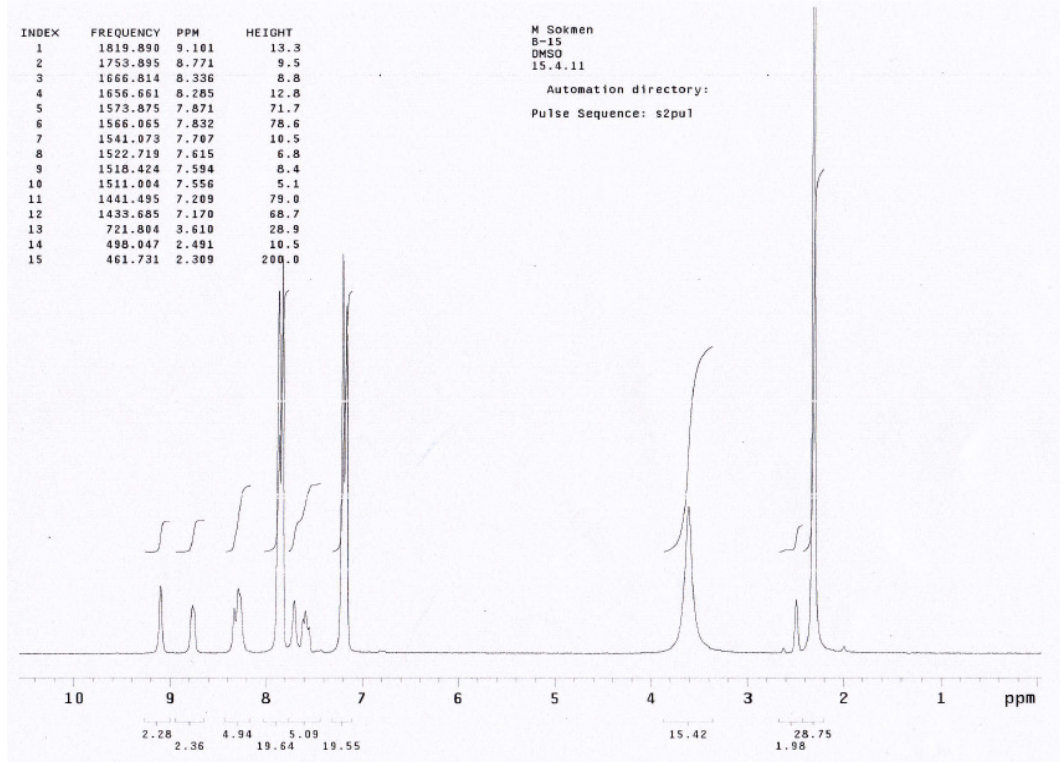
Ek Şekil 56. (2) kompleksinin  $^{13}\text{C}$  NMR (DMSO- $d_6$ ) spektrumu.



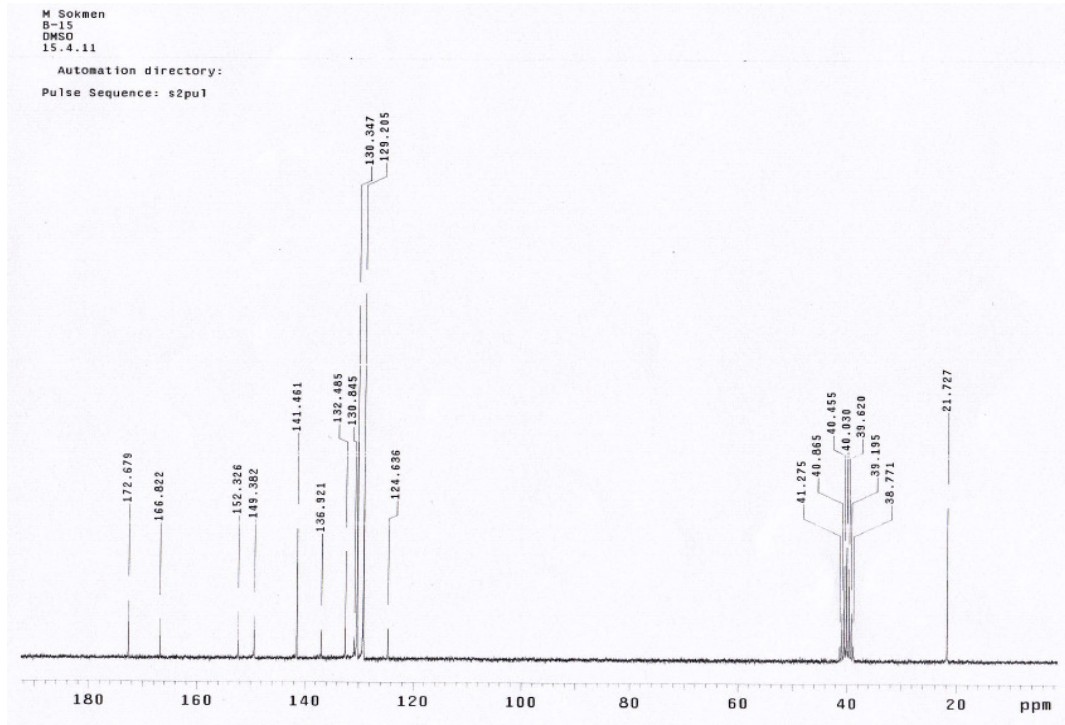
Ek Şekil 57. (3) kompleksinin  $^1\text{H}$  NMR (DMSO- $d_6$ ) spektrumu.



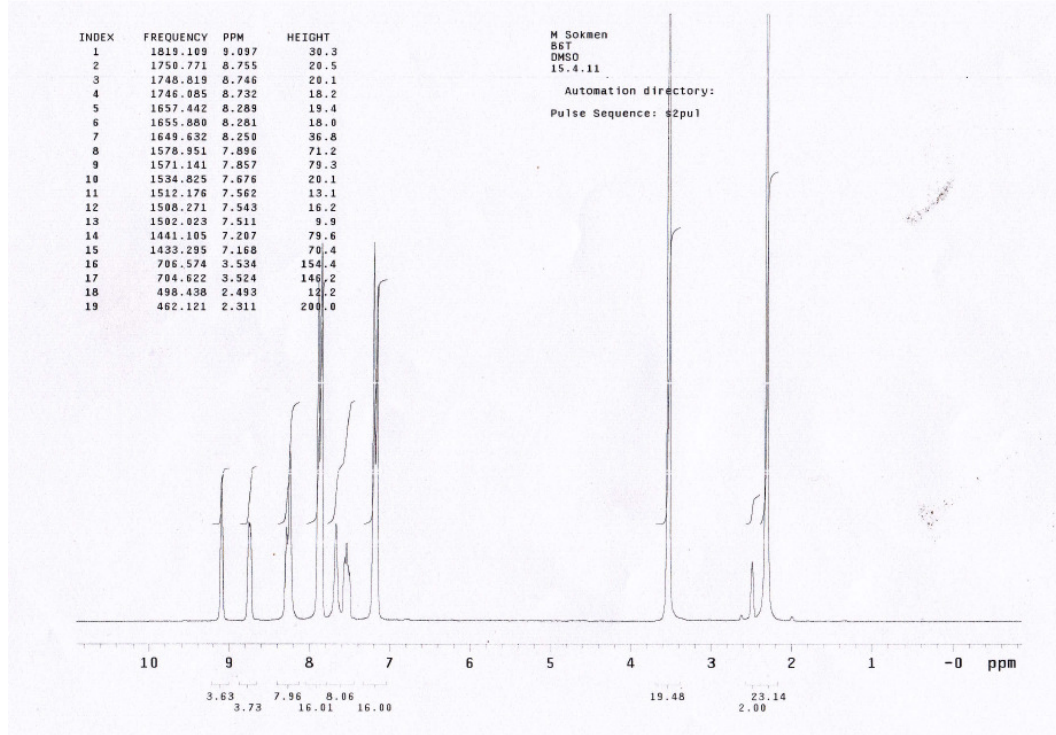
Ek Şekil 58. (3) kompleksinin  $^{13}\text{C}$  NMR (DMSO- $d_6$ ) spektrumu.



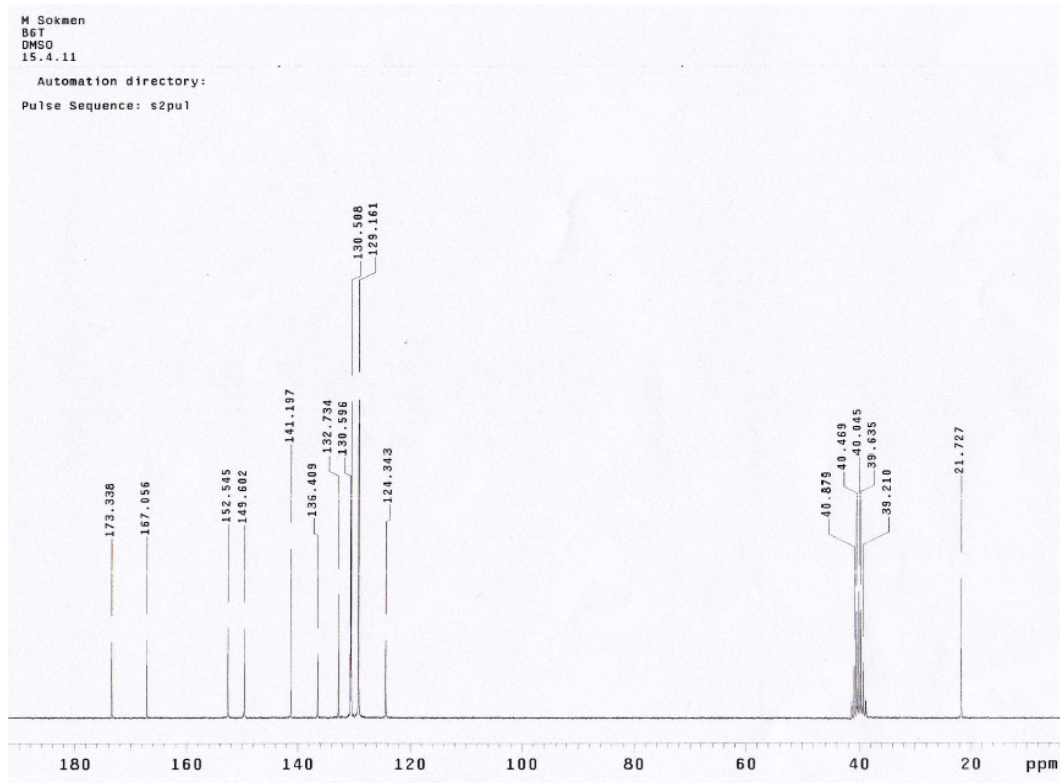
Ek Şekil 59. (9) kompleksinin  $^1\text{H}$  NMR (DMSO- $d_6$ ) spektrumu.



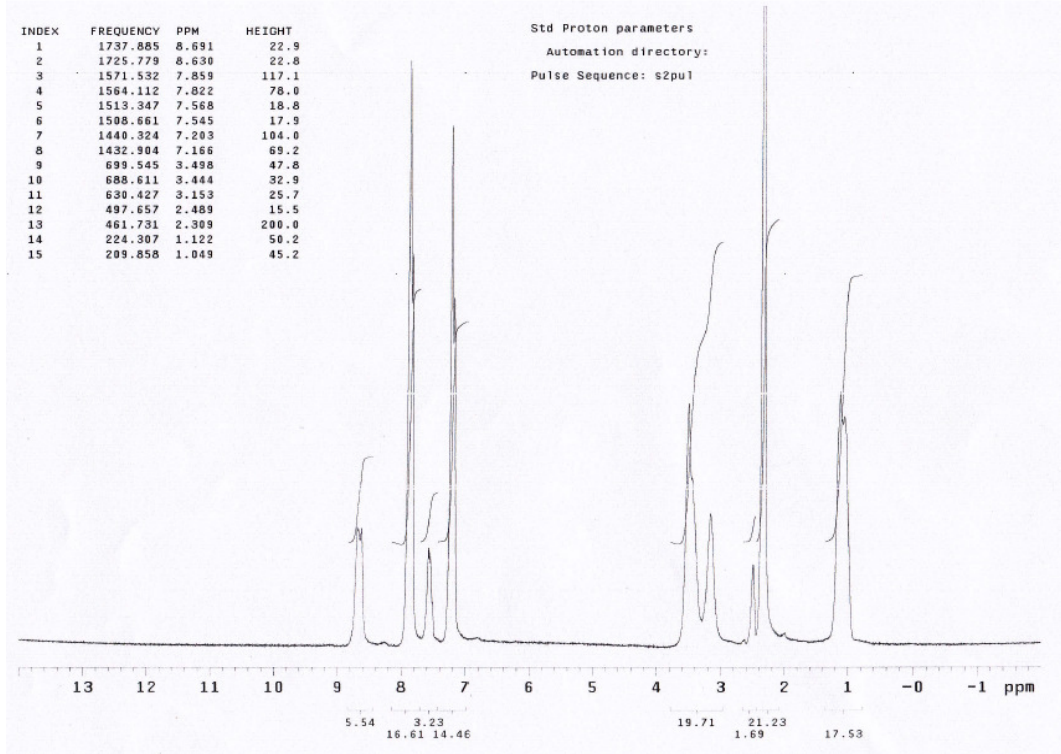
Ek Şekil 60. (9) kompleksinin  $^{13}\text{C}$  NMR (DMSO- $d_6$ ) spektrumu.



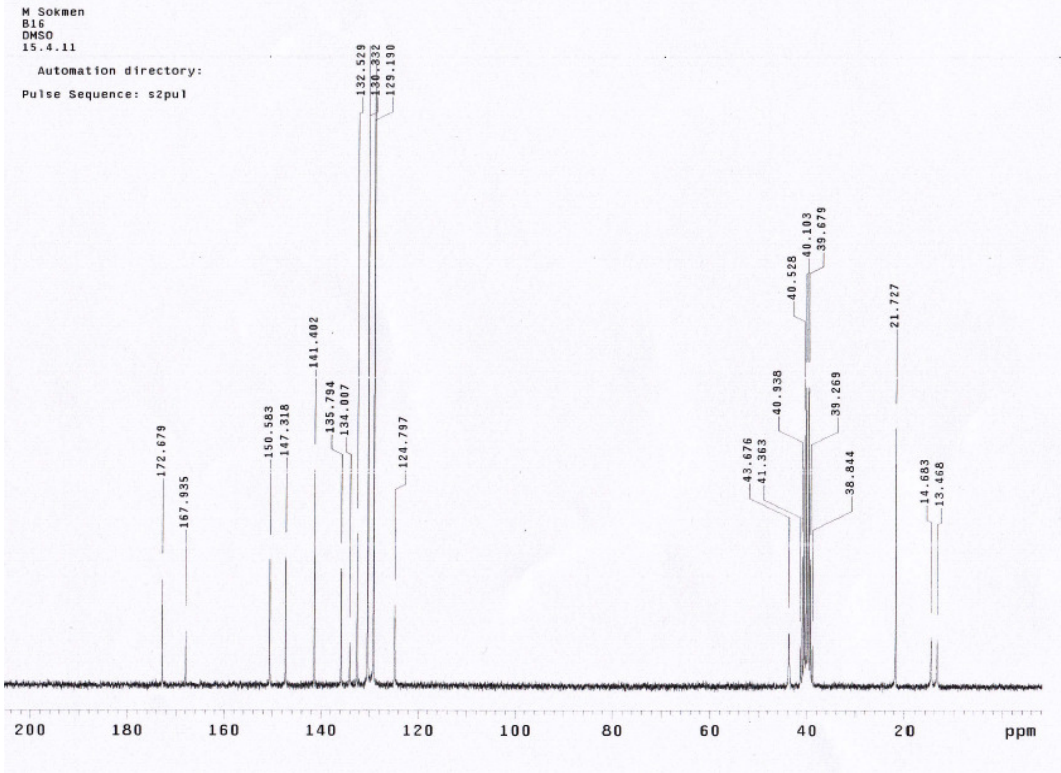
Ek Şekil 61. (10) kompleksinin  $^1\text{H}$  NMR (DMSO- $d_6$ ) spektrumu.



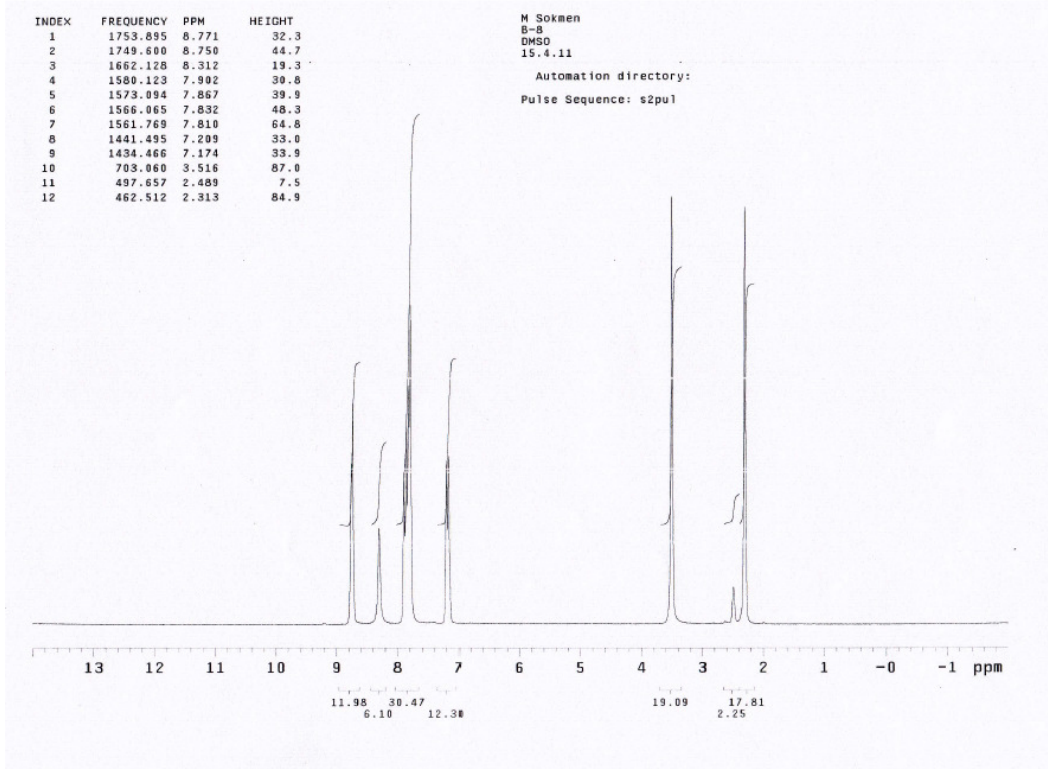
Ek Şekil 62. (10) kompleksinin  $^{13}\text{C}$  NMR (DMSO- $d_6$ ) spektrumu.



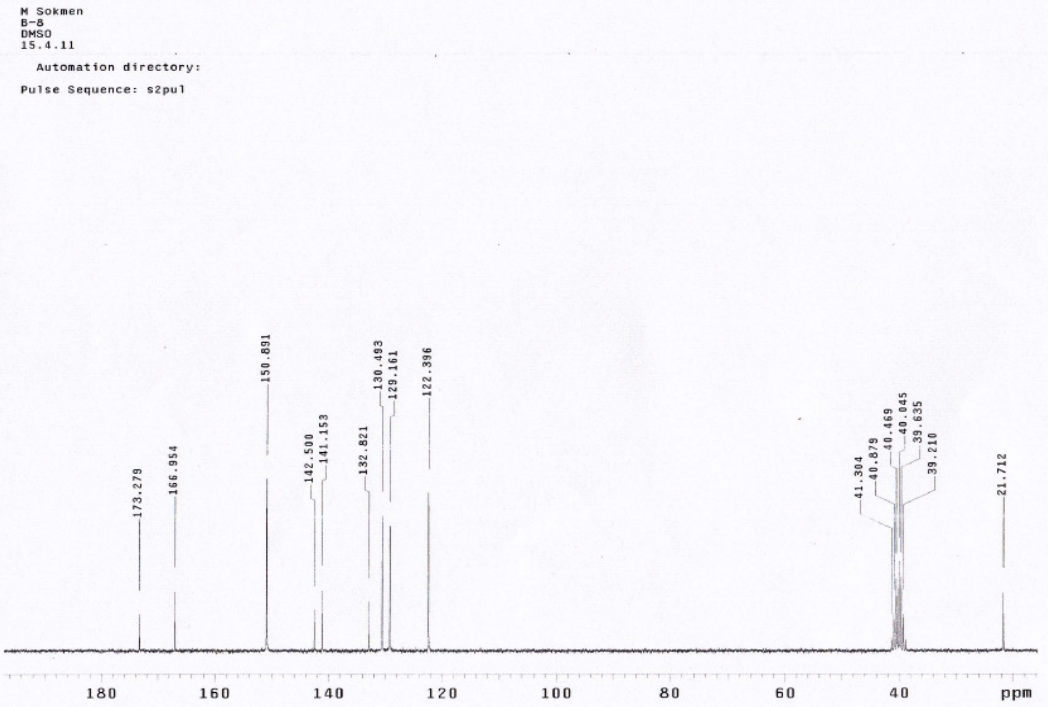
Ek Şekil 63. (16) kompleksinin  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{DMSO-d}_6$ ) spektrumu.



Ek Şekil 64. (16) kompleksinin  $^{13}\text{C}$  NMR ( $\text{DMSO-d}_6$ ) spektrumu.

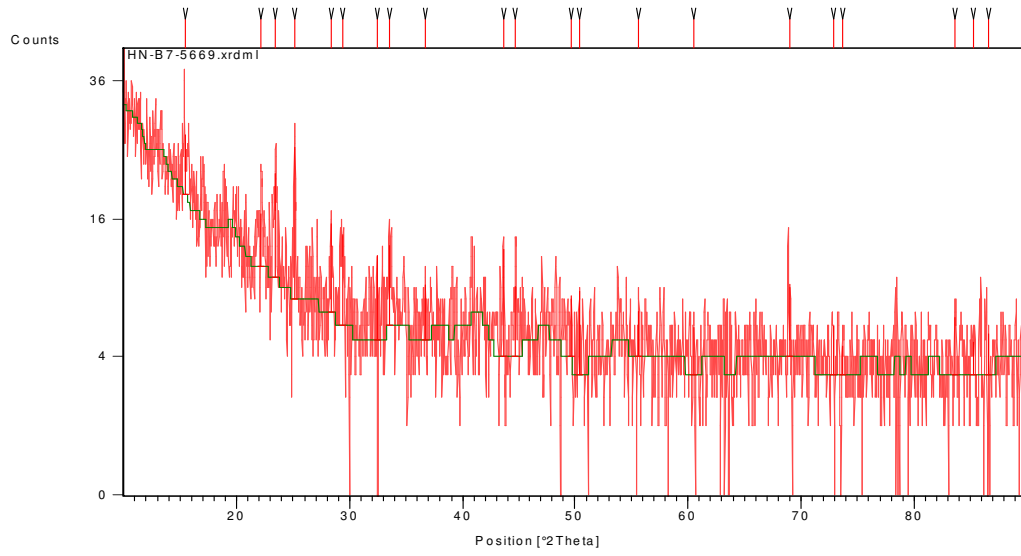
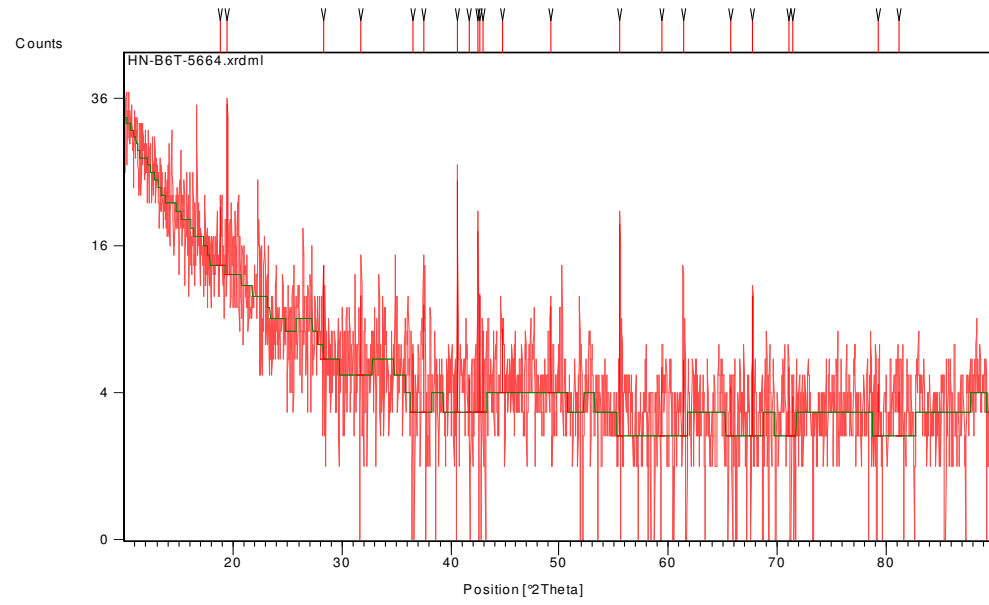


Ek Şekil 65. (21) kompleksinin  $^1\text{H}$  NMR (DMSO- $d_6$ ) spektrumu.

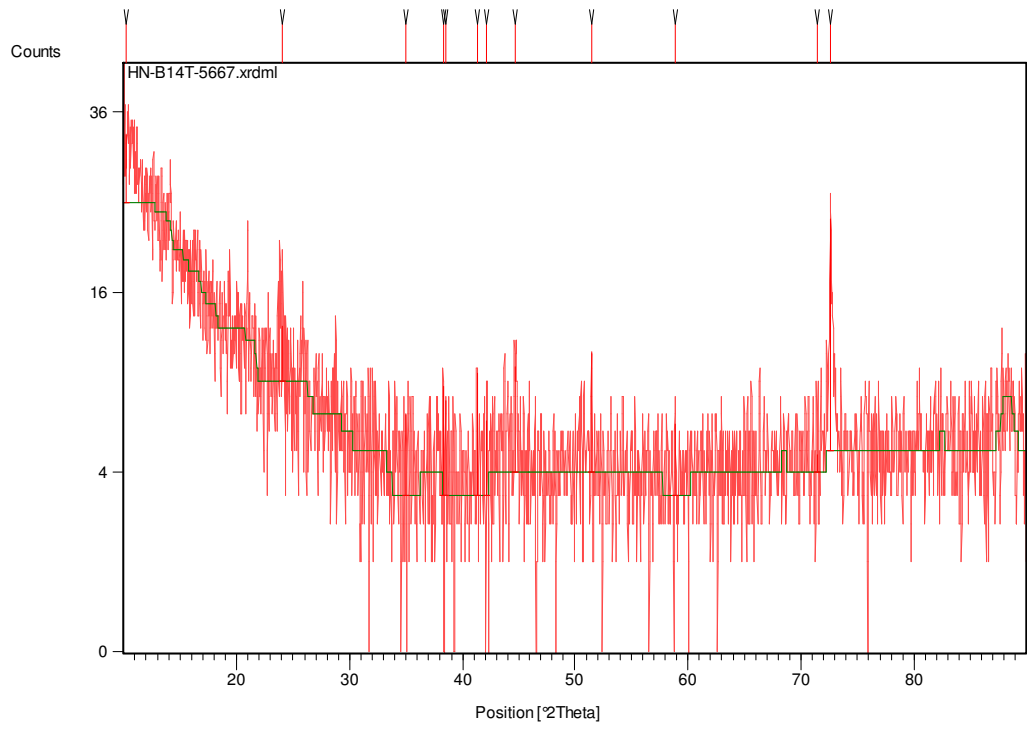
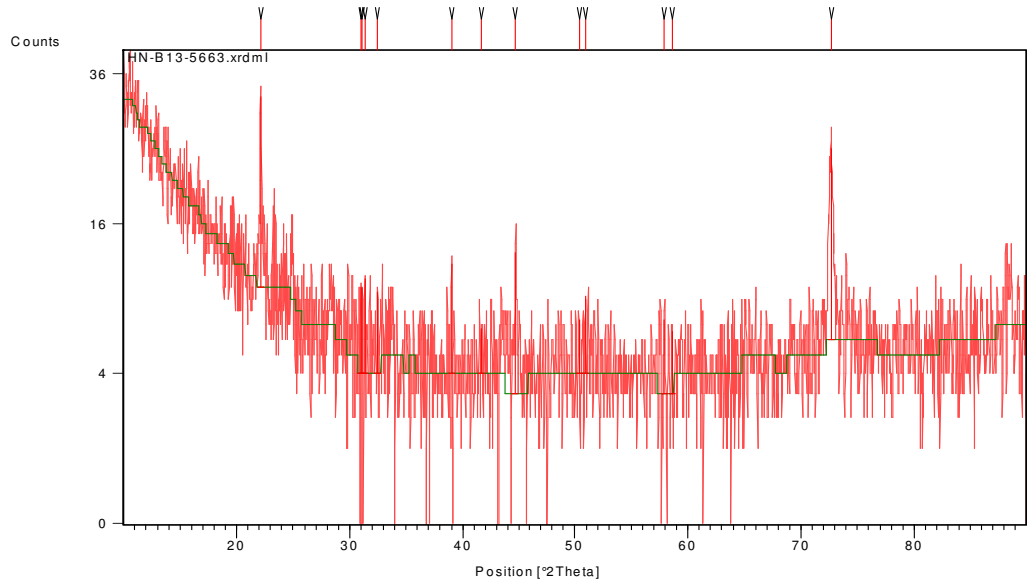


Ek Şekil 66. (21) kompleksinin  $^{13}\text{C}$  NMR (DMSO- $d_6$ ) spektrumu.





Ek Şekil 67. (5) ve (6) komplekslerinin toz X ışını diffraktogramları



Ek Şekil 68. (13) ve (14) komplekslerinin toz X ışını diffraktogramları

Ek Çizelge 1. (5) kristalinin fraksiyonel atomik koordinatları ve izotropik veya eşdeğer izotropik yerdeğiştirme parametreleri ( $\text{Å}^2$ )

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$U_{\text{iso}}^*/U_{\text{eq}}$
Mn1	0.0000	0.0000	0.0000	0.01276 (11)
O1	0.24237 (17)	-0.33733 (12)	0.25988 (12)	0.0207 (2)
O2	0.16077 (17)	-0.08763 (12)	0.17238 (12)	0.0201 (2)
O3	0.78404 (16)	-0.34130 (13)	-0.01469 (13)	0.0210 (3)
O4	0.18323 (19)	0.15102 (14)	-0.09400 (13)	0.0232 (3)
H41	0.208 (4)	0.190 (3)	-0.1860 (17)	0.064 (9)*
H42	0.218 (4)	0.205 (3)	-0.058 (2)	0.042 (7)*
N1	0.21166 (18)	-0.15932 (14)	-0.10409 (13)	0.0143 (3)
N2	0.84692 (19)	-0.50868 (14)	-0.11834 (14)	0.0167 (3)
H21	0.810 (3)	-0.555 (3)	-0.159 (2)	0.028 (5)*
H22	0.958 (4)	-0.545 (3)	-0.084 (2)	0.032 (6)*
C1	0.2620 (2)	-0.21470 (17)	0.24423 (15)	0.0151 (3)
C2	0.4196 (2)	-0.21314 (16)	0.31505 (15)	0.0145 (3)
C3	0.4331 (2)	-0.07942 (16)	0.31453 (15)	0.0164 (3)
H3	0.3426	0.0099	0.2714	0.020*
C4	0.5805 (2)	-0.07856 (18)	0.37770 (16)	0.0181 (3)
H4	0.5871	0.0115	0.3767	0.022*
C5	0.7191 (2)	-0.21079 (19)	0.44279 (16)	0.0190 (3)
C6	0.7063 (2)	-0.34413 (18)	0.44183 (16)	0.0203 (3)
H6	0.7979	-0.4333	0.4839	0.024*
C7	0.5589 (2)	-0.34546 (17)	0.37902 (16)	0.0177 (3)
H7	0.5528	-0.4355	0.3795	0.021*
C8	0.8783 (3)	-0.2097 (2)	0.51214 (18)	0.0257 (4)
H8A	0.8947	-0.1115	0.4763	0.039*
H8B	0.9977	-0.2797	0.4951	0.039*
H8C	0.8437	-0.2371	0.6092	0.039*
C9	0.3975 (2)	-0.22336 (16)	-0.07444 (15)	0.0132 (3)
H9	0.4418	-0.1971	-0.0142	0.016*
C10	0.5280 (2)	-0.32707 (16)	-0.12893 (15)	0.0134 (3)
C11	0.4623 (2)	-0.36415 (17)	-0.22143 (16)	0.0170 (3)
H11	0.5453	-0.4328	-0.2602	0.020*
C12	0.2710 (2)	-0.29647 (18)	-0.25420 (17)	0.0198 (3)
H12	0.2239	-0.3182	-0.3164	0.024*
C13	0.1508 (2)	-0.19621 (17)	-0.19343 (16)	0.0172 (3)

H13	0.0221	-0.1523	-0.2153	0.021*
C14	0.7300 (2)	-0.39401 (16)	-0.08365 (15)	0.0142 (3)

Ek Çizelge 2. (5) kristalinin atomik yerdeğiştirme parametreleri ( $\text{Å}^2$ )

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{12}$	$U^{13}$	$U^{23}$
Mn1	0.01065 (17)	0.01054 (16)	0.01760 (17)	0.00071 (11)	-0.00334 (11)	-0.00758 (12)
O1	0.0252 (6)	0.0149 (5)	0.0241 (6)	-0.0030 (4)	-0.0062 (5)	-0.0092 (5)
O2	0.0216 (6)	0.0138 (5)	0.0243 (6)	0.0035 (4)	-0.0106 (5)	-0.0092 (4)
O3	0.0160 (5)	0.0184 (5)	0.0343 (6)	0.0021 (4)	-0.0096 (5)	-0.0174 (5)
O4	0.0308 (7)	0.0236 (6)	0.0233 (6)	-0.0146 (5)	0.0056 (5)	-0.0147 (5)
N1	0.0126 (6)	0.0117 (6)	0.0177 (6)	-0.0003 (4)	-0.0030 (5)	-0.0061 (5)
N2	0.0120 (6)	0.0146 (6)	0.0258 (7)	0.0020 (5)	-0.0057 (5)	-0.0125 (5)
C1	0.0149 (7)	0.0150 (7)	0.0155 (7)	0.0004 (5)	-0.0019 (5)	-0.0091 (6)
C2	0.0147 (7)	0.0137 (7)	0.0140 (6)	-0.0008 (5)	-0.0017 (5)	-0.0061 (5)
C3	0.0175 (7)	0.0129 (7)	0.0164 (7)	-0.0004 (5)	-0.0029 (6)	-0.0055 (6)
C4	0.0209 (8)	0.0181 (7)	0.0173 (7)	-0.0059 (6)	-0.0014 (6)	-0.0080 (6)
C5	0.0170 (7)	0.0245 (8)	0.0158 (7)	-0.0045 (6)	-0.0017 (6)	-0.0083 (6)
C6	0.0182 (7)	0.0177 (7)	0.0196 (7)	0.0026 (6)	-0.0066 (6)	-0.0053 (6)
C7	0.0203 (7)	0.0124 (7)	0.0186 (7)	-0.0006 (5)	-0.0041 (6)	-0.0056 (6)
C8	0.0199 (8)	0.0352 (10)	0.0240 (8)	-0.0067 (7)	-0.0061 (6)	-0.0114 (7)
C9	0.0137 (7)	0.0105 (6)	0.0160 (6)	-0.0017 (5)	-0.0027 (5)	-0.0060 (5)
C10	0.0118 (7)	0.0101 (6)	0.0174 (7)	-0.0007 (5)	-0.0031 (5)	-0.0051 (5)
C11	0.0146 (7)	0.0149 (7)	0.0224 (7)	0.0015 (5)	-0.0042 (6)	-0.0110 (6)
C12	0.0181 (8)	0.0194 (7)	0.0258 (8)	0.0016 (6)	-0.0092 (6)	-0.0142 (7)
C13	0.0137 (7)	0.0150 (7)	0.0229 (7)	0.0008 (5)	-0.0059 (6)	-0.0087 (6)
C14	0.0127 (7)	0.0113 (6)	0.0184 (7)	-0.0007 (5)	-0.0033 (5)	-0.0063 (5)

Ek Çizelge 3. (5) kristalinin geometrik parametreleri ( $\text{Å}$ ,  $^\circ$ )

Mn1—O2	2.1036 (11)	C4—C3	1.387 (2)
Mn1—O2 <sup>i</sup>	2.1036 (11)	C4—C5	1.396 (2)
Mn1—O4	2.1924 (12)	C4—H4	0.93
Mn1—O4 <sup>i</sup>	2.1924 (12)	C5—C8	1.507 (2)

Mn1—N1	2.2947 (13)	C6—C5	1.396 (2)
Mn1—N1 <sup>i</sup>	2.2947 (13)	C6—C7	1.387 (2)
O1—C1	1.2466 (19)	C6—H6	0.93
O2—C1	1.2690 (18)	C7—H7	0.93
O3—C14	1.2464 (18)	C8—H8A	0.96
O4—H41	0.905 (16)	C8—H8B	0.96
O4—H42	0.906 (16)	C8—H8C	0.96
N1—C9	1.3386 (18)	C9—C10	1.391 (2)
N1—C13	1.345 (2)	C9—H9	0.93
N2—C14	1.3283 (19)	C11—C10	1.396 (2)
N2—H21	0.89 (2)	C11—C12	1.385 (2)
N2—H22	0.86 (2)	C11—H11	0.93
C1—C2	1.509 (2)	C12—H12	0.93
C2—C3	1.395 (2)	C13—C12	1.383 (2)
C2—C7	1.397 (2)	C13—H13	0.93
C3—H3	0.93	C14—C10	1.4956 (19)
O2—Mn1—O2 <sup>i</sup>	180.00 (4)	C3—C4—H4	119.5
O2—Mn1—O4	86.18 (5)	C5—C4—H4	119.5
O2 <sup>i</sup> —Mn1—O4	93.82 (5)	C4—C5—C8	120.94 (15)
O2—Mn1—O4 <sup>i</sup>	93.82 (5)	C6—C5—C4	118.20 (14)
O2 <sup>i</sup> —Mn1—O4 <sup>i</sup>	86.18 (5)	C6—C5—C8	120.86 (15)
O2—Mn1—N1 <sup>i</sup>	86.02 (4)	C5—C6—H6	119.5
O2 <sup>i</sup> —Mn1—N1 <sup>i</sup>	93.98 (4)	C7—C6—C5	120.91 (14)
O2—Mn1—N1	93.98 (4)	C7—C6—H6	119.5
O2 <sup>i</sup> —Mn1—N1	86.02 (4)	C2—C7—H7	119.6
O4—Mn1—O4 <sup>i</sup>	180.00 (5)	C6—C7—C2	120.74 (14)
O4—Mn1—N1 <sup>i</sup>	91.32 (4)	C6—C7—H7	119.6
O4 <sup>i</sup> —Mn1—N1 <sup>i</sup>	88.68 (4)	C5—C8—H8A	109.5
O4—Mn1—N1	88.68 (4)	C5—C8—H8B	109.5
O4 <sup>i</sup> —Mn1—N1	91.32 (4)	C5—C8—H8C	109.5
N1 <sup>i</sup> —Mn1—N1	180.00 (9)	H8A—C8—H8B	109.5
C1—O2—Mn1	136.86 (10)	H8A—C8—H8C	109.5
Mn1—O4—H41	122.2 (18)	H8B—C8—H8C	109.5
Mn1—O4—H42	129.2 (16)	N1—C9—C10	123.52 (13)
H42—O4—H41	107 (2)	N1—C9—H9	118.2
C9—N1—Mn1	121.52 (10)	C10—C9—H9	118.2
C9—N1—C13	117.56 (13)	C9—C10—C11	118.15 (13)
C13—N1—Mn1	120.88 (10)	C9—C10—C14	118.12 (13)
C14—N2—H21	124.4 (15)	C11—C10—C14	123.72 (13)

C14—N2—H22	113.3 (16)	C10—C11—H11	120.7
H21—N2—H22	121 (2)	C12—C11—C10	118.59 (14)
O1—C1—O2	125.89 (14)	C12—C11—H11	120.7
O1—C1—C2	118.59 (13)	C11—C12—H12	120.4
O2—C1—C2	115.51 (13)	C13—C12—C11	119.26 (14)
C3—C2—C1	120.90 (13)	C13—C12—H12	120.4
C3—C2—C7	118.51 (14)	N1—C13—C12	122.90 (14)
C7—C2—C1	120.56 (13)	N1—C13—H13	118.6
C2—C3—H3	119.7	C12—C13—H13	118.6
C4—C3—C2	120.59 (14)	O3—C14—N2	121.84 (14)
C4—C3—H3	119.7	O3—C14—C10	119.46 (13)
C3—C4—C5	121.05 (14)	N2—C14—C10	118.71 (13)
O4—Mn1—O2—C1	-124.12 (16)	O2—C1—C2—C7	-169.99 (14)
O4 <sup>i</sup> —Mn1—O2—C1	55.88 (16)	C1—C2—C3—C4	-178.83 (14)
N1 <sup>i</sup> —Mn1—O2—C1	144.28 (16)	C7—C2—C3—C4	-0.8 (2)
N1—Mn1—O2—C1	-35.72 (16)	C1—C2—C7—C6	178.70 (15)
O2—Mn1—N1—C9	-23.31 (12)	C3—C2—C7—C6	0.6 (2)
O2 <sup>i</sup> —Mn1—N1—C9	156.69 (12)	C5—C4—C3—C2	0.2 (2)
O2—Mn1—N1—C13	154.04 (12)	C3—C4—C5—C6	0.4 (2)
O2 <sup>i</sup> —Mn1—N1—C13	-25.96 (12)	C3—C4—C5—C8	-179.60 (15)
O4—Mn1—N1—C9	62.76 (11)	C5—C6—C7—C2	0.0 (2)
O4 <sup>i</sup> —Mn1—N1—C9	-117.24 (11)	C7—C6—C5—C4	-0.6 (2)
O4—Mn1—N1—C13	-119.89 (12)	C7—C6—C5—C8	179.46 (15)
O4 <sup>i</sup> —Mn1—N1—C13	60.11 (12)	N1—C9—C10—C11	1.2 (2)
Mn1—O2—C1—O1	-26.6 (3)	N1—C9—C10—C14	-177.98 (13)
Mn1—O2—C1—C2	153.01 (12)	C12—C11—C10—C9	-0.1 (2)
Mn1—N1—C9—C10	176.18 (11)	C12—C11—C10—C14	179.01 (15)
C13—N1—C9—C10	-1.3 (2)	C10—C11—C12—C13	-0.8 (2)
Mn1—N1—C13—C12	-177.22 (13)	N1—C13—C12—C11	0.8 (3)
C9—N1—C13—C12	0.2 (2)	O3—C14—C10—C9	-9.9 (2)
O1—C1—C2—C3	-172.31 (14)	O3—C14—C10—C11	170.95 (15)
O1—C1—C2—C7	9.7 (2)	N2—C14—C10—C9	170.04 (14)
O2—C1—C2—C3	8.0 (2)	N2—C14—C10—C11	-9.1 (2)

Simetri kodu: (i)  $-x, -y, -z$ .

Ek Çizelge 4. (5) kristalinin hidrojen bağı geometrisi (Å, °)

Cg1 ve Cg2 sırasıyla, C2-C7 ve N1/C9-C13 halkalarının merkezleridir.

$D-H\cdots A$	$D-H$	$H\cdots A$	$D\cdots A$	$D-H\cdots A$
N2—H21 $\cdots$ O1 <sup>ii</sup>	0.88 (3)	1.97 (3)	2.8456 (19)	174 (2)
N2—H22 $\cdots$ O3 <sup>iii</sup>	0.86 (3)	2.09 (3)	2.952 (2)	172 (3)
O4—H42 $\cdots$ O3 <sup>iv</sup>	0.90 (3)	1.83 (3)	2.7071 (19)	164 (3)
C11—H11 $\cdots$ O1 <sup>ii</sup>	0.93	2.33	3.200 (2)	156
O4—H41 $\cdots$ Cg1 <sup>v</sup>	0.91 (2)	2.33 (2)	3.141 (2)	149 (3)
C4—H4 $\cdots$ Cg2 <sup>v</sup>	0.93	2.80	3.490 (2)	132

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

Ek Çizelge 5. (7) kristalinin fraksiyonel atomik koordinatları ve izotropik veya eşdeğer izotropik yerdeğiştirme parametreleri ( $\text{\AA}^2$ )

	$x$	$y$	$z$	$U_{\text{iso}}^*/U_{\text{eq}}$
Ni1	0.0000	0.0000	0.5000	0.00996 (8)
O1	0.12751 (13)	0.01072 (11)	0.67419 (11)	0.0129 (2)
O2	-0.11125 (14)	0.15789 (11)	0.77116 (11)	0.0149 (2)
O3	0.44171 (14)	0.33247 (11)	0.48634 (12)	0.0177 (2)
O4	0.25984 (15)	-0.07089 (12)	0.41538 (12)	0.0136 (2)
H41	0.342 (3)	-0.137 (2)	0.458 (2)	0.034 (6)*
H42	0.228 (3)	-0.103 (2)	0.345 (2)	0.036 (6)*
N1	-0.00159 (16)	0.21391 (13)	0.41144 (13)	0.0116 (2)
N2	0.33786 (19)	0.55995 (15)	0.35530 (15)	0.0176 (3)
H21	0.252 (3)	0.628 (2)	0.307 (2)	0.022 (5)*
H22	0.425 (3)	0.586 (2)	0.390 (2)	0.024 (5)*
C1	0.05766 (19)	0.09453 (16)	0.75988 (15)	0.0120 (3)
C2	0.18258 (19)	0.12691 (15)	0.85126 (15)	0.0121 (3)
C3	0.3601 (2)	0.12032 (16)	0.81040 (16)	0.0139 (3)
H3	0.4070	0.0851	0.7302	0.017*
C4	0.4678 (2)	0.16598 (16)	0.88863 (16)	0.0153 (3)
H4	0.5855	0.1624	0.8593	0.018*
C5	0.4019 (2)	0.21690 (17)	1.00998 (17)	0.0162 (3)
C6	0.2262 (2)	0.21841 (18)	1.05279 (17)	0.0192 (3)
H6	0.1816	0.2488	1.1356	0.023*
C7	0.1171 (2)	0.17547 (17)	0.97424 (16)	0.0164 (3)
H7	-0.0006	0.1790	1.0037	0.020*

C8	0.5187 (2)	0.26752 (19)	1.09414 (19)	0.0239 (4)
H8A	0.4556	0.3664	1.1063	0.036*
H8B	0.6314	0.2651	1.0463	0.036*
H8C	0.5435	0.2033	1.1834	0.036*
C9	-0.13817 (19)	0.31071 (16)	0.33131 (16)	0.0140 (3)
H9	-0.2385	0.2823	0.3163	0.017*
C10	-0.1356 (2)	0.45107 (17)	0.27015 (17)	0.0169 (3)
H10	-0.2326	0.5157	0.2153	0.020*
C11	0.0139 (2)	0.49377 (16)	0.29208 (16)	0.0156 (3)
H11	0.0188	0.5875	0.2521	0.019*
C12	0.15612 (19)	0.39452 (16)	0.37462 (15)	0.0121 (3)
C13	0.14248 (19)	0.25568 (16)	0.43189 (15)	0.0115 (3)
H13	0.2378	0.1888	0.4869	0.014*
C14	0.32352 (19)	0.42736 (16)	0.40920 (16)	0.0131 (3)

Ek Çizelge 6. (7) kristalinin atomik yerdeğiştirme parametreleri ( $\text{\AA}^2$ )

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{12}$	$U^{13}$	$U^{23}$
Ni1	0.00972 (13)	0.00810 (13)	0.01255 (14)	-0.00273 (10)	-0.00152 (9)	-0.00267 (10)
O1	0.0132 (5)	0.0108 (5)	0.0144 (5)	-0.0023 (4)	-0.0020 (4)	-0.0036 (4)
O2	0.0120 (5)	0.0152 (5)	0.0175 (6)	-0.0027 (4)	-0.0015 (4)	-0.0050 (4)
O3	0.0162 (5)	0.0107 (5)	0.0257 (6)	-0.0035 (4)	-0.0068 (4)	-0.0016 (5)
O4	0.0114 (5)	0.0124 (5)	0.0163 (6)	-0.0018 (4)	-0.0020 (4)	-0.0038 (5)
N1	0.0122 (6)	0.0100 (6)	0.0128 (6)	-0.0029 (5)	-0.0008 (5)	-0.0035 (5)
N2	0.0172 (7)	0.0113 (6)	0.0254 (8)	-0.0066 (5)	-0.0074 (6)	-0.0003 (6)
C1	0.0134 (7)	0.0098 (7)	0.0124 (7)	-0.0044 (5)	-0.0023 (5)	0.0010 (5)
C2	0.0132 (7)	0.0087 (6)	0.0133 (7)	-0.0021 (5)	-0.0032 (5)	-0.0007 (5)
C3	0.0157 (7)	0.0130 (7)	0.0124 (7)	-0.0033 (6)	-0.0010 (5)	-0.0028 (6)
C4	0.0135 (7)	0.0139 (7)	0.0179 (8)	-0.0040 (6)	-0.0021 (6)	-0.0014 (6)
C5	0.0180 (7)	0.0116 (7)	0.0182 (8)	-0.0024 (6)	-0.0062 (6)	-0.0027 (6)
C6	0.0193 (8)	0.0224 (8)	0.0162 (8)	-0.0028 (6)	-0.0002 (6)	-0.0101 (7)
C7	0.0132 (7)	0.0185 (8)	0.0167 (8)	-0.0030 (6)	-0.0003 (6)	-0.0046 (6)
C8	0.0219 (8)	0.0243 (9)	0.0285 (10)	-0.0062 (7)	-0.0070 (7)	-0.0111 (7)
C9	0.0116 (7)	0.0140 (7)	0.0173 (8)	-0.0039 (6)	-0.0022 (6)	-0.0045 (6)
C10	0.0146 (7)	0.0126 (7)	0.0207 (8)	-0.0008 (6)	-0.0058 (6)	-0.0003 (6)
C11	0.0173 (7)	0.0092 (7)	0.0199 (8)	-0.0040 (6)	-0.0024 (6)	-0.0013 (6)
C12	0.0129 (7)	0.0102 (7)	0.0138 (7)	-0.0028 (5)	-0.0005 (5)	-0.0050 (6)



C13	0.0122 (6)	0.0103 (7)	0.0120 (7)	-0.0025 (5)	-0.0019 (5)	-0.0030 (5)
C14	0.0141 (7)	0.0118 (7)	0.0142 (7)	-0.0032 (6)	0.0000 (5)	-0.0053 (6)

Ek Çizelge 7. (7) kristalinin geometrik parametreleri (Å, °)

Ni1—O1	2.0621 (10)	C4—C5	1.389 (2)
Ni1—O1 <sup>i</sup>	2.0621 (10)	C4—H4	0.9300
Ni1—O4 <sup>i</sup>	2.0870 (10)	C5—C6	1.394 (2)
Ni1—O4	2.0870 (10)	C5—C8	1.509 (2)
Ni1—N1	2.0859 (12)	C6—H6	0.9300
Ni1—N1 <sup>i</sup>	2.0859 (12)	C7—C2	1.393 (2)
O1—C1	1.2678 (17)	C7—C6	1.383 (2)
O2—C1	1.2654 (17)	C7—H7	0.9300
O3—C14	1.2392 (18)	C8—H8A	0.9600
O4—H41	0.81 (2)	C8—H8B	0.9600
O4—H42	0.88 (2)	C8—H8C	0.9600
N1—C9	1.3421 (19)	C9—C10	1.383 (2)
N1—C13	1.3386 (18)	C9—H9	0.9300
N2—C14	1.3294 (19)	C10—H10	0.9300
N2—H21	0.86 (2)	C11—C10	1.388 (2)
N2—H22	0.89 (2)	C11—H11	0.9300
C1—C2	1.500 (2)	C12—C11	1.388 (2)
C2—C3	1.392 (2)	C12—C13	1.390 (2)
C3—H3	0.9300	C13—H13	0.9300
C4—C3	1.389 (2)	C14—C12	1.500 (2)
O1 <sup>i</sup> —Ni1—O1	180.0	C5—C4—C3	120.87 (14)
O1—Ni1—O4	86.71 (4)	C5—C4—H4	119.6
O1 <sup>i</sup> —Ni1—O4	93.29 (4)	C4—C5—C6	118.33 (14)
O1—Ni1—O4 <sup>i</sup>	93.29 (4)	C4—C5—C8	120.73 (14)
O1 <sup>i</sup> —Ni1—O4 <sup>i</sup>	86.71 (4)	C6—C5—C8	120.93 (14)
O1—Ni1—N1	89.94 (4)	C5—C6—H6	119.4
O1 <sup>i</sup> —Ni1—N1	90.06 (4)	C7—C6—C5	121.11 (14)
O1—Ni1—N1 <sup>i</sup>	90.06 (4)	C7—C6—H6	119.4
O1 <sup>i</sup> —Ni1—N1 <sup>i</sup>	89.94 (4)	C2—C7—H7	119.8
O4 <sup>i</sup> —Ni1—O4	180.0	C6—C7—C2	120.34 (14)
N1—Ni1—O4	86.75 (4)	C6—C7—H7	119.8
N1 <sup>i</sup> —Ni1—O4	93.25 (4)	C5—C8—H8A	109.5

N1—Ni1—O4 <sup>i</sup>	93.25 (4)	C5—C8—H8B	109.5
N1 <sup>i</sup> —Ni1—O4 <sup>i</sup>	86.75 (4)	C5—C8—H8C	109.5
N1 <sup>i</sup> —Ni1—N1	180.0	H8A—C8—H8B	109.5
C1—O1—Ni1	125.51 (9)	H8A—C8—H8C	109.5
Ni1—O4—H41	122.0 (15)	H8B—C8—H8C	109.5
Ni1—O4—H42	97.1 (14)	N1—C9—C10	122.60 (14)
H42—O4—H41	108 (2)	N1—C9—H9	118.7
C9—N1—Ni1	123.09 (10)	C10—C9—H9	118.7
C13—N1—Ni1	118.67 (10)	C9—C10—C11	118.88 (14)
C13—N1—C9	118.21 (12)	C9—C10—H10	120.6
C14—N2—H21	122.3 (13)	C11—C10—H10	120.6
C14—N2—H22	117.1 (12)	C10—C11—C12	119.04 (14)
H21—N2—H22	118.3 (18)	C10—C11—H11	120.5
O1—C1—C2	118.42 (13)	C12—C11—H11	120.5
O2—C1—O1	124.67 (14)	C11—C12—C13	118.29 (13)
O2—C1—C2	116.86 (13)	C11—C12—C14	124.54 (13)
C3—C2—C1	121.08 (13)	C13—C12—C14	117.16 (13)
C3—C2—C7	118.83 (14)	N1—C13—C12	122.98 (13)
C7—C2—C1	119.91 (13)	N1—C13—H13	118.5
C2—C3—H3	119.8	C12—C13—H13	118.5
C4—C3—C2	120.46 (14)	O3—C14—N2	122.43 (14)
C4—C3—H3	119.8	O3—C14—C12	119.86 (13)
C3—C4—H4	119.6	N2—C14—C12	117.70 (13)
O4—Ni1—O1—C1	153.43 (11)	O2—C1—C2—C7	23.4 (2)
O4 <sup>i</sup> —Ni1—O1—C1	-26.57 (11)	C1—C2—C3—C4	172.95 (13)
N1—Ni1—O1—C1	66.68 (11)	C7—C2—C3—C4	-2.1 (2)
N1 <sup>i</sup> —Ni1—O1—C1	-113.32 (11)	C5—C4—C3—C2	1.0 (2)
O1—Ni1—N1—C9	-144.39 (11)	C3—C4—C5—C6	1.2 (2)
O1 <sup>i</sup> —Ni1—N1—C9	35.61 (11)	C3—C4—C5—C8	-179.53 (14)
O1—Ni1—N1—C13	37.62 (11)	C4—C5—C6—C7	-2.3 (2)
O1 <sup>i</sup> —Ni1—N1—C13	-142.38 (11)	C8—C5—C6—C7	178.42 (15)
O4—Ni1—N1—C9	128.90 (12)	C6—C7—C2—C1	-174.10 (14)
O4 <sup>i</sup> —Ni1—N1—C9	-51.10 (12)	C6—C7—C2—C3	1.0 (2)
O4—Ni1—N1—C13	-49.10 (11)	C2—C7—C6—C5	1.2 (2)
O4 <sup>i</sup> —Ni1—N1—C13	130.90 (11)	N1—C9—C10—C11	0.1 (2)
Ni1—O1—C1—O2	17.6 (2)	C12—C11—C10—C9	0.0 (2)
Ni1—O1—C1—C2	-159.77 (9)	C13—C12—C11—C10	0.1 (2)
Ni1—N1—C9—C10	-178.28 (11)	C14—C12—C11—C10	-178.64 (14)
C13—N1—C9—C10	-0.3 (2)	C11—C12—C13—N1	-0.3 (2)

Ni1—N1—C13—C12	178.46 (11)	C14—C12—C13—N1	178.56 (13)
C9—N1—C13—C12	0.4 (2)	O3—C14—C12—C11	178.48 (14)
O1—C1—C2—C3	26.1 (2)	O3—C14—C12—C13	-0.3 (2)
O1—C1—C2—C7	-158.94 (14)	N2—C14—C12—C11	-1.1 (2)
O2—C1—C2—C3	-151.54 (14)	N2—C14—C12—C13	-179.83 (13)

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

Ek Çizelge 8. (7) kristalinin hidrojen bağı geometrisi (Å, °)

Cg2, N1/C9—C13 halkasının mütle merkezidir.

<i>D—H...A</i>	<i>D—H</i>	<i>H...A</i>	<i>D...A</i>	<i>D—H...A</i>
N2—H21...O2 <sup>ii</sup>	0.86 (2)	2.037 (19)	2.8333 (18)	153.4 (19)
N2—H22...O3 <sup>iii</sup>	0.90 (2)	2.05 (2)	2.9192 (19)	161.5 (18)
O4—H41...O3 <sup>iv</sup>	0.81 (2)	2.10 (2)	2.8864 (16)	162.9 (19)
O4—H42...O2 <sup>i</sup>	0.89 (2)	1.75 (2)	2.6240 (16)	165 (2)
C6—H6...Cg2 <sup>v</sup>	0.93	2.65	3.5737 (18)	171

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

Ek Çizelge 9. (9) kristalinin fraksiyonel atomik koordinatları ve izotropik veya eşdeğer izotropik yerdeğiştirme parametreleri (Å<sup>2</sup>)

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U<sub>iso</sub>*/U<sub>eq</sub></i>
Zn1	0.28355 (2)	0.10592 (3)	0.15711 (2)	0.01471 (9)
Zn2	0.20670 (2)	0.07066 (3)	0.32791 (2)	0.01696 (10)
Zn3	0.69302 (2)	0.99800 (3)	0.33479 (2)	0.01354 (10)
Zn4	0.79811 (2)	1.00907 (3)	0.16901 (2)	0.01335 (10)
N1	0.63153 (16)	1.0446 (2)	0.42375 (17)	0.0155 (7)
N2	0.41642 (17)	0.9780 (2)	0.39318 (18)	0.0175 (7)
H2A	0.3733	0.9576	0.3894	0.021*
H2B	0.4376	0.9734	0.3471	0.021*
N3	0.85772 (15)	1.0568 (2)	0.07915 (17)	0.0137 (6)
N4	1.07081 (17)	0.9790 (2)	0.0974 (2)	0.0201 (7)
H4A	1.1138	0.9580	0.1001	0.024*

H4B	1.0497	0.9714	0.1433	0.024*
O1	0.34255 (14)	0.18920 (19)	0.24754 (14)	0.0201 (6)
O2	0.28988 (14)	0.1544 (2)	0.36336 (15)	0.0205 (6)
O3	0.19960 (13)	0.1879 (2)	0.12372 (14)	0.0200 (6)
O4	0.14732 (14)	0.1571 (2)	0.23982 (15)	0.0220 (6)
O5	0.26286 (15)	-0.0934 (2)	0.39755 (15)	0.0205 (6)
O6	0.17315 (14)	-0.0784 (2)	0.29432 (16)	0.0205 (6)
O7	0.22349 (14)	-0.0618 (2)	0.09298 (15)	0.0192 (6)
O8	0.30657 (14)	-0.0412 (2)	0.20415 (15)	0.0215 (6)
O9	0.32937 (13)	0.1279 (2)	0.05389 (14)	0.0175 (6)
H91	0.3002	0.1244	-0.0029	0.021*
H92	0.3650	0.0733	0.0528	0.021*
O10	0.16159 (13)	0.1037 (2)	0.43203 (15)	0.0194 (6)
H101	0.1272	0.0502	0.4417	0.023*
H102	0.1988	0.0972	0.4810	0.023*
O11	0.64993 (14)	1.0712 (2)	0.23049 (15)	0.0195 (6)
O12	0.71470 (14)	1.09187 (19)	0.12404 (15)	0.0173 (6)
O13	0.77572 (14)	1.08106 (18)	0.38194 (15)	0.0162 (6)
O14	0.84098 (14)	1.0780 (2)	0.27519 (14)	0.0182 (6)
O15	0.60792 (14)	0.8331 (2)	0.27054 (15)	0.0204 (6)
O16	0.71267 (14)	0.84434 (19)	0.34807 (15)	0.0170 (6)
O17	0.77405 (14)	0.85598 (18)	0.15918 (15)	0.0160 (6)
O18	0.87894 (14)	0.8431 (2)	0.23425 (16)	0.0205 (6)
O19	0.42153 (14)	1.0236 (2)	0.53595 (15)	0.0186 (6)
O20	1.06431 (14)	1.0350 (2)	-0.04234 (16)	0.0233 (6)
O21	0.47309 (16)	0.9262 (3)	0.23420 (17)	0.0376 (9)
H211	0.5212	0.9078	0.2363	0.045*
H212	0.4546	0.9419	0.1818	0.045*
O22	1.01450 (19)	0.9193 (3)	0.2565 (2)	0.0570 (12)
H221	1.0405	0.9309	0.3143	0.068*
H222	0.9737	0.8782	0.2648	0.068*
C1	0.3372 (2)	0.1966 (3)	0.3273 (2)	0.0161 (8)
C2	0.39105 (19)	0.2606 (3)	0.3843 (2)	0.0151 (8)
C3	0.3864 (2)	0.2793 (3)	0.4718 (2)	0.0207 (9)
H3	0.3485	0.2516	0.4963	0.025*
C4	0.4373 (2)	0.3387 (3)	0.5235 (2)	0.0264 (9)
H4	0.4338	0.3515	0.5833	0.032*
C5	0.4930 (2)	0.3792 (3)	0.4892 (2)	0.0277 (10)
C6	0.4968 (2)	0.3615 (3)	0.4017 (2)	0.0284 (9)

H6	0.5345	0.3897	0.3771	0.034*
C7	0.4462 (2)	0.3030 (3)	0.3495 (2)	0.0242 (9)
H7	0.4494	0.2919	0.2894	0.029*
C8	0.5502 (2)	0.4410 (4)	0.5459 (3)	0.0426 (12)
H8A	0.5738	0.4881	0.5088	0.064*
H8B	0.5830	0.3891	0.5769	0.064*
H8C	0.5306	0.4856	0.5886	0.064*
C9	0.1499 (2)	0.1971 (3)	0.1652 (2)	0.0145 (8)
C10	0.0896 (2)	0.2605 (3)	0.1232 (2)	0.0159 (8)
C11	0.03233 (19)	0.2751 (3)	0.1654 (2)	0.0205 (8)
H11	0.0323	0.2449	0.2220	0.025*
C12	-0.0243 (2)	0.3327 (3)	0.1262 (2)	0.0246 (9)
H12	-0.0624	0.3419	0.1565	0.029*
C13	-0.02635 (19)	0.3774 (3)	0.0431 (2)	0.0206 (8)
C14	0.0302 (2)	0.3623 (3)	0.0009 (2)	0.0261 (9)
H14	0.0297	0.3917	-0.0561	0.031*
C15	0.08771 (19)	0.3052 (3)	0.0402 (2)	0.0190 (8)
H15	0.1260	0.2967	0.0101	0.023*
C16	-0.0885 (2)	0.4377 (3)	-0.0005 (3)	0.0328 (10)
H16A	-0.1135	0.4681	0.0442	0.049*
H16B	-0.1185	0.3876	-0.0380	0.049*
H16C	-0.0741	0.4969	-0.0362	0.049*
C17	0.2132 (2)	-0.1365 (3)	0.3483 (2)	0.0162 (8)
C18	0.1993 (2)	-0.2550 (3)	0.3528 (2)	0.0188 (8)
C19	0.1421 (2)	-0.3021 (3)	0.3038 (2)	0.0252 (9)
H19	0.1100	-0.2575	0.2678	0.030*
C20	0.1312 (2)	-0.4126 (3)	0.3065 (2)	0.0355 (11)
H20	0.0916	-0.4429	0.2724	0.043*
C21	0.1768 (2)	-0.4807 (3)	0.3578 (2)	0.0327 (10)
C22	0.2338 (2)	-0.4338 (3)	0.4076 (3)	0.0302 (10)
H22	0.2656	-0.4785	0.4440	0.036*
C23	0.2451 (2)	-0.3228 (3)	0.4050 (2)	0.0250 (9)
H23	0.2847	-0.2924	0.4393	0.030*
C24	0.1652 (3)	-0.6017 (3)	0.3607 (3)	0.0542 (14)
H24A	0.2076	-0.6399	0.3529	0.081*
H24B	0.1284	-0.6225	0.3137	0.081*
H24C	0.1523	-0.6216	0.4174	0.081*
C25	0.2687 (2)	-0.1023 (3)	0.1512 (2)	0.0170 (9)
C26	0.2772 (2)	-0.2220 (3)	0.1571 (2)	0.0174 (8)

C27	0.2314 (2)	-0.2910 (3)	0.1080 (2)	0.0236 (9)
H27	0.1943	-0.2613	0.0686	0.028*
C28	0.2385 (2)	-0.4027 (3)	0.1151 (3)	0.0275 (10)
H28	0.2058	-0.4485	0.0812	0.033*
C29	0.2919 (2)	-0.4482 (3)	0.1703 (3)	0.0307 (10)
C30	0.3389 (2)	-0.3788 (3)	0.2193 (2)	0.0323 (11)
H30	0.3765	-0.4089	0.2575	0.039*
C31	0.3318 (2)	-0.2670 (3)	0.2132 (2)	0.0263 (10)
H31	0.3642	-0.2210	0.2474	0.032*
C32	0.2998 (3)	-0.5691 (3)	0.1791 (3)	0.0514 (13)
H32A	0.3443	-0.5909	0.1638	0.077*
H32B	0.2629	-0.6050	0.1396	0.077*
H32C	0.2973	-0.5905	0.2396	0.077*
C33	0.66019 (19)	1.1070 (3)	0.1573 (2)	0.0124 (7)
C34	0.60372 (19)	1.1704 (3)	0.1063 (2)	0.0140 (7)
C35	0.54184 (19)	1.1833 (3)	0.1390 (2)	0.0162 (8)
H35	0.5368	1.1533	0.1944	0.019*
C36	0.4880 (2)	1.2394 (3)	0.0912 (2)	0.0207 (8)
H36	0.4466	1.2489	0.1147	0.025*
C37	0.4934 (2)	1.2820 (3)	0.0092 (2)	0.0202 (8)
C38	0.5552 (2)	1.2687 (3)	-0.0227 (2)	0.0233 (9)
H38	0.5602	1.2974	-0.0785	0.028*
C39	0.6092 (2)	1.2145 (3)	0.0256 (2)	0.0178 (8)
H39	0.6511	1.2072	0.0028	0.021*
C40	0.4339 (2)	1.3391 (4)	-0.0450 (3)	0.0319 (10)
H40A	0.4512	1.3983	-0.0781	0.048*
H40B	0.4034	1.3690	-0.0064	0.048*
H40C	0.4084	1.2872	-0.0858	0.048*
C41	0.82912 (19)	1.1045 (3)	0.3500 (2)	0.0136 (7)
C42	0.88448 (19)	1.1675 (3)	0.4058 (2)	0.0130 (7)
C43	0.87193 (19)	1.2131 (3)	0.4849 (2)	0.0161 (8)
H43	0.8283	1.2054	0.5034	0.019*
C44	0.9243 (2)	1.2698 (3)	0.5357 (2)	0.0208 (8)
H44	0.9157	1.3021	0.5888	0.025*
C45	0.9888 (2)	1.2809 (3)	0.5114 (2)	0.0212 (9)
C46	1.0001 (2)	1.2349 (3)	0.4332 (2)	0.0215 (8)
H46	1.0440	1.2418	0.4153	0.026*
C47	0.94859 (19)	1.1793 (3)	0.3805 (2)	0.0173 (8)
H47	0.9572	1.1489	0.3267	0.021*

C48	1.0455 (2)	1.3396 (3)	0.5700 (2)	0.0323 (10)
H48A	1.0740	1.3795	0.5339	0.048*
H48B	1.0739	1.2867	0.6065	0.048*
H48C	1.0254	1.3910	0.6075	0.048*
C49	0.6605 (2)	0.7893 (3)	0.3108 (2)	0.0151 (8)
C50	0.6655 (2)	0.6689 (3)	0.3203 (2)	0.0176 (8)
C51	0.6159 (2)	0.6022 (3)	0.2732 (2)	0.0171 (8)
H51	0.5788	0.6337	0.2349	0.021*
C52	0.6203 (2)	0.4904 (3)	0.2821 (2)	0.0229 (9)
H52	0.5870	0.4459	0.2479	0.027*
C53	0.6722 (2)	0.4418 (3)	0.3395 (2)	0.0246 (9)
C54	0.7219 (2)	0.5089 (3)	0.3868 (2)	0.0241 (9)
H54	0.7582	0.4776	0.4264	0.029*
C55	0.7185 (2)	0.6202 (3)	0.3764 (2)	0.0202 (8)
H55	0.7532	0.6645	0.4082	0.024*
C56	0.6738 (2)	0.3198 (3)	0.3533 (3)	0.0362 (11)
H56A	0.7216	0.2948	0.3643	0.054*
H56B	0.6498	0.2837	0.3009	0.054*
H56C	0.6512	0.3017	0.4038	0.054*
C57	0.8255 (2)	0.8002 (3)	0.1982 (2)	0.0139 (8)
C58	0.81646 (19)	0.6797 (3)	0.1965 (2)	0.0146 (8)
C59	0.76113 (19)	0.6313 (3)	0.1440 (2)	0.0191 (8)
H59	0.7280	0.6756	0.1094	0.023*
C60	0.7538 (2)	0.5190 (3)	0.1416 (3)	0.0241 (9)
H60	0.7158	0.4870	0.1052	0.029*
C61	0.8017 (2)	0.4529 (3)	0.1921 (2)	0.0245 (9)
C62	0.8570 (2)	0.5018 (3)	0.2451 (2)	0.0231 (9)
H62	0.8897	0.4579	0.2808	0.028*
C63	0.86452 (19)	0.6136 (3)	0.2460 (2)	0.0188 (8)
H63	0.9032	0.6456	0.2810	0.023*
C64	0.7929 (3)	0.3304 (3)	0.1886 (3)	0.0432 (12)
H64A	0.8312	0.2960	0.2266	0.065*
H64B	0.7921	0.3052	0.1283	0.065*
H64C	0.7496	0.3108	0.2087	0.065*
C65	0.5648 (2)	1.0193 (3)	0.4140 (2)	0.0149 (8)
H65	0.5454	0.9784	0.3641	0.018*
C66	0.52289 (19)	1.0508 (3)	0.4743 (2)	0.0126 (7)
C67	0.5516 (2)	1.1111 (3)	0.5462 (2)	0.0160 (8)
H67	0.5239	1.1348	0.5878	0.019*

C68	0.6204 (2)	1.1368 (3)	0.5574 (2)	0.0197 (8)
H68	0.6410	1.1775	0.6068	0.024*
C69	0.6588 (2)	1.1020 (3)	0.4948 (2)	0.0161 (8)
H69	0.7064	1.1191	0.5023	0.019*
C70	0.4496 (2)	1.0156 (3)	0.4684 (2)	0.0148 (8)
C71	0.9239 (2)	1.0286 (3)	0.0847 (2)	0.0161 (8)
H71	0.9439	0.9865	0.1335	0.019*
C72	0.96465 (19)	1.0578 (3)	0.0227 (2)	0.0163 (8)
C73	0.9348 (2)	1.1208 (3)	-0.0482 (2)	0.0200 (9)
H73	0.9611	1.1436	-0.0917	0.024*
C74	0.8664 (2)	1.1497 (3)	-0.0544 (2)	0.0183 (8)
H74	0.8450	1.1917	-0.1025	0.022*
C75	0.8297 (2)	1.1165 (3)	0.0103 (2)	0.0160 (8)
H75	0.7828	1.1368	0.0058	0.019*
C76	1.0381 (2)	1.0218 (3)	0.0246 (2)	0.0177 (8)

Ek Çizelge 10. (9) kristalinin atomik yerdeğiştirme parametreleri ( $\text{\AA}^2$ )

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{12}$	$U^{13}$	$U^{23}$
Zn1	0.0127 (2)	0.0163 (2)	0.01528 (19)	0.00210 (19)	0.00272 (16)	-0.00207 (17)
Zn2	0.0139 (2)	0.0175 (2)	0.0189 (2)	-0.00305 (19)	0.00077 (16)	0.00476 (18)
Zn3	0.0115 (3)	0.01344 (19)	0.01577 (19)	-0.00085 (17)	0.00219 (16)	0.00244 (17)
Zn4	0.0120 (3)	0.0133 (2)	0.0149 (2)	0.00080 (18)	0.00251 (16)	-0.00128 (16)
N1	0.0163 (19)	0.0153 (15)	0.0151 (13)	-0.0018 (13)	0.0031 (12)	0.0040 (12)
N2	0.012 (2)	0.0215 (17)	0.0204 (14)	-0.0003 (14)	0.0068 (13)	0.0002 (13)
N3	0.0102 (18)	0.0145 (15)	0.0171 (14)	-0.0025 (13)	0.0047 (11)	-0.0034 (12)
N4	0.0061 (19)	0.0269 (18)	0.0279 (16)	0.0040 (14)	0.0042 (13)	-0.0005 (14)
O1	0.0243 (17)	0.0180 (13)	0.0177 (12)	-0.0008 (12)	0.0018 (10)	-0.0010 (10)
O2	0.0142 (15)	0.0221 (14)	0.0253 (13)	-0.0050 (12)	0.0032 (10)	0.0042 (11)
O3	0.0140 (15)	0.0247 (14)	0.0213 (12)	0.0057 (12)	0.0033 (10)	0.0001 (10)
O4	0.0184 (16)	0.0249 (15)	0.0215 (13)	0.0009 (12)	-0.0006 (10)	0.0059 (11)
O5	0.0230 (17)	0.0218 (14)	0.0163 (11)	-0.0077 (12)	0.0016 (11)	0.0003 (10)
O6	0.0193 (16)	0.0210 (14)	0.0204 (12)	-0.0018 (12)	0.0008 (10)	0.0007 (11)
O7	0.0189 (16)	0.0178 (13)	0.0214 (13)	0.0065 (11)	0.0051 (11)	0.0021 (10)
O8	0.0264 (17)	0.0160 (13)	0.0210 (12)	0.0024 (12)	0.0000 (11)	-0.0016 (11)
O9	0.0156 (16)	0.0209 (13)	0.0163 (11)	0.0037 (11)	0.0033 (10)	-0.0003 (10)
O10	0.0137 (16)	0.0222 (14)	0.0217 (12)	-0.0038 (11)	0.0004 (10)	0.0036 (10)
O11	0.0159 (16)	0.0241 (14)	0.0185 (12)	0.0018 (12)	0.0031 (10)	0.0075 (11)



O12	0.0162 (17)	0.0170 (13)	0.0191 (12)	0.0023 (11)	0.0036 (10)	0.0002 (10)
O13	0.0103 (16)	0.0146 (13)	0.0237 (13)	-0.0032 (11)	0.0030 (10)	0.0002 (10)
O14	0.0154 (16)	0.0228 (14)	0.0166 (12)	-0.0010 (11)	0.0036 (10)	-0.0056 (10)
O15	0.0168 (17)	0.0206 (14)	0.0230 (13)	0.0020 (12)	0.0008 (11)	0.0020 (11)
O16	0.0161 (16)	0.0147 (12)	0.0199 (13)	-0.0024 (11)	0.0018 (11)	0.0014 (10)
O17	0.0160 (16)	0.0123 (12)	0.0191 (12)	0.0025 (11)	0.0009 (10)	-0.0006 (10)
O18	0.0136 (16)	0.0205 (14)	0.0269 (13)	-0.0023 (11)	0.0020 (11)	-0.0033 (11)
O19	0.0146 (16)	0.0226 (14)	0.0202 (12)	-0.0015 (12)	0.0081 (11)	0.0001 (10)
O20	0.0174 (17)	0.0257 (15)	0.0286 (14)	0.0040 (13)	0.0093 (12)	-0.0008 (12)
O21	0.015 (2)	0.073 (3)	0.0232 (15)	0.0114 (16)	-0.0023 (13)	-0.0068 (14)
O22	0.025 (2)	0.112 (3)	0.0313 (17)	-0.020 (2)	-0.0062 (15)	0.0273 (19)
C1	0.017 (2)	0.0107 (17)	0.0203 (17)	0.0053 (15)	0.0001 (15)	0.0024 (13)
C2	0.014 (2)	0.0141 (17)	0.0171 (16)	0.0005 (15)	0.0013 (14)	0.0037 (13)
C3	0.021 (2)	0.020 (2)	0.0217 (17)	-0.0030 (17)	0.0052 (15)	-0.0015 (15)
C4	0.029 (3)	0.029 (2)	0.0189 (18)	0.0005 (19)	-0.0038 (16)	-0.0077 (16)
C5	0.034 (3)	0.019 (2)	0.0249 (19)	-0.0094 (19)	-0.0104 (17)	-0.0005 (15)
C6	0.019 (2)	0.035 (2)	0.031 (2)	-0.0128 (19)	0.0011 (16)	0.0060 (17)
C7	0.024 (2)	0.031 (2)	0.0171 (17)	-0.0038 (18)	0.0023 (15)	0.0034 (16)
C8	0.048 (3)	0.028 (2)	0.043 (2)	-0.017 (2)	-0.021 (2)	0.001 (2)
C9	0.017 (2)	0.0074 (16)	0.0175 (16)	0.0003 (14)	-0.0015 (14)	-0.0015 (13)
C10	0.016 (2)	0.0117 (17)	0.0187 (16)	0.0014 (15)	-0.0005 (14)	-0.0005 (13)
C11	0.018 (2)	0.026 (2)	0.0171 (16)	0.0004 (17)	0.0024 (14)	-0.0006 (14)
C12	0.016 (2)	0.029 (2)	0.0292 (19)	0.0064 (17)	0.0050 (15)	-0.0073 (17)
C13	0.019 (2)	0.0136 (18)	0.0269 (18)	0.0034 (16)	-0.0042 (15)	-0.0029 (15)
C14	0.024 (3)	0.029 (2)	0.0245 (19)	0.0009 (18)	-0.0011 (16)	0.0057 (16)
C15	0.015 (2)	0.023 (2)	0.0194 (17)	0.0008 (16)	0.0047 (14)	0.0004 (15)
C16	0.026 (2)	0.027 (2)	0.042 (2)	0.0132 (19)	-0.0059 (18)	0.0008 (19)
C17	0.020 (2)	0.0186 (18)	0.0117 (15)	0.0003 (17)	0.0065 (14)	0.0001 (14)
C18	0.022 (2)	0.0156 (18)	0.0205 (17)	-0.0034 (17)	0.0090 (15)	-0.0028 (14)
C19	0.033 (3)	0.024 (2)	0.0156 (17)	-0.0065 (19)	-0.0038 (15)	0.0035 (15)
C20	0.051 (3)	0.028 (2)	0.025 (2)	-0.018 (2)	-0.0045 (19)	-0.0018 (17)
C21	0.052 (3)	0.022 (2)	0.0259 (19)	-0.011 (2)	0.0125 (19)	-0.0063 (16)
C22	0.033 (3)	0.017 (2)	0.041 (2)	0.0033 (19)	0.0071 (19)	0.0034 (17)
C23	0.020 (2)	0.019 (2)	0.035 (2)	-0.0002 (17)	0.0019 (16)	-0.0024 (16)
C24	0.087 (4)	0.018 (2)	0.059 (3)	-0.015 (3)	0.015 (3)	-0.004 (2)
C25	0.021 (2)	0.0171 (18)	0.0164 (16)	0.0038 (16)	0.0142 (16)	0.0041 (15)
C26	0.020 (2)	0.0185 (18)	0.0143 (15)	-0.0010 (17)	0.0058 (14)	0.0014 (15)
C27	0.014 (2)	0.020 (2)	0.035 (2)	-0.0005 (17)	-0.0005 (16)	0.0016 (16)
C28	0.028 (3)	0.020 (2)	0.033 (2)	-0.0034 (18)	0.0026 (17)	0.0013 (16)

C29	0.046 (3)	0.0159 (19)	0.031 (2)	0.002 (2)	0.0064 (19)	0.0046 (17)
C30	0.043 (3)	0.023 (2)	0.027 (2)	0.007 (2)	-0.0082 (19)	0.0052 (17)
C31	0.039 (3)	0.021 (2)	0.0172 (17)	0.0027 (19)	-0.0026 (16)	-0.0014 (15)
C32	0.063 (4)	0.028 (2)	0.057 (3)	0.007 (3)	-0.008 (3)	0.001 (2)
C33	0.013 (2)	0.0059 (15)	0.0176 (16)	-0.0033 (14)	0.0008 (14)	-0.0026 (13)
C34	0.015 (2)	0.0092 (16)	0.0166 (16)	-0.0023 (15)	-0.0010 (13)	-0.0031 (13)
C35	0.015 (2)	0.0168 (18)	0.0176 (16)	-0.0006 (15)	0.0036 (14)	0.0006 (14)
C36	0.015 (2)	0.023 (2)	0.0254 (18)	-0.0005 (17)	0.0054 (15)	0.0001 (15)
C37	0.015 (2)	0.0164 (18)	0.0268 (19)	0.0003 (16)	-0.0045 (15)	0.0016 (15)
C38	0.027 (3)	0.024 (2)	0.0186 (17)	0.0037 (18)	0.0027 (16)	0.0077 (15)
C39	0.015 (2)	0.0213 (19)	0.0181 (16)	0.0036 (16)	0.0066 (14)	0.0009 (15)
C40	0.022 (3)	0.035 (2)	0.036 (2)	0.009 (2)	-0.0044 (18)	0.0085 (19)
C41	0.013 (2)	0.0072 (15)	0.0200 (16)	0.0009 (15)	0.0019 (14)	0.0006 (13)
C42	0.014 (2)	0.0097 (16)	0.0146 (15)	-0.0008 (14)	0.0009 (13)	0.0021 (13)
C43	0.010 (2)	0.021 (2)	0.0180 (17)	-0.0031 (16)	0.0058 (14)	0.0003 (15)
C44	0.023 (2)	0.022 (2)	0.0175 (17)	-0.0028 (17)	0.0023 (15)	-0.0026 (15)
C45	0.022 (2)	0.0175 (19)	0.0225 (18)	-0.0026 (17)	-0.0031 (15)	-0.0013 (15)
C46	0.011 (2)	0.024 (2)	0.0301 (19)	-0.0044 (16)	0.0026 (15)	-0.0024 (16)
C47	0.019 (2)	0.0198 (19)	0.0140 (15)	-0.0004 (16)	0.0042 (14)	-0.0014 (14)
C48	0.024 (3)	0.034 (2)	0.036 (2)	-0.0047 (19)	-0.0053 (18)	-0.0100 (18)
C49	0.015 (2)	0.0191 (19)	0.0133 (15)	-0.0023 (16)	0.0075 (14)	0.0030 (14)
C50	0.022 (2)	0.0149 (18)	0.0174 (16)	0.0022 (16)	0.0096 (15)	0.0029 (14)
C51	0.018 (2)	0.0178 (18)	0.0159 (16)	-0.0023 (16)	0.0045 (14)	0.0022 (14)
C52	0.032 (3)	0.021 (2)	0.0169 (17)	-0.0047 (18)	0.0072 (16)	-0.0020 (15)
C53	0.031 (3)	0.0122 (19)	0.033 (2)	0.0025 (17)	0.0135 (18)	0.0037 (16)
C54	0.022 (2)	0.020 (2)	0.030 (2)	0.0038 (17)	0.0038 (16)	0.0064 (16)
C55	0.013 (2)	0.021 (2)	0.0259 (18)	0.0013 (17)	0.0020 (15)	0.0020 (15)
C56	0.046 (3)	0.013 (2)	0.050 (3)	0.002 (2)	0.009 (2)	0.0016 (18)
C57	0.017 (2)	0.0149 (17)	0.0113 (15)	0.0013 (16)	0.0071 (14)	0.0012 (13)
C58	0.016 (2)	0.0145 (18)	0.0141 (15)	0.0007 (15)	0.0041 (13)	0.0005 (14)
C59	0.017 (2)	0.0152 (19)	0.0254 (18)	0.0017 (16)	0.0028 (15)	-0.0028 (15)
C60	0.020 (2)	0.021 (2)	0.032 (2)	-0.0043 (17)	0.0073 (17)	-0.0032 (16)
C61	0.033 (2)	0.0109 (18)	0.033 (2)	0.0032 (17)	0.0156 (18)	0.0018 (15)
C62	0.029 (2)	0.0191 (19)	0.0217 (18)	0.0044 (17)	0.0050 (16)	0.0018 (15)
C63	0.017 (2)	0.0184 (19)	0.0218 (17)	0.0012 (16)	0.0059 (15)	-0.0007 (14)
C64	0.051 (3)	0.017 (2)	0.066 (3)	0.000 (2)	0.021 (3)	0.001 (2)
C65	0.013 (2)	0.0140 (18)	0.0173 (16)	-0.0012 (15)	0.0001 (14)	0.0014 (14)
C66	0.010 (2)	0.0111 (17)	0.0162 (15)	0.0028 (14)	0.0017 (13)	0.0056 (13)
C67	0.014 (2)	0.0174 (18)	0.0179 (17)	-0.0014 (16)	0.0051 (14)	0.0015 (14)

C68	0.025 (3)	0.0165 (18)	0.0174 (17)	-0.0045 (17)	0.0032 (15)	-0.0013 (14)
C69	0.015 (2)	0.0169 (18)	0.0162 (16)	-0.0021 (16)	0.0003 (14)	0.0078 (14)
C70	0.013 (2)	0.0107 (17)	0.0221 (18)	0.0026 (15)	0.0057 (15)	0.0019 (14)
C71	0.014 (2)	0.0142 (17)	0.0195 (17)	0.0022 (16)	0.0015 (15)	-0.0008 (14)
C72	0.014 (2)	0.0163 (18)	0.0188 (17)	-0.0014 (16)	0.0039 (14)	-0.0053 (14)
C73	0.031 (3)	0.0155 (19)	0.0145 (17)	-0.0009 (17)	0.0082 (16)	-0.0008 (14)
C74	0.018 (2)	0.0193 (19)	0.0164 (16)	-0.0002 (16)	0.0001 (14)	-0.0006 (14)
C75	0.012 (2)	0.0176 (18)	0.0180 (16)	0.0007 (15)	0.0000 (14)	-0.0027 (14)
C76	0.019 (2)	0.0115 (18)	0.0228 (18)	-0.0029 (16)	0.0039 (16)	-0.0032 (14)

---

Ek Çizelge 11. (9) kristalinin geometrik parametreleri (Å, °)

---

Zn1—O1	1.964 (2)	C24—H24A	0.9800
Zn1—O3	1.939 (3)	C24—H24B	0.9800
Zn1—O7	2.505 (3)	C24—H24C	0.9800
Zn1—O8	1.975 (2)	C25—C26	1.482 (5)
Zn1—O9	1.966 (2)	C26—C27	1.379 (5)
Zn2—O2	1.942 (3)	C26—C31	1.390 (5)
Zn2—O4	1.967 (2)	C27—C28	1.382 (5)
Zn2—O5	2.467 (3)	C27—H27	0.9500
Zn2—O6	1.989 (3)	C28—C29	1.370 (6)
Zn2—O10	1.994 (2)	C28—H28	0.9500
Zn3—O11	1.926 (2)	C29—C30	1.394 (6)
Zn3—O13	1.967 (3)	C29—C32	1.498 (5)
Zn3—O16	1.932 (2)	C30—C31	1.383 (5)
Zn3—N1	2.047 (3)	C30—H30	0.9500
Zn4—O12	1.968 (3)	C31—H31	0.9500
Zn4—O14	1.924 (2)	C32—H32A	0.9800
Zn4—O17	1.940 (2)	C32—H32B	0.9800
Zn4—N3	2.036 (3)	C32—H32C	0.9800
N1—C65	1.336 (5)	C33—C34	1.484 (5)
N1—C69	1.347 (4)	C34—C39	1.378 (4)
N2—C70	1.328 (4)	C34—C35	1.398 (5)
N2—H2A	0.8800	C35—C36	1.382 (5)
N2—H2B	0.8800	C35—H35	0.9500
N3—C71	1.339 (5)	C36—C37	1.389 (5)
N3—C75	1.341 (4)	C36—H36	0.9500

N4—C76	1.318 (5)	C37—C38	1.391 (5)
N4—H4A	0.8800	C37—C40	1.507 (5)
N4—H4B	0.8800	C38—C39	1.375 (5)
O1—C1	1.255 (4)	C38—H38	0.9500
O2—C1	1.267 (4)	C39—H39	0.9500
O3—C9	1.255 (4)	C40—H40A	0.9800
O4—C9	1.261 (4)	C40—H40B	0.9800
O5—C17	1.262 (4)	C40—H40C	0.9800
O6—C17	1.275 (4)	C41—C42	1.500 (5)
O7—C25	1.268 (4)	C42—C47	1.385 (5)
O8—C25	1.267 (5)	C42—C43	1.399 (4)
O9—H91	0.9738	C43—C44	1.386 (5)
O9—H92	0.9734	C43—H43	0.9500
O10—H101	0.9719	C44—C45	1.385 (5)
O10—H102	0.9734	C44—H44	0.9500
O11—C33	1.258 (4)	C45—C46	1.383 (5)
O12—C33	1.272 (4)	C45—C48	1.510 (5)
O13—C41	1.261 (4)	C46—C47	1.382 (5)
O14—C41	1.256 (4)	C46—H46	0.9500
O15—C49	1.247 (4)	C47—H47	0.9500
O16—C49	1.290 (4)	C48—H48A	0.9800
O17—C57	1.295 (4)	C48—H48B	0.9800
O18—C57	1.233 (4)	C48—H48C	0.9800
O19—C70	1.257 (4)	C49—C50	1.489 (5)
O20—C76	1.235 (4)	C50—C55	1.388 (5)
O21—H211	0.9712	C50—C51	1.393 (5)
O21—H212	0.8577	C51—C52	1.382 (5)
O22—H221	0.9708	C51—H51	0.9500
O22—H222	0.9737	C52—C53	1.384 (5)
C1—C2	1.496 (5)	C52—H52	0.9500
C2—C7	1.386 (5)	C53—C54	1.399 (5)
C2—C3	1.387 (4)	C53—C56	1.514 (5)
C3—C4	1.391 (5)	C54—C55	1.377 (5)
C3—H3	0.9500	C54—H54	0.9500
C4—C5	1.381 (5)	C55—H55	0.9500
C4—H4	0.9500	C56—H56A	0.9800
C5—C6	1.383 (5)	C56—H56B	0.9800
C5—C8	1.522 (5)	C56—H56C	0.9800
C6—C7	1.383 (5)	C57—C58	1.490 (5)

C6—H6	0.9500	C58—C63	1.387 (5)
C7—H7	0.9500	C58—C59	1.390 (5)
C8—H8A	0.9800	C59—C60	1.388 (5)
C8—H8B	0.9800	C59—H59	0.9500
C8—H8C	0.9800	C60—C61	1.391 (5)
C9—C10	1.485 (5)	C60—H60	0.9500
C10—C15	1.390 (5)	C61—C62	1.396 (6)
C10—C11	1.398 (5)	C61—C64	1.516 (5)
C11—C12	1.380 (5)	C62—C63	1.381 (5)
C11—H11	0.9500	C62—H62	0.9500
C12—C13	1.391 (5)	C63—H63	0.9500
C12—H12	0.9500	C64—H64A	0.9800
C13—C14	1.386 (5)	C64—H64B	0.9800
C13—C16	1.501 (5)	C64—H64C	0.9800
C14—C15	1.391 (5)	C65—C66	1.391 (5)
C14—H14	0.9500	C65—H65	0.9500
C15—H15	0.9500	C66—C67	1.383 (5)
C16—H16A	0.9800	C66—C70	1.496 (5)
C16—H16B	0.9800	C67—C68	1.378 (5)
C16—H16C	0.9800	C67—H67	0.9500
C17—C18	1.486 (5)	C68—C69	1.382 (5)
C18—C19	1.385 (5)	C68—H68	0.9500
C18—C23	1.392 (5)	C69—H69	0.9500
C19—C20	1.377 (5)	C71—C72	1.387 (5)
C19—H19	0.9500	C71—H71	0.9500
C20—C21	1.384 (6)	C72—C73	1.397 (5)
C20—H20	0.9500	C72—C76	1.509 (5)
C21—C22	1.387 (6)	C73—C74	1.382 (5)
C21—C24	1.507 (5)	C73—H73	0.9500
C22—C23	1.384 (5)	C74—C75	1.381 (5)
C22—H22	0.9500	C74—H74	0.9500
C23—H23	0.9500	C75—H75	0.9500
O3—Zn1—O1	107.92 (10)	C26—C27—H27	119.5
O3—Zn1—O9	101.01 (10)	C28—C27—H27	119.5
O1—Zn1—O9	102.14 (10)	C29—C28—C27	120.9 (4)
O3—Zn1—O8	135.45 (11)	C29—C28—H28	119.5
O1—Zn1—O8	97.87 (10)	C27—C28—H28	119.5
O9—Zn1—O8	108.41 (10)	C28—C29—C30	118.2 (4)
O3—Zn1—C25	114.78 (12)	C28—C29—C32	121.4 (4)

O1—Zn1—C25	126.49 (11)	C30—C29—C32	120.4 (4)
O9—Zn1—C25	99.84 (10)	C31—C30—C29	121.2 (4)
O8—Zn1—C25	28.64 (11)	C31—C30—H30	119.4
O2—Zn2—O4	107.30 (10)	C29—C30—H30	119.4
O2—Zn2—O6	142.57 (11)	C30—C31—C26	119.9 (4)
O4—Zn2—O6	100.23 (11)	C30—C31—H31	120.1
O2—Zn2—O10	97.18 (10)	C26—C31—H31	120.1
O4—Zn2—O10	99.04 (10)	C29—C32—H32A	109.5
O6—Zn2—O10	103.10 (10)	C29—C32—H32B	109.5
O2—Zn2—O5	90.36 (10)	H32A—C32—H32B	109.5
O4—Zn2—O5	157.49 (9)	C29—C32—H32C	109.5
O6—Zn2—O5	58.03 (9)	H32A—C32—H32C	109.5
O10—Zn2—O5	92.28 (9)	H32B—C32—H32C	109.5
O2—Zn2—C17	117.82 (12)	O11—C33—O12	124.9 (3)
O4—Zn2—C17	129.36 (11)	O11—C33—C34	116.8 (3)
O6—Zn2—C17	29.17 (11)	O12—C33—C34	118.3 (3)
O10—Zn2—C17	97.06 (10)	C39—C34—C35	118.4 (3)
O5—Zn2—C17	28.95 (10)	C39—C34—C33	122.1 (3)
O11—Zn3—O16	126.93 (10)	C35—C34—C33	119.5 (3)
O11—Zn3—O13	107.64 (10)	C36—C35—C34	120.2 (3)
O16—Zn3—O13	109.04 (11)	C36—C35—H35	119.9
O11—Zn3—N1	101.55 (11)	C34—C35—H35	119.9
O16—Zn3—N1	109.37 (11)	C35—C36—C37	121.2 (4)
O13—Zn3—N1	98.49 (11)	C35—C36—H36	119.4
O14—Zn4—O17	124.32 (10)	C37—C36—H36	119.4
O14—Zn4—O12	107.99 (10)	C36—C37—C38	118.0 (3)
O17—Zn4—O12	107.01 (11)	C36—C37—C40	121.5 (4)
O14—Zn4—N3	103.33 (11)	C38—C37—C40	120.5 (3)
O17—Zn4—N3	112.65 (11)	C39—C38—C37	120.8 (3)
O12—Zn4—N3	98.50 (11)	C39—C38—H38	119.6
C65—N1—C69	118.6 (3)	C37—C38—H38	119.6
C65—N1—Zn3	122.1 (2)	C38—C39—C34	121.4 (4)
C69—N1—Zn3	119.3 (3)	C38—C39—H39	119.3
C70—N2—H2A	120.0	C34—C39—H39	119.3
C70—N2—H2B	120.0	C37—C40—H40A	109.5
H2A—N2—H2B	120.0	C37—C40—H40B	109.5
C71—N3—C75	118.2 (3)	H40A—C40—H40B	109.5
C71—N3—Zn4	122.6 (2)	C37—C40—H40C	109.5
C75—N3—Zn4	119.2 (2)	H40A—C40—H40C	109.5

C76—N4—H4A	120.0	H40B—C40—H40C	109.5
C76—N4—H4B	120.0	O14—C41—O13	125.7 (3)
H4A—N4—H4B	120.0	O14—C41—C42	116.3 (3)
C1—O1—Zn1	127.3 (2)	O13—C41—C42	118.1 (3)
C1—O2—Zn2	137.6 (2)	C47—C42—C43	119.6 (3)
C9—O3—Zn1	127.7 (2)	C47—C42—C41	120.4 (3)
C9—O4—Zn2	137.8 (3)	C43—C42—C41	120.0 (3)
C17—O5—Zn2	79.8 (2)	C44—C43—C42	118.7 (3)
C17—O6—Zn2	101.3 (2)	C44—C43—H43	120.6
C25—O8—Zn1	103.0 (2)	C42—C43—H43	120.6
Zn1—O9—H91	116.3	C45—C44—C43	122.1 (3)
Zn1—O9—H92	109.9	C45—C44—H44	119.0
H91—O9—H92	106.5	C43—C44—H44	119.0
Zn2—O10—H101	113.1	C46—C45—C44	118.2 (3)
Zn2—O10—H102	103.6	C46—C45—C48	121.1 (4)
H101—O10—H102	106.5	C44—C45—C48	120.7 (3)
C33—O11—Zn3	143.6 (3)	C47—C46—C45	121.0 (4)
C33—O12—Zn4	130.1 (2)	C47—C46—H46	119.5
C41—O13—Zn3	131.9 (2)	C45—C46—H46	119.5
C41—O14—Zn4	141.2 (3)	C46—C47—C42	120.4 (3)
C49—O16—Zn3	109.4 (2)	C46—C47—H47	119.8
C57—O17—Zn4	108.2 (2)	C42—C47—H47	119.8
H211—O21—H212	110.9	C45—C48—H48A	109.5
H221—O22—H222	106.5	C45—C48—H48B	109.5
O1—C1—O2	125.4 (3)	H48A—C48—H48B	109.5
O1—C1—C2	117.3 (3)	C45—C48—H48C	109.5
O2—C1—C2	117.3 (3)	H48A—C48—H48C	109.5
C7—C2—C3	119.1 (3)	H48B—C48—H48C	109.5
C7—C2—C1	119.8 (3)	O15—C49—O16	122.8 (3)
C3—C2—C1	121.0 (3)	O15—C49—C50	121.0 (3)
C2—C3—C4	119.9 (4)	O16—C49—C50	116.2 (3)
C2—C3—H3	120.0	C55—C50—C51	118.4 (3)
C4—C3—H3	120.0	C55—C50—C49	121.5 (3)
C5—C4—C3	120.9 (3)	C51—C50—C49	120.2 (3)
C5—C4—H4	119.5	C52—C51—C50	120.3 (4)
C3—C4—H4	119.5	C52—C51—H51	119.9
C4—C5—C6	118.8 (3)	C50—C51—H51	119.9
C4—C5—C8	121.4 (3)	C51—C52—C53	121.5 (4)
C6—C5—C8	119.7 (4)	C51—C52—H52	119.3

C5—C6—C7	120.7 (4)	C53—C52—H52	119.3
C5—C6—H6	119.6	C52—C53—C54	118.1 (3)
C7—C6—H6	119.6	C52—C53—C56	121.0 (4)
C6—C7—C2	120.5 (3)	C54—C53—C56	120.8 (4)
C6—C7—H7	119.8	C55—C54—C53	120.4 (4)
C2—C7—H7	119.8	C55—C54—H54	119.8
C5—C8—H8A	109.5	C53—C54—H54	119.8
C5—C8—H8B	109.5	C54—C55—C50	121.3 (4)
H8A—C8—H8B	109.5	C54—C55—H55	119.3
C5—C8—H8C	109.5	C50—C55—H55	119.3
H8A—C8—H8C	109.5	C53—C56—H56A	109.5
H8B—C8—H8C	109.5	C53—C56—H56B	109.5
O3—C9—O4	125.1 (3)	H56A—C56—H56B	109.5
O3—C9—C10	117.3 (3)	C53—C56—H56C	109.5
O4—C9—C10	117.7 (3)	H56A—C56—H56C	109.5
C15—C10—C11	117.9 (3)	H56B—C56—H56C	109.5
C15—C10—C9	121.3 (3)	O18—C57—O17	122.6 (3)
C11—C10—C9	120.8 (3)	O18—C57—C58	121.6 (3)
C12—C11—C10	121.1 (3)	O17—C57—C58	115.8 (3)
C12—C11—H11	119.4	C63—C58—C59	118.7 (3)
C10—C11—H11	119.4	C63—C58—C57	120.2 (3)
C11—C12—C13	121.1 (3)	C59—C58—C57	121.1 (3)
C11—C12—H12	119.5	C60—C59—C58	120.7 (3)
C13—C12—H12	119.5	C60—C59—H59	119.6
C14—C13—C12	117.9 (3)	C58—C59—H59	119.6
C14—C13—C16	120.9 (3)	C59—C60—C61	120.4 (4)
C12—C13—C16	121.2 (3)	C59—C60—H60	119.8
C13—C14—C15	121.4 (3)	C61—C60—H60	119.8
C13—C14—H14	119.3	C60—C61—C62	118.8 (3)
C15—C14—H14	119.3	C60—C61—C64	119.7 (4)
C10—C15—C14	120.6 (3)	C62—C61—C64	121.6 (4)
C10—C15—H15	119.7	C63—C62—C61	120.4 (4)
C14—C15—H15	119.7	C63—C62—H62	119.8
C13—C16—H16A	109.5	C61—C62—H62	119.8
C13—C16—H16B	109.5	C62—C63—C58	121.0 (4)
H16A—C16—H16B	109.5	C62—C63—H63	119.5
C13—C16—H16C	109.5	C58—C63—H63	119.5
H16A—C16—H16C	109.5	C61—C64—H64A	109.5
H16B—C16—H16C	109.5	C61—C64—H64B	109.5



O5—C17—O6	120.4 (3)	H64A—C64—H64B	109.5
O5—C17—C18	120.9 (3)	C61—C64—H64C	109.5
O6—C17—C18	118.6 (3)	H64A—C64—H64C	109.5
O5—C17—Zn2	71.2 (2)	H64B—C64—H64C	109.5
O6—C17—Zn2	49.49 (17)	N1—C65—C66	122.2 (3)
C18—C17—Zn2	166.5 (3)	N1—C65—H65	118.9
C19—C18—C23	118.0 (3)	C66—C65—H65	118.9
C19—C18—C17	121.6 (4)	C67—C66—C65	118.4 (3)
C23—C18—C17	120.4 (4)	C67—C66—C70	118.5 (3)
C20—C19—C18	120.9 (4)	C65—C66—C70	123.0 (3)
C20—C19—H19	119.6	C68—C67—C66	119.9 (3)
C18—C19—H19	119.6	C68—C67—H67	120.0
C19—C20—C21	121.5 (4)	C66—C67—H67	120.0
C19—C20—H20	119.3	C67—C68—C69	118.3 (3)
C21—C20—H20	119.3	C67—C68—H68	120.8
C20—C21—C22	117.9 (4)	C69—C68—H68	120.8
C20—C21—C24	121.7 (4)	N1—C69—C68	122.6 (4)
C22—C21—C24	120.4 (4)	N1—C69—H69	118.7
C23—C22—C21	120.9 (4)	C68—C69—H69	118.7
C23—C22—H22	119.5	O19—C70—N2	122.2 (4)
C21—C22—H22	119.5	O19—C70—C66	118.0 (3)
C22—C23—C18	120.8 (4)	N2—C70—C66	119.8 (3)
C22—C23—H23	119.6	N3—C71—C72	123.3 (3)
C18—C23—H23	119.6	N3—C71—H71	118.4
C21—C24—H24A	109.5	C72—C71—H71	118.4
C21—C24—H24B	109.5	C71—C72—C73	117.8 (4)
H24A—C24—H24B	109.5	C71—C72—C76	124.3 (3)
C21—C24—H24C	109.5	C73—C72—C76	117.9 (3)
H24A—C24—H24C	109.5	C74—C73—C72	119.1 (3)
H24B—C24—H24C	109.5	C74—C73—H73	120.4
O8—C25—O7	120.5 (3)	C72—C73—H73	120.4
O8—C25—C26	120.0 (3)	C75—C74—C73	119.1 (3)
O7—C25—C26	119.6 (4)	C75—C74—H74	120.4
O8—C25—Zn1	48.34 (17)	C73—C74—H74	120.4
O7—C25—Zn1	72.5 (2)	N3—C75—C74	122.5 (3)
C26—C25—Zn1	166.7 (3)	N3—C75—H75	118.7
C27—C26—C31	118.7 (3)	C74—C75—H75	118.7
C27—C26—C25	121.2 (4)	O20—C76—N4	123.7 (4)
C31—C26—C25	120.2 (4)	O20—C76—C72	117.8 (3)

C26—C27—C28	121.1 (4)	N4—C76—C72	118.5 (3)
O11—Zn3—N1—C65	61.7 (3)	C17—C18—C23—C22	-178.0 (3)
O16—Zn3—N1—C65	-74.5 (3)	Zn1—O8—C25—O7	-7.9 (4)
O13—Zn3—N1—C65	171.8 (3)	Zn1—O8—C25—C26	172.1 (3)
O11—Zn3—N1—C69	-118.8 (3)	O3—Zn1—C25—O8	-142.4 (2)
O16—Zn3—N1—C69	105.0 (3)	O1—Zn1—C25—O8	-2.6 (3)
O13—Zn3—N1—C69	-8.7 (3)	O9—Zn1—C25—O8	110.6 (2)
O14—Zn4—N3—C71	63.8 (3)	O3—Zn1—C25—O7	30.5 (2)
O17—Zn4—N3—C71	-72.9 (3)	O1—Zn1—C25—O7	170.20 (18)
O12—Zn4—N3—C71	174.6 (3)	O9—Zn1—C25—O7	-76.6 (2)
O14—Zn4—N3—C75	-117.9 (3)	O8—Zn1—C25—O7	172.8 (4)
O17—Zn4—N3—C75	105.4 (3)	O3—Zn1—C25—C26	-173.6 (11)
O12—Zn4—N3—C75	-7.1 (3)	O1—Zn1—C25—C26	-33.8 (11)
O3—Zn1—O1—C1	77.9 (3)	O9—Zn1—C25—C26	79.4 (11)
O9—Zn1—O1—C1	-176.1 (3)	O8—Zn1—C25—C26	-31.2 (10)
O8—Zn1—O1—C1	-65.3 (3)	O8—C25—C26—C27	171.7 (4)
C25—Zn1—O1—C1	-64.0 (3)	O7—C25—C26—C27	-8.3 (5)
O4—Zn2—O2—C1	-57.6 (4)	Zn1—C25—C26—C27	-161.8 (9)
O6—Zn2—O2—C1	77.8 (4)	O8—C25—C26—C31	-7.8 (5)
O10—Zn2—O2—C1	-159.5 (4)	O7—C25—C26—C31	172.2 (3)
O5—Zn2—O2—C1	108.2 (4)	Zn1—C25—C26—C31	18.7 (13)
C17—Zn2—O2—C1	98.6 (4)	C31—C26—C27—C28	1.1 (6)
O1—Zn1—O3—C9	-76.5 (3)	C25—C26—C27—C28	-178.4 (4)
O9—Zn1—O3—C9	176.7 (3)	C26—C27—C28—C29	-0.9 (6)
O8—Zn1—O3—C9	45.7 (3)	C27—C28—C29—C30	0.1 (6)
C25—Zn1—O3—C9	70.4 (3)	C27—C28—C29—C32	179.5 (4)
O2—Zn2—O4—C9	60.2 (4)	C28—C29—C30—C31	0.6 (7)
O6—Zn2—O4—C9	-94.1 (3)	C32—C29—C30—C31	-178.8 (4)
O10—Zn2—O4—C9	160.7 (3)	C29—C30—C31—C26	-0.4 (6)
O5—Zn2—O4—C9	-80.0 (5)	C27—C26—C31—C30	-0.4 (6)
C17—Zn2—O4—C9	-92.3 (4)	C25—C26—C31—C30	179.1 (4)
O2—Zn2—O5—C17	-162.3 (2)	Zn3—O11—C33—O12	7.3 (6)
O4—Zn2—O5—C17	-20.0 (4)	Zn3—O11—C33—C34	-173.4 (3)
O6—Zn2—O5—C17	-3.6 (2)	Zn4—O12—C33—O11	1.7 (5)
O10—Zn2—O5—C17	100.5 (2)	Zn4—O12—C33—C34	-177.6 (2)
O2—Zn2—O6—C17	40.1 (3)	O11—C33—C34—C39	179.5 (3)
O4—Zn2—O6—C17	177.2 (2)	O12—C33—C34—C39	-1.1 (5)
O10—Zn2—O6—C17	-80.9 (2)	O11—C33—C34—C35	-2.9 (5)
O5—Zn2—O6—C17	3.5 (2)	O12—C33—C34—C35	176.5 (3)

O3—Zn1—O8—C25	52.2 (3)	C39—C34—C35—C36	-0.3 (5)
O1—Zn1—O8—C25	177.9 (2)	C33—C34—C35—C36	-178.1 (3)
O9—Zn1—O8—C25	-76.5 (2)	C34—C35—C36—C37	1.4 (5)
O16—Zn3—O11—C33	-77.5 (4)	C35—C36—C37—C38	-1.4 (5)
O13—Zn3—O11—C33	54.4 (4)	C35—C36—C37—C40	177.4 (4)
N1—Zn3—O11—C33	157.3 (4)	C36—C37—C38—C39	0.3 (6)
O14—Zn4—O12—C33	-64.0 (3)	C40—C37—C38—C39	-178.5 (4)
O17—Zn4—O12—C33	72.0 (3)	C37—C38—C39—C34	0.8 (6)
N3—Zn4—O12—C33	-171.1 (3)	C35—C34—C39—C38	-0.8 (5)
O11—Zn3—O13—C41	-60.7 (3)	C33—C34—C39—C38	176.9 (3)
O16—Zn3—O13—C41	80.3 (3)	Zn4—O14—C41—O13	5.8 (6)
N1—Zn3—O13—C41	-165.7 (3)	Zn4—O14—C41—C42	-175.5 (3)
O17—Zn4—O14—C41	-68.0 (4)	Zn3—O13—C41—O14	0.6 (5)
O12—Zn4—O14—C41	58.4 (4)	Zn3—O13—C41—C42	-178.1 (2)
N3—Zn4—O14—C41	162.1 (4)	O14—C41—C42—C47	-10.0 (5)
O11—Zn3—O16—C49	-43.4 (3)	O13—C41—C42—C47	168.8 (3)
O13—Zn3—O16—C49	-174.8 (2)	O14—C41—C42—C43	171.2 (3)
N1—Zn3—O16—C49	78.6 (2)	O13—C41—C42—C43	-10.0 (5)
O14—Zn4—O17—C57	-45.3 (3)	C47—C42—C43—C44	0.4 (5)
O12—Zn4—O17—C57	-172.2 (2)	C41—C42—C43—C44	179.2 (3)
N3—Zn4—O17—C57	80.7 (2)	C42—C43—C44—C45	-1.2 (5)
Zn1—O1—C1—O2	-3.3 (5)	C43—C44—C45—C46	1.1 (5)
Zn1—O1—C1—C2	176.7 (2)	C43—C44—C45—C48	-177.7 (4)
Zn2—O2—C1—O1	-2.8 (6)	C44—C45—C46—C47	-0.2 (5)
Zn2—O2—C1—C2	177.1 (2)	C48—C45—C46—C47	178.7 (3)
O1—C1—C2—C7	-3.9 (5)	C45—C46—C47—C42	-0.6 (6)
O2—C1—C2—C7	176.1 (3)	C43—C42—C47—C46	0.5 (5)
O1—C1—C2—C3	175.4 (3)	C41—C42—C47—C46	-178.3 (3)
O2—C1—C2—C3	-4.5 (5)	Zn3—O16—C49—O15	2.5 (4)
C7—C2—C3—C4	-0.9 (5)	Zn3—O16—C49—C50	-176.1 (2)
C1—C2—C3—C4	179.7 (3)	O15—C49—C50—C55	-169.5 (3)
C2—C3—C4—C5	-0.3 (6)	O16—C49—C50—C55	9.1 (5)
C3—C4—C5—C6	1.1 (6)	O15—C49—C50—C51	9.7 (5)
C3—C4—C5—C8	-177.9 (4)	O16—C49—C50—C51	-171.8 (3)
C4—C5—C6—C7	-0.8 (6)	C55—C50—C51—C52	-0.7 (5)
C8—C5—C6—C7	178.3 (4)	C49—C50—C51—C52	-179.8 (3)
C5—C6—C7—C2	-0.5 (6)	C50—C51—C52—C53	2.3 (5)
C3—C2—C7—C6	1.3 (6)	C51—C52—C53—C54	-2.2 (5)
C1—C2—C7—C6	-179.4 (3)	C51—C52—C53—C56	175.7 (4)

Zn1—O3—C9—O4	3.2 (5)	C52—C53—C54—C55	0.5 (6)
Zn1—O3—C9—C10	-177.0 (2)	C56—C53—C54—C55	-177.5 (4)
Zn2—O4—C9—O3	0.7 (6)	C53—C54—C55—C50	1.2 (6)
Zn2—O4—C9—C10	-179.1 (2)	C51—C50—C55—C54	-1.0 (5)
O3—C9—C10—C15	1.7 (5)	C49—C50—C55—C54	178.1 (3)
O4—C9—C10—C15	-178.5 (3)	Zn4—O17—C57—O18	0.2 (4)
O3—C9—C10—C11	-179.6 (3)	Zn4—O17—C57—C58	-179.4 (2)
O4—C9—C10—C11	0.2 (5)	O18—C57—C58—C63	8.9 (5)
C15—C10—C11—C12	-0.4 (5)	O17—C57—C58—C63	-171.5 (3)
C9—C10—C11—C12	-179.1 (3)	O18—C57—C58—C59	-169.4 (3)
C10—C11—C12—C13	0.5 (6)	O17—C57—C58—C59	10.2 (5)
C11—C12—C13—C14	0.0 (6)	C63—C58—C59—C60	0.5 (5)
C11—C12—C13—C16	178.5 (3)	C57—C58—C59—C60	178.8 (3)
C12—C13—C14—C15	-0.5 (6)	C58—C59—C60—C61	0.3 (6)
C16—C13—C14—C15	-179.0 (4)	C59—C60—C61—C62	0.0 (6)
C11—C10—C15—C14	-0.1 (5)	C59—C60—C61—C64	-180.0 (4)
C9—C10—C15—C14	178.6 (3)	C60—C61—C62—C63	-1.1 (5)
C13—C14—C15—C10	0.6 (6)	C64—C61—C62—C63	178.9 (4)
Zn2—O5—C17—O6	5.5 (3)	C61—C62—C63—C58	1.9 (5)
Zn2—O5—C17—C18	-173.5 (3)	C59—C58—C63—C62	-1.6 (5)
Zn2—O6—C17—O5	-6.8 (4)	C57—C58—C63—C62	-179.9 (3)
Zn2—O6—C17—C18	172.2 (3)	C69—N1—C65—C66	0.4 (5)
O2—Zn2—C17—O5	20.1 (2)	Zn3—N1—C65—C66	179.9 (2)
O4—Zn2—C17—O5	170.26 (17)	N1—C65—C66—C67	0.6 (5)
O6—Zn2—C17—O5	173.8 (4)	N1—C65—C66—C70	-174.9 (3)
O10—Zn2—C17—O5	-81.9 (2)	C65—C66—C67—C68	-1.2 (5)
O2—Zn2—C17—O6	-153.7 (2)	C70—C66—C67—C68	174.5 (3)
O4—Zn2—C17—O6	-3.5 (3)	C66—C67—C68—C69	0.8 (5)
O10—Zn2—C17—O6	104.3 (2)	C65—N1—C69—C68	-0.9 (5)
O5—Zn2—C17—O6	-173.8 (4)	Zn3—N1—C69—C68	179.5 (3)
O2—Zn2—C17—C18	175.6 (10)	C67—C68—C69—N1	0.3 (5)
O4—Zn2—C17—C18	-34.2 (11)	C67—C66—C70—O19	-13.7 (5)
O6—Zn2—C17—C18	-30.7 (9)	C65—C66—C70—O19	161.8 (3)
O10—Zn2—C17—C18	73.6 (10)	C67—C66—C70—N2	166.0 (3)
O5—Zn2—C17—C18	155.5 (11)	C65—C66—C70—N2	-18.5 (5)
O5—C17—C18—C19	175.2 (3)	C75—N3—C71—C72	-0.2 (5)
O6—C17—C18—C19	-3.8 (5)	Zn4—N3—C71—C72	178.1 (3)
Zn2—C17—C18—C19	22.4 (12)	N3—C71—C72—C73	0.8 (5)
O5—C17—C18—C23	-6.8 (5)	N3—C71—C72—C76	-176.3 (3)

O6—C17—C18—C23	174.2 (3)	C71—C72—C73—C74	-1.1 (5)
Zn2—C17—C18—C23	-159.5 (8)	C76—C72—C73—C74	176.3 (3)
C23—C18—C19—C20	-0.3 (6)	C72—C73—C74—C75	0.8 (5)
C17—C18—C19—C20	177.8 (4)	C71—N3—C75—C74	0.0 (5)
C18—C19—C20—C21	-0.2 (6)	Zn4—N3—C75—C74	-178.4 (3)
C19—C20—C21—C22	0.7 (6)	C73—C74—C75—N3	-0.3 (5)
C19—C20—C21—C24	-179.8 (4)	C71—C72—C76—O20	166.0 (3)
C20—C21—C22—C23	-0.8 (6)	C73—C72—C76—O20	-11.1 (5)
C24—C21—C22—C23	179.6 (4)	C71—C72—C76—N4	-14.5 (5)
C21—C22—C23—C18	0.4 (6)	C73—C72—C76—N4	168.4 (3)
C19—C18—C23—C22	0.1 (6)		

Ek Çizelge 12. (9) kristalinin hidrojen bağı geometrisi (Å, °)

<i>D—H...A</i>	<i>D—H</i>	<i>H...A</i>	<i>D...A</i>	<i>D—H...A</i>
N2—H2A...O5 <sup>i</sup>	0.88	2.29	3.161 (4)	173
N2—H2B...O21	0.88	2.06	2.918 (4)	165
N4—H4A...O7 <sup>ii</sup>	0.88	2.19	3.061 (4)	168
N4—H4B...O22	0.88	2.08	2.939 (5)	166
O9—H91...O5 <sup>iii</sup>	0.97	1.65	2.602 (3)	166
O9—H92...O19 <sup>iv</sup>	0.97	1.68	2.644 (4)	172
O10—H101...O20 <sup>v</sup>	0.97	1.67	2.639 (4)	176
O10—H102...O7 <sup>vi</sup>	0.97	1.78	2.649 (3)	147
O21—H211...O15	0.97	1.94	2.869 (4)	159
O21—H212...O19 <sup>vii</sup>	0.86	2.29	3.138 (4)	171
O22—H221...O20 <sup>viii</sup>	0.97	2.23	3.164 (4)	160
O22—H222...O18	0.97	1.90	2.802 (5)	152
C65—H65...O21	0.95	2.37	3.282 (4)	161
C71—H71...O22	0.95	2.33	3.256 (5)	165

Simetri kodları: (i)  $x, y+1, z$ ; (ii)  $x+1, y+1, z$ ; (iii)  $x, -y, z-1/2$ ; (iv)  $x, -y+1, z-1/2$ ; (v)  $x-1, -y+1, z+1/2$ ; (vi)  $x, -y, z+1/2$ ; (vii)  $x, -y+2, z-1/2$ ; (viii)  $x, -y+2, z+1/2$ .

Ek Çizelge 13. (11) kristalinin fraksiyonel atomik koordinatları ve izotropik veya eşdeğer izotropik yerdeğiştirme parametreleri (Å<sup>2</sup>)

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$U_{\text{iso}}^*/U_{\text{eq}}$
Pb1	0.455879 (7)	0.261390 (11)	0.672516 (4)	0.01364 (4)
O1	0.26579 (14)	0.3383 (2)	0.61028 (9)	0.0203 (4)
O2	0.38915 (13)	0.5234 (2)	0.62939 (9)	0.0165 (4)
O3	0.59356 (13)	0.3990 (2)	0.63203 (9)	0.0187 (4)
O4	0.59623 (14)	0.4377 (2)	0.74604 (9)	0.0198 (4)
O5	0.42873 (14)	0.1659 (2)	0.53563 (9)	0.0207 (4)
N1	0.39370 (16)	0.1149 (3)	0.28403 (10)	0.0148 (4)
N2	0.53688 (17)	0.3091 (3)	0.48605 (12)	0.0185 (4)
H2A	0.566 (2)	0.351 (4)	0.5262 (17)	0.023 (8)*
H2B	0.552 (2)	0.347 (4)	0.4480 (17)	0.028 (8)*
C1	0.29883 (19)	0.4848 (3)	0.60520 (12)	0.0154 (5)
C2	0.23623 (19)	0.6286 (3)	0.56937 (13)	0.0157 (5)
C3	0.26372 (19)	0.8006 (3)	0.58144 (13)	0.0176 (5)
H3	0.3189	0.8277	0.6157	0.021*
C4	0.2096 (2)	0.9319 (3)	0.54282 (13)	0.0186 (5)
H4	0.2277	1.0464	0.5524	0.022*
C5	0.1285 (2)	0.8938 (3)	0.48978 (13)	0.0198 (5)
C6	0.0983 (2)	0.7224 (4)	0.48013 (15)	0.0227 (6)
H6	0.0423	0.6958	0.4466	0.027*
C7	0.1510 (2)	0.5900 (3)	0.52003 (13)	0.0201 (5)
H7	0.1293	0.4764	0.5138	0.024*
C8	0.0763 (2)	1.0343 (4)	0.44306 (15)	0.0275 (6)
H8A	0.0096	1.0025	0.4265	0.041*
H8B	0.1060	1.0507	0.4030	0.041*
H8C	0.0800	1.1398	0.4698	0.041*
C9	0.63657 (19)	0.4482 (3)	0.69346 (12)	0.0156 (5)
C10	0.73759 (19)	0.5183 (3)	0.70341 (13)	0.0165 (5)
C11	0.7859 (2)	0.5820 (3)	0.76893 (13)	0.0206 (5)
H11	0.7547	0.5834	0.8070	0.025*
C12	0.8796 (2)	0.6431 (3)	0.77827 (14)	0.0246 (6)
H12	0.9103	0.6877	0.8223	0.030*
C13	0.9291 (2)	0.6390 (3)	0.72244 (15)	0.0230 (6)
C14	0.8792 (2)	0.5788 (3)	0.65661 (14)	0.0227 (6)
H14	0.9099	0.5787	0.6184	0.027*
C15	0.7850 (2)	0.5191 (3)	0.64661 (13)	0.0195 (5)
H15	0.7531	0.4794	0.6021	0.023*
C16	1.0339 (2)	0.6892 (4)	0.73324 (19)	0.0350 (7)
H16A	1.0436	0.7559	0.6932	0.053*

H16B	1.0733	0.5870	0.7375	0.053*
H16C	1.0520	0.7568	0.7759	0.053*
C17	0.43980 (18)	0.1755 (3)	0.34748 (12)	0.0138 (5)
H17	0.4933	0.2468	0.3494	0.017*
C18	0.41142 (18)	0.1368 (3)	0.41091 (12)	0.0137 (5)
C19	0.33353 (19)	0.0266 (3)	0.40765 (13)	0.0181 (5)
H19	0.3133	-0.0039	0.4490	0.022*
C20	0.2860 (2)	-0.0379 (3)	0.34251 (13)	0.0199 (5)
H20	0.2337	-0.1125	0.3393	0.024*
C21	0.31782 (19)	0.0106 (3)	0.28202 (13)	0.0173 (5)
H21	0.2849	-0.0311	0.2381	0.021*
C22	0.46060 (19)	0.2068 (3)	0.48252 (13)	0.0146 (5)

Ek Çizelge 14. (11) kristalinin atomik yerdeğiştirme parametreleri ( $\text{\AA}^2$ )

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{12}$	$U^{13}$	$U^{23}$
Pb1	0.01661 (6)	0.01381 (6)	0.01057 (5)	0.00062 (3)	0.00306 (4)	0.00089 (3)
O1	0.0239 (11)	0.0159 (9)	0.0209 (9)	-0.0031 (7)	0.0044 (8)	0.0029 (7)
O2	0.0174 (10)	0.0166 (9)	0.0150 (8)	-0.0008 (7)	0.0023 (7)	0.0036 (6)
O3	0.0175 (10)	0.0249 (10)	0.0129 (8)	-0.0021 (7)	0.0018 (7)	-0.0025 (7)
O4	0.0211 (10)	0.0244 (10)	0.0144 (8)	0.0013 (7)	0.0051 (7)	-0.0013 (7)
O5	0.0240 (11)	0.0265 (10)	0.0129 (8)	-0.0046 (8)	0.0071 (7)	-0.0005 (7)
N1	0.0165 (11)	0.0153 (10)	0.0124 (9)	0.0012 (8)	0.0028 (8)	-0.0010 (7)
N2	0.0227 (12)	0.0222 (11)	0.0110 (10)	-0.0050 (9)	0.0046 (9)	-0.0013 (9)
C1	0.0197 (14)	0.0187 (12)	0.0086 (10)	-0.0009 (9)	0.0045 (9)	-0.0008 (8)
C2	0.0160 (13)	0.0183 (12)	0.0142 (11)	-0.0002 (9)	0.0061 (10)	0.0008 (9)
C3	0.0169 (13)	0.0197 (12)	0.0164 (12)	-0.0023 (10)	0.0037 (10)	-0.0008 (10)
C4	0.0226 (15)	0.0160 (12)	0.0187 (12)	0.0002 (10)	0.0079 (11)	0.0017 (9)
C5	0.0206 (14)	0.0216 (13)	0.0190 (12)	0.0046 (10)	0.0084 (11)	0.0022 (10)
C6	0.0177 (14)	0.0254 (14)	0.0229 (14)	0.0031 (10)	-0.0006 (11)	-0.0025 (10)
C7	0.0188 (14)	0.0196 (13)	0.0207 (12)	-0.0011 (10)	0.0016 (11)	-0.0002 (10)
C8	0.0293 (17)	0.0268 (15)	0.0265 (14)	0.0090 (12)	0.0065 (12)	0.0062 (11)
C9	0.0174 (13)	0.0152 (12)	0.0139 (11)	0.0038 (9)	0.0029 (10)	0.0002 (9)
C10	0.0171 (14)	0.0145 (12)	0.0159 (11)	0.0027 (9)	-0.0008 (10)	0.0005 (9)
C11	0.0221 (15)	0.0212 (13)	0.0171 (12)	0.0050 (10)	0.0010 (10)	-0.0021 (10)
C12	0.0246 (16)	0.0228 (14)	0.0210 (13)	0.0019 (11)	-0.0073 (11)	-0.0050 (10)
C13	0.0208 (15)	0.0138 (12)	0.0308 (14)	0.0003 (10)	-0.0028 (11)	0.0003 (10)

C14	0.0226 (15)	0.0224 (14)	0.0237 (13)	-0.0006 (11)	0.0061 (11)	0.0026 (10)
C15	0.0192 (14)	0.0213 (13)	0.0171 (12)	-0.0027 (10)	0.0021 (10)	-0.0005 (9)
C16	0.0229 (17)	0.0277 (16)	0.0500 (19)	-0.0039 (13)	-0.0019 (14)	0.0004 (14)
C17	0.0139 (12)	0.0131 (12)	0.0144 (11)	-0.0002 (9)	0.0034 (9)	0.0002 (8)
C18	0.0151 (13)	0.0135 (11)	0.0120 (11)	0.0022 (9)	0.0020 (9)	0.0003 (8)
C19	0.0179 (14)	0.0232 (13)	0.0147 (11)	-0.0011 (10)	0.0071 (10)	0.0017 (9)
C20	0.0165 (14)	0.0242 (14)	0.0185 (12)	-0.0061 (10)	0.0025 (10)	0.0018 (10)
C21	0.0168 (14)	0.0213 (13)	0.0126 (11)	-0.0010 (10)	0.0004 (10)	-0.0009 (9)
C22	0.0172 (13)	0.0141 (11)	0.0127 (11)	0.0018 (9)	0.0034 (9)	-0.0003 (9)

---

Ek Çizelge 15. (11) kristalinin geometrik parametreleri (Å, °)

---

Pb1—O1	2.7594 (19)	C9—O3	1.265 (3)
Pb1—O2	2.3141 (17)	C9—C10	1.499 (4)
Pb1—O3	2.4824 (18)	C10—C11	1.388 (3)
Pb1—O4	2.5672 (19)	C10—C15	1.397 (4)
Pb1—O5	2.6800 (16)	C11—C12	1.380 (4)
Pb1—N1 <sup>i</sup>	2.661 (2)	C11—H11	0.93
O1—C1	1.239 (3)	C12—H12	0.93
O2—C1	1.295 (3)	C13—C12	1.400 (4)
O4—C9	1.264 (3)	C13—C14	1.391 (4)
N1—Pb1 <sup>ii</sup>	2.661 (2)	C13—C16	1.500 (4)
N2—C22	1.327 (4)	C14—H14	0.93
N2—H2A	0.86 (3)	C15—C14	1.382 (4)
N2—H2B	0.85 (3)	C15—H15	0.93
C1—C2	1.495 (3)	C16—H16A	0.96
C2—C7	1.396 (4)	C16—H16B	0.96
C3—C2	1.393 (4)	C16—H16C	0.96
C3—C4	1.388 (4)	C17—N1	1.338 (3)
C3—H3	0.93	C17—C18	1.394 (3)
C4—C5	1.393 (4)	C17—H17	0.93
C4—H4	0.93	C18—C19	1.383 (3)
C5—C8	1.500 (4)	C18—C22	1.504 (3)
C6—C5	1.394 (4)	C19—C20	1.381 (3)
C6—C7	1.396 (4)	C19—H19	0.93
C6—H6	0.93	C20—H20	0.93
C7—H7	0.93	C21—N1	1.335 (3)



C8—H8A	0.96	C21—C20	1.384 (3)
C8—H8B	0.96	C21—H21	0.93
C8—H8C	0.96	C22—O5	1.241 (3)
O2—Pb1—O3	78.32 (6)	C5—C8—H8C	109.5
O2—Pb1—O4	86.45 (6)	H8A—C8—H8B	109.5
O3—Pb1—O4	51.71 (5)	H8A—C8—H8C	109.5
O2—Pb1—N1 <sup>i</sup>	78.11 (6)	H8B—C8—H8C	109.5
O3—Pb1—N1 <sup>i</sup>	120.84 (6)	O4—C9—O3	121.2 (2)
O4—Pb1—N1 <sup>i</sup>	73.37 (6)	O4—C9—C10	120.0 (2)
O2—Pb1—O5	85.89 (6)	O3—C9—C10	118.8 (2)
O3—Pb1—O5	76.61 (5)	C11—C10—C15	118.9 (3)
O4—Pb1—O5	128.23 (5)	C11—C10—C9	120.9 (2)
N1 <sup>i</sup> —Pb1—O5	152.50 (6)	C15—C10—C9	120.2 (2)
O2—Pb1—O1	51.09 (6)	C10—C11—H11	119.6
O3—Pb1—O1	121.69 (5)	C12—C11—C10	120.8 (3)
O4—Pb1—O1	133.51 (5)	C12—C11—H11	119.6
N1 <sup>i</sup> —Pb1—O1	79.28 (6)	C11—C12—C13	120.9 (2)
O5—Pb1—O1	73.26 (6)	C11—C12—H12	119.5
C1—O1—Pb1	83.35 (15)	C13—C12—H12	119.5
C1—O2—Pb1	102.76 (14)	C12—C13—C16	121.8 (3)
C9—O3—Pb1	95.09 (15)	C14—C13—C12	117.7 (3)
C9—O4—Pb1	91.18 (15)	C14—C13—C16	120.4 (3)
C22—O5—Pb1	137.38 (17)	C13—C14—H14	119.2
C21—N1—C17	118.0 (2)	C15—C14—C13	121.6 (3)
C21—N1—Pb1 <sup>ii</sup>	126.49 (15)	C15—C14—H14	119.2
C17—N1—Pb1 <sup>ii</sup>	115.32 (16)	C10—C15—H15	120.0
C22—N2—H2A	120 (2)	C14—C15—C10	120.0 (2)
C22—N2—H2B	120 (2)	C14—C15—H15	120.0
H2A—N2—H2B	119 (3)	C13—C16—H16A	109.5
O1—C1—O2	122.8 (2)	C13—C16—H16B	109.5
O1—C1—C2	121.5 (2)	C13—C16—H16C	109.5
O2—C1—C2	115.7 (2)	H16A—C16—H16B	109.5
C3—C2—C1	121.3 (2)	H16A—C16—H16C	109.5
C3—C2—C7	119.2 (2)	H16B—C16—H16C	109.5
C7—C2—C1	119.5 (2)	N1—C17—C18	123.1 (2)
C4—C3—C2	120.6 (2)	N1—C17—H17	118.4
C4—C3—H3	119.7	C18—C17—H17	118.4
C2—C3—H3	119.7	C17—C18—C22	124.0 (2)
C3—C4—C5	120.6 (2)	C19—C18—C17	117.8 (2)

C3—C4—H4	119.7	C19—C18—C22	118.1 (2)
C5—C4—H4	119.7	C18—C19—H19	120.3
C4—C5—C6	118.6 (2)	C20—C19—C18	119.5 (2)
C4—C5—C8	120.4 (2)	C20—C19—H19	120.3
C6—C5—C8	120.9 (3)	C19—C20—C21	118.8 (2)
C5—C6—C7	121.0 (3)	C19—C20—H20	120.6
C5—C6—H6	119.5	C21—C20—H20	120.6
C7—C6—H6	119.5	N1—C21—C20	122.8 (2)
C2—C7—H7	120.1	N1—C21—H21	118.6
C6—C7—C2	119.8 (2)	C20—C21—H21	118.6
C6—C7—H7	120.1	O5—C22—N2	122.9 (2)
C5—C8—H8A	109.5	O5—C22—C18	118.9 (2)
C5—C8—H8B	109.5	N2—C22—C18	118.2 (2)
O2—Pb1—O1—C1	1.22 (13)	C2—C3—C4—C5	-1.9 (4)
O3—Pb1—O1—C1	-35.24 (15)	C3—C4—C5—C6	5.0 (4)
O4—Pb1—O1—C1	30.06 (16)	C3—C4—C5—C8	-173.6 (2)
O5—Pb1—O1—C1	-97.21 (14)	C7—C6—C5—C4	-3.4 (4)
N1 <sup>i</sup> —Pb1—O1—C1	84.52 (14)	C7—C6—C5—C8	175.2 (3)
O1—Pb1—O2—C1	-1.19 (12)	C5—C6—C7—C2	-1.3 (4)
O3—Pb1—O2—C1	147.72 (14)	O4—C9—O3—Pb1	-9.4 (2)
O4—Pb1—O2—C1	-160.67 (14)	C10—C9—O3—Pb1	169.95 (19)
O5—Pb1—O2—C1	70.57 (14)	O3—C9—C10—C11	176.7 (2)
N1 <sup>i</sup> —Pb1—O2—C1	-86.93 (14)	O3—C9—C10—C15	-3.8 (4)
O1—Pb1—O3—C9	127.94 (14)	O4—C9—C10—C11	-3.9 (4)
O2—Pb1—O3—C9	99.77 (15)	O4—C9—C10—C15	175.6 (2)
O4—Pb1—O3—C9	5.02 (13)	C9—C10—C11—C12	178.7 (2)
O5—Pb1—O3—C9	-171.72 (15)	C15—C10—C11—C12	-0.8 (4)
N1 <sup>i</sup> —Pb1—O3—C9	31.39 (16)	C9—C10—C15—C14	-178.0 (2)
O1—Pb1—O4—C9	-105.01 (15)	C11—C10—C15—C14	1.5 (4)
O2—Pb1—O4—C9	-82.92 (14)	C10—C11—C12—C13	-1.4 (4)
O3—Pb1—O4—C9	-5.01 (13)	C14—C13—C12—C11	2.9 (4)
O5—Pb1—O4—C9	-0.98 (17)	C16—C13—C12—C11	-174.1 (3)
N1 <sup>i</sup> —Pb1—O4—C9	-161.56 (15)	C12—C13—C14—C15	-2.2 (4)
O1—Pb1—O5—C22	116.6 (3)	C16—C13—C14—C15	174.9 (3)
O2—Pb1—O5—C22	66.1 (3)	C10—C15—C14—C13	0.0 (4)
O3—Pb1—O5—C22	-12.9 (3)	C18—C17—N1—Pb1 <sup>ii</sup>	174.19 (18)
O4—Pb1—O5—C22	-16.1 (3)	C18—C17—N1—C21	-1.0 (4)
N1 <sup>i</sup> —Pb1—O5—C22	120.2 (3)	N1—C17—C18—C19	1.9 (4)
Pb1—O1—C1—O2	-2.0 (2)	N1—C17—C18—C22	-178.5 (2)

Pb1—O1—C1—C2	177.1 (2)	C17—C18—C19—C20	-1.2 (4)
Pb1—O2—C1—O1	2.5 (3)	C22—C18—C19—C20	179.1 (2)
Pb1—O2—C1—C2	-176.69 (16)	C17—C18—C22—O5	179.1 (2)
Pb1—O4—C9—O3	9.0 (2)	C17—C18—C22—N2	-1.3 (4)
Pb1—O4—C9—C10	-170.3 (2)	C19—C18—C22—O5	-1.3 (4)
O1—C1—C2—C3	160.7 (2)	C19—C18—C22—N2	178.3 (2)
O1—C1—C2—C7	-22.6 (3)	C18—C19—C20—C21	-0.2 (4)
O2—C1—C2—C3	-20.1 (3)	C20—C21—N1—Pb1 <sup>ii</sup>	-175.19 (19)
O2—C1—C2—C7	156.5 (2)	C20—C21—N1—C17	-0.6 (4)
C1—C2—C7—C6	-172.3 (2)	N1—C21—C20—C19	1.2 (4)
C3—C2—C7—C6	4.4 (4)	N2—C22—O5—Pb1	10.7 (4)
C4—C3—C2—C1	173.8 (2)	C18—C22—O5—Pb1	-169.76 (16)
C4—C3—C2—C7	-2.8 (4)		

Ek Çizelge 16. (11) kristalinin hidrojen bağı geometrisi (Å, °)

Cg3 ve Cg4 sırasıyla, N1/C17-C21 ve N3/C23-C27 halkalarının merkezleridir.

<i>D—H...A</i>	<i>D—H</i>	<i>H...A</i>	<i>D...A</i>	<i>D—H...A</i>
N2—H2A...O3	0.86 (3)	2.02 (3)	2.835 (3)	158 (3)
N2—H2B...O2 <sup>iii</sup>	0.86 (3)	2.11 (3)	2.946 (3)	167 (3)
C4—H4...O1 <sup>iv</sup>	0.93	2.53	3.431 (3)	165
C11—H11...O1 <sup>v</sup>	0.93	2.59	3.253 (3)	129
C17—H17...O2 <sup>iii</sup>	0.93	2.41	3.317 (3)	166

Simetri kodları: (i) -x-1, -y-1, -z-1; (ii) -x, -y, -z; (iii) -x, -y, -z+1; (iv) -x, -y-1, -z-; (v) -x+1, -y, -z-; (vi) x+1, y, z; (vii) x-1, y, z.

Ek Çizelge 17. (12) kristalinin fraksiyonel atomik koordinatları ve izotropik veya eşdeğer izotropik yerdeğiştirme parametreleri (Å<sup>2</sup>)

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U<sub>iso</sub>*/U<sub>eq</sub></i>
Mn1	0.29102 (3)	0.092307 (17)	0.156751 (12)	0.01457 (7)
Mn2	-0.02201 (3)	0.133661 (17)	0.112030 (12)	0.01425 (7)
Mn3	0.20220 (3)	0.461244 (17)	0.326281 (12)	0.01420 (7)

Mn4	0.51449 (3)	0.407633 (17)	0.366892 (12)	0.01429 (7)
O1	-0.00798 (14)	0.01586 (8)	0.14766 (6)	0.0216 (3)
O2	0.19077 (14)	-0.00928 (8)	0.16623 (6)	0.0215 (3)
O3	0.32961 (14)	0.13578 (8)	0.06967 (6)	0.0203 (3)
O4	0.13544 (14)	0.15161 (8)	0.04538 (6)	0.0210 (3)
O5	0.10170 (14)	0.28937 (8)	0.11920 (6)	0.0223 (3)
O6	-0.05798 (14)	0.25125 (8)	0.08837 (6)	0.0191 (3)
O7	0.05950 (15)	0.08986 (9)	0.26520 (6)	0.0245 (3)
O8	0.26278 (14)	0.05493 (9)	0.24495 (6)	0.0220 (3)
O9	0.11046 (14)	0.15084 (8)	0.16200 (6)	0.0164 (3)
H9A	0.085 (3)	0.1322 (15)	0.1999 (12)	0.046 (8)*
H9B	0.112 (3)	0.2027 (10)	0.1476 (13)	0.069 (11)*
O10	0.40261 (14)	0.18976 (8)	0.15298 (6)	0.0210 (3)
O11	-0.15129 (14)	0.11306 (8)	0.06165 (6)	0.0183 (3)
O12	0.35950 (14)	0.37541 (9)	0.43431 (6)	0.0217 (3)
O13	0.16363 (14)	0.39528 (8)	0.41208 (6)	0.0193 (3)
O14	0.49611 (14)	0.52498 (8)	0.34726 (6)	0.0222 (3)
O15	0.30051 (14)	0.55792 (8)	0.32796 (6)	0.0205 (3)
O16	0.42449 (14)	0.47310 (9)	0.21309 (6)	0.0236 (3)
O17	0.22779 (14)	0.51251 (8)	0.23789 (6)	0.0217 (3)
O18	0.38854 (15)	0.25966 (8)	0.35204 (6)	0.0243 (4)
O19	0.55809 (14)	0.29317 (8)	0.37939 (6)	0.0207 (3)
O20	0.65101 (13)	0.41069 (8)	0.41920 (6)	0.0187 (3)
O21	0.08786 (14)	0.37412 (8)	0.31793 (6)	0.0217 (3)
O22	0.37934 (14)	0.40100 (9)	0.31456 (6)	0.0160 (3)
H22A	0.406 (2)	0.4217 (14)	0.2775 (11)	0.035 (7)*
H22B	0.374 (3)	0.347 (2)	0.3269 (14)	0.081 (12)*
N1	-0.20574 (17)	0.12154 (10)	0.17872 (7)	0.0171 (4)
N2	0.47393 (17)	0.02732 (10)	0.14640 (7)	0.0172 (4)
N3	0.83418 (17)	0.05090 (10)	0.00421 (7)	0.0181 (4)
N4	0.45429 (17)	0.27187 (10)	0.19043 (7)	0.0195 (4)
N5	0.01818 (16)	0.51791 (10)	0.35032 (7)	0.0166 (4)
N6	0.68991 (16)	0.43439 (9)	0.29721 (7)	0.0168 (4)
N7	0.65443 (17)	0.44424 (10)	0.49232 (7)	0.0193 (4)
N8	0.03462 (17)	0.29462 (10)	0.27868 (7)	0.0179 (4)
C1	0.0784 (2)	-0.02758 (12)	0.16489 (8)	0.0169 (4)
C2	0.0427 (2)	-0.10932 (11)	0.18415 (8)	0.0169 (4)
C3	-0.0853 (2)	-0.13269 (12)	0.19115 (8)	0.0186 (4)
H3	-0.1495	-0.0980	0.1870	0.022*

C4	-0.1182 (2)	-0.20697 (12)	0.20415 (9)	0.0208 (5)
H4	-0.2045	-0.2217	0.2088	0.025*
C5	-0.0241 (2)	-0.25999 (12)	0.21033 (9)	0.0208 (5)
C6	0.1028 (2)	-0.23687 (12)	0.20604 (9)	0.0216 (5)
H6	0.1662	-0.2718	0.2120	0.026*
C7	0.1363 (2)	-0.16242 (12)	0.19306 (9)	0.0201 (5)
H7	0.2218	-0.1479	0.1903	0.024*
C8	-0.0587 (2)	-0.33925 (12)	0.21777 (10)	0.0281 (5)
H8A	0.0082	-0.3707	0.2316	0.042*
H8B	-0.0667	-0.3431	0.1834	0.042*
H8C	-0.1395	-0.3545	0.2431	0.042*
C9	0.2572 (2)	0.15832 (11)	0.03538 (8)	0.0165 (4)
C10	0.3218 (2)	0.19464 (11)	-0.02273 (8)	0.0171 (4)
C11	0.2489 (2)	0.23152 (12)	-0.06148 (9)	0.0210 (5)
H11	0.1593	0.2321	-0.0513	0.025*
C12	0.3087 (2)	0.26728 (13)	-0.11504 (9)	0.0248 (5)
H12	0.2587	0.2920	-0.1403	0.030*
C13	0.4422 (2)	0.26688 (12)	-0.13162 (9)	0.0233 (5)
C14	0.5145 (2)	0.22896 (13)	-0.09326 (9)	0.0238 (5)
H14	0.6037	0.2270	-0.1037	0.029*
C15	0.4551 (2)	0.19386 (12)	-0.03941 (9)	0.0201 (5)
H15	0.5054	0.1695	-0.0142	0.024*
C16	0.5066 (3)	0.30636 (14)	-0.18978 (9)	0.0347 (6)
H16A	0.4432	0.3328	-0.2097	0.052*
H16B	0.5447	0.2708	-0.2059	0.052*
H16C	0.5728	0.3407	-0.1909	0.052*
C17	0.0039 (2)	0.30073 (11)	0.09722 (8)	0.0171 (4)
C18	-0.0438 (2)	0.37802 (12)	0.08131 (8)	0.0178 (4)
C19	-0.1414 (2)	0.39756 (13)	0.05159 (10)	0.0274 (5)
H19	-0.1782	0.3622	0.0412	0.033*
C20	-0.1848 (2)	0.46928 (13)	0.03717 (10)	0.0298 (5)
H20	-0.2504	0.4813	0.0172	0.036*
C21	-0.1322 (2)	0.52330 (13)	0.05200 (9)	0.0260 (5)
C22	-0.0330 (2)	0.50357 (13)	0.08122 (10)	0.0281 (5)
H22	0.0050	0.5391	0.0911	0.034*
C23	0.0104 (2)	0.43205 (12)	0.09590 (9)	0.0231 (5)
H23	0.0764	0.4200	0.1157	0.028*
C24	-0.1783 (2)	0.60127 (13)	0.03638 (11)	0.0342 (6)
H24A	-0.1075	0.6352	0.0311	0.051*

H24B	-0.2463	0.6057	0.0648	0.051*
H24C	-0.2105	0.6127	0.0033	0.051*
C25	0.1568 (2)	0.05343 (12)	0.27750 (9)	0.0187 (4)
C26	0.1452 (2)	0.00386 (12)	0.33574 (9)	0.0204 (5)
C27	0.0350 (2)	0.00399 (14)	0.37437 (9)	0.0300 (5)
H27	-0.0304	0.0362	0.3645	0.036*
C28	0.0225 (3)	-0.04345 (15)	0.42726 (10)	0.0391 (7)
H28	-0.0509	-0.0419	0.4527	0.047*
C29	0.1168 (3)	-0.09347 (14)	0.44339 (10)	0.0361 (7)
C30	0.2254 (3)	-0.09338 (14)	0.40479 (11)	0.0367 (7)
H30	0.2900	-0.1264	0.4146	0.044*
C31	0.2404 (2)	-0.04492 (13)	0.35141 (10)	0.0281 (5)
H31	0.3150	-0.0455	0.3263	0.034*
C32	0.0996 (3)	-0.14617 (17)	0.50102 (11)	0.0553 (9)
H32A	0.0816	-0.1187	0.5257	0.083*
H32B	0.1775	-0.1726	0.5060	0.083*
H32C	0.0286	-0.1808	0.5080	0.083*
C33	-0.2241 (2)	0.07042 (11)	0.22842 (9)	0.0183 (4)
H33	-0.1566	0.0398	0.2383	0.022*
C34	-0.3392 (2)	0.06135 (12)	0.26569 (9)	0.0214 (5)
H34	-0.3481	0.0256	0.3000	0.026*
C35	-0.4409 (2)	0.10575 (12)	0.25143 (9)	0.0199 (5)
H35	-0.5198	0.0997	0.2756	0.024*
C36	-0.42287 (19)	0.15955 (11)	0.20030 (8)	0.0155 (4)
C37	-0.30381 (19)	0.16563 (11)	0.16559 (8)	0.0161 (4)
H37	-0.2914	0.2021	0.1315	0.019*
C38	0.4733 (2)	-0.04641 (12)	0.17108 (9)	0.0190 (4)
H38	0.4031	-0.0693	0.1985	0.023*
C39	0.5722 (2)	-0.08989 (12)	0.15759 (9)	0.0213 (5)
H39	0.5682	-0.1408	0.1756	0.026*
C40	0.6768 (2)	-0.05651 (12)	0.11698 (9)	0.0211 (5)
H40	0.7433	-0.0848	0.1066	0.025*
C41	0.6813 (2)	0.02013 (11)	0.09173 (8)	0.0164 (4)
C42	0.5773 (2)	0.05918 (11)	0.10813 (8)	0.0160 (4)
H42	0.5799	0.1104	0.0915	0.019*
C43	0.79495 (19)	0.06378 (11)	0.05116 (8)	0.0159 (4)
C44	0.7643 (2)	0.00135 (13)	-0.01427 (9)	0.0240 (5)
H44A	0.7213	-0.0388	0.0173	0.029*
H44B	0.8267	-0.0203	-0.0362	0.029*

C45	0.6646 (2)	0.03952 (14)	-0.04705 (10)	0.0317 (6)
H45A	0.6249	0.0046	-0.0587	0.047*
H45B	0.7061	0.0796	-0.0783	0.047*
H45C	0.5995	0.0586	-0.0250	0.047*
C46	0.9449 (2)	0.09632 (12)	-0.03440 (9)	0.0228 (5)
H46A	0.9768	0.0736	-0.0618	0.027*
H46B	1.0140	0.0968	-0.0151	0.027*
C47	0.9114 (2)	0.17535 (13)	-0.06227 (10)	0.0287 (5)
H47A	0.9843	0.2008	-0.0896	0.043*
H47B	0.8905	0.2002	-0.0359	0.043*
H47C	0.8383	0.1753	-0.0789	0.043*
C48	0.47036 (19)	0.20863 (12)	0.18015 (8)	0.0162 (4)
C49	0.3529 (2)	0.32107 (13)	0.16928 (10)	0.0244 (5)
H49A	0.3339	0.3552	0.1895	0.029*
H49B	0.2745	0.2913	0.1756	0.029*
C50	0.3893 (2)	0.36527 (14)	0.10934 (10)	0.0342 (6)
H50A	0.3243	0.4005	0.0993	0.051*
H50B	0.3954	0.3323	0.0886	0.051*
H50C	0.4714	0.3911	0.1020	0.051*
C51	0.5357 (2)	0.29619 (13)	0.22146 (9)	0.0248 (5)
H51A	0.5711	0.2529	0.2448	0.030*
H51B	0.4816	0.3197	0.2446	0.030*
C52	0.6457 (2)	0.34963 (14)	0.18583 (11)	0.0342 (6)
H52A	0.6961	0.3623	0.2082	0.051*
H52B	0.6113	0.3937	0.1639	0.051*
H52C	0.6997	0.3268	0.1627	0.051*
C53	0.2385 (2)	0.36444 (11)	0.44399 (8)	0.0167 (4)
C54	0.1792 (2)	0.31129 (11)	0.49916 (8)	0.0170 (4)
C55	0.0468 (2)	0.30495 (12)	0.51870 (9)	0.0204 (5)
H55	-0.0082	0.3327	0.4968	0.024*
C56	-0.0045 (2)	0.25787 (13)	0.57045 (9)	0.0240 (5)
H56	-0.0938	0.2550	0.5829	0.029*
C57	0.0741 (2)	0.21472 (12)	0.60428 (9)	0.0238 (5)
C58	0.2070 (2)	0.21989 (12)	0.58382 (9)	0.0232 (5)
H58	0.2618	0.1908	0.6052	0.028*
C59	0.2591 (2)	0.26750 (12)	0.53229 (9)	0.0219 (5)
H59	0.3483	0.2703	0.5196	0.026*
C60	0.0182 (3)	0.16500 (14)	0.66114 (10)	0.0340 (6)
H60A	0.0653	0.1203	0.6696	0.051*

H60B	-0.0713	0.1529	0.6637	0.051*
H60C	0.0250	0.1901	0.6864	0.051*
C61	0.4106 (2)	0.57161 (12)	0.33415 (8)	0.0165 (4)
C62	0.4477 (2)	0.65083 (11)	0.32589 (8)	0.0158 (4)
C63	0.3573 (2)	0.70589 (12)	0.32052 (9)	0.0202 (5)
H63	0.2711	0.6941	0.3220	0.024*
C64	0.3946 (2)	0.77828 (12)	0.31296 (9)	0.0220 (5)
H64	0.3330	0.8145	0.3095	0.026*
C65	0.5228 (2)	0.79759 (12)	0.31052 (9)	0.0200 (5)
C66	0.6129 (2)	0.74237 (12)	0.31522 (9)	0.0202 (5)
H66	0.6992	0.7541	0.3134	0.024*
C67	0.5759 (2)	0.67020 (12)	0.32261 (8)	0.0183 (4)
H67	0.6378	0.6342	0.3254	0.022*
C68	0.5636 (2)	0.87545 (12)	0.30437 (10)	0.0278 (5)
H68A	0.5172	0.9104	0.2800	0.042*
H68B	0.6550	0.8835	0.2900	0.042*
H68C	0.5446	0.8821	0.3392	0.042*
C69	0.3274 (2)	0.51141 (12)	0.20306 (9)	0.0179 (4)
C70	0.3331 (2)	0.56018 (12)	0.14482 (8)	0.0190 (4)
C71	0.2283 (2)	0.60070 (12)	0.12891 (9)	0.0229 (5)
H71	0.1515	0.5965	0.1540	0.027*
C72	0.2373 (2)	0.64770 (13)	0.07557 (10)	0.0272 (5)
H72	0.1654	0.6738	0.0654	0.033*
C73	0.3505 (2)	0.65661 (13)	0.03725 (9)	0.0272 (5)
C74	0.4538 (2)	0.61449 (14)	0.05329 (9)	0.0304 (6)
H74	0.5302	0.6182	0.0280	0.036*
C75	0.4457 (2)	0.56714 (13)	0.10592 (9)	0.0255 (5)
H75	0.5166	0.5395	0.1155	0.031*
C76	0.3644 (3)	0.71158 (14)	-0.01987 (10)	0.0355 (6)
H76A	0.4412	0.7426	-0.0283	0.053*
H76B	0.2900	0.7418	-0.0223	0.053*
H76C	0.3709	0.6852	-0.0452	0.053*
C77	0.4867 (2)	0.24556 (12)	0.37353 (8)	0.0185 (4)
C78	0.5223 (2)	0.16569 (12)	0.39390 (9)	0.0198 (5)
C79	0.4467 (2)	0.11043 (12)	0.38984 (9)	0.0245 (5)
H79	0.3736	0.1228	0.3744	0.029*
C80	0.4790 (2)	0.03679 (13)	0.40862 (10)	0.0287 (5)
H80	0.4263	0.0004	0.4060	0.034*
C81	0.5883 (2)	0.01624 (13)	0.43122 (10)	0.0277 (5)



C82	0.6634 (3)	0.07218 (14)	0.43503 (11)	0.0346 (6)
H82	0.7368	0.0600	0.4503	0.042*
C83	0.6311 (2)	0.14594 (13)	0.41647 (10)	0.0289 (5)
H83	0.6833	0.1824	0.4193	0.035*
C84	0.6237 (3)	-0.06375 (13)	0.45167 (11)	0.0393 (7)
H84A	0.5581	-0.0947	0.4481	0.059*
H84B	0.6300	-0.0773	0.4892	0.059*
H84C	0.7055	-0.0702	0.4307	0.059*
C85	-0.08494 (19)	0.47597 (12)	0.38283 (8)	0.0156 (4)
H85	-0.0835	0.4250	0.3899	0.019*
C86	-0.19401 (19)	0.50452 (12)	0.40655 (8)	0.0159 (4)
C87	-0.1961 (2)	0.58115 (12)	0.39485 (9)	0.0196 (5)
H87	-0.2671	0.6026	0.4099	0.023*
C88	-0.0908 (2)	0.62472 (12)	0.36043 (9)	0.0211 (5)
H88	-0.0906	0.6760	0.3515	0.025*
C89	0.0139 (2)	0.59133 (12)	0.33947 (9)	0.0186 (4)
H89	0.0848	0.6211	0.3167	0.022*
C90	0.7032 (2)	0.48943 (11)	0.24927 (8)	0.0180 (4)
H90	0.6323	0.5181	0.2412	0.022*
C91	0.8177 (2)	0.50526 (12)	0.21137 (9)	0.0211 (5)
H91	0.8227	0.5434	0.1783	0.025*
C92	0.9247 (2)	0.46414 (12)	0.22288 (9)	0.0195 (4)
H92	1.0036	0.4752	0.1985	0.023*
C93	0.9114 (2)	0.40577 (11)	0.27179 (8)	0.0159 (4)
C94	0.79259 (19)	0.39322 (11)	0.30731 (8)	0.0160 (4)
H94	0.7838	0.3540	0.3400	0.019*
C95	0.69637 (19)	0.45079 (12)	0.44036 (8)	0.0160 (4)
C96	0.7140 (2)	0.48486 (13)	0.52104 (9)	0.0246 (5)
H96A	0.6495	0.4891	0.5512	0.030*
H96B	0.7400	0.5346	0.4963	0.030*
C97	0.8309 (2)	0.44791 (14)	0.54251 (10)	0.0290 (5)
H97A	0.8634	0.4759	0.5617	0.044*
H97B	0.8972	0.4460	0.5127	0.044*
H97C	0.8062	0.3984	0.5668	0.044*
C98	0.5546 (2)	0.38594 (13)	0.52469 (9)	0.0257 (5)
H98A	0.4857	0.3888	0.5046	0.031*
H98B	0.5175	0.3950	0.5582	0.031*
C99	0.6063 (2)	0.30848 (14)	0.53846 (10)	0.0317 (6)
H99A	0.5389	0.2732	0.5620	0.048*

H99B	0.6779	0.3061	0.5564	0.048*
H99C	0.6348	0.2971	0.5056	0.048*
C100	0.01980 (19)	0.35729 (12)	0.29004 (8)	0.0156 (4)
C101	0.1292 (2)	0.24234 (12)	0.30289 (9)	0.0228 (5)
H10A	0.2107	0.2691	0.2970	0.027*
H10B	0.1446	0.2056	0.2848	0.027*
C102	0.0828 (2)	0.20352 (14)	0.36308 (10)	0.0324 (6)
H10H	0.1444	0.1678	0.3768	0.049*
H10I	0.0003	0.1787	0.3692	0.049*
H10J	0.0742	0.2393	0.3815	0.049*
C103	-0.0447 (2)	0.27293 (13)	0.24597 (9)	0.0232 (5)
H10C	0.0103	0.2505	0.2223	0.028*
H10D	-0.0790	0.3171	0.2231	0.028*
C104	-0.1561 (2)	0.21903 (13)	0.27990 (10)	0.0298 (6)
H10E	-0.2054	0.2081	0.2564	0.045*
H10F	-0.2109	0.2407	0.3036	0.045*
H10G	-0.1227	0.1741	0.3012	0.045*

---

Ek Çizelge 18. (12) kristalinin atomik yerdeğiştirme parametreleri ( $\text{\AA}^2$ )

---

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{12}$	$U^{13}$	$U^{23}$
Mn1	0.01369 (16)	0.01606 (16)	0.01613 (16)	0.00008 (12)	-0.00361 (12)	-0.00779 (13)
Mn2	0.01361 (16)	0.01591 (16)	0.01577 (16)	0.00055 (12)	-0.00323 (12)	-0.00843 (13)
Mn3	0.01195 (15)	0.01724 (16)	0.01632 (16)	0.00047 (12)	-0.00281 (12)	-0.00939 (13)
Mn4	0.01224 (16)	0.01742 (16)	0.01566 (16)	0.00045 (12)	-0.00275 (12)	-0.00872 (13)
O1	0.0193 (8)	0.0177 (8)	0.0293 (9)	0.0016 (6)	-0.0071 (7)	-0.0088 (7)
O2	0.0157 (8)	0.0183 (8)	0.0322 (9)	-0.0017 (6)	-0.0047 (7)	-0.0106 (7)
O3	0.0197 (8)	0.0242 (8)	0.0175 (8)	0.0028 (6)	-0.0042 (6)	-0.0075 (7)
O4	0.0171 (8)	0.0281 (9)	0.0206 (8)	-0.0017 (7)	-0.0013 (6)	-0.0129 (7)
O5	0.0234 (8)	0.0175 (8)	0.0283 (9)	0.0012 (6)	-0.0121 (7)	-0.0069 (7)
O6	0.0197 (8)	0.0154 (7)	0.0243 (8)	-0.0007 (6)	-0.0073 (6)	-0.0078 (6)
O7	0.0248 (9)	0.0285 (9)	0.0197 (8)	0.0076 (7)	-0.0033 (7)	-0.0087 (7)
O8	0.0181 (8)	0.0301 (9)	0.0177 (8)	0.0011 (7)	-0.0040 (6)	-0.0078 (7)
O9	0.0179 (8)	0.0170 (8)	0.0169 (8)	0.0024 (6)	-0.0051 (6)	-0.0084 (7)
O10	0.0223 (8)	0.0192 (8)	0.0252 (8)	-0.0021 (6)	-0.0095 (7)	-0.0093 (7)
O11	0.0180 (8)	0.0212 (8)	0.0196 (8)	-0.0012 (6)	-0.0056 (6)	-0.0108 (6)
O12	0.0158 (8)	0.0331 (9)	0.0180 (8)	-0.0028 (7)	-0.0012 (6)	-0.0117 (7)

O13	0.0181 (8)	0.0220 (8)	0.0177 (8)	0.0013 (6)	-0.0028 (6)	-0.0072 (6)
O14	0.0190 (8)	0.0193 (8)	0.0323 (9)	0.0023 (6)	-0.0055 (7)	-0.0139 (7)
O15	0.0156 (8)	0.0210 (8)	0.0284 (9)	-0.0019 (6)	-0.0032 (6)	-0.0133 (7)
O16	0.0215 (8)	0.0279 (9)	0.0193 (8)	0.0078 (7)	-0.0035 (6)	-0.0061 (7)
O17	0.0189 (8)	0.0281 (9)	0.0181 (8)	0.0040 (7)	-0.0021 (6)	-0.0089 (7)
O18	0.0247 (9)	0.0191 (8)	0.0307 (9)	-0.0009 (7)	-0.0136 (7)	-0.0056 (7)
O19	0.0186 (8)	0.0177 (8)	0.0279 (9)	0.0000 (6)	-0.0067 (6)	-0.0093 (7)
O20	0.0155 (7)	0.0256 (8)	0.0188 (8)	-0.0005 (6)	-0.0053 (6)	-0.0111 (7)
O21	0.0201 (8)	0.0226 (8)	0.0294 (9)	-0.0015 (6)	-0.0091 (7)	-0.0153 (7)
O22	0.0171 (8)	0.0180 (8)	0.0151 (8)	0.0023 (6)	-0.0037 (6)	-0.0081 (6)
N1	0.0189 (9)	0.0196 (9)	0.0170 (9)	0.0013 (7)	-0.0048 (7)	-0.0107 (8)
N2	0.0170 (9)	0.0184 (9)	0.0182 (9)	-0.0009 (7)	-0.0062 (7)	-0.0071 (8)
N3	0.0197 (9)	0.0193 (9)	0.0183 (9)	0.0004 (7)	-0.0038 (7)	-0.0103 (8)
N4	0.0161 (9)	0.0232 (10)	0.0257 (10)	0.0042 (7)	-0.0068 (8)	-0.0155 (8)
N5	0.0156 (9)	0.0197 (9)	0.0169 (9)	0.0011 (7)	-0.0047 (7)	-0.0086 (7)
N6	0.0168 (9)	0.0179 (9)	0.0179 (9)	0.0002 (7)	-0.0033 (7)	-0.0091 (7)
N7	0.0160 (9)	0.0274 (10)	0.0171 (9)	0.0022 (8)	-0.0024 (7)	-0.0115 (8)
N8	0.0173 (9)	0.0200 (9)	0.0223 (10)	0.0030 (7)	-0.0063 (7)	-0.0135 (8)
C1	0.0172 (11)	0.0189 (11)	0.0167 (10)	0.0009 (8)	-0.0019 (8)	-0.0093 (9)
C2	0.0195 (11)	0.0170 (10)	0.0148 (10)	0.0006 (8)	-0.0033 (8)	-0.0062 (9)
C3	0.0170 (11)	0.0205 (11)	0.0185 (11)	0.0001 (9)	-0.0018 (8)	-0.0075 (9)
C4	0.0183 (11)	0.0219 (11)	0.0220 (11)	-0.0048 (9)	-0.0015 (9)	-0.0082 (9)
C5	0.0283 (12)	0.0163 (11)	0.0179 (11)	-0.0035 (9)	-0.0045 (9)	-0.0058 (9)
C6	0.0230 (12)	0.0196 (11)	0.0221 (12)	0.0040 (9)	-0.0056 (9)	-0.0062 (9)
C7	0.0185 (11)	0.0197 (11)	0.0229 (11)	-0.0016 (9)	-0.0048 (9)	-0.0077 (9)
C8	0.0353 (14)	0.0197 (12)	0.0301 (13)	-0.0025 (10)	-0.0080 (11)	-0.0084 (10)
C9	0.0199 (11)	0.0148 (10)	0.0185 (11)	-0.0004 (8)	-0.0028 (9)	-0.0109 (9)
C10	0.0220 (11)	0.0146 (10)	0.0170 (10)	-0.0008 (8)	-0.0035 (9)	-0.0084 (9)
C11	0.0197 (11)	0.0248 (12)	0.0212 (11)	0.0034 (9)	-0.0059 (9)	-0.0105 (10)
C12	0.0327 (13)	0.0243 (12)	0.0225 (12)	0.0068 (10)	-0.0126 (10)	-0.0108 (10)
C13	0.0340 (13)	0.0201 (11)	0.0171 (11)	-0.0031 (10)	-0.0027 (10)	-0.0090 (9)
C14	0.0184 (11)	0.0319 (13)	0.0216 (12)	-0.0036 (10)	-0.0006 (9)	-0.0110 (10)
C15	0.0195 (11)	0.0246 (12)	0.0177 (11)	-0.0003 (9)	-0.0037 (9)	-0.0090 (9)
C16	0.0463 (16)	0.0360 (15)	0.0188 (12)	-0.0075 (12)	-0.0016 (11)	-0.0073 (11)
C17	0.0186 (11)	0.0161 (10)	0.0151 (10)	-0.0006 (8)	-0.0008 (8)	-0.0047 (8)
C18	0.0174 (11)	0.0185 (11)	0.0164 (10)	0.0002 (9)	0.0000 (8)	-0.0061 (9)
C19	0.0270 (13)	0.0223 (12)	0.0368 (14)	0.0034 (10)	-0.0125 (11)	-0.0116 (11)
C20	0.0261 (13)	0.0277 (13)	0.0364 (14)	0.0074 (10)	-0.0114 (11)	-0.0093 (11)
C21	0.0273 (13)	0.0214 (12)	0.0230 (12)	0.0048 (10)	0.0050 (10)	-0.0049 (10)

C22	0.0346 (14)	0.0213 (12)	0.0307 (13)	0.0005 (10)	-0.0039 (11)	-0.0131 (11)
C23	0.0248 (12)	0.0210 (11)	0.0254 (12)	0.0010 (9)	-0.0069 (10)	-0.0092 (10)
C24	0.0328 (14)	0.0240 (13)	0.0397 (15)	0.0092 (11)	0.0024 (12)	-0.0088 (12)
C25	0.0224 (12)	0.0182 (11)	0.0190 (11)	-0.0020 (9)	-0.0046 (9)	-0.0102 (9)
C26	0.0238 (12)	0.0188 (11)	0.0194 (11)	-0.0049 (9)	-0.0063 (9)	-0.0058 (9)
C27	0.0369 (15)	0.0299 (13)	0.0223 (12)	0.0016 (11)	-0.0015 (11)	-0.0100 (11)
C28	0.0489 (18)	0.0406 (16)	0.0227 (13)	-0.0093 (13)	0.0027 (12)	-0.0087 (12)
C29	0.0511 (18)	0.0326 (14)	0.0220 (13)	-0.0196 (13)	-0.0120 (12)	-0.0015 (11)
C30	0.0416 (16)	0.0293 (14)	0.0371 (15)	-0.0065 (12)	-0.0240 (13)	0.0015 (12)
C31	0.0267 (13)	0.0288 (13)	0.0284 (13)	-0.0056 (10)	-0.0084 (10)	-0.0068 (11)
C32	0.088 (3)	0.0488 (19)	0.0237 (15)	-0.0261 (18)	-0.0187 (15)	0.0022 (13)
C33	0.0187 (11)	0.0153 (10)	0.0232 (11)	0.0000 (8)	-0.0066 (9)	-0.0080 (9)
C34	0.0259 (12)	0.0164 (11)	0.0196 (11)	-0.0045 (9)	-0.0017 (9)	-0.0042 (9)
C35	0.0179 (11)	0.0219 (11)	0.0203 (11)	-0.0041 (9)	0.0011 (9)	-0.0101 (9)
C36	0.0149 (10)	0.0180 (10)	0.0183 (11)	-0.0024 (8)	-0.0037 (8)	-0.0117 (9)
C37	0.0179 (11)	0.0173 (10)	0.0155 (10)	-0.0008 (8)	-0.0047 (8)	-0.0077 (9)
C38	0.0173 (11)	0.0193 (11)	0.0201 (11)	-0.0013 (9)	-0.0060 (9)	-0.0047 (9)
C39	0.0238 (12)	0.0149 (10)	0.0243 (12)	0.0008 (9)	-0.0080 (9)	-0.0036 (9)
C40	0.0226 (12)	0.0207 (11)	0.0245 (12)	0.0063 (9)	-0.0087 (9)	-0.0118 (10)
C41	0.0176 (11)	0.0193 (11)	0.0168 (10)	0.0005 (8)	-0.0066 (8)	-0.0101 (9)
C42	0.0192 (11)	0.0156 (10)	0.0160 (10)	0.0006 (8)	-0.0070 (8)	-0.0068 (8)
C43	0.0140 (10)	0.0204 (11)	0.0163 (10)	0.0041 (8)	-0.0058 (8)	-0.0087 (9)
C44	0.0320 (13)	0.0257 (12)	0.0222 (12)	0.0028 (10)	-0.0078 (10)	-0.0169 (10)
C45	0.0306 (14)	0.0350 (14)	0.0400 (15)	0.0027 (11)	-0.0156 (12)	-0.0218 (12)
C46	0.0230 (12)	0.0285 (12)	0.0178 (11)	0.0020 (10)	0.0003 (9)	-0.0114 (10)
C47	0.0297 (13)	0.0298 (13)	0.0243 (12)	-0.0040 (11)	-0.0060 (10)	-0.0053 (11)
C48	0.0135 (10)	0.0199 (11)	0.0149 (10)	-0.0014 (8)	0.0004 (8)	-0.0072 (9)
C49	0.0200 (12)	0.0258 (12)	0.0352 (13)	0.0069 (10)	-0.0102 (10)	-0.0183 (11)
C50	0.0302 (14)	0.0300 (14)	0.0400 (15)	-0.0003 (11)	-0.0114 (12)	-0.0057 (12)
C51	0.0236 (12)	0.0309 (13)	0.0333 (13)	0.0088 (10)	-0.0118 (10)	-0.0257 (11)
C52	0.0260 (13)	0.0370 (15)	0.0519 (17)	0.0011 (11)	-0.0151 (12)	-0.0267 (13)
C53	0.0190 (11)	0.0179 (11)	0.0168 (10)	0.0003 (9)	-0.0021 (8)	-0.0111 (9)
C54	0.0194 (11)	0.0163 (10)	0.0187 (11)	-0.0006 (8)	-0.0044 (8)	-0.0102 (9)
C55	0.0193 (11)	0.0214 (11)	0.0213 (11)	0.0008 (9)	-0.0043 (9)	-0.0080 (9)
C56	0.0195 (12)	0.0270 (12)	0.0254 (12)	-0.0048 (10)	-0.0004 (9)	-0.0103 (10)
C57	0.0339 (14)	0.0190 (11)	0.0200 (11)	-0.0076 (10)	-0.0040 (10)	-0.0086 (9)
C58	0.0296 (13)	0.0197 (11)	0.0235 (12)	0.0037 (10)	-0.0106 (10)	-0.0085 (10)
C59	0.0201 (11)	0.0239 (12)	0.0244 (12)	0.0015 (9)	-0.0052 (9)	-0.0112 (10)
C60	0.0466 (16)	0.0286 (13)	0.0246 (13)	-0.0117 (12)	-0.0068 (11)	-0.0051 (11)

C61	0.0168 (11)	0.0197 (11)	0.0154 (10)	0.0009 (8)	0.0000 (8)	-0.0109 (9)
C62	0.0180 (11)	0.0172 (10)	0.0134 (10)	-0.0001 (8)	-0.0020 (8)	-0.0073 (8)
C63	0.0150 (11)	0.0239 (11)	0.0236 (12)	-0.0016 (9)	-0.0037 (9)	-0.0103 (10)
C64	0.0215 (12)	0.0193 (11)	0.0268 (12)	0.0046 (9)	-0.0061 (9)	-0.0092 (10)
C65	0.0228 (12)	0.0199 (11)	0.0175 (11)	-0.0035 (9)	-0.0030 (9)	-0.0067 (9)
C66	0.0180 (11)	0.0219 (11)	0.0211 (11)	-0.0060 (9)	-0.0038 (9)	-0.0073 (9)
C67	0.0182 (11)	0.0205 (11)	0.0171 (11)	0.0020 (9)	-0.0040 (8)	-0.0072 (9)
C68	0.0296 (13)	0.0200 (12)	0.0337 (14)	-0.0031 (10)	-0.0081 (11)	-0.0075 (10)
C69	0.0189 (11)	0.0180 (11)	0.0189 (11)	-0.0012 (9)	-0.0038 (9)	-0.0087 (9)
C70	0.0237 (12)	0.0177 (11)	0.0168 (11)	-0.0010 (9)	-0.0052 (9)	-0.0067 (9)
C71	0.0212 (12)	0.0216 (11)	0.0263 (12)	0.0016 (9)	-0.0062 (9)	-0.0078 (10)
C72	0.0311 (13)	0.0212 (12)	0.0306 (13)	0.0039 (10)	-0.0163 (11)	-0.0049 (10)
C73	0.0383 (15)	0.0231 (12)	0.0214 (12)	-0.0035 (11)	-0.0109 (11)	-0.0057 (10)
C74	0.0307 (14)	0.0387 (15)	0.0187 (12)	-0.0002 (11)	-0.0013 (10)	-0.0074 (11)
C75	0.0269 (13)	0.0274 (13)	0.0213 (12)	0.0055 (10)	-0.0062 (10)	-0.0064 (10)
C76	0.0464 (17)	0.0319 (14)	0.0253 (13)	-0.0074 (12)	-0.0144 (12)	-0.0009 (11)
C77	0.0182 (11)	0.0186 (11)	0.0171 (11)	-0.0011 (9)	-0.0011 (8)	-0.0053 (9)
C78	0.0223 (12)	0.0179 (11)	0.0196 (11)	0.0002 (9)	-0.0029 (9)	-0.0076 (9)
C79	0.0273 (13)	0.0228 (12)	0.0249 (12)	-0.0016 (10)	-0.0067 (10)	-0.0089 (10)
C80	0.0380 (15)	0.0194 (12)	0.0311 (13)	-0.0035 (10)	-0.0069 (11)	-0.0111 (10)
C81	0.0354 (14)	0.0200 (12)	0.0262 (13)	0.0021 (10)	-0.0011 (11)	-0.0085 (10)
C82	0.0329 (15)	0.0267 (13)	0.0471 (16)	0.0079 (11)	-0.0181 (12)	-0.0107 (12)
C83	0.0296 (13)	0.0205 (12)	0.0397 (15)	0.0007 (10)	-0.0135 (11)	-0.0103 (11)
C84	0.0519 (18)	0.0225 (13)	0.0447 (17)	0.0081 (12)	-0.0090 (14)	-0.0136 (12)
C85	0.0170 (11)	0.0172 (10)	0.0163 (10)	0.0006 (8)	-0.0051 (8)	-0.0093 (9)
C86	0.0136 (10)	0.0228 (11)	0.0160 (10)	0.0022 (8)	-0.0057 (8)	-0.0113 (9)
C87	0.0174 (11)	0.0244 (12)	0.0233 (11)	0.0071 (9)	-0.0074 (9)	-0.0149 (10)
C88	0.0216 (12)	0.0155 (11)	0.0303 (12)	0.0032 (9)	-0.0105 (10)	-0.0101 (10)
C89	0.0174 (11)	0.0186 (11)	0.0215 (11)	-0.0015 (9)	-0.0068 (9)	-0.0070 (9)
C90	0.0186 (11)	0.0170 (11)	0.0217 (11)	0.0016 (9)	-0.0056 (9)	-0.0102 (9)
C91	0.0239 (12)	0.0181 (11)	0.0193 (11)	-0.0030 (9)	-0.0025 (9)	-0.0042 (9)
C92	0.0151 (11)	0.0205 (11)	0.0222 (11)	-0.0043 (9)	0.0014 (9)	-0.0085 (9)
C93	0.0167 (10)	0.0170 (10)	0.0196 (11)	0.0004 (8)	-0.0040 (8)	-0.0133 (9)
C94	0.0170 (11)	0.0170 (10)	0.0159 (10)	-0.0002 (8)	-0.0027 (8)	-0.0081 (9)
C95	0.0119 (10)	0.0218 (11)	0.0176 (10)	0.0045 (8)	-0.0046 (8)	-0.0102 (9)
C96	0.0280 (13)	0.0331 (13)	0.0196 (11)	0.0038 (10)	-0.0052 (9)	-0.0176 (10)
C97	0.0289 (13)	0.0365 (14)	0.0314 (13)	0.0054 (11)	-0.0134 (11)	-0.0203 (12)
C98	0.0191 (12)	0.0404 (14)	0.0173 (11)	-0.0013 (10)	-0.0013 (9)	-0.0101 (10)
C99	0.0274 (13)	0.0345 (14)	0.0287 (13)	-0.0051 (11)	-0.0086 (11)	-0.0024 (11)

C100	0.0110 (10)	0.0210 (11)	0.0152 (10)	-0.0016 (8)	0.0013 (8)	-0.0087 (9)
C101	0.0208 (12)	0.0235 (12)	0.0315 (13)	0.0064 (9)	-0.0113 (10)	-0.0157 (10)
C102	0.0308 (14)	0.0304 (14)	0.0337 (14)	-0.0001 (11)	-0.0121 (11)	-0.0045 (11)
C103	0.0268 (12)	0.0272 (12)	0.0282 (12)	0.0072 (10)	-0.0134 (10)	-0.0217 (10)
C104	0.0266 (13)	0.0288 (13)	0.0458 (15)	0.0027 (10)	-0.0162 (11)	-0.0228 (12)

Ek Çizelge 19. (12) kristalinin geometrik parametreleri (Å, °)

Mn1—O2	2.1528 (14)	C41—C40	1.393 (3)
Mn1—O3	2.1429 (15)	C41—C42	1.391 (3)
Mn1—O8	2.1743 (15)	C41—C43	1.498 (3)
Mn1—O9	2.1848 (15)	C42—N2	1.336 (3)
Mn1—O10	2.1936 (14)	C42—H42	0.9300
Mn1—N2	2.2854 (18)	C43—O11 <sup>ii</sup>	1.246 (2)
Mn2—O1	2.1482 (15)	C44—C45	1.511 (3)
Mn2—O4	2.1197 (15)	C44—H44A	0.9700
Mn2—O6	2.1694 (14)	C44—H44B	0.9700
Mn2—O9	2.2026 (14)	C45—H45A	0.9600
Mn2—O11	2.2109 (13)	C45—H45B	0.9600
Mn2—N1	2.3152 (18)	C45—H45C	0.9600
Mn3—O13	2.1716 (14)	C46—C47	1.512 (3)
Mn3—O15	2.1608 (14)	C46—H46A	0.9700
Mn3—O17	2.1898 (15)	C46—H46B	0.9700
Mn3—O21	2.1755 (14)	C47—H47A	0.9600
Mn3—O22	2.1913 (15)	C47—H47B	0.9600
Mn3—N5	2.2817 (17)	C47—H47C	0.9600
Mn4—O12	2.1071 (15)	C48—O10	1.244 (2)
Mn4—O14	2.1419 (15)	C48—C36 <sup>ii</sup>	1.508 (3)
Mn4—O19	2.1540 (15)	C49—C50	1.512 (3)
Mn4—O20	2.1990 (13)	C49—H49A	0.9700
Mn4—O22	2.2069 (14)	C49—H49B	0.9700
Mn4—N6	2.2799 (18)	C50—H50A	0.9600
O1—C1	1.263 (2)	C50—H50B	0.9600
O2—C1	1.252 (2)	C50—H50C	0.9600
O3—C9	1.260 (2)	C51—C52	1.509 (3)
O4—C9	1.258 (2)	C51—H51A	0.9700
O5—C17	1.259 (2)	C51—H51B	0.9700

O6—C17	1.271 (2)	C52—H52A	0.9600
O7—C25	1.257 (3)	C52—H52B	0.9600
O9—H9A	0.94 (3)	C52—H52C	0.9600
O9—H9B	0.937 (18)	C53—C54	1.504 (3)
O11—C43 <sup>i</sup>	1.246 (2)	C54—C55	1.383 (3)
O12—C53	1.258 (2)	C54—C59	1.394 (3)
O13—C53	1.261 (2)	C55—H55	0.9300
O14—C61	1.264 (2)	C56—C55	1.382 (3)
O15—C61	1.248 (2)	C56—C57	1.391 (3)
O16—C69	1.260 (2)	C56—H56	0.9300
O17—C69	1.262 (3)	C57—C60	1.505 (3)
O18—C77	1.256 (2)	C58—C59	1.383 (3)
O19—C77	1.263 (2)	C58—C57	1.392 (3)
O22—H22A	0.92 (3)	C58—H58	0.9300
O22—H22B	0.98 (4)	C59—H59	0.9300
N1—C33	1.338 (3)	C60—H60A	0.9600
N1—C37	1.340 (3)	C60—H60B	0.9600
N2—C38	1.343 (3)	C60—H60C	0.9600
N3—C43	1.338 (3)	C62—C61	1.508 (3)
N3—C44	1.473 (3)	C62—C67	1.387 (3)
N3—C46	1.470 (3)	C63—C62	1.392 (3)
N4—C48	1.327 (3)	C63—C64	1.388 (3)
N4—C49	1.472 (3)	C63—H63	0.9300
N4—C51	1.477 (3)	C64—H64	0.9300
N5—C85	1.338 (3)	C65—C66	1.391 (3)
N5—C89	1.338 (3)	C65—C64	1.392 (3)
N6—C90	1.341 (3)	C65—C68	1.509 (3)
N6—C94	1.337 (3)	C66—H66	0.9300
N7—C95	1.331 (3)	C67—C66	1.384 (3)
N7—C96	1.479 (3)	C67—H67	0.9300
N7—C98	1.470 (3)	C68—H68A	0.9600
N8—C100	1.329 (3)	C68—H68B	0.9600
N8—C101	1.474 (3)	C68—H68C	0.9600
N8—C103	1.472 (2)	C70—C69	1.509 (3)
C1—C2	1.508 (3)	C70—C71	1.383 (3)
C3—C2	1.389 (3)	C70—C75	1.391 (3)
C3—H3	0.9300	C71—C72	1.390 (3)
C4—C3	1.383 (3)	C71—H71	0.9300
C4—H4	0.9300	C72—C73	1.382 (3)

C5—C6	1.390 (3)	C72—H72	0.9300
C5—C4	1.391 (3)	C73—C74	1.385 (3)
C5—C8	1.507 (3)	C74—H74	0.9300
C6—C7	1.387 (3)	C75—C74	1.379 (3)
C6—H6	0.9300	C75—H75	0.9300
C7—C2	1.391 (3)	C76—C73	1.514 (3)
C7—H7	0.9300	C76—H76A	0.9600
C8—H8A	0.9600	C76—H76B	0.9600
C8—H8B	0.9600	C76—H76C	0.9600
C8—H8C	0.9600	C77—C78	1.506 (3)
C9—C10	1.496 (3)	C78—C83	1.381 (3)
C10—C15	1.388 (3)	C79—C78	1.384 (3)
C11—C12	1.386 (3)	C79—C80	1.386 (3)
C11—C10	1.394 (3)	C79—H79	0.9300
C11—H11	0.9300	C80—H80	0.9300
C12—C13	1.388 (3)	C81—C80	1.388 (3)
C12—H12	0.9300	C81—C84	1.507 (3)
C14—C13	1.387 (3)	C82—C81	1.389 (3)
C14—C15	1.388 (3)	C82—C83	1.388 (3)
C14—H14	0.9300	C82—H82	0.9300
C15—H15	0.9300	C83—H83	0.9300
C16—C13	1.505 (3)	C84—H84A	0.9600
C16—H16A	0.9600	C84—H84B	0.9600
C16—H16B	0.9600	C84—H84C	0.9600
C16—H16C	0.9600	C85—H85	0.9300
C18—C17	1.498 (3)	C86—C85	1.389 (3)
C18—C19	1.384 (3)	C86—C95 <sup>i</sup>	1.497 (3)
C18—C23	1.389 (3)	C87—C88	1.382 (3)
C19—H19	0.9300	C87—C86	1.395 (3)
C20—C21	1.385 (3)	C87—H87	0.9300
C20—C19	1.387 (3)	C88—H88	0.9300
C20—H20	0.9300	C89—C88	1.376 (3)
C21—C22	1.391 (3)	C89—H89	0.9300
C21—C24	1.504 (3)	C90—H90	0.9300
C22—C23	1.383 (3)	C91—C90	1.380 (3)
C22—H22	0.9300	C91—C92	1.381 (3)
C23—H23	0.9300	C91—H91	0.9300
C24—H24A	0.9600	C92—H92	0.9300
C24—H24B	0.9600	C93—C92	1.389 (3)



C24—H24C	0.9600	C93—C94	1.386 (3)
C25—O8	1.267 (3)	C93—C100 <sup>ii</sup>	1.502 (3)
C25—C26	1.506 (3)	C94—H94	0.9300
C26—C27	1.393 (3)	C95—O20	1.243 (2)
C26—C31	1.379 (3)	C95—C86 <sup>ii</sup>	1.497 (3)
C27—H27	0.9300	C96—C97	1.516 (3)
C28—C27	1.380 (3)	C96—H96A	0.9700
C28—H28	0.9300	C96—H96B	0.9700
C29—C28	1.388 (4)	C97—H97A	0.9600
C29—C30	1.380 (4)	C97—H97B	0.9600
C30—H30	0.9300	C97—H97C	0.9600
C31—C30	1.394 (3)	C98—C99	1.517 (3)
C31—H31	0.9300	C98—H98A	0.9700
C32—C29	1.507 (3)	C98—H98B	0.9700
C32—H32A	0.9600	C99—H99A	0.9600
C32—H32B	0.9600	C99—H99B	0.9600
C32—H32C	0.9600	C99—H99C	0.9600
C33—C34	1.383 (3)	C100—O21	1.243 (2)
C33—H33	0.9300	C100—C93 <sup>i</sup>	1.502 (3)
C34—H34	0.9300	C101—C102	1.509 (3)
C35—C34	1.380 (3)	C101—H10A	0.9700
C35—C36	1.387 (3)	C101—H10B	0.9700
C35—H35	0.9300	C102—H10H	0.9600
C36—C48 <sup>i</sup>	1.508 (3)	C102—H10I	0.9600
C37—C36	1.387 (3)	C102—H10J	0.9600
C37—H37	0.9300	C103—C104	1.512 (3)
C38—H38	0.9300	C103—H10C	0.9700
C39—C38	1.383 (3)	C103—H10D	0.9700
C39—C40	1.380 (3)	C104—H10E	0.9600
C39—H39	0.9300	C104—H10F	0.9600
C40—H40	0.9300	C104—H10G	0.9600
O2—Mn1—O8	86.85 (6)	N2—C42—H42	118.1
O2—Mn1—O9	92.31 (6)	C41—C42—H42	118.1
O2—Mn1—O10	174.70 (6)	O11 <sup>ii</sup> —C43—N3	121.49 (19)
O2—Mn1—N2	84.43 (6)	O11 <sup>ii</sup> —C43—C41	118.48 (18)
O3—Mn1—O2	97.60 (6)	N3—C43—C41	120.00 (18)
O3—Mn1—O8	175.43 (6)	N3—C44—C45	113.85 (19)
O3—Mn1—O9	91.91 (6)	N3—C44—H44A	108.8
O3—Mn1—O10	86.29 (6)	N3—C44—H44B	108.8

O3—Mn1—N2	85.17 (6)	C45—C44—H44A	108.8
O8—Mn1—O9	88.92 (6)	C45—C44—H44B	108.8
O8—Mn1—O10	89.21 (6)	H44A—C44—H44B	107.7
O8—Mn1—N2	94.29 (6)	C44—C45—H45A	109.5
O9—Mn1—O10	91.16 (6)	C44—C45—H45B	109.5
O9—Mn1—N2	175.29 (6)	C44—C45—H45C	109.5
O10—Mn1—N2	92.34 (6)	H45A—C45—H45B	109.5
O1—Mn2—O6	170.61 (6)	H45A—C45—H45C	109.5
O1—Mn2—O9	89.49 (6)	H45B—C45—H45C	109.5
O1—Mn2—O11	88.90 (5)	N3—C46—C47	113.19 (18)
O1—Mn2—N1	86.27 (6)	N3—C46—H46A	108.9
O4—Mn2—O1	97.75 (6)	N3—C46—H46B	108.9
O4—Mn2—O6	91.45 (6)	C47—C46—H46A	108.9
O4—Mn2—O9	90.02 (6)	C47—C46—H46B	108.9
O4—Mn2—O11	89.10 (5)	H46A—C46—H46B	107.8
O4—Mn2—N1	174.27 (6)	C46—C47—H47A	109.5
O6—Mn2—O9	88.61 (5)	C46—C47—H47B	109.5
O6—Mn2—O11	93.15 (5)	C46—C47—H47C	109.5
O6—Mn2—N1	84.69 (6)	H47A—C47—H47B	109.5
O9—Mn2—O11	178.04 (6)	H47A—C47—H47C	109.5
O9—Mn2—N1	94.11 (6)	H47B—C47—H47C	109.5
O11—Mn2—N1	86.89 (6)	O10—C48—N4	121.96 (19)
O13—Mn3—O17	170.86 (6)	O10—C48—C36 <sup>ii</sup>	119.09 (18)
O13—Mn3—O21	84.47 (6)	N4—C48—C36 <sup>ii</sup>	118.91 (17)
O13—Mn3—O22	89.52 (6)	N4—C49—C50	113.82 (19)
O13—Mn3—N5	83.28 (6)	N4—C49—H49A	108.8
O15—Mn3—O13	100.63 (6)	N4—C49—H49B	108.8
O15—Mn3—O17	88.49 (6)	C50—C49—H49A	108.8
O15—Mn3—O21	172.45 (6)	C50—C49—H49B	108.8
O15—Mn3—O22	95.02 (6)	H49A—C49—H49B	107.7
O15—Mn3—N5	84.32 (6)	C49—C50—H50A	109.5
O17—Mn3—O22	89.03 (6)	C49—C50—H50B	109.5
O17—Mn3—N5	98.40 (6)	C49—C50—H50C	109.5
O21—Mn3—O17	86.52 (6)	H50A—C50—H50B	109.5
O21—Mn3—O22	90.55 (6)	H50A—C50—H50C	109.5
O21—Mn3—N5	90.82 (6)	H50B—C50—H50C	109.5
O22—Mn3—N5	172.51 (6)	N4—C51—C52	113.39 (19)
O12—Mn4—O14	97.04 (6)	N4—C51—H51A	108.9
O12—Mn4—O19	90.47 (6)	N4—C51—H51B	108.9

O12—Mn4—O20	91.25 (5)	C52—C51—H51A	108.9
O12—Mn4—O22	88.94 (6)	C52—C51—H51B	108.9
O12—Mn4—N6	175.55 (6)	H51A—C51—H51B	107.7
O14—Mn4—O19	172.28 (6)	C51—C52—H52A	109.5
O14—Mn4—O20	89.45 (6)	C51—C52—H52B	109.5
O14—Mn4—O22	92.31 (6)	C51—C52—H52C	109.5
O14—Mn4—N6	86.78 (6)	H52A—C52—H52B	109.5
O19—Mn4—O20	88.57 (5)	H52A—C52—H52C	109.5
O19—Mn4—O22	89.64 (6)	H52B—C52—H52C	109.5
O19—Mn4—N6	85.65 (6)	O12—C53—O13	125.68 (19)
O20—Mn4—O22	178.20 (6)	O12—C53—C54	116.39 (18)
O20—Mn4—N6	86.48 (6)	O13—C53—C54	117.92 (18)
O22—Mn4—N6	93.20 (6)	C55—C54—C53	121.96 (19)
C1—O1—Mn2	136.20 (13)	C55—C54—C59	118.4 (2)
C1—O2—Mn1	135.80 (14)	C59—C54—C53	119.61 (19)
C9—O3—Mn1	132.79 (14)	C54—C55—H55	119.7
C9—O4—Mn2	139.38 (13)	C56—C55—C54	120.7 (2)
C17—O6—Mn2	126.66 (13)	C56—C55—H55	119.7
C25—O8—Mn1	126.00 (13)	C55—C56—C57	121.5 (2)
Mn1—O9—Mn2	114.68 (6)	C55—C56—H56	119.2
Mn1—O9—H9A	96.9 (17)	C57—C56—H56	119.2
Mn1—O9—H9B	120 (2)	C56—C57—C58	117.5 (2)
Mn2—O9—H9A	118.6 (17)	C56—C57—C60	121.4 (2)
Mn2—O9—H9B	95 (2)	C58—C57—C60	121.1 (2)
H9A—O9—H9B	113 (3)	C57—C58—H58	119.4
C48—O10—Mn1	139.39 (14)	C59—C58—C57	121.2 (2)
C43 <sup>i</sup> —O11—Mn2	144.18 (14)	C59—C58—H58	119.4
C53—O12—Mn4	138.85 (13)	C54—C59—H59	119.7
C53—O13—Mn3	131.60 (14)	C58—C59—C54	120.6 (2)
C61—O14—Mn4	137.28 (13)	C58—C59—H59	119.7
C61—O15—Mn3	134.89 (14)	C57—C60—H60A	109.5
C69—O17—Mn3	126.80 (13)	C57—C60—H60B	109.5
C77—O19—Mn4	125.56 (13)	C57—C60—H60C	109.5
C95—O20—Mn4	143.45 (14)	H60A—C60—H60B	109.5
C100—O21—Mn3	146.13 (14)	H60A—C60—H60C	109.5
Mn3—O22—Mn4	113.16 (6)	H60B—C60—H60C	109.5
Mn3—O22—H22A	99.9 (16)	O14—C61—C62	115.51 (18)
Mn3—O22—H22B	119 (2)	O15—C61—O14	126.27 (19)
Mn4—O22—H22A	118.4 (16)	O15—C61—C62	118.21 (18)

Mn4—O22—H22B	95 (2)	C63—C62—C61	121.92 (18)
H22A—O22—H22B	113 (3)	C67—C62—C61	119.52 (18)
C33—N1—Mn2	124.49 (14)	C67—C62—C63	118.56 (19)
C33—N1—C37	117.62 (18)	C62—C63—H63	119.8
C37—N1—Mn2	117.75 (14)	C64—C63—C62	120.5 (2)
C38—N2—Mn1	121.24 (14)	C64—C63—H63	119.8
C42—N2—Mn1	120.29 (13)	C63—C64—C65	121.0 (2)
C42—N2—C38	117.38 (18)	C63—C64—H64	119.5
C43—N3—C44	124.34 (18)	C65—C64—H64	119.5
C43—N3—C46	117.55 (17)	C64—C65—C68	121.5 (2)
C46—N3—C44	117.64 (17)	C66—C65—C64	118.06 (19)
C48—N4—C49	119.05 (17)	C66—C65—C68	120.40 (19)
C48—N4—C51	122.86 (18)	C65—C66—H66	119.5
C49—N4—C51	118.08 (17)	C67—C66—C65	121.0 (2)
C85—N5—Mn3	118.94 (13)	C67—C66—H66	119.5
C85—N5—C89	117.71 (18)	C62—C67—H67	119.6
C89—N5—Mn3	122.73 (14)	C66—C67—C62	120.9 (2)
C90—N6—Mn4	126.99 (14)	C66—C67—H67	119.6
C94—N6—Mn4	115.46 (14)	C65—C68—H68A	109.5
C94—N6—C90	117.40 (18)	C65—C68—H68B	109.5
C95—N7—C96	123.95 (18)	C65—C68—H68C	109.5
C95—N7—C98	117.56 (18)	H68A—C68—H68B	109.5
C98—N7—C96	117.96 (17)	H68A—C68—H68C	109.5
C100—N8—C101	118.32 (17)	H68B—C68—H68C	109.5
C100—N8—C103	123.07 (17)	O16—C69—O17	125.0 (2)
C103—N8—C101	118.50 (17)	O16—C69—C70	116.66 (19)
O1—C1—C2	116.18 (18)	O17—C69—C70	118.28 (19)
O2—C1—O1	126.35 (19)	C71—C70—C69	121.2 (2)
O2—C1—C2	117.45 (18)	C71—C70—C75	118.2 (2)
C3—C2—C1	119.81 (19)	C75—C70—C69	120.65 (19)
C3—C2—C7	118.72 (19)	C70—C71—C72	120.3 (2)
C7—C2—C1	121.42 (18)	C70—C71—H71	119.8
C2—C3—H3	119.7	C72—C71—H71	119.8
C4—C3—C2	120.7 (2)	C71—C72—H72	119.2
C4—C3—H3	119.7	C73—C72—C71	121.7 (2)
C3—C4—C5	120.9 (2)	C73—C72—H72	119.2
C3—C4—H4	119.5	C72—C73—C74	117.5 (2)
C5—C4—H4	119.5	C72—C73—C76	122.1 (2)
C4—C5—C8	120.3 (2)	C74—C73—C76	120.3 (2)

C6—C5—C4	118.21 (19)	C73—C74—H74	119.3
C6—C5—C8	121.4 (2)	C75—C74—C73	121.4 (2)
C5—C6—H6	119.5	C75—C74—H74	119.3
C7—C6—C5	121.0 (2)	C70—C75—H75	119.5
C7—C6—H6	119.5	C74—C75—C70	120.9 (2)
C2—C7—H7	119.8	C74—C75—H75	119.5
C6—C7—C2	120.3 (2)	C73—C76—H76A	109.5
C6—C7—H7	119.8	C73—C76—H76B	109.5
C5—C8—H8A	109.5	C73—C76—H76C	109.5
C5—C8—H8B	109.5	H76A—C76—H76B	109.5
C5—C8—H8C	109.5	H76A—C76—H76C	109.5
H8A—C8—H8B	109.5	H76B—C76—H76C	109.5
H8A—C8—H8C	109.5	O18—C77—O19	125.1 (2)
H8B—C8—H8C	109.5	O18—C77—C78	117.55 (19)
O3—C9—C10	117.14 (18)	O19—C77—C78	117.31 (18)
O4—C9—O3	125.93 (19)	C83—C78—C79	118.6 (2)
O4—C9—C10	116.90 (18)	C83—C78—C77	121.03 (19)
C11—C10—C9	120.30 (19)	C79—C78—C77	120.38 (19)
C15—C10—C9	121.41 (19)	C78—C79—C80	120.6 (2)
C15—C10—C11	118.3 (2)	C78—C79—H79	119.7
C10—C11—H11	119.7	C80—C79—H79	119.7
C12—C11—C10	120.5 (2)	C79—C80—C81	121.4 (2)
C12—C11—H11	119.7	C79—C80—H80	119.3
C11—C12—C13	121.1 (2)	C81—C80—H80	119.3
C11—C12—H12	119.4	C80—C81—C82	117.5 (2)
C13—C12—H12	119.4	C80—C81—C84	121.5 (2)
C12—C13—C16	120.8 (2)	C82—C81—C84	121.0 (2)
C14—C13—C12	118.3 (2)	C81—C82—H82	119.3
C14—C13—C16	120.9 (2)	C83—C82—C81	121.3 (2)
C13—C14—C15	120.7 (2)	C83—C82—H82	119.3
C13—C14—H14	119.6	C78—C83—C82	120.6 (2)
C15—C14—H14	119.6	C78—C83—H83	119.7
C10—C15—C14	121.0 (2)	C82—C83—H83	119.7
C10—C15—H15	119.5	C81—C84—H84A	109.5
C14—C15—H15	119.5	C81—C84—H84B	109.5
C13—C16—H16A	109.5	C81—C84—H84C	109.5
C13—C16—H16B	109.5	H84A—C84—H84B	109.5
C13—C16—H16C	109.5	H84A—C84—H84C	109.5
H16A—C16—H16B	109.5	H84B—C84—H84C	109.5

H16A—C16—H16C	109.5	N5—C85—C86	123.48 (19)
H16B—C16—H16C	109.5	N5—C85—H85	118.3
O5—C17—O6	124.73 (19)	C86—C85—H85	118.3
O5—C17—C18	117.28 (18)	C85—C86—C87	117.8 (2)
O6—C17—C18	117.99 (18)	C85—C86—C95 <sup>i</sup>	117.21 (18)
C19—C18—C17	121.26 (19)	C87—C86—C95 <sup>i</sup>	124.91 (19)
C19—C18—C23	118.5 (2)	C88—C87—C86	118.8 (2)
C23—C18—C17	120.26 (19)	C88—C87—H87	120.6
C18—C19—C20	120.7 (2)	C86—C87—H87	120.6
C18—C19—H19	119.6	C87—C88—H88	120.4
C20—C19—H19	119.6	C89—C88—C87	119.3 (2)
C19—C20—H20	119.4	C89—C88—H88	120.4
C21—C20—C19	121.2 (2)	N5—C89—C88	122.9 (2)
C21—C20—H20	119.4	N5—C89—H89	118.5
C20—C21—C22	117.8 (2)	C88—C89—H89	118.5
C20—C21—C24	121.6 (2)	N6—C90—C91	122.7 (2)
C22—C21—C24	120.6 (2)	N6—C90—H90	118.7
C21—C22—H22	119.4	C91—C90—H90	118.7
C23—C22—C21	121.3 (2)	C90—C91—C92	119.6 (2)
C23—C22—H22	119.4	C90—C91—H91	120.2
C18—C23—H23	119.7	C92—C91—H91	120.2
C22—C23—C18	120.5 (2)	C91—C92—C93	118.3 (2)
C22—C23—H23	119.7	C91—C92—H92	120.8
C21—C24—H24A	109.5	C93—C92—H92	120.8
C21—C24—H24B	109.5	C92—C93—C100 <sup>ii</sup>	124.11 (19)
C21—C24—H24C	109.5	C94—C93—C92	118.32 (19)
H24A—C24—H24B	109.5	C94—C93—C100 <sup>ii</sup>	117.50 (18)
H24A—C24—H24C	109.5	N6—C94—C93	123.62 (19)
H24B—C24—H24C	109.5	N6—C94—H94	118.2
O7—C25—O8	125.4 (2)	C93—C94—H94	118.2
O7—C25—C26	116.86 (19)	O20—C95—N7	121.7 (2)
O8—C25—C26	117.77 (19)	O20—C95—C86 <sup>ii</sup>	118.05 (18)
C31—C26—C27	118.6 (2)	N7—C95—C86 <sup>ii</sup>	120.13 (18)
C31—C26—C25	120.8 (2)	N7—C96—C97	113.40 (19)
C27—C26—C25	120.5 (2)	N7—C96—H96A	108.9
C26—C27—H27	119.8	N7—C96—H96B	108.9
C28—C27—C26	120.4 (2)	C97—C96—H96A	108.9
C28—C27—H27	119.8	C97—C96—H96B	108.9
C27—C28—C29	121.5 (3)	H96A—C96—H96B	107.7

C27—C28—H28	119.2	C96—C97—H97A	109.5
C29—C28—H28	119.2	C96—C97—H97B	109.5
C28—C29—C32	120.7 (3)	C96—C97—H97C	109.5
C30—C29—C28	117.6 (2)	H97A—C97—H97B	109.5
C30—C29—C32	121.7 (3)	H97A—C97—H97C	109.5
C29—C30—C31	121.5 (3)	H97B—C97—H97C	109.5
C29—C30—H30	119.3	N7—C98—C99	113.18 (19)
C31—C30—H30	119.3	N7—C98—H98A	108.9
C26—C31—C30	120.3 (2)	N7—C98—H98B	108.9
C26—C31—H31	119.8	C99—C98—H98A	108.9
C30—C31—H31	119.8	C99—C98—H98B	108.9
C29—C32—H32A	109.5	H98A—C98—H98B	107.8
C29—C32—H32B	109.5	C98—C99—H99A	109.5
C29—C32—H32C	109.5	C98—C99—H99B	109.5
H32A—C32—H32B	109.5	C98—C99—H99C	109.5
H32A—C32—H32C	109.5	H99A—C99—H99B	109.5
H32B—C32—H32C	109.5	H99A—C99—H99C	109.5
N1—C33—C34	122.7 (2)	H99B—C99—H99C	109.5
N1—C33—H33	118.7	O21—C100—N8	121.72 (19)
C34—C33—H33	118.7	O21—C100—C93 <sup>i</sup>	119.68 (18)
C33—C34—H34	120.3	N8—C100—C93 <sup>i</sup>	118.45 (17)
C35—C34—C33	119.4 (2)	N8—C101—C102	112.10 (19)
C35—C34—H34	120.3	N8—C101—H10A	109.2
C34—C35—C36	118.6 (2)	N8—C101—H10B	109.2
C34—C35—H35	120.7	C102—C101—H10A	109.2
C36—C35—H35	120.7	C102—C101—H10B	109.2
C35—C36—C37	118.39 (19)	H10A—C101—H10B	107.9
C35—C36—C48 <sup>i</sup>	122.52 (19)	C101—C102—H10H	109.5
C37—C36—C48 <sup>i</sup>	119.01 (18)	C101—C102—H10I	109.5
N1—C37—C36	123.30 (19)	C101—C102—H10J	109.5
N1—C37—H37	118.3	H10H—C102—H10I	109.5
C36—C37—H37	118.3	H10H—C102—H10J	109.5
N2—C38—C39	123.0 (2)	H10I—C102—H10J	109.5
N2—C38—H38	118.5	N8—C103—C104	113.38 (18)
C39—C38—H38	118.5	N8—C103—H10C	108.9
C38—C39—H39	120.5	N8—C103—H10D	108.9
C40—C39—C38	119.0 (2)	C104—C103—H10C	108.9
C40—C39—H39	120.5	C104—C103—H10D	108.9
C39—C40—C41	119.1 (2)	H10C—C103—H10D	107.7

C39—C40—H40	120.5	C103—C104—H10E	109.5
C41—C40—H40	120.5	C103—C104—H10F	109.5
C40—C41—C43	124.26 (19)	C103—C104—H10G	109.5
C42—C41—C40	117.7 (2)	H10E—C104—H10F	109.5
C42—C41—C43	117.84 (18)	H10E—C104—H10G	109.5
N2—C42—C41	123.75 (19)	H10F—C104—H10G	109.5
O3—Mn1—O2—C1	-79.9 (2)	C96—N7—C95—C86 <sup>ii</sup>	-3.1 (3)
O8—Mn1—O2—C1	101.1 (2)	C98—N7—C95—O20	1.9 (3)
O9—Mn1—O2—C1	12.3 (2)	C98—N7—C95—C86 <sup>ii</sup>	-174.63 (18)
N2—Mn1—O2—C1	-164.3 (2)	C95—N7—C96—C97	-83.4 (3)
O2—Mn1—O3—C9	66.64 (18)	C98—N7—C96—C97	88.1 (2)
O9—Mn1—O3—C9	-25.94 (18)	C95—N7—C98—C99	72.9 (2)
O10—Mn1—O3—C9	-116.98 (18)	C96—N7—C98—C99	-99.1 (2)
N2—Mn1—O3—C9	150.36 (18)	C101—N8—C100—O21	3.8 (3)
O2—Mn1—O8—C25	-73.48 (17)	C101—N8—C100—C93 <sup>i</sup>	-171.83 (18)
O9—Mn1—O8—C25	18.89 (17)	C103—N8—C100—O21	179.7 (2)
O10—Mn1—O8—C25	110.06 (17)	C103—N8—C100—C93 <sup>i</sup>	4.2 (3)
N2—Mn1—O8—C25	-157.65 (17)	C100—N8—C101—C102	72.1 (2)
O3—Mn1—O9—Mn2	51.35 (8)	C103—N8—C101—C102	-104.1 (2)
O2—Mn1—O9—Mn2	-46.34 (8)	C100—N8—C103—C104	-98.1 (2)
O8—Mn1—O9—Mn2	-133.14 (8)	C101—N8—C103—C104	77.9 (2)
O10—Mn1—O9—Mn2	137.67 (7)	O1—C1—C2—C3	-11.1 (3)
O3—Mn1—O10—C48	-152.6 (2)	O1—C1—C2—C7	166.19 (19)
O8—Mn1—O10—C48	26.7 (2)	O2—C1—C2—C3	170.53 (19)
O9—Mn1—O10—C48	115.6 (2)	O2—C1—C2—C7	-12.2 (3)
N2—Mn1—O10—C48	-67.6 (2)	C4—C3—C2—C1	174.29 (19)
O2—Mn1—N2—C38	-29.95 (15)	C4—C3—C2—C7	-3.1 (3)
O2—Mn1—N2—C42	137.82 (15)	C5—C4—C3—C2	-0.2 (3)
O3—Mn1—N2—C38	-128.09 (15)	C6—C5—C4—C3	3.5 (3)
O3—Mn1—N2—C42	39.68 (14)	C8—C5—C4—C3	-172.6 (2)
O8—Mn1—N2—C38	56.46 (15)	C4—C5—C6—C7	-3.4 (3)
O8—Mn1—N2—C42	-135.77 (14)	C8—C5—C6—C7	172.6 (2)
O10—Mn1—N2—C38	145.84 (15)	C5—C6—C7—C2	0.1 (3)
O10—Mn1—N2—C42	-46.39 (15)	C6—C7—C2—C1	-174.18 (19)
O4—Mn2—O1—C1	56.3 (2)	C6—C7—C2—C3	3.1 (3)
O9—Mn2—O1—C1	-33.7 (2)	O4—C9—C10—C15	-169.21 (19)
O11—Mn2—O1—C1	145.2 (2)	O3—C9—C10—C15	9.3 (3)
N1—Mn2—O1—C1	-127.8 (2)	O4—C9—C10—C11	11.9 (3)
O1—Mn2—O4—C9	-79.6 (2)	O3—C9—C10—C11	-169.58 (19)



O6—Mn2—O4—C9	98.5 (2)	C11—C10—C15—C14	0.1 (3)
O9—Mn2—O4—C9	9.9 (2)	C9—C10—C15—C14	-178.75 (19)
O11—Mn2—O4—C9	-168.3 (2)	C12—C11—C10—C15	-0.9 (3)
O4—Mn2—O6—C17	-79.50 (17)	C12—C11—C10—C9	177.93 (19)
O9—Mn2—O6—C17	10.48 (17)	C10—C11—C12—C13	0.5 (3)
O11—Mn2—O6—C17	-168.68 (17)	C15—C14—C13—C12	-1.5 (3)
N1—Mn2—O6—C17	104.74 (17)	C15—C14—C13—C16	178.7 (2)
O1—Mn2—O9—Mn1	51.85 (8)	C11—C12—C13—C14	0.7 (3)
O4—Mn2—O9—Mn1	-45.90 (8)	C11—C12—C13—C16	-179.5 (2)
O6—Mn2—O9—Mn1	-137.35 (8)	C13—C14—C15—C10	1.1 (3)
N1—Mn2—O9—Mn1	138.08 (8)	C19—C18—C17—O5	172.8 (2)
O1—Mn2—N1—C33	30.76 (16)	C19—C18—C17—O6	-8.2 (3)
O1—Mn2—N1—C37	-144.83 (14)	C23—C18—C17—O5	-6.7 (3)
O6—Mn2—N1—C33	-146.69 (16)	C23—C18—C17—O6	172.3 (2)
O6—Mn2—N1—C37	37.72 (14)	C17—C18—C19—C20	179.9 (2)
O9—Mn2—N1—C33	-58.46 (16)	C23—C18—C19—C20	-0.6 (4)
O9—Mn2—N1—C37	125.94 (14)	C17—C18—C23—C22	179.8 (2)
O11—Mn2—N1—C33	119.86 (16)	C19—C18—C23—C22	0.3 (3)
O11—Mn2—N1—C37	-55.74 (14)	C21—C20—C19—C18	0.0 (4)
O15—Mn3—O13—C53	-66.18 (18)	C19—C20—C21—C22	0.9 (4)
O21—Mn3—O13—C53	119.44 (18)	C19—C20—C21—C24	179.8 (2)
O22—Mn3—O13—C53	28.84 (18)	C20—C21—C22—C23	-1.1 (4)
N5—Mn3—O13—C53	-149.08 (18)	C24—C21—C22—C23	180.0 (2)
O13—Mn3—O15—C61	74.1 (2)	C21—C22—C23—C18	0.5 (4)
O17—Mn3—O15—C61	-105.2 (2)	O7—C25—O8—Mn1	-19.4 (3)
O22—Mn3—O15—C61	-16.3 (2)	C26—C25—O8—Mn1	160.32 (13)
N5—Mn3—O15—C61	156.2 (2)	O7—C25—C26—C27	-5.1 (3)
O15—Mn3—O17—C69	83.06 (17)	O7—C25—C26—C31	171.9 (2)
O21—Mn3—O17—C69	-102.60 (17)	O8—C25—C26—C27	175.1 (2)
O22—Mn3—O17—C69	-11.99 (17)	O8—C25—C26—C31	-7.9 (3)
N5—Mn3—O17—C69	167.09 (17)	C31—C26—C27—C28	0.5 (3)
O13—Mn3—O21—C100	156.8 (3)	C25—C26—C27—C28	177.6 (2)
O17—Mn3—O21—C100	-24.7 (3)	C25—C26—C31—C30	-176.5 (2)
O22—Mn3—O21—C100	-113.7 (3)	C27—C26—C31—C30	0.6 (3)
N5—Mn3—O21—C100	73.6 (3)	C29—C28—C27—C26	-1.3 (4)
O13—Mn3—O22—Mn4	-56.91 (8)	C30—C29—C28—C27	1.1 (4)
O15—Mn3—O22—Mn4	43.72 (8)	C32—C29—C28—C27	-178.4 (2)
O17—Mn3—O22—Mn4	132.11 (8)	C28—C29—C30—C31	0.0 (4)
O21—Mn3—O22—Mn4	-141.38 (8)	C32—C29—C30—C31	179.5 (2)

O13—Mn3—N5—C85	-44.99 (14)	C26—C31—C30—C29	-0.8 (4)
O13—Mn3—N5—C89	125.77 (16)	N1—C33—C34—C35	0.8 (3)
O15—Mn3—N5—C85	-146.43 (14)	C36—C35—C34—C33	-1.5 (3)
O15—Mn3—N5—C89	24.33 (15)	C34—C35—C36—C37	0.8 (3)
O17—Mn3—N5—C85	125.95 (14)	C34—C35—C36—C48 <sup>i</sup>	177.45 (18)
O17—Mn3—N5—C89	-63.30 (16)	N1—C37—C36—C35	0.8 (3)
O21—Mn3—N5—C85	39.35 (14)	N1—C37—C36—C48 <sup>i</sup>	-175.99 (18)
O21—Mn3—N5—C89	-149.90 (15)	C40—C39—C38—N2	0.0 (3)
O14—Mn4—O12—C53	84.7 (2)	C38—C39—C40—C41	1.6 (3)
O19—Mn4—O12—C53	-97.1 (2)	C42—C41—C40—C39	-1.5 (3)
O20—Mn4—O12—C53	174.3 (2)	C43—C41—C40—C39	173.70 (18)
O22—Mn4—O12—C53	-7.5 (2)	C40—C41—C42—N2	-0.2 (3)
O12—Mn4—O14—C61	-59.5 (2)	C43—C41—C42—N2	-175.73 (17)
O20—Mn4—O14—C61	-150.7 (2)	C40—C41—C43—O11 <sup>ii</sup>	-120.2 (2)
O22—Mn4—O14—C61	29.7 (2)	C40—C41—C43—N3	61.7 (3)
N6—Mn4—O14—C61	122.8 (2)	C42—C41—C43—O11 <sup>ii</sup>	55.0 (3)
O12—Mn4—O19—C77	66.94 (17)	C42—C41—C43—N3	-123.1 (2)
O20—Mn4—O19—C77	158.19 (17)	C41—C42—N2—Mn1	-166.44 (15)
O22—Mn4—O19—C77	-22.00 (17)	C41—C42—N2—C38	1.8 (3)
N6—Mn4—O19—C77	-115.24 (17)	N4—C48—O10—Mn1	-132.5 (2)
O12—Mn4—O20—C95	-86.5 (2)	C36 <sup>ii</sup> —C48—O10—Mn1	49.8 (3)
O14—Mn4—O20—C95	10.5 (2)	O12—C53—C54—C55	167.60 (19)
O19—Mn4—O20—C95	-177.0 (2)	O12—C53—C54—C59	-11.5 (3)
N6—Mn4—O20—C95	97.3 (2)	O13—C53—C54—C55	-10.8 (3)
O12—Mn4—O22—Mn3	50.24 (8)	O13—C53—C54—C59	170.05 (19)
O14—Mn4—O22—Mn3	-46.76 (8)	C53—C54—C55—C56	-177.29 (19)
O19—Mn4—O22—Mn3	140.72 (8)	C59—C54—C55—C56	1.8 (3)
N6—Mn4—O22—Mn3	-133.66 (8)	C55—C54—C59—C58	-1.1 (3)
O14—Mn4—N6—C90	-37.95 (16)	C53—C54—C59—C58	178.02 (19)
O14—Mn4—N6—C94	137.43 (14)	C57—C56—C55—C54	-0.9 (3)
O19—Mn4—N6—C90	143.58 (17)	C55—C56—C57—C58	-0.8 (3)
O19—Mn4—N6—C94	-41.05 (14)	C55—C56—C57—C60	178.4 (2)
O20—Mn4—N6—C90	-127.59 (17)	C59—C58—C57—C56	1.6 (3)
O20—Mn4—N6—C94	47.78 (14)	C59—C58—C57—C60	-177.7 (2)
O22—Mn4—N6—C90	54.18 (17)	C57—C58—C59—C54	-0.6 (3)
O22—Mn4—N6—C94	-130.44 (14)	C67—C62—C61—O14	12.2 (3)
Mn2—O1—C1—O2	1.6 (4)	C67—C62—C61—O15	-168.26 (19)
Mn2—O1—C1—C2	-176.61 (13)	C63—C62—C61—O14	-168.89 (19)
Mn1—O2—C1—O1	12.9 (3)	C63—C62—C61—O15	10.7 (3)

Mn1—O2—C1—C2	-168.92 (14)	C61—C62—C67—C66	-179.78 (19)
Mn1—O3—C9—O4	-9.7 (3)	C63—C62—C67—C66	1.3 (3)
Mn1—O3—C9—C10	172.00 (13)	C64—C63—C62—C61	-179.99 (19)
Mn2—O4—C9—O3	21.0 (3)	C64—C63—C62—C67	-1.1 (3)
Mn2—O4—C9—C10	-160.69 (15)	C62—C63—C64—C65	0.0 (3)
Mn2—O6—C17—O5	3.8 (3)	C66—C65—C64—C63	0.8 (3)
Mn2—O6—C17—C18	-175.16 (13)	C68—C65—C64—C63	-177.7 (2)
C43 <sup>i</sup> —O11—Mn2—O1	0.3 (2)	C64—C65—C66—C67	-0.6 (3)
C43 <sup>i</sup> —O11—Mn2—O4	98.0 (2)	C68—C65—C66—C67	177.9 (2)
C43 <sup>i</sup> —O11—Mn2—O6	-170.5 (2)	C62—C67—C66—C65	-0.4 (3)
C43 <sup>i</sup> —O11—Mn2—N1	-86.0 (2)	C71—C70—C69—O16	175.77 (19)
Mn4—O12—C53—O13	-27.6 (3)	C71—C70—C69—O17	-5.0 (3)
Mn4—O12—C53—C54	154.13 (16)	C75—C70—C69—O16	-6.0 (3)
Mn3—O13—C53—O12	12.3 (3)	C75—C70—C69—O17	173.2 (2)
Mn3—O13—C53—C54	-169.43 (13)	C69—C70—C71—C72	177.3 (2)
Mn4—O14—C61—O15	-1.2 (4)	C75—C70—C71—C72	-0.9 (3)
Mn4—O14—C61—C62	178.30 (14)	C69—C70—C75—C74	-176.7 (2)
Mn3—O15—C61—O14	-7.7 (3)	C71—C70—C75—C74	1.6 (3)
Mn3—O15—C61—C62	172.76 (13)	C70—C71—C72—C73	-1.2 (3)
Mn3—O17—C69—O16	8.6 (3)	C71—C72—C73—C74	2.7 (3)
Mn3—O17—C69—C70	-170.54 (13)	C71—C72—C73—C76	-175.6 (2)
Mn4—O19—C77—O18	10.9 (3)	C72—C73—C74—C75	-2.0 (4)
Mn4—O19—C77—C78	-169.13 (14)	C76—C73—C74—C75	176.3 (2)
Mn2—N1—C33—C34	-174.91 (15)	C70—C75—C74—C73	-0.1 (4)
C37—N1—C33—C34	0.7 (3)	O18—C77—C78—C79	-1.4 (3)
Mn2—N1—C37—C36	174.37 (15)	O18—C77—C78—C83	178.0 (2)
C33—N1—C37—C36	-1.5 (3)	O19—C77—C78—C79	178.6 (2)
Mn1—N2—C38—C39	166.40 (15)	O19—C77—C78—C83	-2.0 (3)
C42—N2—C38—C39	-1.7 (3)	C77—C78—C83—C82	-179.8 (2)
C44—N3—C43—O11 <sup>ii</sup>	-170.87 (19)	C79—C78—C83—C82	-0.4 (4)
C44—N3—C43—C41	7.1 (3)	C80—C79—C78—C77	-179.9 (2)
C46—N3—C43—O11 <sup>ii</sup>	1.0 (3)	C80—C79—C78—C83	0.7 (3)
C46—N3—C43—C41	178.99 (18)	C78—C79—C80—C81	-0.9 (4)
C43—N3—C44—C45	89.3 (3)	C82—C81—C80—C79	0.9 (4)
C46—N3—C44—C45	-82.6 (2)	C84—C81—C80—C79	-180.0 (2)
C43—N3—C46—C47	-72.9 (2)	C83—C82—C81—C80	-0.6 (4)
C44—N3—C46—C47	99.5 (2)	C83—C82—C81—C84	-179.8 (2)
C49—N4—C48—O10	0.3 (3)	C81—C82—C83—C78	0.4 (4)
C49—N4—C48—C36 <sup>ii</sup>	178.03 (18)	C87—C86—C85—N5	1.1 (3)

C51—N4—C48—O10	-178.5 (2)	C95 <sup>i</sup> —C86—C85—N5	177.86 (17)
C51—N4—C48—C36 <sup>ii</sup>	-0.8 (3)	C88—C87—C86—C85	0.2 (3)
C48—N4—C49—C50	-77.2 (3)	C88—C87—C86—C95 <sup>i</sup>	-176.26 (18)
C51—N4—C49—C50	101.6 (2)	N5—C89—C88—C87	0.9 (3)
C48—N4—C51—C52	97.0 (3)	C86—C87—C88—C89	-1.1 (3)
C49—N4—C51—C52	-81.8 (2)	C92—C91—C90—N6	-1.1 (3)
Mn3—N5—C85—C86	169.80 (15)	C90—C91—C92—C93	2.6 (3)
Mn3—N5—C89—C88	-170.47 (15)	C94—C93—C92—C91	-2.0 (3)
C85—N5—C89—C88	0.4 (3)	C100 <sup>ii</sup> —C93—C92—C91	-178.93 (19)
C89—N5—C85—C86	-1.4 (3)	C92—C93—C94—N6	-0.3 (3)
Mn4—N6—C90—C91	174.16 (15)	C100 <sup>ii</sup> —C93—C94—N6	176.89 (18)
Mn4—N6—C94—C93	-174.02 (15)	N7—C95—O20—Mn4	100.6 (3)
C94—N6—C90—C91	-1.1 (3)	C86 <sup>ii</sup> —C95—O20—Mn4	-82.8 (3)
C90—N6—C94—C93	1.8 (3)	N8—C100—O21—Mn3	134.9 (2)
C96—N7—C95—O20	173.37 (19)	C93 <sup>i</sup> —C100—O21—Mn3	-49.5 (3)

---

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

---

Ek Çizelge 20. (12) kristalinin hidrojen bağı geometrisi (Å, °)

---

Cg1, Cg5, Cg10 ve Cg12 sırasıyla C2–C7, N1/C33–C37, C78–C83 ve N6/C90–C94 halkalarının merkezleridir.

$D-H\cdots A$	$D-H$	$H\cdots A$	$D\cdots A$	$D-H\cdots A$
O9—H9A $\cdots$ O7	0.94 (3)	1.62 (3)	2.552 (2)	170 (3)
O9—H9B $\cdots$ O5	0.94 (2)	1.59 (2)	2.520 (2)	173 (3)
O22—H22A $\cdots$ O16	0.92 (3)	1.64 (3)	2.544 (2)	166 (2)
O22—H22B $\cdots$ O18	0.97 (4)	1.60 (4)	2.558 (2)	169 (3)
C52—H52A $\cdots$ Cg12 <sup>ii</sup>	0.96	2.87	3.782 (3)	160
C60—H60C $\cdots$ Cg1 <sup>iii</sup>	0.96	2.99	3.841 (3)	149
C84—H84B $\cdots$ Cg10 <sup>iv</sup>	0.96	2.88	3.609 (3)	134
C104—H10E $\cdots$ Cg5 <sup>i</sup>	0.96	2.82	3.709 (3)	155

---

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

---

Ek Çizelge 21. (13) kristalinin fraksiyonel atomik koordinatları ve izotropik veya eşdeğer izotropik yerdeğiştirme parametreleri ( $\text{\AA}^2$ )

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$U_{\text{iso}}^*/U_{\text{eq}}$
Co1	0.0000	0.0000	0.0000	0.01216 (9)
O1	-0.07573 (18)	0.12790 (16)	-0.20025 (8)	0.0182 (3)
O2	0.11412 (18)	0.12158 (15)	-0.10611 (7)	0.0152 (2)
O3	0.84302 (19)	-0.32653 (16)	-0.12244 (8)	0.0190 (3)
O4	0.22201 (18)	0.01547 (16)	0.06192 (8)	0.0164 (3)
H41	0.191 (4)	-0.036 (3)	0.1190 (12)	0.058 (9)*
H42	0.211 (4)	0.117 (2)	0.0762 (16)	0.046 (8)*
N1	0.2241 (2)	-0.23699 (18)	-0.04865 (9)	0.0138 (3)
N2	0.8480 (2)	-0.42543 (18)	-0.24793 (9)	0.0170 (3)
C1	0.0833 (3)	0.1274 (2)	-0.18126 (11)	0.0142 (3)
C2	0.2508 (3)	0.1341 (2)	-0.25355 (11)	0.0148 (3)
C3	0.2310 (3)	0.1313 (2)	-0.33787 (11)	0.0168 (3)
H3	0.1161	0.1212	-0.3492	0.020*
C4	0.3813 (3)	0.1434 (2)	-0.40496 (11)	0.0189 (4)
H4	0.3655	0.1425	-0.4609	0.023*
C5	0.5557 (3)	0.1569 (2)	-0.38953 (11)	0.0191 (4)
C6	0.5781 (3)	0.1543 (2)	-0.30536 (12)	0.0192 (4)
H6	0.6952	0.1603	-0.2940	0.023*
C7	0.4276 (3)	0.1429 (2)	-0.23807 (11)	0.0165 (3)
H7	0.4450	0.1411	-0.1822	0.020*
C8	0.7177 (3)	0.1732 (3)	-0.46257 (13)	0.0298 (5)
H8A	0.7231	0.1117	-0.5104	0.045*
H8B	0.8468	0.1275	-0.4451	0.045*
H8C	0.6861	0.2907	-0.4786	0.045*
C9	0.1932 (3)	-0.3834 (2)	-0.03785 (11)	0.0146 (3)
H9	0.0700	-0.3831	-0.0063	0.018*
C10	0.3371 (3)	-0.5349 (2)	-0.07173 (11)	0.0162 (3)
H10	0.3102	-0.6339	-0.0631	0.019*
C11	0.5216 (3)	-0.5369 (2)	-0.11857 (11)	0.0157 (3)
H11	0.6200	-0.6366	-0.1426	0.019*
C12	0.5562 (3)	-0.3860 (2)	-0.12890 (10)	0.0138 (3)
C13	0.4048 (3)	-0.2405 (2)	-0.09221 (11)	0.0146 (3)
H13	0.4297	-0.1407	-0.0981	0.018*
C14	0.7599 (3)	-0.3773 (2)	-0.16750 (11)	0.0147 (3)

C15	0.7528 (3)	-0.4745 (2)	-0.30709 (11)	0.0203 (4)
H15A	0.6229	-0.4762	-0.2769	0.024*
H15B	0.8377	-0.5886	-0.3261	0.024*
C16	0.7198 (4)	-0.3567 (3)	-0.38450 (15)	0.0397 (6)
H16A	0.6555	-0.3943	-0.4203	0.060*
H16B	0.8482	-0.3575	-0.4160	0.060*
H16C	0.6348	-0.2435	-0.3663	0.060*
C17	1.0549 (3)	-0.4277 (2)	-0.27880 (12)	0.0211 (4)
H17A	1.1183	-0.5004	-0.3278	0.025*
H17B	1.1337	-0.4769	-0.2344	0.025*
C18	1.0623 (3)	-0.2529 (3)	-0.30397 (14)	0.0289 (5)
H18A	1.2009	-0.2634	-0.3226	0.043*
H18B	1.0014	-0.1803	-0.2556	0.043*
H18C	0.9891	-0.2050	-0.3495	0.043*

---

Ek Çizelge 22. (13) kristalinin atomik yerdeğiştirme parametreleri ( $\text{Å}^2$ )

---

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{12}$	$U^{13}$	$U^{23}$
Co1	0.01068 (16)	0.01085 (16)	0.01383 (17)	-0.00297 (12)	-0.00131 (12)	-0.00186 (12)
O1	0.0155 (6)	0.0201 (6)	0.0191 (6)	-0.0067 (5)	-0.0040 (5)	0.0007 (5)
O2	0.0162 (6)	0.0136 (6)	0.0154 (6)	-0.0054 (5)	-0.0021 (5)	-0.0013 (4)
O3	0.0168 (6)	0.0199 (6)	0.0224 (7)	-0.0086 (5)	-0.0028 (5)	-0.0044 (5)
O4	0.0148 (6)	0.0155 (6)	0.0200 (6)	-0.0065 (5)	-0.0032 (5)	-0.0023 (5)
N1	0.0125 (7)	0.0129 (7)	0.0156 (7)	-0.0041 (6)	-0.0029 (5)	-0.0011 (5)
N2	0.0163 (7)	0.0158 (7)	0.0183 (7)	-0.0067 (6)	0.0004 (6)	-0.0028 (6)
C1	0.0150 (8)	0.0073 (7)	0.0173 (8)	-0.0013 (6)	-0.0024 (7)	-0.0008 (6)
C2	0.0158 (8)	0.0100 (8)	0.0166 (8)	-0.0030 (6)	-0.0023 (7)	-0.0013 (6)
C3	0.0160 (8)	0.0154 (8)	0.0181 (8)	-0.0046 (7)	-0.0036 (7)	-0.0013 (6)
C4	0.0208 (9)	0.0194 (9)	0.0149 (8)	-0.0056 (7)	-0.0030 (7)	-0.0016 (7)
C5	0.0181 (9)	0.0192 (9)	0.0182 (9)	-0.0071 (7)	0.0008 (7)	-0.0014 (7)
C6	0.0170 (8)	0.0195 (9)	0.0219 (9)	-0.0076 (7)	-0.0029 (7)	-0.0023 (7)
C7	0.0171 (8)	0.0150 (8)	0.0164 (8)	-0.0045 (7)	-0.0041 (7)	-0.0013 (6)
C8	0.0252 (10)	0.0423 (13)	0.0219 (10)	-0.0159 (10)	0.0025 (8)	-0.0027 (9)
C9	0.0125 (8)	0.0154 (8)	0.0161 (8)	-0.0056 (7)	-0.0025 (6)	-0.0001 (6)
C10	0.0172 (8)	0.0125 (8)	0.0203 (9)	-0.0065 (7)	-0.0041 (7)	-0.0010 (6)
C11	0.0153 (8)	0.0125 (8)	0.0172 (8)	-0.0028 (7)	-0.0025 (7)	-0.0024 (6)
C12	0.0134 (8)	0.0145 (8)	0.0137 (8)	-0.0054 (7)	-0.0028 (6)	-0.0001 (6)

C13	0.0147 (8)	0.0128 (8)	0.0171 (8)	-0.0058 (7)	-0.0032 (7)	-0.0002 (6)
C14	0.0139 (8)	0.0095 (7)	0.0194 (8)	-0.0031 (6)	-0.0027 (7)	-0.0001 (6)
C15	0.0228 (9)	0.0198 (9)	0.0177 (9)	-0.0075 (8)	-0.0019 (7)	-0.0034 (7)
C16	0.0536 (15)	0.0448 (14)	0.0296 (12)	-0.0251 (12)	-0.0195 (11)	0.0120 (10)
C17	0.0173 (9)	0.0182 (9)	0.0242 (9)	-0.0063 (7)	0.0048 (7)	-0.0047 (7)
C18	0.0288 (11)	0.0219 (10)	0.0342 (11)	-0.0136 (9)	0.0065 (9)	-0.0028 (8)

---

Ek Çizelge 23. (13) kristalinin geometrik parametreleri (Å, °)

---

Co1—O2	2.0885 (12)	C7—C6	1.388 (2)
Co1—O2 <sup>i</sup>	2.0885 (12)	C7—H7	0.93
Co1—O4	2.1209 (12)	C8—H8A	0.96
Co1—O4 <sup>i</sup>	2.1209 (12)	C8—H8B	0.96
Co1—N1	2.1439 (14)	C8—H8C	0.96
Co1—N1 <sup>i</sup>	2.1439 (14)	C9—C10	1.386 (2)
O1—C1	1.257 (2)	C9—H9	0.93
O2—C1	1.266 (2)	C10—H10	0.93
O3—C14	1.238 (2)	C11—C10	1.385 (2)
O4—H41	0.996 (15)	C11—H11	0.93
O4—H42	0.889 (16)	C12—C11	1.394 (2)
N1—C9	1.342 (2)	C12—C13	1.385 (2)
N1—C13	1.341 (2)	C12—C14	1.506 (2)
N2—C14	1.340 (2)	C13—H13	0.93
N2—C15	1.465 (2)	C15—C16	1.516 (3)
N2—C17	1.474 (2)	C15—H15A	0.97
C1—C2	1.505 (2)	C15—H15B	0.97
C2—C3	1.394 (2)	C16—H16A	0.96
C3—H3	0.93	C16—H16B	0.96
C4—C3	1.387 (2)	C16—H16C	0.96
C4—C5	1.393 (3)	C17—C18	1.525 (3)
C4—H4	0.93	C17—H17A	0.97
C5—C8	1.511 (3)	C17—H17B	0.97
C6—C5	1.392 (3)	C18—H18A	0.96
C6—H6	0.93	C18—H18B	0.96
C7—C2	1.393 (2)	C18—H18C	0.96
O2 <sup>i</sup> —Co1—O2	180.00 (5)	C5—C8—H8B	109.5
O2—Co1—O4	88.07 (5)	C5—C8—H8C	109.5

O2 <sup>i</sup> —Co1—O4	91.93 (5)	H8A—C8—H8B	109.5
O2—Co1—O4 <sup>i</sup>	91.93 (5)	H8A—C8—H8C	109.5
O2 <sup>i</sup> —Co1—O4 <sup>i</sup>	88.07 (5)	H8B—C8—H8C	109.5
O2—Co1—N1	88.47 (5)	N1—C9—C10	122.83 (15)
O2 <sup>i</sup> —Co1—N1	91.53 (5)	N1—C9—H9	118.6
O2—Co1—N1 <sup>i</sup>	91.53 (5)	C10—C9—H9	118.6
O2 <sup>i</sup> —Co1—N1 <sup>i</sup>	88.47 (5)	C9—C10—H10	120.5
O4—Co1—O4 <sup>i</sup>	180.00 (8)	C11—C10—C9	119.08 (16)
O4—Co1—N1	86.58 (5)	C11—C10—H10	120.5
O4 <sup>i</sup> —Co1—N1	93.42 (5)	C10—C11—C12	118.47 (15)
O4—Co1—N1 <sup>i</sup>	93.42 (5)	C10—C11—H11	120.8
O4 <sup>i</sup> —Co1—N1 <sup>i</sup>	86.58 (5)	C12—C11—H11	120.8
N1 <sup>i</sup> —Co1—N1	180.00 (8)	C11—C12—C14	123.16 (15)
C1—O2—Co1	126.53 (11)	C13—C12—C11	118.72 (15)
Co1—O4—H41	101.8 (17)	C13—C12—C14	117.57 (15)
Co1—O4—H42	118.7 (18)	N1—C13—C12	123.04 (16)
H41—O4—H42	101 (2)	N1—C13—H13	118.5
C9—N1—Co1	123.36 (11)	C12—C13—H13	118.5
C13—N1—Co1	118.83 (11)	O3—C14—N2	121.55 (16)
C13—N1—C9	117.81 (14)	O3—C14—C12	118.01 (15)
C14—N2—C15	124.66 (15)	N2—C14—C12	120.44 (15)
C14—N2—C17	117.31 (15)	N2—C15—C16	113.39 (16)
C15—N2—C17	118.03 (14)	N2—C15—H15A	108.9
O1—C1—O2	125.19 (16)	N2—C15—H15B	108.9
O1—C1—C2	117.52 (15)	C16—C15—H15A	108.9
O2—C1—C2	117.30 (15)	C16—C15—H15B	108.9
C3—C2—C1	120.15 (16)	H15A—C15—H15B	107.7
C7—C2—C1	121.17 (15)	C15—C16—H16A	109.5
C7—C2—C3	118.67 (16)	C15—C16—H16B	109.5
C2—C3—H3	119.7	C15—C16—H16C	109.5
C4—C3—C2	120.57 (17)	H16A—C16—H16B	109.5
C4—C3—H3	119.7	H16A—C16—H16C	109.5
C3—C4—C5	120.76 (17)	H16B—C16—H16C	109.5
C3—C4—H4	119.6	N2—C17—C18	113.83 (15)
C5—C4—H4	119.6	N2—C17—H17A	108.8
C4—C5—C8	120.76 (17)	N2—C17—H17B	108.8
C6—C5—C4	118.59 (16)	C18—C17—H17A	108.8
C6—C5—C8	120.65 (17)	C18—C17—H17B	108.8
C5—C6—H6	119.6	H17A—C17—H17B	107.7



C7—C6—C5	120.79 (17)	C17—C18—H18A	109.5
C7—C6—H6	119.6	C17—C18—H18B	109.5
C2—C7—H7	119.7	C17—C18—H18C	109.5
C6—C7—C2	120.57 (16)	H18A—C18—H18B	109.5
C6—C7—H7	119.7	H18A—C18—H18C	109.5
C5—C8—H8A	109.5	H18B—C18—H18C	109.5
O4—Co1—O2—C1	163.36 (13)	C15—N2—C17—C18	100.98 (19)
O4 <sup>i</sup> —Co1—O2—C1	-16.64 (13)	O1—C1—C2—C7	176.64 (15)
N1—Co1—O2—C1	76.73 (13)	O2—C1—C2—C7	-3.4 (2)
N1 <sup>i</sup> —Co1—O2—C1	-103.27 (13)	O1—C1—C2—C3	-3.4 (2)
O2—Co1—N1—C9	-147.01 (13)	O2—C1—C2—C3	176.48 (15)
O2 <sup>i</sup> —Co1—N1—C9	32.99 (13)	C1—C2—C3—C4	177.72 (15)
O4—Co1—N1—C9	124.83 (13)	C7—C2—C3—C4	-2.4 (3)
O4 <sup>i</sup> —Co1—N1—C9	-55.17 (13)	C5—C4—C3—C2	0.6 (3)
O2—Co1—N1—C13	32.98 (13)	C3—C4—C5—C6	1.3 (3)
O2 <sup>i</sup> —Co1—N1—C13	-147.02 (13)	C3—C4—C5—C8	-178.90 (18)
O4—Co1—N1—C13	-55.18 (13)	C7—C6—C5—C4	-1.6 (3)
O4 <sup>i</sup> —Co1—N1—C13	124.82 (13)	C7—C6—C5—C8	178.64 (18)
Co1—O2—C1—O1	31.7 (2)	C6—C7—C2—C1	-177.98 (16)
Co1—O2—C1—C2	-148.20 (11)	C6—C7—C2—C3	2.1 (2)
Co1—N1—C9—C10	178.06 (12)	C2—C7—C6—C5	-0.1 (3)
C13—N1—C9—C10	-1.9 (2)	N1—C9—C10—C11	0.3 (3)
Co1—N1—C13—C12	-177.42 (13)	C12—C11—C10—C9	0.8 (3)
C9—N1—C13—C12	2.6 (2)	C13—C12—C11—C10	-0.2 (2)
C15—N2—C14—O3	-175.13 (16)	C14—C12—C11—C10	171.09 (16)
C15—N2—C14—C12	5.7 (2)	C11—C12—C13—N1	-1.5 (3)
C17—N2—C14—O3	4.4 (2)	C14—C12—C13—N1	-173.31 (15)
C17—N2—C14—C12	-174.73 (15)	C11—C12—C14—O3	-118.02 (19)
C14—N2—C15—C16	116.2 (2)	C11—C12—C14—N2	61.2 (2)
C17—N2—C15—C16	-63.3 (2)	C13—C12—C14—O3	53.4 (2)
C14—N2—C17—C18	-78.6 (2)	C13—C12—C14—N2	-127.43 (17)

---

Simetri kodu: (i) -x, -y, -z.

---

Ek Çizelge 24. (13) kristalinin hidrojen bağı geometrisi (Å, °)

---

Cg1, C2-C7 halkasının merkezidir.

$D-H\cdots A$	$D-H$	$H\cdots A$	$D\cdots A$	$D-H\cdots A$
O4—H41 $\cdots$ O1 <sup>ii</sup>	1.00 (2)	1.69 (2)	2.6443 (18)	160 (3)
O4—H42 $\cdots$ O3 <sup>iii</sup>	0.89 (2)	1.88 (2)	2.7557 (18)	170 (2)
C6—H6 $\cdots$ O1 <sup>iv</sup>	0.93	2.40	3.249 (3)	152
C11—H11 $\cdots$ O1 <sup>v</sup>	0.93	2.42	3.339 (2)	168
C17—H17A $\cdots$ Cg1 <sup>vi</sup>	0.97	2.95	3.594 (2)	125

Simetri kodları: (ii)  $-x, -y, -z$ ; (iii)  $-x+1, -y, -z$ ; (iv); (v); (vi)  $x-1, y+1, z$ .

Ek Çizelge 25. (16) kristalinin fraksiyonel atomik koordinatları ve izotropik veya eşdeğer izotropik yerdeğiştirme parametreleri ( $\text{\AA}^2$ )

	$x$	$y$	$z$	$U_{\text{iso}}^*/U_{\text{eq}}$
Zn1	0.450815 (15)	0.115632 (13)	0.040631 (11)	0.01383 (5)
O1	0.73414 (10)	0.02215 (9)	0.02905 (8)	0.01896 (19)
O2	0.65938 (9)	0.19668 (9)	0.09519 (8)	0.01795 (18)
O3	0.49245 (10)	-0.10996 (10)	0.12229 (8)	0.0210 (2)
O4	0.41059 (10)	0.05856 (9)	0.18860 (8)	0.01957 (19)
O5	0.30214 (10)	0.44313 (10)	-0.27313 (8)	0.0239 (2)
N1	0.37721 (11)	0.27588 (10)	0.02830 (9)	0.0147 (2)
N2	0.08512 (11)	0.30568 (11)	-0.25343 (9)	0.0175 (2)
C1	0.75162 (13)	0.13428 (12)	0.08691 (10)	0.0154 (2)
C2	0.89284 (13)	0.19728 (12)	0.15322 (10)	0.0158 (2)
C3	0.92011 (14)	0.31934 (13)	0.22226 (11)	0.0184 (2)
H3	0.8532	0.3665	0.2228	0.022*
C4	1.04631 (14)	0.37058 (13)	0.29001 (12)	0.0212 (3)
H4	1.0628	0.4518	0.3359	0.025*
C5	1.14912 (14)	0.30273 (14)	0.29080 (11)	0.0205 (3)
C6	1.12308 (14)	0.18255 (14)	0.21929 (12)	0.0210 (3)
H6	1.1913	0.1369	0.2171	0.025*
C7	0.99677 (14)	0.13047 (13)	0.15144 (11)	0.0193 (3)
H7	0.9812	0.0503	0.1043	0.023*
C8	1.28449 (15)	0.35768 (16)	0.36690 (13)	0.0282 (3)
H8A	1.3353	0.2920	0.3650	0.042*
H8B	1.2620	0.3787	0.4403	0.042*
H8C	1.3424	0.4373	0.3439	0.042*

C9	0.44426 (13)	-0.04751 (13)	0.19693 (10)	0.0165 (2)
C10	0.42490 (13)	-0.10307 (12)	0.30249 (10)	0.0162 (2)
C11	0.34787 (14)	-0.05492 (13)	0.38074 (11)	0.0189 (2)
H11	0.3120	0.0156	0.3692	0.023*
C12	0.32480 (14)	-0.11202 (15)	0.47572 (11)	0.0224 (3)
H12	0.2727	-0.0796	0.5270	0.027*
C13	0.37825 (15)	-0.21695 (14)	0.49557 (11)	0.0235 (3)
C14	0.45906 (15)	-0.26154 (14)	0.41892 (11)	0.0219 (3)
H14	0.4984	-0.3294	0.4320	0.026*
C15	0.48161 (14)	-0.20583 (13)	0.32319 (11)	0.0189 (2)
H15	0.5350	-0.2373	0.2725	0.023*
C16	0.34955 (19)	-0.28015 (19)	0.59785 (13)	0.0360 (4)
H16A	0.3701	-0.3646	0.5892	0.054*
H16B	0.2515	-0.2941	0.6100	0.054*
H16C	0.4088	-0.2220	0.6596	0.054*
C17	0.40194 (13)	0.38549 (13)	0.10388 (10)	0.0160 (2)
H17	0.4491	0.3876	0.1719	0.019*
C18	0.35931 (13)	0.49579 (13)	0.08359 (11)	0.0181 (2)
H18	0.3738	0.5689	0.1384	0.022*
C19	0.29485 (13)	0.49579 (12)	-0.01931 (11)	0.0173 (2)
H19	0.2696	0.5704	-0.0357	0.021*
C20	0.26868 (12)	0.38185 (12)	-0.09764 (10)	0.0152 (2)
C21	0.30915 (13)	0.27380 (12)	-0.06968 (10)	0.0151 (2)
H21	0.2883	0.1964	-0.1209	0.018*
C22	0.21826 (13)	0.37980 (12)	-0.21572 (11)	0.0162 (2)
C23	-0.01970 (14)	0.23617 (13)	-0.18488 (11)	0.0199 (3)
H23A	0.0297	0.2137	-0.1231	0.024*
H23B	-0.0793	0.1532	-0.2275	0.024*
C24	-0.11255 (15)	0.32037 (15)	-0.14258 (13)	0.0270 (3)
H24A	-0.1828	0.2694	-0.1020	0.041*
H24B	-0.1588	0.3458	-0.2034	0.041*
H24C	-0.0549	0.3993	-0.0955	0.041*
C25	0.03872 (15)	0.29558 (14)	-0.37030 (11)	0.0218 (3)
H25A	0.0906	0.3760	-0.3974	0.026*
H25B	-0.0615	0.2891	-0.3790	0.026*
C26	0.06320 (19)	0.17447 (16)	-0.43724 (13)	0.0321 (3)
H26A	0.0298	0.1694	-0.5128	0.048*
H26B	0.0124	0.0948	-0.4102	0.048*
H26C	0.1629	0.1824	-0.4311	0.048*

Ek Çizelge 26. (16) kristalinin atomik yerdeğiştirme parametreleri ( $\text{\AA}^2$ )

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{12}$	$U^{13}$	$U^{23}$
Zn1	0.01471 (8)	0.01387 (7)	0.01481 (8)	0.00699 (5)	0.00123 (5)	0.00289 (5)
O1	0.0180 (4)	0.0163 (4)	0.0221 (5)	0.0056 (3)	-0.0003 (4)	0.0008 (4)
O2	0.0162 (4)	0.0170 (4)	0.0215 (5)	0.0064 (3)	0.0004 (4)	0.0035 (3)
O3	0.0231 (5)	0.0281 (5)	0.0161 (4)	0.0131 (4)	0.0043 (4)	0.0052 (4)
O4	0.0229 (5)	0.0208 (4)	0.0177 (4)	0.0093 (4)	0.0027 (4)	0.0058 (4)
O5	0.0200 (5)	0.0275 (5)	0.0235 (5)	0.0030 (4)	0.0020 (4)	0.0110 (4)
N1	0.0133 (5)	0.0147 (5)	0.0172 (5)	0.0053 (4)	0.0026 (4)	0.0034 (4)
N2	0.0164 (5)	0.0186 (5)	0.0176 (5)	0.0053 (4)	0.0009 (4)	0.0031 (4)
C1	0.0160 (6)	0.0156 (5)	0.0155 (6)	0.0045 (4)	0.0029 (5)	0.0061 (4)
C2	0.0150 (5)	0.0159 (6)	0.0173 (6)	0.0045 (4)	0.0025 (5)	0.0047 (5)
C3	0.0180 (6)	0.0174 (6)	0.0215 (6)	0.0070 (5)	0.0038 (5)	0.0046 (5)
C4	0.0215 (6)	0.0177 (6)	0.0223 (6)	0.0038 (5)	0.0015 (5)	0.0002 (5)
C5	0.0167 (6)	0.0226 (6)	0.0211 (6)	0.0029 (5)	0.0010 (5)	0.0057 (5)
C6	0.0166 (6)	0.0239 (6)	0.0249 (7)	0.0087 (5)	0.0026 (5)	0.0051 (5)
C7	0.0180 (6)	0.0179 (6)	0.0225 (6)	0.0068 (5)	0.0022 (5)	0.0017 (5)
C8	0.0199 (7)	0.0332 (8)	0.0278 (7)	0.0037 (6)	-0.0026 (6)	0.0028 (6)
C9	0.0137 (5)	0.0203 (6)	0.0154 (6)	0.0046 (5)	0.0005 (4)	0.0030 (5)
C10	0.0156 (5)	0.0178 (6)	0.0137 (6)	0.0026 (4)	0.0000 (4)	0.0026 (4)
C11	0.0160 (6)	0.0216 (6)	0.0179 (6)	0.0044 (5)	0.0007 (5)	0.0018 (5)
C12	0.0171 (6)	0.0306 (7)	0.0161 (6)	0.0020 (5)	0.0030 (5)	0.0021 (5)
C13	0.0208 (6)	0.0271 (7)	0.0172 (6)	-0.0027 (5)	-0.0018 (5)	0.0071 (5)
C14	0.0242 (7)	0.0197 (6)	0.0198 (6)	0.0031 (5)	-0.0038 (5)	0.0052 (5)
C15	0.0201 (6)	0.0187 (6)	0.0167 (6)	0.0048 (5)	0.0000 (5)	0.0016 (5)
C16	0.0350 (8)	0.0474 (10)	0.0245 (8)	0.0041 (7)	0.0042 (7)	0.0185 (7)
C17	0.0144 (5)	0.0188 (6)	0.0152 (6)	0.0056 (4)	0.0020 (4)	0.0020 (5)
C18	0.0178 (6)	0.0152 (6)	0.0211 (6)	0.0058 (5)	0.0041 (5)	-0.0012 (5)
C19	0.0165 (6)	0.0145 (5)	0.0233 (6)	0.0073 (4)	0.0048 (5)	0.0041 (5)
C20	0.0116 (5)	0.0162 (5)	0.0185 (6)	0.0045 (4)	0.0023 (4)	0.0043 (5)
C21	0.0142 (5)	0.0137 (5)	0.0173 (6)	0.0045 (4)	0.0011 (4)	0.0014 (4)
C22	0.0171 (6)	0.0135 (5)	0.0201 (6)	0.0078 (4)	0.0009 (5)	0.0031 (5)
C23	0.0152 (6)	0.0200 (6)	0.0231 (6)	0.0025 (5)	0.0012 (5)	0.0051 (5)
C24	0.0217 (7)	0.0266 (7)	0.0328 (8)	0.0061 (5)	0.0088 (6)	0.0040 (6)
C25	0.0214 (6)	0.0239 (6)	0.0184 (6)	0.0056 (5)	-0.0026 (5)	0.0019 (5)
C26	0.0409 (9)	0.0295 (8)	0.0242 (7)	0.0105 (7)	0.0035 (7)	-0.0026 (6)

Ek Çizelge 27. (16) kristalinin geometrik parametreleri (Å, °)

Zn1—Zn1 <sup>i</sup>	2.9494 (3)	C10—C15	1.3934 (18)
Zn1—O1 <sup>i</sup>	2.0420 (9)	C11—H11	0.9300
Zn1—O2	2.0264 (9)	C12—C11	1.3876 (19)
Zn1—O3 <sup>i</sup>	2.1196 (9)	C12—C13	1.393 (2)
Zn1—O4	2.0235 (9)	C12—H12	0.9300
Zn1—N1	2.0340 (10)	C13—C14	1.393 (2)
O1—Zn1 <sup>i</sup>	2.0420 (9)	C13—C16	1.507 (2)
O1—C1	1.2604 (15)	C14—C15	1.3884 (19)
O2—C1	1.2648 (15)	C14—H14	0.9300
O3—Zn1 <sup>i</sup>	2.1196 (9)	C15—H15	0.9300
O3—C9	1.2580 (16)	C16—H16A	0.9600
O4—C9	1.2654 (16)	C16—H16B	0.9600
O5—C22	1.2305 (16)	C16—H16C	0.9600
N1—C17	1.3419 (16)	C17—C18	1.3871 (18)
N1—C21	1.3418 (16)	C17—H17	0.9300
N2—C22	1.3433 (16)	C18—H18	0.9300
N2—C23	1.4700 (17)	C19—C18	1.3857 (19)
N2—C25	1.4685 (17)	C19—H19	0.9300
C1—C2	1.5002 (17)	C20—C19	1.3927 (17)
C2—C7	1.3963 (18)	C20—C21	1.3824 (17)
C3—C2	1.3957 (18)	C20—C22	1.5071 (18)
C3—C4	1.3851 (19)	C21—H21	0.9300
C3—H3	0.9300	C23—C24	1.5146 (19)
C4—H4	0.9300	C23—H23A	0.9700
C5—C4	1.3950 (19)	C23—H23B	0.9700
C5—C6	1.3965 (19)	C24—H24A	0.9600
C5—C8	1.5073 (19)	C24—H24B	0.9600
C6—H6	0.9300	C24—H24C	0.9600
C7—C6	1.3870 (19)	C25—C26	1.515 (2)
C7—H7	0.9300	C25—H25A	0.9700
C8—H8A	0.9600	C25—H25B	0.9700
C8—H8B	0.9600	C26—H26A	0.9600
C8—H8C	0.9600	C26—H26B	0.9600
C9—C10	1.4971 (18)	C26—H26C	0.9600
C10—C11	1.3963 (18)		
O1 <sup>i</sup> —Zn1—O3 <sup>i</sup>	84.43 (4)	C13—C12—H12	119.4

O2—Zn1—O1 <sup>i</sup>	159.97 (4)	C12—C13—C14	118.42 (13)
O2—Zn1—O3 <sup>i</sup>	88.67 (4)	C12—C13—C16	120.61 (14)
O2—Zn1—N1	104.57 (4)	C14—C13—C16	120.97 (14)
O4—Zn1—O1 <sup>i</sup>	89.88 (4)	C13—C14—H14	119.6
O4—Zn1—O2	90.22 (4)	C15—C14—C13	120.78 (13)
O4—Zn1—O3 <sup>i</sup>	159.93 (4)	C15—C14—H14	119.6
O4—Zn1—N1	107.92 (4)	C10—C15—H15	119.7
N1—Zn1—O1 <sup>i</sup>	94.43 (4)	C14—C15—C10	120.52 (13)
N1—Zn1—O3 <sup>i</sup>	91.72 (4)	C14—C15—H15	119.7
C1—O1—Zn1 <sup>i</sup>	128.83 (8)	C13—C16—H16A	109.5
C1—O2—Zn1	124.35 (8)	C13—C16—H16B	109.5
C9—O3—Zn1 <sup>i</sup>	145.07 (9)	C13—C16—H16C	109.5
C9—O4—Zn1	110.41 (8)	H16A—C16—H16B	109.5
C17—N1—Zn1	126.21 (9)	H16A—C16—H16C	109.5
C21—N1—Zn1	114.90 (8)	H16B—C16—H16C	109.5
C21—N1—C17	118.59 (11)	N1—C17—C18	122.00 (12)
C22—N2—C23	124.41 (11)	N1—C17—H17	119.0
C22—N2—C25	118.33 (11)	C18—C17—H17	119.0
C25—N2—C23	117.24 (11)	C17—C18—H18	120.4
O1—C1—O2	125.48 (12)	C19—C18—C17	119.26 (12)
O1—C1—C2	117.03 (11)	C19—C18—H18	120.4
O2—C1—C2	117.47 (11)	C18—C19—C20	118.68 (12)
C3—C2—C1	120.98 (11)	C18—C19—H19	120.7
C3—C2—C7	118.75 (12)	C20—C19—H19	120.7
C7—C2—C1	120.17 (11)	C19—C20—C22	122.14 (11)
C2—C3—H3	119.9	C21—C20—C19	118.57 (12)
C4—C3—C2	120.29 (12)	C21—C20—C22	118.65 (11)
C4—C3—H3	119.9	N1—C21—C20	122.78 (11)
C3—C4—C5	121.29 (12)	N1—C21—H21	118.6
C3—C4—H4	119.4	C20—C21—H21	118.6
C5—C4—H4	119.4	O5—C22—N2	123.51 (12)
C4—C5—C6	118.19 (12)	O5—C22—C20	118.39 (11)
C4—C5—C8	120.84 (13)	N2—C22—C20	118.08 (11)
C6—C5—C8	120.97 (13)	N2—C23—C24	112.25 (11)
C5—C6—H6	119.6	N2—C23—H23A	109.2
C7—C6—C5	120.82 (12)	N2—C23—H23B	109.2
C7—C6—H6	119.6	C24—C23—H23A	109.2
C2—C7—H7	119.7	C24—C23—H23B	109.2
C6—C7—C2	120.62 (12)	H23A—C23—H23B	107.9

C6—C7—H7	119.7	C23—C24—H24A	109.5
C5—C8—H8A	109.5	C23—C24—H24B	109.5
C5—C8—H8B	109.5	C23—C24—H24C	109.5
C5—C8—H8C	109.5	H24A—C24—H24B	109.5
H8A—C8—H8B	109.5	H24A—C24—H24C	109.5
H8A—C8—H8C	109.5	H24B—C24—H24C	109.5
H8B—C8—H8C	109.5	N2—C25—C26	111.44 (12)
O3—C9—O4	124.45 (12)	N2—C25—H25A	109.3
O3—C9—C10	117.63 (11)	N2—C25—H25B	109.3
O4—C9—C10	117.92 (11)	C26—C25—H25A	109.3
C11—C10—C9	120.82 (12)	C26—C25—H25B	109.3
C15—C10—C9	120.25 (12)	H25A—C25—H25B	108.0
C15—C10—C11	118.92 (12)	C25—C26—H26A	109.5
C10—C11—H11	119.9	C25—C26—H26B	109.5
C12—C11—C10	120.13 (13)	C25—C26—H26C	109.5
C12—C11—H11	119.9	H26A—C26—H26B	109.5
C11—C12—C13	121.17 (13)	H26A—C26—H26C	109.5
C11—C12—H12	119.4	H26B—C26—H26C	109.5
O1 <sup>i</sup> —Zn1—O2—C1	0.43 (18)	O1—C1—C2—C7	-1.65 (18)
O3 <sup>i</sup> —Zn1—O2—C1	-69.26 (10)	O2—C1—C2—C3	0.75 (18)
O4—Zn1—O2—C1	90.70 (10)	O2—C1—C2—C7	177.09 (12)
N1—Zn1—O2—C1	-160.69 (10)	C1—C2—C7—C6	-174.62 (12)
O1 <sup>i</sup> —Zn1—O4—C9	80.22 (9)	C3—C2—C7—C6	1.8 (2)
O2—Zn1—O4—C9	-79.75 (9)	C4—C3—C2—C1	174.42 (12)
O3 <sup>i</sup> —Zn1—O4—C9	6.98 (16)	C4—C3—C2—C7	-2.0 (2)
N1—Zn1—O4—C9	174.84 (8)	C2—C3—C4—C5	0.3 (2)
O1 <sup>i</sup> —Zn1—N1—C17	139.95 (10)	C6—C5—C4—C3	1.5 (2)
O1 <sup>i</sup> —Zn1—N1—C21	-46.58 (9)	C8—C5—C4—C3	-178.45 (13)
O2—Zn1—N1—C17	-46.43 (11)	C4—C5—C6—C7	-1.6 (2)
O2—Zn1—N1—C21	127.04 (9)	C8—C5—C6—C7	178.28 (13)
O3 <sup>i</sup> —Zn1—N1—C17	-135.50 (10)	C2—C7—C6—C5	0.0 (2)
O3 <sup>i</sup> —Zn1—N1—C21	37.97 (9)	O3—C9—C10—C11	-167.82 (12)
O4—Zn1—N1—C17	48.64 (11)	O3—C9—C10—C15	10.99 (18)
O4—Zn1—N1—C21	-137.89 (8)	O4—C9—C10—C11	11.89 (18)
Zn1 <sup>i</sup> —O1—C1—O2	-15.50 (19)	O4—C9—C10—C15	-169.31 (12)
Zn1 <sup>i</sup> —O1—C1—C2	163.13 (8)	C9—C10—C11—C12	176.76 (11)
Zn1—O2—C1—O1	12.25 (18)	C15—C10—C11—C12	-2.06 (19)
Zn1—O2—C1—C2	-166.37 (8)	C9—C10—C15—C14	-177.34 (12)
Zn1 <sup>i</sup> —O3—C9—O4	-1.2 (2)	C11—C10—C15—C14	1.49 (19)

Zn1 <sup>i</sup> —O3—C9—C10	178.47 (10)	C13—C12—C11—C10	0.5 (2)
Zn1—O4—C9—O3	-1.70 (16)	C11—C12—C13—C14	1.6 (2)
Zn1—O4—C9—C10	178.62 (8)	C11—C12—C13—C16	-178.59 (13)
Zn1—N1—C17—C18	173.27 (9)	C12—C13—C14—C15	-2.2 (2)
C21—N1—C17—C18	0.02 (18)	C16—C13—C14—C15	178.01 (13)
Zn1—N1—C21—C20	-171.23 (9)	C13—C14—C15—C10	0.7 (2)
C17—N1—C21—C20	2.77 (18)	N1—C17—C18—C19	-2.94 (19)
C23—N2—C22—O5	-175.96 (12)	C20—C19—C18—C17	3.09 (19)
C23—N2—C22—C20	5.98 (18)	C21—C20—C19—C18	-0.49 (18)
C25—N2—C22—O5	2.33 (19)	C22—C20—C19—C18	-171.23 (11)
C25—N2—C22—C20	-175.72 (11)	C19—C20—C22—O5	70.73 (16)
C22—N2—C23—C24	92.91 (15)	C19—C20—C22—N2	-111.12 (14)
C25—N2—C23—C24	-85.40 (14)	C21—C20—C22—O5	-100.01 (14)
C22—N2—C25—C26	92.54 (15)	C21—C20—C22—N2	78.14 (15)
C23—N2—C25—C26	-89.04 (15)	C19—C20—C21—N1	-2.52 (18)
O1—C1—C2—C3	-178.00 (12)	C22—C20—C21—N1	168.55 (11)

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

Ek Çizelge 28. (16) kristalinin hidrojen bağı geometrisi (Å, °)

$D-H\cdots A$	$D-H$	$H\cdots A$	$D\cdots A$	$D-H\cdots A$
C6—H6 <sup>ii</sup> ...O4 <sup>ii</sup>	0.93	2.55	3.4601 (18)	166
C16—H16C <sup>iii</sup> ...O4 <sup>iii</sup>	0.96	2.59	3.542 (2)	174
C19—H19 <sup>iv</sup> ...O2 <sup>iv</sup>	0.93	2.57	3.4013 (15)	149

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

Ek Çizelge 29. (19) kristalinin fraksiyonel atomik koordinatları ve izotropik veya eşdeğer izotropik yerdeğiştirme parametreleri (Å<sup>2</sup>)

	$x$	$y$	$z$	$U_{iso}^*/U_{eq}$
Cu1	0.0000	0.0000	0.0000	0.01074 (9)
O1	0.0382 (2)	-0.09651 (7)	-0.17689 (11)	0.0173 (3)
O2	-0.1745 (2)	-0.00164 (6)	-0.14584 (11)	0.0140 (3)
O3	-0.8594 (2)	-0.25069 (7)	0.09449 (12)	0.0191 (3)



O4	-1.1555 (3)	-0.22382 (8)	-0.10917 (14)	0.0184 (3)
H41	-1.077 (5)	-0.2318 (14)	-0.055 (2)	0.027 (7)*
H42	-1.097 (5)	-0.1903 (14)	-0.132 (2)	0.028 (7)*
N1	-0.2249 (3)	-0.07406 (8)	0.05451 (13)	0.0124 (3)
N2	-0.6168 (3)	-0.27723 (9)	0.24930 (14)	0.0158 (3)
H21	-0.707 (4)	-0.3082 (12)	0.2657 (19)	0.016 (6)*
H22	-0.487 (4)	-0.2719 (10)	0.2909 (18)	0.007 (5)*
C1	-0.1300 (3)	-0.05595 (9)	-0.20439 (15)	0.0134 (4)
C2	-0.2973 (3)	-0.06975 (9)	-0.30646 (15)	0.0112 (3)
C3	-0.2437 (3)	-0.11966 (9)	-0.38569 (16)	0.0144 (4)
H3	-0.1009	-0.1435	-0.3763	0.017*
C4	-0.4027 (3)	-0.13357 (9)	-0.47810 (16)	0.0144 (4)
H4	-0.3645	-0.1665	-0.5308	0.017*
C5	-0.6202 (3)	-0.09904 (9)	-0.49401 (15)	0.0132 (4)
C6	-0.6723 (3)	-0.04968 (9)	-0.41381 (16)	0.0136 (4)
H6	-0.8162	-0.0264	-0.4225	0.016*
C7	-0.5137 (3)	-0.03481 (9)	-0.32179 (16)	0.0126 (4)
H7	-0.5510	-0.0013	-0.2697	0.015*
C8	-0.7908 (3)	-0.11485 (10)	-0.59515 (16)	0.0175 (4)
H8A	-0.8165	-0.1647	-0.6006	0.026*
H8B	-0.7274	-0.0984	-0.6616	0.026*
H8C	-0.9374	-0.0915	-0.5878	0.026*
C9	-0.4391 (3)	-0.08763 (10)	0.00027 (16)	0.0143 (4)
H9	-0.4908	-0.0604	-0.0621	0.017*
C10	-0.5851 (3)	-0.14000 (9)	0.03306 (16)	0.0149 (4)
H10	-0.7323	-0.1471	-0.0062	0.018*
C11	-0.5111 (3)	-0.18220 (9)	0.12538 (16)	0.0132 (4)
C12	-0.2892 (3)	-0.16896 (9)	0.18202 (16)	0.0149 (4)
H12	-0.2327	-0.1958	0.2440	0.018*
C13	-0.1551 (3)	-0.11484 (10)	0.14368 (16)	0.0150 (4)
H13	-0.0079	-0.1062	0.1820	0.018*
C14	-0.6762 (3)	-0.24014 (9)	0.15535 (16)	0.0145 (4)

Ek Çizelge 30. (19) kristalinin atomik yerdeğiştirme parametreleri ( $\text{\AA}^2$ )

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{12}$	$U^{13}$	$U^{23}$
Cu1	0.01320 (16)	0.01035 (15)	0.00829 (16)	-0.00275 (12)	-0.00076 (11)	-0.00013 (12)
O1	0.0140 (7)	0.0194 (7)	0.0172 (7)	0.0006 (5)	-0.0041 (5)	0.0042 (5)

O2	0.0181 (6)	0.0127 (6)	0.0103 (6)	-0.0040 (5)	-0.0020 (5)	0.0005 (5)
O3	0.0180 (7)	0.0167 (6)	0.0217 (8)	-0.0030 (5)	-0.0025 (6)	0.0026 (6)
O4	0.0205 (8)	0.0147 (7)	0.0189 (8)	-0.0022 (6)	-0.0036 (6)	0.0018 (6)
N1	0.0131 (8)	0.0128 (7)	0.0110 (8)	-0.0015 (6)	-0.0007 (6)	-0.0005 (6)
N2	0.0154 (9)	0.0143 (8)	0.0168 (9)	-0.0034 (6)	-0.0019 (7)	0.0021 (6)
C1	0.0144 (9)	0.0138 (8)	0.0118 (9)	-0.0058 (7)	0.0011 (7)	0.0037 (7)
C2	0.0129 (9)	0.0102 (8)	0.0102 (9)	-0.0029 (6)	-0.0004 (7)	0.0014 (6)
C3	0.0139 (9)	0.0128 (8)	0.0164 (10)	0.0011 (7)	0.0013 (7)	0.0016 (7)
C4	0.0195 (9)	0.0109 (8)	0.0131 (9)	-0.0004 (7)	0.0024 (7)	-0.0036 (7)
C5	0.0163 (9)	0.0117 (8)	0.0110 (9)	-0.0045 (7)	-0.0010 (7)	0.0016 (7)
C6	0.0130 (9)	0.0127 (8)	0.0149 (10)	0.0003 (6)	0.0003 (7)	0.0019 (7)
C7	0.0155 (9)	0.0106 (8)	0.0117 (9)	-0.0016 (6)	0.0014 (7)	-0.0011 (7)
C8	0.0205 (10)	0.0174 (9)	0.0136 (10)	-0.0034 (7)	-0.0032 (8)	-0.0003 (7)
C9	0.0161 (9)	0.0142 (9)	0.0124 (9)	0.0014 (6)	0.0000 (7)	-0.0001 (7)
C10	0.0148 (9)	0.0147 (9)	0.0149 (10)	0.0004 (7)	-0.0004 (7)	-0.0015 (7)
C11	0.0152 (9)	0.0110 (8)	0.0137 (10)	0.0005 (6)	0.0028 (7)	-0.0014 (7)
C12	0.0200 (10)	0.0130 (8)	0.0116 (9)	-0.0013 (7)	0.0012 (7)	0.0014 (7)
C13	0.0149 (9)	0.0164 (9)	0.0131 (9)	-0.0001 (7)	-0.0013 (7)	0.0001 (7)
C14	0.0133 (9)	0.0120 (8)	0.0183 (10)	0.0011 (7)	0.0027 (7)	-0.0012 (7)

Ek Çizelge 31. (19) kristalinin geometrik parametreleri (Å, °)

Cu1—O2	1.9192 (13)	C4—H4	0.9300
Cu1—O2 <sup>i</sup>	1.9192 (13)	C5—C4	1.401 (3)
Cu1—N1	2.0562 (15)	C5—C6	1.396 (3)
Cu1—N1 <sup>i</sup>	2.0562 (15)	C5—C8	1.504 (3)
O1—C1	1.249 (2)	C6—H6	0.9300
O2—C1	1.287 (2)	C7—C6	1.382 (3)
O3—C14	1.228 (2)	C7—H7	0.9300
O4—H41	0.77 (3)	C8—H8A	0.9600
O4—H42	0.78 (3)	C8—H8B	0.9600
N1—C9	1.350 (2)	C8—H8C	0.9600
N1—C13	1.345 (2)	C9—H9	0.9300
N2—C14	1.341 (2)	C10—C9	1.381 (3)
N2—H21	0.82 (2)	C10—C11	1.395 (3)
N2—H22	0.86 (2)	C10—H10	0.9300
C2—C1	1.495 (3)	C11—C12	1.398 (3)
C2—C3	1.397 (2)	C11—C14	1.516 (2)

C2—C7	1.398 (3)	C12—C13	1.388 (2)
C3—C4	1.383 (3)	C12—H12	0.9300
C3—H3	0.9300	C13—H13	0.9300
O2 <sup>i</sup> —Cu1—O2	180.00 (4)	C7—C6—C5	121.11 (17)
O2—Cu1—N1	89.67 (6)	C7—C6—H6	119.4
O2 <sup>i</sup> —Cu1—N1	90.33 (6)	C2—C7—H7	119.8
O2—Cu1—N1 <sup>i</sup>	90.33 (6)	C6—C7—C2	120.40 (17)
O2 <sup>i</sup> —Cu1—N1 <sup>i</sup>	89.67 (6)	C6—C7—H7	119.8
N1—Cu1—N1 <sup>i</sup>	180.00 (10)	C5—C8—H8A	109.5
C1—O2—Cu1	113.26 (12)	C5—C8—H8B	109.5
H42—O4—H41	103 (3)	C5—C8—H8C	109.5
C9—N1—Cu1	122.91 (12)	H8A—C8—H8B	109.5
C13—N1—Cu1	120.10 (12)	H8A—C8—H8C	109.5
C13—N1—C9	116.85 (16)	H8B—C8—H8C	109.5
C14—N2—H21	117.9 (16)	N1—C9—C10	123.05 (17)
C14—N2—H22	123.8 (14)	N1—C9—H9	118.5
H22—N2—H21	118 (2)	C10—C9—H9	118.5
O1—C1—O2	122.72 (18)	C9—C10—C11	119.75 (17)
O1—C1—C2	121.14 (17)	C9—C10—H10	120.1
O2—C1—C2	116.10 (16)	C11—C10—H10	120.1
C3—C2—C1	120.47 (16)	C10—C11—C12	117.82 (17)
C3—C2—C7	119.07 (17)	C10—C11—C14	117.32 (16)
C7—C2—C1	120.42 (16)	C12—C11—C14	124.85 (17)
C2—C3—H3	120.0	C11—C12—H12	120.7
C4—C3—C2	120.03 (17)	C13—C12—C11	118.51 (17)
C4—C3—H3	120.0	C13—C12—H12	120.7
C3—C4—C5	121.34 (17)	N1—C13—C12	124.04 (17)
C3—C4—H4	119.3	N1—C13—H13	118.0
C5—C4—H4	119.3	C12—C13—H13	118.0
C4—C5—C8	120.56 (16)	O3—C14—N2	122.56 (17)
C6—C5—C4	118.05 (17)	O3—C14—C11	119.40 (17)
C6—C5—C8	121.39 (17)	N2—C14—C11	118.03 (17)
C5—C6—H6	119.4		
O2 <sup>i</sup> —Cu1—N1—C9	161.86 (14)	C1—C2—C7—C6	-177.34 (16)
O2—Cu1—N1—C9	-18.14 (14)	C3—C2—C7—C6	0.2 (3)
O2 <sup>i</sup> —Cu1—N1—C13	-22.59 (14)	C2—C3—C4—C5	-0.7 (3)
O2—Cu1—N1—C13	157.41 (14)	C6—C5—C4—C3	0.2 (3)
N1—Cu1—O2—C1	-76.89 (12)	C8—C5—C4—C3	179.96 (17)
N1 <sup>i</sup> —Cu1—O2—C1	103.11 (12)	C4—C5—C6—C7	0.5 (3)

Cu1—O2—C1—O1	-11.8 (2)	C8—C5—C6—C7	-179.23 (16)
Cu1—O2—C1—C2	166.15 (11)	C2—C7—C6—C5	-0.7 (3)
Cu1—N1—C9—C10	176.28 (14)	C11—C10—C9—N1	-0.8 (3)
C13—N1—C9—C10	0.6 (3)	C9—C10—C11—C12	0.5 (3)
Cu1—N1—C13—C12	-175.86 (14)	C9—C10—C11—C14	-178.32 (16)
C9—N1—C13—C12	0.0 (3)	C10—C11—C12—C13	0.0 (3)
C3—C2—C1—O1	-13.1 (3)	C14—C11—C12—C13	178.73 (17)
C7—C2—C1—O1	164.51 (16)	C10—C11—C14—O3	4.5 (2)
C3—C2—C1—O2	169.00 (16)	C10—C11—C14—N2	-174.41 (17)
C7—C2—C1—O2	-13.4 (2)	C12—C11—C14—O3	-174.24 (18)
C7—C2—C3—C4	0.5 (3)	C12—C11—C14—N2	6.9 (3)
C1—C2—C3—C4	178.05 (16)	C11—C12—C13—N1	-0.3 (3)

Simetri kodu: (i) -x, -y, -z.

Ek Çizelge 32. (19) kristalinin hidrojen bağı geometrisi (Å, °)

<i>D—H...A</i>	<i>D—H</i>	<i>H...A</i>	<i>D...A</i>	<i>D—H...A</i>
N2—H21...O1 <sup>ii</sup>	0.82 (2)	2.46 (2)	3.283 (2)	177 (2)
N2—H22...O4 <sup>iii</sup>	0.86 (2)	2.14 (2)	2.983 (2)	171 (2)
O4—H41...O3	0.77 (3)	2.10 (3)	2.866 (2)	178 (3)
O4—H42...O1 <sup>iv</sup>	0.78 (3)	2.04 (3)	2.813 (2)	173 (3)
C3—H3...O3 <sup>v</sup>	0.93	2.48	3.324 (2)	151
C10—H10...O1 <sup>iv</sup>	0.93	2.50	3.242 (2)	137
C12—H12...O4 <sup>iii</sup>	0.93	2.34	3.253 (2)	169

Simetri kodları: (ii) x-1, -y-1/2, z+1/2; (iii) x+1, -y-1/2, z+1/2; (iv) x-1, y, z; (v) x+1, -y-1/2, z-1/2.

Ek Çizelge 33. (20) kristalinin fraksiyonel atomik koordinatları ve izotropik veya eşdeğer izotropik yerdeğiştirme parametreleri (Å<sup>2</sup>)

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U<sub>iso</sub>*/U<sub>eq</sub></i>
Cu1	0.95060 (3)	0.966319 (13)	1.09852 (4)	0.01099 (9)
O1	0.81764 (18)	0.95045 (8)	0.9002 (2)	0.0191 (4)
O2	0.90275 (17)	1.00855 (8)	0.7371 (2)	0.0168 (4)
O3	1.04702 (19)	0.90818 (8)	1.0089 (2)	0.0203 (4)
O4	0.86037 (17)	1.03478 (8)	1.1481 (2)	0.0180 (4)
O5	0.70039 (18)	0.75397 (8)	1.5592 (2)	0.0183 (4)
N1	0.8976 (2)	0.90548 (9)	1.2719 (3)	0.0139 (5)

N2	0.7819 (3)	0.81071 (11)	1.7825 (3)	0.0200 (6)
H2A	0.752 (3)	0.7887 (13)	1.854 (4)	0.022 (8)*
H2B	0.818 (3)	0.8419 (16)	1.818 (4)	0.047 (12)*
C1	0.8203 (3)	0.97549 (10)	0.7606 (3)	0.0130 (5)
C2	0.7165 (2)	0.96483 (11)	0.6131 (3)	0.0122 (5)
C3	0.6147 (2)	0.93399 (11)	0.6322 (3)	0.0138 (6)
H3	0.6095	0.9196	0.7413	0.017*
C4	0.5205 (3)	0.92415 (11)	0.4928 (3)	0.0148 (6)
H4	0.4508	0.9034	0.5077	0.018*
C5	0.5265 (3)	0.94428 (11)	0.3308 (3)	0.0147 (6)
C6	0.6286 (3)	0.97476 (11)	0.3131 (3)	0.0159 (6)
H6	0.6344	0.9885	0.2035	0.019*
C7	0.7225 (2)	0.98563 (10)	0.4518 (3)	0.0128 (5)
H7	0.7911	1.0072	0.4371	0.015*
C8	0.4259 (3)	0.93213 (12)	0.1789 (3)	0.0221 (6)
H8A	0.3516	0.9219	0.2179	0.033*
H8B	0.4498	0.9005	0.1132	0.033*
H8C	0.4106	0.9661	0.1064	0.033*
C9	1.1213 (2)	0.91754 (11)	0.9141 (3)	0.0133 (5)
C10	1.1926 (3)	0.86716 (11)	0.8745 (3)	0.0142 (6)
C11	1.1638 (3)	0.81263 (11)	0.9227 (3)	0.0188 (6)
H11	1.0971	0.8075	0.9770	0.023*
C12	1.2313 (3)	0.76602 (12)	0.8923 (3)	0.0224 (7)
H12	1.2090	0.7291	0.9232	0.027*
C13	1.3314 (3)	0.77232 (12)	0.8172 (3)	0.0206 (6)
C14	1.3589 (3)	0.82663 (12)	0.7674 (3)	0.0203 (6)
H14	1.4264	0.8318	0.7146	0.024*
C15	1.2897 (3)	0.87351 (11)	0.7932 (3)	0.0176 (6)
H15	1.3087	0.9101	0.7552	0.021*
C16	1.4105 (3)	0.72204 (13)	0.7957 (4)	0.0284 (7)
H16A	1.3606	0.6874	0.7780	0.043*
H16B	1.4748	0.7177	0.8985	0.043*
H16C	1.4473	0.7283	0.6967	0.043*
C17	0.7944 (2)	0.87572 (10)	1.2239 (3)	0.0134 (5)
H17	0.7501	0.8796	1.1096	0.016*
C18	0.7487 (2)	0.83964 (11)	1.3316 (3)	0.0124 (5)
H18	0.6757	0.8188	1.2916	0.015*
C19	0.8121 (2)	0.83446 (10)	1.4999 (3)	0.0127 (5)
C20	0.9206 (3)	0.86403 (11)	1.5496 (3)	0.0170 (6)

H20	0.9674	0.8604	1.6626	0.020*
C21	0.9600 (3)	0.89878 (11)	1.4330 (3)	0.0152 (6)
H21	1.0346	0.9188	1.4683	0.018*
C22	0.7601 (3)	0.79620 (11)	1.6172 (3)	0.0142 (6)

Ek Çizelge 34. (20) kristalinin atomik yerdeğiştirme parametreleri ( $\text{\AA}^2$ )

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{12}$	$U^{13}$	$U^{23}$
Cu1	0.01279 (18)	0.01089 (15)	0.00968 (13)	-0.00136 (15)	0.00323 (11)	0.00055 (13)
O1	0.0192 (11)	0.0233 (11)	0.0133 (9)	-0.0080 (9)	0.0000 (8)	0.0042 (7)
O2	0.0154 (11)	0.0202 (10)	0.0137 (8)	-0.0071 (8)	0.0003 (7)	0.0035 (7)
O3	0.0299 (13)	0.0129 (9)	0.0236 (10)	0.0023 (9)	0.0177 (9)	0.0009 (8)
O4	0.0208 (11)	0.0142 (9)	0.0221 (9)	0.0023 (9)	0.0116 (8)	0.0033 (8)
O5	0.0255 (12)	0.0147 (10)	0.0160 (9)	-0.0046 (9)	0.0077 (8)	0.0016 (7)
N1	0.0156 (13)	0.0140 (11)	0.0130 (10)	0.0012 (10)	0.0050 (9)	0.0011 (8)
N2	0.0348 (17)	0.0132 (12)	0.0140 (11)	-0.0057 (12)	0.0094 (11)	0.0010 (9)
C1	0.0174 (15)	0.0085 (13)	0.0143 (11)	0.0016 (11)	0.0058 (10)	-0.0026 (9)
C2	0.0137 (14)	0.0096 (11)	0.0128 (11)	0.0027 (11)	0.0018 (9)	-0.0023 (10)
C3	0.0153 (16)	0.0133 (13)	0.0141 (12)	0.0024 (11)	0.0061 (10)	0.0007 (10)
C4	0.0127 (15)	0.0136 (13)	0.0179 (12)	-0.0008 (11)	0.0028 (11)	-0.0016 (10)
C5	0.0161 (16)	0.0110 (12)	0.0162 (12)	0.0039 (11)	0.0011 (10)	-0.0026 (10)
C6	0.0218 (16)	0.0124 (13)	0.0138 (11)	0.0015 (11)	0.0045 (11)	0.0006 (10)
C7	0.0144 (15)	0.0103 (12)	0.0150 (12)	0.0002 (11)	0.0062 (10)	0.0001 (9)
C8	0.0226 (18)	0.0209 (15)	0.0198 (13)	-0.0015 (13)	-0.0026 (12)	-0.0029 (11)
C9	0.0125 (15)	0.0159 (13)	0.0099 (11)	-0.0029 (11)	-0.0013 (10)	-0.0023 (9)
C10	0.0161 (16)	0.0154 (13)	0.0104 (11)	0.0002 (11)	0.0013 (10)	-0.0003 (10)
C11	0.0192 (17)	0.0180 (14)	0.0195 (13)	-0.0011 (12)	0.0049 (11)	0.0025 (11)
C12	0.0265 (19)	0.0149 (14)	0.0241 (14)	0.0034 (13)	0.0017 (12)	0.0022 (11)
C13	0.0245 (18)	0.0209 (15)	0.0149 (13)	0.0078 (13)	0.0009 (11)	-0.0017 (11)
C14	0.0202 (17)	0.0247 (16)	0.0171 (13)	0.0041 (13)	0.0063 (11)	-0.0008 (11)
C15	0.0222 (17)	0.0136 (13)	0.0160 (12)	0.0004 (12)	0.0016 (11)	0.0003 (10)
C16	0.036 (2)	0.0219 (16)	0.0264 (15)	0.0131 (14)	0.0043 (14)	0.0000 (12)
C17	0.0183 (16)	0.0113 (12)	0.0110 (11)	0.0004 (11)	0.0036 (10)	-0.0014 (9)
C18	0.0138 (15)	0.0112 (12)	0.0130 (11)	-0.0006 (11)	0.0049 (10)	-0.0026 (10)
C19	0.0177 (16)	0.0093 (12)	0.0127 (11)	0.0007 (11)	0.0065 (10)	-0.0005 (9)
C20	0.0202 (17)	0.0189 (14)	0.0108 (11)	-0.0003 (12)	0.0003 (10)	0.0026 (10)
C21	0.0140 (15)	0.0152 (13)	0.0160 (12)	-0.0036 (11)	0.0026 (10)	0.0002 (10)
C22	0.0186 (16)	0.0134 (13)	0.0118 (12)	0.0009 (12)	0.0060 (11)	0.0033 (10)

Ek Çizelge 35. (20) kristalinin geometrik parametreleri (Å, °)

Cu1—Cu1 <sup>i</sup>	2.6375 (6)	C8—H8A	0.9800
Cu1—O1	1.9733 (18)	C8—H8B	0.9800
Cu1—O2 <sup>i</sup>	1.9703 (18)	C8—H8C	0.9800
Cu1—O3	1.9687 (18)	C9—O4 <sup>i</sup>	1.259 (3)
Cu1—O4	1.9836 (18)	C9—C10	1.499 (4)
Cu1—N1	2.161 (2)	C10—C11	1.394 (4)
O1—C1	1.269 (3)	C10—C15	1.390 (4)
O2—Cu1 <sup>i</sup>	1.9703 (18)	C11—C12	1.381 (4)
O2—C1	1.252 (3)	C11—H11	0.9500
O3—C9	1.259 (3)	C12—C13	1.389 (4)
O4—C9 <sup>i</sup>	1.259 (3)	C12—H12	0.9500
O5—C22	1.232 (3)	C13—C14	1.389 (4)
N1—C17	1.338 (3)	C13—C16	1.508 (4)
N1—C21	1.342 (3)	C14—C15	1.387 (4)
N2—C22	1.339 (3)	C14—H14	0.9500
N2—H2A	0.89 (3)	C15—H15	0.9500
N2—H2B	0.85 (4)	C16—H16A	0.9800
C1—C2	1.497 (3)	C16—H16B	0.9800
C2—C3	1.388 (4)	C16—H16C	0.9800
C2—C7	1.397 (3)	C17—C18	1.382 (3)
C3—C4	1.387 (4)	C17—H17	0.9500
C3—H3	0.9500	C18—C19	1.391 (3)
C4—C5	1.395 (3)	C18—H18	0.9500
C4—H4	0.9500	C19—C20	1.387 (4)
C5—C6	1.384 (4)	C19—C22	1.503 (3)
C5—C8	1.503 (4)	C20—C21	1.381 (3)
C6—C7	1.385 (4)	C20—H20	0.9500
C6—H6	0.9500	C21—H21	0.9500
C7—H7	0.9500		
O1—Cu1—Cu1 <sup>i</sup>	88.51 (5)	H8A—C8—H8B	109.5
O1—Cu1—O4	88.96 (8)	H8A—C8—H8C	109.5
O1—Cu1—N1	97.37 (8)	H8B—C8—H8C	109.5
O2 <sup>i</sup> —Cu1—Cu1 <sup>i</sup>	79.79 (5)	O3—C9—O4 <sup>i</sup>	125.3 (2)
O2 <sup>i</sup> —Cu1—O1	168.28 (7)	O3—C9—C10	116.2 (2)
O2 <sup>i</sup> —Cu1—O4	90.82 (8)	O4 <sup>i</sup> —C9—C10	118.6 (2)
O2 <sup>i</sup> —Cu1—N1	94.19 (8)	C11—C10—C9	120.0 (2)

O3—Cu1—Cu1 <sup>i</sup>	82.21 (5)	C15—C10—C9	121.4 (2)
O3—Cu1—O1	87.53 (8)	C15—C10—C11	118.6 (3)
O3—Cu1—O2 <sup>i</sup>	90.25 (8)	C10—C11—H11	119.6
O3—Cu1—O4	167.82 (7)	C12—C11—C10	120.7 (3)
O3—Cu1—N1	91.34 (8)	C12—C11—H11	119.6
O4—Cu1—Cu1 <sup>i</sup>	86.04 (5)	C11—C12—C13	121.1 (3)
O4—Cu1—N1	100.68 (8)	C11—C12—H12	119.5
N1—Cu1—Cu1 <sup>i</sup>	171.10 (6)	C13—C12—H12	119.5
C1—O1—Cu1	117.87 (17)	C12—C13—C16	121.0 (3)
C1—O2—Cu1 <sup>i</sup>	128.72 (16)	C14—C13—C12	118.1 (3)
C9—O3—Cu1	125.69 (17)	C14—C13—C16	120.9 (3)
C9 <sup>i</sup> —O4—Cu1	120.50 (17)	C13—C14—H14	119.3
C17—N1—Cu1	119.94 (16)	C15—C14—C13	121.3 (3)
C17—N1—C21	117.5 (2)	C15—C14—H14	119.3
C21—N1—Cu1	122.42 (18)	C10—C15—H15	119.9
C22—N2—H2A	118 (2)	C14—C15—C10	120.2 (3)
C22—N2—H2B	121 (2)	C14—C15—H15	119.9
H2A—N2—H2B	120 (3)	C13—C16—H16A	109.5
O1—C1—C2	117.3 (2)	C13—C16—H16B	109.5
O2—C1—O1	125.1 (2)	C13—C16—H16C	109.5
O2—C1—C2	117.6 (2)	H16A—C16—H16B	109.5
C3—C2—C1	121.6 (2)	H16A—C16—H16C	109.5
C3—C2—C7	119.1 (2)	H16B—C16—H16C	109.5
C7—C2—C1	119.4 (2)	N1—C17—C18	123.6 (2)
C2—C3—H3	119.9	N1—C17—H17	118.2
C4—C3—C2	120.3 (2)	C18—C17—H17	118.2
C4—C3—H3	119.9	C17—C18—C19	118.5 (2)
C3—C4—C5	121.0 (3)	C17—C18—H18	120.7
C3—C4—H4	119.5	C19—C18—H18	120.7
C5—C4—H4	119.5	C18—C19—C22	118.1 (2)
C4—C5—C8	120.9 (3)	C20—C19—C18	118.3 (2)
C6—C5—C4	118.2 (2)	C20—C19—C22	123.6 (2)
C6—C5—C8	120.9 (2)	C19—C20—H20	120.4
C5—C6—C7	121.4 (2)	C21—C20—C19	119.3 (2)
C5—C6—H6	119.3	C21—C20—H20	120.4
C7—C6—H6	119.3	N1—C21—C20	122.8 (3)
C2—C7—H7	120.0	N1—C21—H21	118.6
C6—C7—C2	120.0 (2)	C20—C21—H21	118.6
C6—C7—H7	120.0	O5—C22—N2	123.4 (2)



C5—C8—H8A	109.5	O5—C22—C19	119.8 (2)
C5—C8—H8B	109.5	N2—C22—C19	116.9 (2)
C5—C8—H8C	109.5		
Cu1 <sup>i</sup> —Cu1—O1—C1	-1.45 (18)	O2—C1—C2—C7	8.2 (4)
O2 <sup>i</sup> —Cu1—O1—C1	-4.4 (5)	C1—C2—C3—C4	-179.2 (2)
O3—Cu1—O1—C1	-83.72 (19)	C7—C2—C3—C4	-0.1 (4)
O4—Cu1—O1—C1	84.61 (19)	C1—C2—C7—C6	178.2 (2)
N1—Cu1—O1—C1	-174.75 (19)	C3—C2—C7—C6	-0.9 (4)
Cu1 <sup>i</sup> —Cu1—O3—C9	5.3 (2)	C2—C3—C4—C5	0.8 (4)
O1—Cu1—O3—C9	94.1 (2)	C3—C4—C5—C6	-0.5 (4)
O2 <sup>i</sup> —Cu1—O3—C9	-74.4 (2)	C3—C4—C5—C8	178.2 (2)
O4—Cu1—O3—C9	20.7 (5)	C4—C5—C6—C7	-0.5 (4)
N1—Cu1—O3—C9	-168.6 (2)	C8—C5—C6—C7	-179.2 (2)
Cu1 <sup>i</sup> —Cu1—O4—C9 <sup>i</sup>	-2.61 (18)	C5—C6—C7—C2	1.2 (4)
O1—Cu1—O4—C9 <sup>i</sup>	-91.19 (19)	O3—C9—C10—C11	8.4 (4)
O2 <sup>i</sup> —Cu1—O4—C9 <sup>i</sup>	77.09 (19)	O3—C9—C10—C15	-170.2 (2)
O3—Cu1—O4—C9 <sup>i</sup>	-17.9 (5)	O4 <sup>i</sup> —C9—C10—C11	-171.8 (2)
N1—Cu1—O4—C9 <sup>i</sup>	171.51 (19)	O4 <sup>i</sup> —C9—C10—C15	9.6 (4)
O1—Cu1—N1—C17	-4.4 (2)	C9—C10—C11—C12	-177.8 (2)
O1—Cu1—N1—C21	-179.6 (2)	C15—C10—C11—C12	0.8 (4)
O2 <sup>i</sup> —Cu1—N1—C17	177.58 (19)	C9—C10—C15—C14	176.1 (2)
O2 <sup>i</sup> —Cu1—N1—C21	2.4 (2)	C11—C10—C15—C14	-2.6 (4)
O3—Cu1—N1—C17	-92.1 (2)	C10—C11—C12—C13	1.7 (4)
O3—Cu1—N1—C21	92.7 (2)	C11—C12—C13—C14	-2.5 (4)
O4—Cu1—N1—C17	85.95 (19)	C11—C12—C13—C16	175.5 (3)
O4—Cu1—N1—C21	-89.3 (2)	C12—C13—C14—C15	0.8 (4)
Cu1—O1—C1—O2	2.0 (3)	C16—C13—C14—C15	-177.3 (3)
Cu1—O1—C1—C2	-177.69 (16)	C13—C14—C15—C10	1.8 (4)
Cu1 <sup>i</sup> —O2—C1—O1	-1.3 (4)	N1—C17—C18—C19	1.0 (4)
Cu1 <sup>i</sup> —O2—C1—C2	178.39 (16)	C17—C18—C19—C20	-2.6 (4)
Cu1—O3—C9—O4 <sup>i</sup>	-5.1 (4)	C17—C18—C19—C22	178.6 (2)
Cu1—O3—C9—C10	174.71 (16)	C18—C19—C20—C21	2.1 (4)
Cu1—N1—C17—C18	-174.35 (19)	C22—C19—C20—C21	-179.1 (2)
C21—N1—C17—C18	1.1 (4)	C18—C19—C22—O5	30.9 (4)
Cu1—N1—C21—C20	173.7 (2)	C18—C19—C22—N2	-148.8 (3)
C17—N1—C21—C20	-1.6 (4)	C20—C19—C22—O5	-147.9 (3)
O1—C1—C2—C3	7.0 (4)	C20—C19—C22—N2	32.4 (4)
O1—C1—C2—C7	-172.1 (2)	C19—C20—C21—N1	0.1 (4)
O2—C1—C2—C3	-172.7 (2)		

Simetri kodu: (i)  $-x+2, -y+2, -z+2$ .

Ek Çizelge 36. (20) kristalinin hidrojen bağı geometrisi (Å, °)

D—H...A	D—H	H...A	D...A	D—H...A
N2—H2A...O5 <sup>ii</sup>	0.89 (3)	2.11 (3)	2.984 (3)	169 (3)

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

Ek Çizelge 37. (21) kristalinin fraksiyonel atomik koordinatları ve izotropik veya eşdeğer izotropik yerdeğiştirme parametreleri (Å<sup>2</sup>)

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	$U_{iso}^*/U_{eq}$
Cd1	0.141608 (11)	0.121190 (8)	0.094078 (7)	0.00977 (3)
O1	0.21408 (12)	0.17237 (9)	0.21480 (8)	0.0153 (2)
O2	0.43486 (13)	0.06777 (9)	0.11883 (8)	0.0158 (2)
O3	-0.09543 (12)	0.15690 (9)	0.04849 (8)	0.0150 (2)
O4	-0.08901 (13)	0.26914 (10)	0.15327 (9)	0.0164 (2)
O5	0.56683 (13)	0.41643 (10)	-0.38584 (9)	0.0199 (2)
O6	-0.03527 (14)	-0.40999 (9)	0.37641 (9)	0.0178 (2)
O7	0.25490 (14)	-0.02091 (10)	-0.01623 (9)	0.0183 (2)
H71	0.345 (3)	-0.038 (2)	-0.0464 (19)	0.030 (6)*
H72	0.214 (3)	-0.064 (2)	-0.0261 (18)	0.028 (6)*
O8	-0.06722 (16)	0.23407 (12)	0.36356 (10)	0.0224 (2)
H81	-0.115 (3)	0.252 (2)	0.323 (2)	0.039 (7)*
H82	0.021 (3)	0.216 (2)	0.326 (2)	0.039 (7)*
N1	0.24879 (15)	0.23682 (11)	-0.05300 (10)	0.0131 (2)
N2	0.32591 (17)	0.46852 (14)	-0.40532 (11)	0.0222 (3)
H21	0.355 (3)	0.502 (2)	-0.4672 (19)	0.029 (6)*
H22	0.235 (3)	0.4542 (19)	-0.3832 (18)	0.027 (6)*
N3	0.06838 (15)	-0.03017 (11)	0.21984 (10)	0.0139 (2)
N4	0.02873 (16)	-0.36600 (12)	0.50561 (10)	0.0162 (2)
H41	0.056 (2)	-0.3201 (18)	0.5322 (17)	0.022 (5)*
H42	0.020 (2)	-0.4306 (19)	0.5415 (16)	0.019 (5)*
C1	0.35814 (17)	0.12189 (12)	0.19750 (11)	0.0122 (3)
C2	0.43118 (17)	0.12606 (13)	0.27780 (11)	0.0138 (3)
C3	0.34802 (19)	0.19738 (14)	0.35725 (13)	0.0190 (3)

H3	0.2493	0.2439	0.3587	0.023*
C4	0.4114 (2)	0.19972 (16)	0.43464 (13)	0.0223 (3)
H4	0.3544	0.2478	0.4874	0.027*
C5	0.55876 (19)	0.13100 (15)	0.43413 (12)	0.0196 (3)
C6	0.64170 (19)	0.06017 (15)	0.35394 (13)	0.0208 (3)
H6	0.7406	0.0138	0.3523	0.025*
C7	0.57917 (18)	0.05760 (14)	0.27640 (12)	0.0174 (3)
H7	0.6364	0.0099	0.2233	0.021*
C8	0.6266 (2)	0.13244 (18)	0.51874 (14)	0.0276 (4)
H8A	0.7263	0.0775	0.5079	0.041*
H8B	0.5582	0.1132	0.5865	0.041*
H8C	0.6384	0.2075	0.5157	0.041*
C9	-0.16048 (17)	0.24072 (12)	0.10406 (11)	0.0123 (3)
C10	-0.32334 (17)	0.30742 (12)	0.10992 (12)	0.0130 (3)
C11	-0.41385 (18)	0.37317 (13)	0.19319 (12)	0.0166 (3)
H11	-0.3706	0.3785	0.2432	0.020*
C12	-0.56823 (19)	0.43074 (14)	0.20192 (13)	0.0195 (3)
H12	-0.6280	0.4732	0.2584	0.023*
C13	-0.63418 (18)	0.42543 (13)	0.12678 (13)	0.0177 (3)
C14	-0.54103 (18)	0.36423 (13)	0.04114 (13)	0.0176 (3)
H14	-0.5822	0.3633	-0.0114	0.021*
C15	-0.38809 (18)	0.30477 (13)	0.03297 (12)	0.0152 (3)
H15	-0.3283	0.2629	-0.0240	0.018*
C16	-0.80317 (19)	0.48229 (16)	0.13748 (15)	0.0257 (4)
H16A	-0.8456	0.5324	0.1920	0.039*
H16B	-0.8590	0.4248	0.1551	0.039*
H16C	-0.8127	0.5259	0.0721	0.039*
C17	0.16137 (17)	0.33676 (13)	-0.08530 (12)	0.0152 (3)
H17	0.0612	0.3651	-0.0419	0.018*
C18	0.21389 (18)	0.39975 (13)	-0.18067 (12)	0.0166 (3)
H18	0.1500	0.4686	-0.2009	0.020*
C19	0.36446 (17)	0.35759 (13)	-0.24544 (11)	0.0134 (3)
C20	0.45742 (18)	0.25694 (13)	-0.20997 (12)	0.0153 (3)
H20	0.5599	0.2288	-0.2501	0.018*
C21	0.39564 (18)	0.19876 (13)	-0.11404 (12)	0.0148 (3)
H21A	0.4582	0.1308	-0.0911	0.018*
C22	0.42827 (18)	0.41740 (13)	-0.35244 (12)	0.0154 (3)
C23	0.01222 (18)	-0.10290 (13)	0.19260 (12)	0.0153 (3)
H23	-0.0121	-0.0849	0.1296	0.018*

C24	-0.01121 (18)	-0.20371 (13)	0.25425 (12)	0.0158 (3)
H24	-0.0495	-0.2523	0.2325	0.019*
C25	0.02332 (17)	-0.23100 (12)	0.34907 (11)	0.0125 (3)
C26	0.07689 (18)	-0.15443 (13)	0.37961 (12)	0.0160 (3)
H26	0.0976	-0.1688	0.4437	0.019*
C27	0.09879 (18)	-0.05607 (13)	0.31243 (12)	0.0156 (3)
H27	0.1363	-0.0057	0.3326	0.019*
C28	0.00343 (17)	-0.34324 (12)	0.41280 (11)	0.0131 (3)

Ek Çizelge 38. (21) kristalinin atomik yerdeğiřtirme parametreleri ( $\text{\AA}^2$ )

	$U^{11}$	$U^{22}$	$U^{33}$	$U^{12}$	$U^{13}$	$U^{23}$
Cd1	0.01036 (5)	0.01012 (5)	0.00874 (5)	-0.00363 (4)	-0.00264 (4)	0.00016 (3)
O1	0.0118 (5)	0.0192 (5)	0.0162 (5)	-0.0038 (4)	-0.0054 (4)	-0.0029 (4)
O2	0.0165 (5)	0.0163 (5)	0.0152 (5)	-0.0032 (4)	-0.0054 (4)	-0.0038 (4)
O3	0.0122 (5)	0.0160 (5)	0.0169 (5)	-0.0018 (4)	-0.0048 (4)	-0.0040 (4)
O4	0.0142 (5)	0.0201 (5)	0.0177 (5)	-0.0041 (4)	-0.0076 (4)	-0.0034 (4)
O5	0.0164 (5)	0.0272 (6)	0.0148 (5)	-0.0095 (5)	-0.0039 (4)	0.0046 (4)
O6	0.0239 (6)	0.0157 (5)	0.0185 (5)	-0.0105 (4)	-0.0098 (4)	0.0023 (4)
O7	0.0141 (5)	0.0195 (6)	0.0213 (6)	-0.0072 (5)	0.0013 (4)	-0.0100 (4)
O8	0.0184 (6)	0.0347 (7)	0.0148 (5)	-0.0063 (5)	-0.0039 (5)	-0.0075 (5)
N1	0.0138 (6)	0.0132 (6)	0.0125 (6)	-0.0055 (5)	-0.0033 (5)	0.0003 (4)
N2	0.0179 (7)	0.0322 (8)	0.0158 (6)	-0.0125 (6)	-0.0065 (5)	0.0105 (6)
N3	0.0152 (6)	0.0144 (6)	0.0121 (6)	-0.0049 (5)	-0.0038 (5)	-0.0006 (4)
N4	0.0225 (7)	0.0131 (6)	0.0147 (6)	-0.0078 (5)	-0.0072 (5)	0.0024 (5)
C1	0.0128 (6)	0.0106 (6)	0.0138 (6)	-0.0055 (5)	-0.0045 (5)	0.0017 (5)
C2	0.0135 (6)	0.0162 (7)	0.0128 (6)	-0.0060 (5)	-0.0045 (5)	0.0001 (5)
C3	0.0157 (7)	0.0226 (8)	0.0205 (7)	-0.0035 (6)	-0.0068 (6)	-0.0063 (6)
C4	0.0224 (8)	0.0292 (9)	0.0190 (8)	-0.0074 (7)	-0.0063 (6)	-0.0091 (6)
C5	0.0207 (8)	0.0278 (8)	0.0155 (7)	-0.0132 (7)	-0.0078 (6)	0.0014 (6)
C6	0.0142 (7)	0.0299 (9)	0.0190 (7)	-0.0055 (6)	-0.0079 (6)	0.0006 (6)
C7	0.0146 (7)	0.0223 (8)	0.0145 (7)	-0.0037 (6)	-0.0044 (6)	-0.0022 (6)
C8	0.0299 (9)	0.0432 (11)	0.0195 (8)	-0.0202 (8)	-0.0128 (7)	0.0018 (7)
C9	0.0119 (6)	0.0136 (6)	0.0109 (6)	-0.0049 (5)	-0.0029 (5)	0.0016 (5)
C10	0.0114 (6)	0.0124 (6)	0.0157 (7)	-0.0038 (5)	-0.0049 (5)	-0.0002 (5)
C11	0.0158 (7)	0.0173 (7)	0.0183 (7)	-0.0032 (6)	-0.0067 (6)	-0.0042 (6)
C12	0.0162 (7)	0.0189 (7)	0.0209 (8)	-0.0012 (6)	-0.0037 (6)	-0.0057 (6)
C13	0.0130 (7)	0.0150 (7)	0.0246 (8)	-0.0029 (5)	-0.0067 (6)	-0.0004 (6)

C14	0.0169 (7)	0.0159 (7)	0.0241 (8)	-0.0038 (6)	-0.0119 (6)	-0.0019 (6)
C15	0.0151 (7)	0.0136 (7)	0.0177 (7)	-0.0028 (5)	-0.0064 (6)	-0.0027 (5)
C16	0.0142 (7)	0.0257 (9)	0.0352 (10)	0.0002 (6)	-0.0095 (7)	-0.0039 (7)
C17	0.0117 (6)	0.0170 (7)	0.0145 (7)	-0.0040 (5)	-0.0029 (5)	0.0015 (5)
C18	0.0143 (7)	0.0164 (7)	0.0162 (7)	-0.0037 (6)	-0.0051 (6)	0.0044 (6)
C19	0.0151 (7)	0.0151 (7)	0.0114 (6)	-0.0072 (5)	-0.0047 (5)	0.0018 (5)
C20	0.0143 (7)	0.0154 (7)	0.0136 (7)	-0.0040 (5)	-0.0017 (5)	-0.0008 (5)
C21	0.0154 (7)	0.0129 (7)	0.0144 (7)	-0.0029 (5)	-0.0042 (5)	0.0002 (5)
C22	0.0174 (7)	0.0161 (7)	0.0123 (6)	-0.0073 (6)	-0.0035 (5)	0.0019 (5)
C23	0.0190 (7)	0.0170 (7)	0.0115 (6)	-0.0071 (6)	-0.0059 (5)	0.0009 (5)
C24	0.0216 (7)	0.0152 (7)	0.0132 (7)	-0.0082 (6)	-0.0058 (6)	-0.0012 (5)
C25	0.0124 (6)	0.0117 (6)	0.0123 (6)	-0.0037 (5)	-0.0033 (5)	0.0012 (5)
C26	0.0202 (7)	0.0171 (7)	0.0142 (7)	-0.0088 (6)	-0.0088 (6)	0.0028 (5)
C27	0.0203 (7)	0.0154 (7)	0.0145 (7)	-0.0091 (6)	-0.0073 (6)	0.0014 (5)
C28	0.0111 (6)	0.0128 (6)	0.0136 (6)	-0.0036 (5)	-0.0025 (5)	0.0009 (5)

---

Ek Çizelge 39. (21) kristalinin geometrik parametreleri (Å, °)

---

Cd1—O1	2.2478 (11)	C8—C5	1.507 (2)
Cd1—O3	2.4263 (11)	C8—H8A	0.9600
Cd1—O4	2.3794 (11)	C8—H8B	0.9600
Cd1—O7	2.2947 (11)	C8—H8C	0.9600
Cd1—N1	2.3295 (12)	C9—C10	1.491 (2)
Cd1—N3	2.3671 (13)	C10—C11	1.395 (2)
O1—C1	1.2730 (18)	C10—C15	1.396 (2)
O2—C1	1.2535 (18)	C11—H11	0.9300
O3—C9	1.2730 (18)	C12—C11	1.390 (2)
O4—C9	1.2622 (18)	C12—C13	1.393 (2)
O5—C22	1.2325 (19)	C12—H12	0.9300
O6—C28	1.2422 (18)	C13—C16	1.506 (2)
O7—H71	0.79 (3)	C14—C13	1.393 (2)
O7—H72	0.80 (2)	C14—C15	1.385 (2)
O8—H81	0.79 (3)	C14—H14	0.9300
O8—H82	0.81 (3)	C15—H15	0.9300
N1—C17	1.3406 (19)	C16—H16A	0.9600
N1—C21	1.3435 (19)	C16—H16B	0.9600
N2—C22	1.333 (2)	C16—H16C	0.9600

N2—H21	0.85 (2)	C17—H17	0.9300
N2—H22	0.87 (2)	C18—C17	1.387 (2)
N3—C23	1.3425 (19)	C18—C19	1.394 (2)
N3—C27	1.3433 (19)	C18—H18	0.9300
N4—C28	1.325 (2)	C20—C19	1.387 (2)
N4—H41	0.87 (2)	C20—H20	0.9300
N4—H42	0.86 (2)	C21—C20	1.385 (2)
C1—C2	1.500 (2)	C21—H21A	0.9300
C2—C3	1.390 (2)	C22—C19	1.506 (2)
C2—C7	1.392 (2)	C23—C24	1.387 (2)
C3—C4	1.391 (2)	C23—H23	0.9300
C3—H3	0.9300	C24—H24	0.9300
C4—C5	1.391 (2)	C25—C24	1.391 (2)
C4—H4	0.9300	C26—C25	1.391 (2)
C6—C5	1.393 (2)	C26—C27	1.390 (2)
C6—C7	1.388 (2)	C26—H26	0.9300
C6—H6	0.9300	C27—H27	0.9300
C7—H7	0.9300	C28—C25	1.5077 (19)
O1—Cd1—O3	137.23 (4)	O4—C9—O3	121.19 (13)
O1—Cd1—O4	83.65 (4)	O4—C9—C10	119.45 (13)
O1—Cd1—O7	133.14 (4)	C11—C10—C15	118.94 (14)
O1—Cd1—N1	99.39 (4)	C11—C10—C9	120.24 (13)
O1—Cd1—N3	87.65 (4)	C15—C10—C9	120.82 (13)
O4—Cd1—O3	54.71 (4)	C10—C11—H11	119.8
O7—Cd1—O3	88.51 (4)	C12—C11—C10	120.44 (14)
O7—Cd1—O4	143.07 (4)	C12—C11—H11	119.8
O7—Cd1—N1	84.40 (4)	C11—C12—C13	120.59 (15)
O7—Cd1—N3	82.88 (4)	C11—C12—H12	119.7
N1—Cd1—O3	93.12 (4)	C13—C12—H12	119.7
N1—Cd1—O4	93.53 (4)	C12—C13—C14	118.64 (14)
N1—Cd1—N3	167.06 (4)	C12—C13—C16	121.48 (15)
N3—Cd1—O3	88.91 (4)	C14—C13—C16	119.87 (15)
N3—Cd1—O4	98.06 (4)	C13—C14—H14	119.5
C1—O1—Cd1	105.84 (9)	C15—C14—C13	121.06 (14)
C9—O3—Cd1	90.83 (8)	C15—C14—H14	119.5
C9—O4—Cd1	93.27 (9)	C10—C15—H15	119.9
Cd1—O7—H71	123.1 (17)	C14—C15—C10	120.21 (14)
Cd1—O7—H72	127.0 (17)	C14—C15—H15	119.9
H72—O7—H71	110 (2)	C13—C16—H16A	109.5

H81—O8—H82	103 (3)	C13—C16—H16B	109.5
C17—N1—Cd1	121.04 (10)	C13—C16—H16C	109.5
C17—N1—C21	118.25 (13)	H16A—C16—H16B	109.5
C21—N1—Cd1	120.31 (10)	H16A—C16—H16C	109.5
C22—N2—H21	120.3 (15)	H16B—C16—H16C	109.5
C22—N2—H22	119.5 (15)	N1—C17—C18	122.87 (14)
H22—N2—H21	119 (2)	N1—C17—H17	118.6
C23—N3—Cd1	118.71 (10)	C18—C17—H17	118.6
C23—N3—C27	117.68 (13)	C17—C18—C19	118.55 (14)
C27—N3—Cd1	123.03 (10)	C17—C18—H18	120.7
C28—N4—H41	124.1 (14)	C19—C18—H18	120.7
C28—N4—H42	118.4 (14)	C18—C19—C22	122.10 (14)
H42—N4—H41	117.4 (19)	C20—C19—C18	118.62 (13)
O1—C1—C2	117.01 (13)	C20—C19—C22	119.28 (13)
O2—C1—O1	121.75 (13)	C19—C20—H20	120.4
O2—C1—C2	121.20 (13)	C21—C20—C19	119.15 (14)
C3—C2—C1	119.49 (14)	C21—C20—H20	120.4
C3—C2—C7	119.02 (14)	N1—C21—C20	122.46 (14)
C7—C2—C1	121.47 (13)	N1—C21—H21A	118.8
C2—C3—C4	120.48 (15)	C20—C21—H21A	118.8
C2—C3—H3	119.8	O5—C22—N2	124.40 (14)
C4—C3—H3	119.8	O5—C22—C19	120.11 (14)
C3—C4—H4	119.6	N2—C22—C19	115.49 (13)
C5—C4—C3	120.82 (15)	N3—C23—C24	122.90 (14)
C5—C4—H4	119.6	N3—C23—H23	118.5
C4—C5—C6	118.36 (14)	C24—C23—H23	118.5
C4—C5—C8	120.82 (16)	C23—C24—C25	119.07 (14)
C6—C5—C8	120.82 (16)	C23—C24—H24	120.5
C5—C6—H6	119.5	C25—C24—H24	120.5
C7—C6—C5	121.08 (15)	C24—C25—C26	118.47 (13)
C7—C6—H6	119.5	C24—C25—C28	118.30 (13)
C2—C7—H7	119.9	C26—C25—C28	123.23 (13)
C6—C7—C2	120.24 (15)	C25—C26—H26	120.7
C6—C7—H7	119.9	C27—C26—C25	118.64 (14)
C5—C8—H8A	109.5	C27—C26—H26	120.7
C5—C8—H8B	109.5	N3—C27—C26	123.20 (14)
C5—C8—H8C	109.5	N3—C27—H27	118.4
H8A—C8—H8B	109.5	C26—C27—H27	118.4
H8A—C8—H8C	109.5	O6—C28—N4	123.03 (14)

H8B—C8—H8C	109.5	O6—C28—C25	119.00 (13)
O3—C9—C10	119.35 (13)	N4—C28—C25	117.97 (13)
O3—Cd1—O1—C1	178.82 (8)	O1—C1—C2—C3	-9.6 (2)
O4—Cd1—O1—C1	-168.65 (9)	O1—C1—C2—C7	168.54 (14)
O7—Cd1—O1—C1	15.00 (11)	O2—C1—C2—C3	172.66 (14)
N1—Cd1—O1—C1	-76.11 (9)	O2—C1—C2—C7	-9.2 (2)
N3—Cd1—O1—C1	92.97 (9)	C1—C2—C3—C4	177.80 (14)
O1—Cd1—O3—C9	15.18 (11)	C7—C2—C3—C4	-0.4 (2)
O4—Cd1—O3—C9	-0.14 (8)	C1—C2—C7—C6	-177.67 (14)
O7—Cd1—O3—C9	-176.56 (9)	C3—C2—C7—C6	0.5 (2)
N1—Cd1—O3—C9	-92.25 (9)	C2—C3—C4—C5	0.0 (3)
N3—Cd1—O3—C9	100.53 (9)	C3—C4—C5—C6	0.3 (3)
O1—Cd1—O4—C9	-169.47 (9)	C3—C4—C5—C8	-179.23 (16)
O3—Cd1—O4—C9	0.14 (8)	C5—C6—C7—C2	-0.2 (2)
O7—Cd1—O4—C9	6.09 (12)	C7—C6—C5—C4	-0.2 (2)
N1—Cd1—O4—C9	91.47 (9)	C7—C6—C5—C8	179.32 (15)
N3—Cd1—O4—C9	-82.76 (9)	O3—C9—C10—C11	159.36 (14)
O1—Cd1—N1—C17	-98.58 (11)	O3—C9—C10—C15	-20.3 (2)
O1—Cd1—N1—C21	88.82 (11)	O4—C9—C10—C11	-21.4 (2)
O3—Cd1—N1—C17	40.37 (11)	O4—C9—C10—C15	158.92 (14)
O3—Cd1—N1—C21	-132.23 (11)	C9—C10—C11—C12	-176.66 (14)
O4—Cd1—N1—C17	-14.44 (11)	C15—C10—C11—C12	3.0 (2)
O4—Cd1—N1—C21	172.96 (11)	C9—C10—C15—C14	177.96 (14)
O7—Cd1—N1—C17	128.57 (12)	C11—C10—C15—C14	-1.7 (2)
O7—Cd1—N1—C21	-44.04 (11)	C13—C12—C11—C10	-1.2 (2)
N3—Cd1—N1—C17	139.16 (18)	C11—C12—C13—C14	-1.9 (2)
N3—Cd1—N1—C21	-33.4 (3)	C11—C12—C13—C16	176.95 (15)
O1—Cd1—N3—C23	-178.51 (11)	C15—C14—C13—C12	3.3 (2)
O1—Cd1—N3—C27	-7.44 (12)	C15—C14—C13—C16	-175.65 (15)
O3—Cd1—N3—C23	44.13 (11)	C13—C14—C15—C10	-1.5 (2)
O3—Cd1—N3—C27	-144.80 (12)	C19—C18—C17—N1	-0.4 (2)
O4—Cd1—N3—C23	98.24 (11)	C17—C18—C19—C20	-2.6 (2)
O4—Cd1—N3—C27	-90.69 (12)	C17—C18—C19—C22	177.02 (14)
O7—Cd1—N3—C23	-44.50 (11)	C21—C20—C19—C18	3.1 (2)
O7—Cd1—N3—C27	126.57 (12)	C21—C20—C19—C22	-176.49 (13)
N1—Cd1—N3—C23	-55.1 (2)	N1—C21—C20—C19	-0.8 (2)
N1—Cd1—N3—C27	115.9 (2)	O5—C22—C19—C18	145.44 (16)
Cd1—N1—C17—C18	-170.02 (12)	O5—C22—C19—C20	-35.0 (2)
C21—N1—C17—C18	2.7 (2)	N2—C22—C19—C18	-34.9 (2)



Cd1—N1—C21—C20	170.65 (11)	N2—C22—C19—C20	144.70 (15)
C17—N1—C21—C20	-2.2 (2)	N3—C23—C24—C25	0.6 (2)
Cd1—N3—C23—C24	169.79 (12)	C26—C25—C24—C23	1.5 (2)
C27—N3—C23—C24	-1.8 (2)	C28—C25—C24—C23	-177.50 (14)
Cd1—N3—C27—C26	-170.25 (12)	C27—C26—C25—C24	-2.2 (2)
C23—N3—C27—C26	0.9 (2)	C27—C26—C25—C28	176.66 (14)
Cd1—O1—C1—O2	7.16 (16)	C25—C26—C27—N3	1.1 (2)
Cd1—O1—C1—C2	-170.52 (10)	O6—C28—C25—C24	3.6 (2)
Cd1—O3—C9—O4	0.24 (14)	O6—C28—C25—C26	-175.30 (14)
Cd1—O3—C9—C10	179.43 (11)	N4—C28—C25—C24	-176.55 (14)
Cd1—O4—C9—O3	-0.25 (14)	N4—C28—C25—C26	4.5 (2)
Cd1—O4—C9—C10	-179.43 (11)		

Ek Çizelge 40. (21) kristalinin hidrojen bağı geometrisi (Å, °)

Cg3 ve Cg4 sırasıyla, N1/C17-C21 ve N3/C23-C27 halkalarının merkezleridir.				
<i>D—H...A</i>	<i>D—H</i>	<i>H...A</i>	<i>D...A</i>	<i>D—H...A</i>
N2—H21...O5 <sup>i</sup>	0.85 (2)	2.05 (2)	2.8990 (19)	177 (2)
N2—H22...O6 <sup>ii</sup>	0.87 (3)	2.10 (3)	2.948 (2)	163 (2)
N4—H41...O8 <sup>iii</sup>	0.87 (2)	1.99 (2)	2.822 (2)	160 (2)
N4—H42...O6 <sup>iv</sup>	0.86 (2)	2.05 (2)	2.8979 (18)	171 (2)
O7—H71...O2 <sup>v</sup>	0.79 (3)	1.93 (3)	2.7186 (19)	175 (2)
O7—H72...O3 <sup>ii</sup>	0.80 (3)	1.97 (3)	2.7690 (18)	174 (3)
O8—H81...O4	0.79 (3)	2.21 (3)	2.8767 (18)	143 (3)
O8—H82...O1	0.80 (3)	1.93 (3)	2.7269 (18)	169 (3)
C6—H6...Cg4 <sup>vi</sup>	0.93	2.82	3.7196 (20)	163
C14—H14...Cg3 <sup>vii</sup>	0.93	2.78	3.6840 (19)	164

Simetri kodları: (i)  $-x+1, -y+1, -z-1$ ; (ii)  $-x, -y, -z$ ; (iii)  $-x, -y, -z+1$ ; (iv)  $-x, -y-1, -z+1$ ; (v)  $-x+1, -y, -z$ ; (vi)  $x+1, y, z$ ; (vii)  $x-1, y, z$ .

Ek Çizelge 41. (6) kompleksinin toz XRD değerleri

Pos. [ $^{\circ}2\theta$ .]	Yükseklik [cts]	FWHM [ $^{\circ}2\theta$ .]	d-aralığı [Å]	Rel. Int. [%]
18,8153	6,52	0,3360	4,71254	29,52
19,4835	22,10	0,1200	4,55240	100,00
28,2780	7,85	0,0720	3,15340	35,51
31,7158	6,06	0,1440	2,81900	27,42
36,5424	3,34	0,0960	2,45698	15,11
37,4744	7,25	0,2880	2,39798	32,79
40,5597	20,82	0,0960	2,22240	94,23
41,6517	1,77	0,1200	2,16663	7,99
42,5020	14,59	0,0960	2,12523	66,04
42,6391	8,20	0,0960	2,11871	37,11
42,8815	5,01	0,1440	2,10730	22,68
44,6874	4,23	0,3840	2,02624	19,13
49,2360	6,10	0,1200	1,84916	27,61
55,5993	16,39	0,0960	1,65165	74,16
59,4149	3,46	0,1440	1,55436	15,68
61,4424	3,94	0,2880	1,50784	17,81
65,7663	2,24	0,2400	1,41879	10,14
67,7847	8,99	0,1200	1,38137	40,67
71,0761	3,47	0,1440	1,32526	15,71
71,4122	1,75	0,1920	1,31985	7,91
79,3190	2,46	0,2400	1,20694	11,14
81,1817	2,03	0,9600	1,18389	9,19

Ek Çizelge 42. (7) kompleksinin toz XRD değerleri

Pos. [ $^{\circ}$ 2Th.]	Yükselik [cts]	FWHM [ $^{\circ}$ 2Th.]	d-aralığı [ $\text{\AA}$ ]	Rel. Int. [%]
15,4774	8,27	0,7680	5,72050	47,64
22,1432	5,64	0,7680	4,01123	32,50
23,4312	11,72	0,4800	3,79358	67,52
25,1572	17,35	0,1440	3,53707	100,00
28,4016	8,48	0,2880	3,13996	48,87
29,3525	8,20	0,2880	3,04037	47,27
32,4288	7,02	0,0720	2,75863	40,48
33,5528	7,10	0,4800	2,66874	40,91
36,6842	4,23	0,1680	2,44780	24,37
43,6146	8,65	0,1440	2,07356	49,88
44,6220	5,08	0,5760	2,02906	29,26
49,7301	4,29	0,1680	1,83194	24,72
50,3900	5,68	0,1920	1,80949	32,73
55,6201	3,07	0,1920	1,65108	17,71
60,5476	2,88	0,1920	1,52797	16,57
68,9716	5,25	0,1920	1,36047	30,24
72,8439	2,95	0,2400	1,29740	17,00
73,6623	1,62	0,2880	1,28499	9,34
83,6603	3,59	0,2400	1,15500	20,70
85,2341	1,86	0,4800	1,13765	10,71
86,6213	2,44	0,0720	1,12296	14,06

Ek Çizelge 43. (13) kompleksinin toz XRD deęerleri

Pos. [ $^{\circ}2\text{Th.}$ ]	Yükseklik [cts]	FWHM [ $^{\circ}2\text{Th.}$ ]	d-aralıęı [ $\text{Å}$ ]	Rel. Int. [%]
22,1453	22,39	0,1200	4,01085	100,00
30,9779	6,31	0,0720	2,88445	28,16
31,1295	5,93	0,0720	2,87074	26,48
31,3416	6,64	0,1200	2,85180	29,66
32,4912	5,55	0,1200	2,75348	24,77
39,0195	8,76	0,0960	2,30651	39,10
41,6561	2,70	0,1680	2,16641	12,06
44,6766	10,08	0,2880	2,02671	45,01
50,3896	3,32	0,1680	1,80950	14,84
50,9491	5,22	0,1680	1,79093	23,29
57,9376	4,37	0,1920	1,59043	19,51
58,6043	3,55	0,1440	1,57392	15,85
72,7275	19,09	0,5280	1,29918	85,23

Ek Çizelge 44. (14) kompleksinin toz XRD değerleri

Pos. [ $^{\circ}$ 2Th.]	Yükseklik [cts]	FWHM [ $^{\circ}$ 2Th.]	d-aralığı [ $\text{\AA}$ ]	Rel. Int. [%]
10,2671	8,08	1,1520	8,60888	44,47
24,0306	4,17	1,1520	3,70028	22,97
35,0064	3,91	0,1200	2,56118	21,51
38,2880	5,66	0,0960	2,34888	31,18
38,5013	4,80	0,1200	2,33635	26,43
41,2716	6,55	0,1200	2,18570	36,09
42,1115	3,57	0,1440	2,14403	19,66
44,6498	6,07	0,2400	2,02786	33,45
51,4917	7,20	0,1440	1,77333	39,64
58,8592	3,41	0,1200	1,56771	18,76
71,4354	0,79	0,2400	1,31948	4,33
72,6506	18,16	0,3840	1,30037	100,00



**İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ**  
**BİLİMSEL VE TEKNOLOJİ**  
**MERKEZ ARAŞTIRMA LABORATUVARI**  
**İnönü Üniversitesi, Kampüs 44280 MALATYA**  
**Tel: (0.422) 377 49 50**  
**Faks: (0.422) 3410319**  
**http://ibtam.inonu.edu.tr**

### ELEMENTEL ANALİZ İSTEK FORMU

Analiz İsteyen Kişi / Kuruluş : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu Uzman Eftal Çimen Adres – Tel :Kafhas Üniversitesi Fen Edb.Fak.Kimya Böl. KARS					Örnek Tanıma Kodu  B20	
Analizi istenen elementler : C-H-N-S Örneğin kapalı formülü : Nem çekiciliği :						
	(%) C	(%) H	(%) N	(%) S	(%) O	Üniversite
Teorik Değerler						
Analiz Sonuçları	47.69	5.293	-	-		Endüstri
Analiz Ücretini ödeyenin Adı, Soyadı, Ünvanı : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu Adres – Tel. : . İmza Uzman Eftal Çimen					Analiz ücretinin yatırılacağı hesap No: Ziraat Bankası İnönü Üniv. Şubesi TR 880001001490403232975005	
<b>KURUM TARAFINDAN DOLDURULACAK</b>						
<b>LABORATUVAR KAYIT NO.</b>	<b>GELİŞ TARİHİ</b>	<b>BİTİŞ TARİHİ</b>	<b>ANALİZ TUTARI</b>			
800/719	20.01.2011	20.01.2011	37TL			
Analizi yapanın imzası :  Bülent DURMAZ			Laboratuvar Müdürünün imzası :  İki nüsha doldurunuz.			

- Analiz sonunda geri istenilen numunelerin analiz yapıldıktan sonra en geç 1 ay içinde alınması gerekmektedir.
- Zehirli ve sağlığa zararlı numuneler analiz istek formunda belirtilmelidir.
- Kağıt paket veya alüminyum folyo içinde getirilecek numuneler kabul edilmeyecektir.
- Element analiz ücretlerini web adresimizden öğrenebilirsiniz.(www.inonu.edu.tr/mal)

**UYGUNDUR**

Ek Çizelge 45. (1) kompleksinin elementel analiz sonucu



**İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ**  
**BİLİMSEL VE TEKNOLOJİ**  
**MERKEZ ARAŞTIRMA LABORATUVARI**  
İnönü Üniversitesi, Kampüs 44280 MALATYA  
Tel: (0.422) 377 49 50  
Faks: (0.422) 3410319  
http://ibtam.inonu.edu.tr

### ELEMENTEL ANALİZ İSTEK FORMU

Analiz İsteyen Kişi / Kuruluş : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu  
Uzman Eftal Çimen  
Adres – Tel :Kafhas Üniversitesi Fen Edb.Fak.Kimya Böl.  
KARS

Örnek Tanıma Kodu

B-17

Analizi istenen elementler : C-H-N-S

Örneğin kapalı formülü :

Nem çekiciliği :

	(%) C	(%) H	(%) N	(%) S	(%) O
Teorik Değerler					
Analiz Sonuçları	52.04	4.782	-	-	

Üniversite

Endüstri

Analiz Ücretini ödeyenin  
Adı, Soyadı, Ünvanı : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu  
Adres – Tel. : .

İmza Uzman Eftal Çimen

Analiz ücretinin yatırılacağı  
hesap No:

Ziraat Bankası İnönü Üniv.  
Şubesi  
TR  
880001001490403232975005

### KURUM TARAFINDAN DOLDURULACAK

LABORATUVAR KAYIT NO.	GELİŞ TARİHİ	BİTİŞ TARİHİ	ANALİZ TUTARI
800/719	20.01.2011	20.01.2011	37TL
Analizi yapanın imzası : 	Bülent DURMAZ	Laboratuvar Müdürünün imzası : 	

İki nüsha doldurunuz.

- Analiz sonunda geri istenilen numunelerin analiz yapıldıktan sonra en geç 1 ay içinde alınması gerekmektedir.
- Zehirli ve sağlığa zararlı numuneler analiz istek formunda belirtilmelidir.
- Kağıt paket veya alüminyum folyo içinde getirilecek numuneler kabul edilmeyecektir.
- Element analiz ücretlerini web adresimizden öğrenebilirsiniz.(www.inonu.edu.tr/mal)

**UYGUNDUR**

Ek Çizelge 46. (2) kompleksinin elementel analiz sonucu



**İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ**  
**BİLİMSEL VE TEKNOLOJİ**  
**MERKEZ ARAŞTIRMA LABORATUVARI**  
Inönü Üniversitesi, Kampüs 44280 MALATYA  
Tel: (0.422) 377 49 50  
Faks: (0.422) 3410319  
<http://ibtam.inonu.edu.tr>

### ELEMENTEL ANALİZ İSTEK FORMU

Analiz İsteyen Kişi / Kuruluş : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu Uzman Eftal Çimen Adres – Tel :Kafhas Üniversitesi Fen Edb.Fak.Kimya Böl. KARS	Örnek Tanıma Kodu  B7
---	-----------------------------

Analizi istenen elementler : C-H-N-S

Örneğin kapalı formülü :

Nem çekiciliği :

	(%) C	(%) H	(%) N	(%) S	(%) O	
Teorik Değerler						Üniversite
Analiz Sonuçları	45.50	4.218	-	-		Endüstri
Analiz Ücretini ödeyenin Adı, Soyadı, Ünvanı : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu Adres – Tel. : . İmza Uzman Eftal Çimen						Analiz ücretinin yatırılacağı hesap No:  Ziraat Bankası İnönü Üniv. Şubesi TR 880001001490403232975005

### KURUM TARAFINDAN DOLDURULACAK

LABORATUVAR KAYIT NO.	GELİŞ TARİHİ	BİTİŞ TARİHİ	ANALİZ TUTARI
800/719	20.01.2011	20.01.2011	37TL
Analizi yapanın imzası : 	Laboratuvar Müdürünün imzası : 		

İki nüsha doldurunuz.

- Analiz sonunda geri istenilen numunelerin analiz yapıldıktan sonra en geç 1 ay içinde alınması gerekmektedir.
- Zehirli ve sağlığa zararlı numuneler analiz istek formunda belirtilmelidir.
- Kağıt paket veya alüminyum folyo içinde getirilecek numuneler kabul edilmeyecektir.
- Element analiz ücretlerini web adresimizden öğrenebilirsiniz.([www.inonu.edu.tr/mal](http://www.inonu.edu.tr/mal))

**UYGUNDUR**

Ek Çizelge 47. (3) kompleksinin elementel analiz sonucu





**İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ**  
**BİLİMSEL VE TEKNOLOJİ**  
**MERKEZ ARAŞTIRMA LABORATUVARI**  
İnönü Üniversitesi, Kampüs 44280 MALATYA  
Tel: (0.422) 377 49 50  
Faks: (0.422) 3410319  
http://ibtam.inonu.edu.tr

### ELEMENTEL ANALİZ İSTEK FORMU

Analiz İsteyen Kişi / Kuruluş : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu  
Uzman Eftal Çimen  
Adres – Tel :Kafhas Üniversitesi Fen Edb.Fak.Kimya Böl.  
KARS

Örnek Tanıma Kodu  
B26

Analizi istenen elementler : C-H-N-S

Örneğin kapalı formülü :

Nem çekiciliği :

	(%) C	(%) H	(%) N	(%) S	(%) O
Teorik Değerler					
Analiz Sonuçları	38.61	3.194	-	-	

Üniversite  
Endüstri

Analiz Ücretini ödeyenin  
Adı, Soyadı, Ünvanı : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu  
Adres – Tel. : .

İmza Uzman Eftal Çimen

Analiz ücretinin yatırılacağı  
hesap No:

Ziraat Bankası İnönü Üniv.  
Şubesi  
TR  
880001001490403232975005

### KURUM TARAFINDAN DOLDURULACAK

LABORATUVAR KAYIT NO.	GELİŞ TARİHİ	BİTİŞ TARİHİ	ANALİZ TUTARI
800/719	20.01.2011	20.01.2011	37TL
Analizi yapanın imzası : 	Bülent DURMAZ	Laboratuvar Müdürünün imzası : 	

İki nüsha doldurunuz.

- Analiz sonunda geri istenilen numunelerin analiz yapıldıktan sonra en geç 1 ay içinde alınması gerekmektedir.
- Zehirli ve sağlığa zararlı numuneler analiz istek formunda belirtilmelidir.
- Kağıt paket veya alüminyum folyo içinde getirilecek numuneler kabul edilmeyecektir.
- Element analiz ücretlerini web adresimizden öğrenebilirsiniz.(www.inonu.edu.tr/mal)

**UYGUNDUR**

Ek Çizelge 48. (4) kompleksinin elementel analiz sonucu



**İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ**  
**BİLİMSEL VE TEKNOLOJİ**  
**MERKEZ ARAŞTIRMA LABORATUVARI**  
İnönü Üniversitesi, Kampüs 44280 MALATYA  
Tel: (0.422) 377 49 50  
Faks: (0.422) 3410319  
<http://ibtam.inonu.edu.tr>

### ELEMENTEL ANALİZ İSTEK FORMU

Analiz İsteyen Kişi / Kuruluş : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu Uzman Eftal Çimen Adres – Tel :Kafhas Üniversitesi Fen Edb.Fak.Kimya Böl. KARS					Örnek Tanıma Kodu B18	
Analizi istenen elementler : C-H-N-S Örneğin kapalı formülü : Nem çekiciliği :						
	(%) C	(%) H	(%) N	(%) S	(%) O	Üniversite
Teorik Değerler						Endüstri
Analiz Sonuçları	55.14	4.870	9.446	-		
Analiz Ücretini ödeyenin Adı, Soyadı, Ünvanı : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu Adres – Tel. : İmza Uzman Eftal Çimen					Analiz ücretinin yatırılacağı hesap No: Ziraat Bankası İnönü Üniv. Şubesi TR 880001001490403232975005	
<b>KURUM TARAFINDAN DOLDURULACAK</b>						
<b>LABORATUVAR KAYIT NO.</b>	<b>GELİŞ TARİHİ</b>	<b>BİTİŞ TARİHİ</b>	<b>ANALİZ TUTARI</b>			
800/719	20.01.2011	20.01.2011	37TL			
Analizi yapanın imzası : 		Laboratuvar Müdürünün imzası : 				
Bülent DURMAZ						

İki nüsha doldurunuz.

- Analiz sonunda geri istenilen numunelerin analiz yapıldıktan sonra en geç 1 ay içinde alınması gerekmektedir.
- Zehirli ve sağlığa zararlı numuneler analiz istek formunda belirtilmelidir.
- Kağıt paket veya alüminyum folyo içinde getirilecek numuneler kabul edilmeyecektir.
- Element analiz ücretlerini web adresimizden öğrenebilirsiniz.([www.inonu.edu.tr/mal](http://www.inonu.edu.tr/mal))

**UYGUNDUR**

Ek Çizelge 49. (5) kompleksinin elementel analiz sonucu



**İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ**  
**BİLİMSEL VE TEKNOLOJİ**  
**MERKEZ ARAŞTIRMA LABORATUVARI**  
İnönü Üniversitesi, Kampüs 44280 MALATYA  
Tel: (0.422) 377 49 50  
Faks: (0.422) 3410319  
<http://ibtam.inonu.edu.tr>

### ELEMENTEL ANALİZ İSTEK FORMU

Analiz İsteyen Kişi / Kuruluş : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu Uzman Eftal Çimen Adres – Tel : Kafhas Üniversitesi Fen Edb.Fak.Kimya Böl. KARS					Örnek Tanıma Kodu B12
Analizi istenen elementler : C-H-N-S					
Örneğin kapalı formülü :					
Nem çekiciliği :					
	(%) C	(%) H	(%) N	(%) S	(%) O
Teorik Değerler					Üniversite
Analiz Sonuçları	55.14	4.961	9.147	-	Endüstri
Analiz Ücretini ödeyenin Adı, Soyadı, Ünvanı : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu Adres – Tel. : . . . İmza Uzman Eftal Çimen					Analiz ücretinin yatırılacağı hesap No: Ziraat Bankası İnönü Üniv. Şubesi TR 880001001490403232975005
<b>KURUM TARAFINDAN DOLDURULACAK</b>					
<b>LABORATUVAR KAYIT NO.</b>	<b>GELİŞ TARİHİ</b>	<b>BİTİŞ TARİHİ</b>	<b>ANALİZ TUTARI</b>		
800/719	20.01.2011	20.01.2011	37TL		
Analizi yapanın imzası :  Bülent DURMAZ			Laboratuvar Müdürünün imzası : 		

İki nüsha doldurunuz.

- Analiz sonunda geri istenilen numunelerin analiz yapıldıktan sonra en geç 1 ay içinde alınması gerekmektedir.
- Zehirli ve sağlığa zararlı numuneler analiz istek formunda belirtilmelidir.
- Kağıt paket veya alüminyum folyo içinde getirilecek numuneler kabul edilmeyecektir.
- Element analiz ücretlerini web adresimizden öğrenebilirsiniz.([www.inonu.edu.tr/mal](http://www.inonu.edu.tr/mal))


**UYGUNDUR**

Ek Çizelge 50. (6) kompleksinin elementel analiz sonucu



**İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ**  
**BİLİMSEL VE TEKNOLOJİ**  
**MERKEZ ARAŞTIRMA LABORATUVARI**  
İnönü Üniversitesi, Kampüs 44280 MALATYA  
Tel: (0.422) 377 49 50  
Faks: (0.422) 3410319  
http://ibtam.inonu.edu.tr

### ELEMENTEL ANALİZ İSTEK FORMU

Analiz İsteyen Kişi / Kuruluş : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu Uzman Eftal Çimen Adres – Tel :Kafhas Üniversitesi Fen Edb.Fak.Kimya Böl. KARS					Örnek Tanıma Kodu B11	
Analizi istenen elementler : C-H-N-S Örneğin kapalı formülü : Nem çekiciliği :						
	(%) C	(%) H	(%) N	(%) S	(%) O	Üniversite
Teorik Değerler						Endüstri
Analiz Sonuçları	54.80	4.929	9.042	-		
Analiz Ücretini ödeyenin Adı, Soyadı, Ünvanı : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu Adres – Tel. : . İmza Uzman Eftal Çimen					Analiz ücretinin yatırılacağı hesap No: Ziraat Bankası İnönü Üniv. Şubesi TR 880001001490403232975005	
<b>KURUM TARAFINDAN DOLDURULACAK</b>						
<b>LABORATUVAR KAYIT NO.</b>	<b>GELİŞ TARİHİ</b>	<b>BİTİŞ TARİHİ</b>	<b>ANALİZ TUTARI</b>			
800/719	20.01.2011	20.01.2011	37TL			
Analizi yapanın imzası :  Bülent DURMAZ			Laboratuvar Müdürünün imzası : 			

İki nüsha doldurunuz.

- Analiz sonunda geri istenilen numunelerin analiz yapıldıktan sonra en geç 1 ay içinde alınması gerekmektedir.
- Zehirli ve sağlığa zararlı numuneler analiz istek formunda belirtilmelidir.
- Kağıt paket veya alüminyum folyo içinde getirilecek numuneler kabul edilmeyecektir.
- Element analiz ücretlerini web adresimizden öğrenebilirsiniz.(www.inonu.edu.tr/mal)

**UYGUNDUR**

Ek Çizelge 51. (7) kompleksinin elementel analiz sonucu



**İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ**  
**BİLİMSEL VE TEKNOLOJİ**  
**MERKEZ ARAŞTIRMA LABORATUVARI**  
İnönü Üniversitesi, Kampüs 44280 MALATYA  
Tel: (0.422) 377 49 50  
Faks: (0.422) 3410319  
<http://ibtam.inonu.edu.tr>

### ELEMENTEL ANALİZ İSTEK FORMU

Analiz İsteyen Kişi / Kuruluş : Prof.Dr.H.Ali Neceföğlü Uzman Eftal Çimen Adres – Tel : Kafhas Üniversitesi Fen Edb.Fak.Kimya Böl. KARS					Örnek Tanıma Kodu  B3	
Analizi istenen elementler : C-H-N-S Örneğin kapalı formülü : Nem çekiciliği :						
	(%) C	(%) H	(%) N	(%) S	(%) O	Üniversite
Teorik Değerler						Endüstri
Analiz Sonuçları	57.57	4.476	9.757	-		
Analiz Ücretini ödeyenin Adı, Soyadı, Ünvanı : Prof.Dr.H.Ali Neceföğlü Adres – Tel. : İmza Uzman Eftal Çimen					Analiz ücretinin yatırılacağı hesap No:  Ziraat Bankası İnönü Üniv. Şubesi TR 880001001490403232975005	
<b>KURUM TARAFINDAN DOLDURULACAK</b>						
<b>LABORATUVAR KAYIT NO.</b>	<b>GELİŞ TARİHİ</b>	<b>BİTİŞ TARİHİ</b>	<b>ANALİZ TUTARI</b>			
800/719	20.01.2011	20.01.2011	37TL			
Analizi yapanın imzası :  Bülent DURMAZ			Laboratuvar Müdürünün imzası : 			

İki nüsha doldurunuz.

- Analiz sonunda geri istenilen numunelerin analiz yapıldıktan sonra en geç 1 ay içinde alınması gerekmektedir.
- Zehirli ve sağlığa zararlı numuneler analiz istek formunda belirtilmelidir.
- Kağıt paket veya alüminyum folyo içinde getirilecek numuneler kabul edilmeyecektir.
- Element analiz ücretlerini web adresimizden öğrenebilirsiniz.([www.inonu.edu.tr/mal](http://www.inonu.edu.tr/mal))

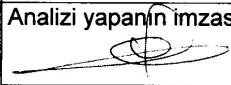
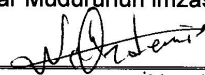
**YIGUNDIR**

Ek Çizelge 52. (8) kompleksinin elementel analiz sonucu



**İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ**  
**BİLİMSEL VE TEKNOLOJİ**  
**MERKEZ ARAŞTIRMA LABORATUVARI**  
İnönü Üniversitesi, Kampüs 44280 MALATYA  
Tel: (0.422) 377 49 50  
Faks: (0.422) 3410319  
<http://ibtam.inonu.edu.tr>

### ELEMENTEL ANALİZ İSTEK FORMU

Analiz İsteyen Kişi / Kuruluş : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu Uzman Eftal Çimen Adres – Tel :Kafhas Üniversitesi Fen Edb.Fak.Kimya Böl. KARS					Örnek Tanıma Kodu B-15	
Analizi istenen elementler : C-H-N-S Örneğin kapalı formülü : Nem çekiciliği :						
	(%) C	(%) H	(%) N	(%) S	(%) O	
Teorik Değerler						Üniversite
Analiz Sonuçları	54.94	4.594	3.389	-		Endüstri
Analiz Ücretini ödeyenin Adı, Soyadı, Ünvanı : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu Adres – Tel. : İmza Uzman Eftal Çimen					Analiz ücretinin yatırılacağı hesap No: Ziraat Bankası İnönü Üniv. Şubesi TR 880001001490403232975005	
<b>KURUM TARAFINDAN DOLDURULACAK</b>						
<b>LABORATUVAR KAYIT NO.</b>	<b>GELİŞ TARİHİ</b>		<b>BİTİŞ TARİHİ</b>		<b>ANALİZ TUTARI</b>	
800/719	20.01.2011		20.01.2011		37TL	
Analizi yapanın imzası :  Bülent DURMAZ			Laboratuvar Müdürünün imzası : 			

İki nüsha doldurunuz.

- Analiz sonunda geri istenilen numunelerin analiz yapıldıktan sonra en geç 1 ay içinde alınması gerekmektedir.
- Zehirli ve sağlığa zararlı numuneler analiz istek formunda belirtilmelidir.
- Kağıt paket veya alüminyum folyo içinde getirilecek numuneler kabul edilmeyecektir.
- Element analiz ücretlerini web adresimizden öğrenebilirsiniz.([www.inonu.edu.tr/mal](http://www.inonu.edu.tr/mal))

**UYGUNDUR**

Ek Çizelge 53. (9) kompleksinin elementel analiz sonucu



**İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ**  
**BİLİMSEL VE TEKNOLOJİ**  
**MERKEZ ARAŞTIRMA LABORATUVARI**  
İnönü Üniversitesi, Kampüs 44280 MALATYA  
Tel: (0.422) 377 49 50  
Faks: (0.422) 3410319  
<http://ibtam.inonu.edu.tr>

### ELEMENTEL ANALİZ İSTEK FORMU

Analiz İsteyen Kişi / Kuruluş : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu  
Uzman Eftal Çimen  
Adres – Tel :Kafhas Üniversitesi Fen Edb.Fak.Kimya Böl.  
KARS

Örnek Tanıma Kodu

B6-T

Analizi istenen elementler : C-H-N-S

Örneğin kapalı formülü :

Nem çekiciliği :

	(%) C	(%) H	(%) N	(%) S	(%) O
Teorik Değerler					
Analiz Sonuçları	49.96	4.135	5.259	-	

Üniversite

Endüstri

Analiz Ücretini ödeyenin.  
Adı, Soyadı, Ünvanı : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu  
Adres – Tel. : .

İmza Uzman Eftal Çimen

Analiz ücretinin yatırılacağı hesap No:

Ziraat Bankası İnönü Üniv.  
Şubesi  
TR  
880001001490403232975005

### KURUM TARAFINDAN DOLDURULACAK

LABORATUVAR KAYIT NO.	GELİŞ TARİHİ	BİTİŞ TARİHİ	ANALİZ TUTARI
800/719	20.01.2011	20.01.2011	37TL
Analizi yapanın imzası : Bülent DURMAZ	Laboratuvar Müdürünün imzası : 		

İki nüsha doldurunuz.

- Analiz sonunda geri istenilen numunelerin analiz yapıldıktan sonra en geç 1 ay içinde alınması gerekmektedir.
- Zehirli ve sağlığa zararlı numuneler analiz istek formunda belirtilmelidir.
- Kağıt paket veya alüminyum folyo içinde getirilecek numuneler kabul edilmeyecektir.
- Element analiz ücretlerini web adresimizden öğrenebilirsiniz.(www.inonu.edu.tr/mal)

**UYGUNDUR**

Ek Çizelge 54. (10) kompleksinin elementel analiz sonucu



**İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ**  
**BİLİMSEL VE TEKNOLOJİ**  
**MERKEZ ARAŞTIRMA LABORATUVARI**  
İnönü Üniversitesi, Kampüs 44280 MALATYA  
Tel: (0.422) 377 49 50  
Faks: (0.422) 3410319  
<http://ibtam.inonu.edu.tr>

### ELEMENTEL ANALİZ İSTEK FORMU

Analiz İsteyen Kişi / Kuruluş : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu Uzman Eftal Çimen Adres – Tel :Kafhas Üniversitesi Fen Edb.Fak.Kimya Böl. KARS	Örnek Tanıma Kodu B24
---	--------------------------

Analizi istenen elementler : C-H-N-S

Örneğin kapalı formülü :

Nem çekiciliği :

	(%) C	(%) H	(%) N	(%) S	(%) O	
Teorik Değerler						Üniversite
Analiz Sonuçları	38.25	3.107	-	-		Endüstri
Analiz Ücretini ödeyenin Adı, Soyadı, Ünvanı : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu Adres – Tel. : .						Analiz ücretinin yatırılacağı hesap No: Ziraat Bankası İnönü Üniv. Şubesi TR 880001001490403232975005
İmza Uzman Eftal Çimen						

### KURUM TARAFINDAN DOLDURULACAK

LABORATUVAR KAYIT NO.	GELİŞ TARİHİ	BİTİŞ TARİHİ	ANALİZ TUTARI
800/719	20.01.2011	20.01.2011	37TL
Analizi yapanın imzası :  Bülent DURMAZ		Laboratuvar Müdürünün imzası : 	

İki nüsha doldurunuz.

- Analiz sonunda geri istenilen numunelerin analiz yapıldıktan sonra en geç 1 ay içinde alınması gerekmektedir.
- Zehirli ve sağlığa zararlı numuneler analiz istek formunda belirtilmelidir.
- Kağıt paket veya alüminyum folyo içinde getirilecek numuneler kabul edilmeyecektir.
- Element analiz ücretlerini web adresimizden öğrenebilirsiniz.([www.inonu.edu.tr/mal](http://www.inonu.edu.tr/mal))

**UYGUNDUR**

Ek Çizelge 55. (11) kompleksinin elementel analiz sonucu





**İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ**  
**BİLİMSEL VE TEKNOLOJİ**  
**MERKEZ ARAŞTIRMA LABORATUVARI**  
**İnönü Üniversitesi, Kampüs 44280 MALATYA**  
**Tel: (0.422) 377 49 50**  
**Faks: (0.422) 3410319**  
**http://ibtam.inonu.edu.tr**

### ELEMENTEL ANALİZ İSTEK FORMU

Analiz İsteyen Kişi / Kuruluş : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu Uzman Eftal Çimen Adres – Tel :Kafhas Üniversitesi Fen Edb.Fak.Kimya Böl. KARS					Örnek Tanıma Kodu B19	
Analizi istenen elementler : C-H-N-S Örneğin kapalı formülü : Nem çekiciliği :						
	(%) C	(%) H	(%) N	(%) S	(%) O	Üniversite
Teorik Değerler						Endüstri
Analiz Sonuçları	59.74	6.351	7.680	-		
Analiz Ücretini ödeyenin Adı, Soyadı, Ünvanı : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu Adres – Tel. : İmza Uzman Eftal Çimen					Analiz ücretinin yatırılacağı hesap No: Ziraat Bankası İnönü Üniv. Şubesi TR 880001001490403232975005	
<b>KURUM TARAFINDAN DOLDURULACAK</b>						
<b>LABORATUVAR KAYIT NO.</b>	<b>GELİŞ TARİHİ</b>	<b>BİTİŞ TARİHİ</b>	<b>ANALİZ TUTARI</b>			
800/719	20.01.2011	20.01.2011	37TL			
Analizi yapanın imzası : 			Laboratuvar Müdürünün imzası : 			
Bülent DURMAZ						

İki nüsha doldurunuz.

- Analiz sonunda geri istenilen numunelerin analiz yapıldıktan sonra en geç 1 ay içinde alınması gerekmektedir.
- Zehirli ve sağlığa zararlı numuneler analiz istek formunda belirtilmelidir.
- Kağıt paket veya alüminyum folyo içinde getirilecek numuneler kabul edilmeyecektir.
- Element analiz ücretlerini web adresimizden öğrenebilirsiniz.(www.inonu.edu.tr/mal)

**İY GUNDUR**

Ek Çizelge 56. (12) kompleksinin elementel analiz sonucu



**İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ**  
**BİLİMSEL VE TEKNOLOJİ**  
**MERKEZ ARAŞTIRMA LABORATUVARI**  
İnönü Üniversitesi, Kampüs 44280 MALATYA  
Tel: (0.422) 377 49 50  
Faks: (0.422) 3410319  
<http://ibtam.inonu.edu.tr>

### ELEMENTEL ANALİZ İSTEK FORMU

Analiz İsteyen Kişi / Kuruluş : Prof.Dr.H.Ali Neceföğlü Uzman Eftal Çimen Adres – Tel :Kafhas Üniversitesi Fen Edb.Fak.Kimya Böl. KARS					Örnek Tanıma Kodu  B13	
Analizi istenen elementler : C-H-N-S Örneğin kapalı formülü : Nem çekiciliği :						
	(%) C	(%) H	(%) N	(%) S	(%) O	Üniversite
Teorik Değerler						Endüstri
Analiz Sonuçları	59.50	6.221	7.720	-		
Analiz Ücretini ödeyenin Adı, Soyadı, Ünvanı : Prof.Dr.H.Ali Neceföğlü Adres – Tel. : İmza Uzman Eftal Çimen					Analiz ücretinin yatırılacağı hesap No:  Ziraat Bankası İnönü Üniv. Şubesi TR 880001001490403232975005	
<b>KURUM TARAFINDAN DOLDURULACAK</b>						
<b>LABORATUVAR KAYIT NO.</b>	<b>GELİŞ TARİHİ</b>	<b>BİTİŞ TARİHİ</b>	<b>ANALİZ TUTARI</b>			
800/719	20.01.2011	20.01.2011	37TL			
Analizi yapanın imzası :  Bülent DURMAZ			Laboratuvar Müdürünün imzası : 			

İki nüsha doldurunuz.

- Analiz sonunda geri istenilen numunelerin analiz yapıldıktan sonra en geç 1 ay içinde alınması gerekmektedir.
- Zehirli ve sağlığa zararlı numuneler analiz istek formunda belirtilmelidir.
- Kağıt paket veya alüminyum folyo içinde getirilecek numuneler kabul edilmeyecektir.
- Element analiz ücretlerini web adresimizden öğrenebilirsiniz.([www.inonu.edu.tr/mal](http://www.inonu.edu.tr/mal))

**UYGUNDUR**

Ek Çizelge 57. (13) kompleksinin elementel analiz sonucu



**İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ**  
**BİLİMSEL VE TEKNOLOJİ**  
**MERKEZ ARAŞTIRMA LABORATUVARI**  
İnönü Üniversitesi, Kampüs 44280 MALATYA  
Tel: (0.422) 377 49 50  
Faks: (0.422) 3410319  
<http://ibtam.inonu.edu.tr>

### ELEMENTEL ANALİZ İSTEK FORMU

Analiz İsteyen Kişi / Kuruluş : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu Uzman Eftal Çimen Adres – Tel :Kafhas Üniversitesi Fen Edb.Fak.Kimya Böl. KARS					Örnek Tanıma Kodu  B10	
Analizi istenen elementler : C-H-N-S Örneğin kapalı formülü : Nem çekiciliği :						
	(%) C	(%) H	(%) N	(%) S	(%) O	Üniversite
Teorik Değerler						Endüstri
Analiz Sonuçları	59.96	6.322	7.779	-		
Analiz Ücretini ödeyenin Adı, Soyadı, Ünvanı : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu Adres – Tel. : . İmza Uzman Eftal Çimen					Analiz ücretinin yatırılacağı hesap No: Ziraat Bankası İnönü Üniv. Şubesi TR 880001001490403232975005	
<b>KURUM TARAFINDAN DOLDURULACAK</b>						
<b>LABORATUVAR KAYIT NO.</b>	<b>GELİŞ TARİHİ</b>	<b>BİTİŞ TARİHİ</b>	<b>ANALİZ TUTARI</b>			
800/719	20.01.2011	20.01.2011	37TL			
Analizi yapanın imzası :  Bülent DURMAZ			Laboratuvar Müdürünün imzası : 			

İki nüsha doldurunuz.

- Analiz sonunda geri istenilen numunelerin analiz yapıldıktan sonra en geç 1 ay içinde alınması gerekmektedir.
- Zehirli ve sağlığa zararlı numuneler analiz istek formunda belirtilmelidir.
- Kağıt paket veya alüminyum folyo içinde getirilecek numuneler kabul edilmeyecektir.
- Element analiz ücretlerini web adresimizden öğrenebilirsiniz.([www.inonu.edu.tr/mal](http://www.inonu.edu.tr/mal))

**UYGUNDUR**

Ek Çizelge 58. (14) kompleksinin elementel analiz sonucu



**İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ**  
**BİLİMSEL VE TEKNOLOJİ**  
**MERKEZ ARAŞTIRMA LABORATUVARI**  
İnönü Üniversitesi, Kampüs 44280 MALATYA  
Tel: (0.422) 377 49 50  
Faks: (0.422) 3410319  
<http://ibtam.inonu.edu.tr>

### ELEMENTEL ANALİZ İSTEK FORMU

Analiz İsteyen Kişi / Kuruluş : Prof.Dr.H.Ali Neceföğlü Uzman Eftal Çimen Adres – Tel : Kafhas Üniversitesi Fen Edb.Fak.Kimya Böl. KARS	Örnek Tanıma Kodu  B4-T
--	-------------------------------

Analizi istenen elementler : C-H-N-S

Örneğin kapalı formülü :

Nem çekiciliği :

	(%) C	(%) H	(%) N	(%) S	(%) O	
Teorik Değerler						Üniversite
Analiz Sonuçları	60.81	5.433	5.479	-		Endüstri

Analiz Ücretini ödeyenin Adı, Soyadı, Ünvanı : Prof.Dr.H.Ali Neceföğlü Adres – Tel. : . İmza Uzman Eftal Çimen	Analiz ücretinin yatırılacağı hesap No:  Ziraat Bankası İnönü Üniv. Şubesi TR 880001001490403232975005
---	--

### KURUM TARAFINDAN DOLDURULACAK

LABORATUVAR KAYIT NO.	GELİŞ TARİHİ	BİTİŞ TARİHİ	ANALİZ TUTARI
800/719	20.01.2011	20.01.2011	37TL
Analizi yapanın imzası :  Bülent DURMAZ	Laboratuvar Müdürünün imzası :  İki nüsha doldurunuz.		

- Analiz sonunda geri istenilen numunelerin analiz yapıldıktan sonra en geç 1 ay içinde alınması gerekmektedir.
- Zehirli ve sağlığa zararlı numuneler analiz istek formunda belirtilmelidir.
- Kağıt paket veya alüminyum folyo içinde getirilecek numuneler kabul edilmeyecektir.
- Element analiz ücretlerini web adresimizden öğrenebilirsiniz.([www.inonu.edu.tr/mal](http://www.inonu.edu.tr/mal))

**UYGUNDUR**

Ek Çizelge 59. (15) kompleksinin elementel analiz sonucu



**İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ**  
**BİLİMSEL VE TEKNOLOJİ**  
**MERKEZ ARAŞTIRMA LABORATUVARI**  
Inönü Üniversitesi, Kampüs 44280 MALATYA  
Tel: (0.422) 377 49 50  
Faks: (0.422) 3410319  
<http://ibtam.inonu.edu.tr>

### ELEMENTEL ANALİZ İSTEK FORMU

Analiz İsteyen Kişi / Kuruluş : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu  
Uzman Eftal Çimen  
Adres – Tel :Kafhas Üniversitesi Fen Edb.Fak.Kimya Böl.  
KARS

Örnek Tanıma Kodu

B-16

Analizi istenen elementler : C-H-N-S

Örneğin kapalı formülü :

Nem çekiciliği :

	(%) C	(%) H	(%) N	(%) S	(%) O
Teorik Değerler					
Analiz Sonuçları	60.50	5.400	5.372	-	

Üniversite

Endüstri

Analiz Ücretini ödeyenin  
Adı, Soyadı, Ünvanı : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu  
Adres – Tel. : .

İmza Uzman Eftal Çimen

Analiz ücretinin yatırılacağı  
hesap No:

Ziraat Bankası İnönü Üniv.  
Şubesi  
TR  
880001001490403232975005

### KURUM TARAFINDAN DOLDURULACAK

LABORATUVAR KAYIT NO.	GELİŞ TARİHİ	BİTİŞ TARİHİ	ANALİZ TUTARI
800/719	20.01.2011	20.01.2011	37TL
Analizi yapanın imzası : 	Bülent DURMAZ	Laboratuvar Müdürünün imzası : 	

İki nüsha doldurunuz.

- Analiz sonunda geri istenilen numunelerin analiz yapıldıktan sonra en geç 1 ay içinde alınması gerekmektedir.
- Zehirli ve sağlığa zararlı numuneler analiz istek formunda belirtilmelidir.
- Kağıt paket veya alüminyum folyo içinde getirilecek numuneler kabul edilmeyecektir.
- Element analiz ücretlerini web adresimizden öğrenebilirsiniz.([www.inonu.edu.tr/mal](http://www.inonu.edu.tr/mal))

**UYGUNDUR**

Ek Çizelge 60. (16) kompleksinin elementel analiz sonucu



**İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ**  
**BİLİMSEL VE TEKNOLOJİ**  
**MERKEZ ARAŞTIRMA LABORATUVARI**  
İnönü Üniversitesi, Kampüs 44280 MALATYA  
Tel: (0.422) 377 49 50  
Faks: (0.422) 3410319  
<http://ibtam.inonu.edu.tr>

### ELEMENTEL ANALİZ İSTEK FORMU

Analiz İsteyen Kişi / Kuruluş : Prof.Dr.H.Ali Neceföğlü  
Uzman Eftal Çimen  
Adres – Tel :Kafhas Üniversitesi Fen Edb.Fak.Kimya Böl.  
KARS

Örnek Tanıma Kodu

B14-T

Analizi istenen elementler : C-H-N-S

Örneğin kapalı formülü :

Nem çekiciliği :

	(%) C	(%) H	(%) N	(%) S	(%) O
Teorik Değerler					
Analiz Sonuçları	58.07	4.618	10.83	-	

Üniversite

Endüstri

Analiz Ücretini ödeyenin  
Adı, Soyadı, Ünvanı : Prof.Dr.H.Ali Neceföğlü  
Adres – Tel. : .

İmza Uzman Eftal Çimen

Analiz ücretinin yatırılacağı  
hesap No:

Ziraat Bankası İnönü Üniv.  
Şubesi  
TR  
880001001490403232975005

### KURUM TARAFINDAN DOLDURULACAK

LABORATUVAR KAYIT NO.	GELİŞ TARİHİ	BİTİŞ TARİHİ	ANALİZ TUTARI
800/719	20.01.2011	20.01.2011	37TL
Analizi yapanın imzası : 	Bülent DURMAZ	Laboratuvar Müdürünün imzası : 	

İki nüsha doldurunuz.

- Analiz sonunda geri istenilen numunelerin analiz yapıldıktan sonra en geç 1 ay içinde alınması gerekmektedir.
- Zehirli ve sağlığa zararlı numuneler analiz istek formunda belirtilmelidir.
- Kağıt paket veya alüminyum folyo içinde getirilecek numuneler kabul edilmeyecektir.
- Element analiz ücretlerini web adresimizden öğrenebilirsiniz.([www.inonu.edu.tr/mal](http://www.inonu.edu.tr/mal))

**UYGUNDUR**

Ek Çizelge 61. (17) kompleksinin elementel analiz sonucu



**İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ**  
**BİLİMSEL VE TEKNOLOJİ**  
**MERKEZ ARAŞTIRMA LABORATUVARI**  
Inönü Üniversitesi, Kampüs 44280 MALATYA  
Tel: (0.422) 377 49 50  
Faks: (0.422) 3410319  
http://ibtam.inonu.edu.tr

### ELEMENTEL ANALİZ İSTEK FORMU

Analiz İsteyen Kişi / Kuruluş : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu Uzman Eftal Çimen Adres – Tel :Kafkas Üniversitesi Fen Edb.Fak.Kimya Böl. KARS	Örnek Tanıma Kodu B9
---	-------------------------

Analizi istenen elementler : C-H-N-S

Örneğin kapalı formülü :

Nem çekiciliği :

	(%) C	(%) H	(%) N	(%) S	(%) O	
Teorik Değerler						Üniversite
Analiz Sonuçları	54.64	4.844	8.420	-		Endüstri
Analiz Ücretini ödeyenin Adı, Soyadı, Ünvanı : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu Adres – Tel. : .						Analiz ücretinin yatırılacağı hesap No: Ziraat Bankası İnönü Üniv. Şubesi TR 880001001490403232975005
İmza Uzman Eftal Çimen						

### KURUM TARAFINDAN DOLDURULACAK

LABORATUVAR KAYIT NO.	GELİŞ TARİHİ	BİTİŞ TARİHİ	ANALİZ TUTARI
800/719	20.01.2011	20.01.2011	37TL
Analizi yapanın imzası : 	Laboratuvar Müdürünün imzası : 		
Bülent DURMAZ			

İki nüsha doldurunuz.

- Analiz sonunda geri istenilen numunelerin analiz yapıldıktan sonra en geç 1 ay içinde alınması gerekmektedir.
- Zehirli ve sağlığa zararlı numuneler analiz istek formunda belirtilmelidir.
- Kağıt paket veya alüminyum folyo içinde getirilecek numuneler kabul edilmeyecektir.
- Element analiz ücretlerini web adresimizden öğrenebilirsiniz.(www.inonu.edu.tr/mal)

**UYGUNDUR**

Ek Çizelge 62. (18) kompleksinin elementel analiz sonucu



**İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ**  
**BİLİMSEL VE TEKNOLOJİ**  
**MERKEZ ARAŞTIRMA LABORATUVARI**  
İnönü Üniversitesi, Kampüs 44280 MALATYA  
Tel: (0.422) 377 49 50  
Faks: (0.422) 3410319  
http://ibtam.inonu.edu.tr

### ELEMENTEL ANALİZ İSTEK FORMU

Analiz İsteyen Kişi / Kuruluş : Prof.Dr.H.Ali Neceföğlü  
Uzman Eftal Çimen  
Adres – Tel :Kafhas Üniversitesi Fen Edb.Fak.Kimya Böl.  
KARS

Örnek Tanıma Kodu  
B5-T

Analizi istenen elementler : C-H-N-S

Örneğin kapalı formülü :

Nem çekiciliği :

	(%) C	(%) H	(%) N	(%) S	(%) O
Teorik Değerler					
Analiz Sonuçları	53.90	4.795	8.827	-	

Üniversite  
Endüstri

Analiz Ücretini ödeyenin  
Adı, Soyadı, Ünvanı : Prof.Dr.H.Ali Neceföğlü  
Adres – Tel. : .

İmza Uzman Eftal Çimen

Analiz ücretinin yatırılacağı  
hesap No:  
Ziraat Bankası İnönü Üniv.  
Şubesi  
TR  
880001001490403232975005

### KURUM TARAFINDAN DOLDURULACAK

LABORATUVAR KAYIT NO.	GELİŞ TARİHİ	BİTİŞ TARİHİ	ANALİZ TUTARI
800/719	20.01.2011	20.01.2011	37TL
Analizi yapanın imzası : 	Bülent DURMAZ	Laboratuvar Müdürünün imzası : 	

İki nüsha doldurunuz.

- Analiz sonunda geri istenilen numunelerin analiz yapıldıktan sonra en geç 1 ay içinde alınması gerekmektedir.
- Zehirli ve sağlığa zararlı numuneler analiz istek formunda belirtilmelidir.
- Kağıt paket veya alüminyum folyo içinde getirilecek numuneler kabul edilmeyecektir.
- Element analiz ücretlerini web adresimizden öğrenebilirsiniz.(www.inonu.edu.tr/mal)

**UYGUNDUR**

Ek Çizelge 63. (19) kompleksinin elementel analiz sonucu





**İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ**  
**BİLİMSEL VE TEKNOLOJİ**  
**MERKEZ ARAŞTIRMA LABORATUVARI**  
İnönü Üniversitesi, Kampüs 44280 MALATYA  
Tel: (0.422) 377 49 50  
Faks: (0.422) 3410319  
http://ibtam.inonu.edu.tr

### ELEMENTEL ANALİZ İSTEK FORMU

Analiz İsteyen Kişi / Kuruluş : Prof.Dr.H.Ali Neceföğlü  
Uzman Eftal Çimen  
Adres – Tel :Kafhas Üniversitesi Fen Edb.Fak.Kimya Böl.  
KARS

Örnek Tanıma Kodu  
B5

Analizi istenen elementler : C-H-N-S

Örneğin kapalı formülü :

Nem çekiciliği :

	(%) C	(%) H	(%) N	(%) S	(%) O
Teorik Değerler					
Analiz Sonuçları	57.71	4.342	6.120	-	

Üniversite

Endüstri

Analiz Ücretini ödeyenin  
Adı, Soyadı, Ünvanı : Prof.Dr.H.Ali Neceföğlü  
Adres – Tel. : .  
İmza Uzman Eftal Çimen

Analiz ücretinin yatırılacağı  
hesap No:  
Ziraat Bankası İnönü Üniv.  
Şubesi  
TR  
880001001490403232975005

### KURUM TARAFINDAN DOLDURULACAK

LABORATUVAR KAYIT NO.	GELİŞ TARİHİ	BİTİŞ TARİHİ	ANALİZ TUTARI
800/719	20.01.2011	20.01.2011	37TL
Analizi yapanın imzası : 	Bülent DURMAZ	Laboratuvar Müdürünün imzası : 	

İki nüsha doldurunuz.

- Analiz sonunda geri istenilen numunelerin analiz yapıldıktan sonra en geç 1 ay içinde alınması gerekmektedir.
- Zehirli ve sağlığa zararlı numuneler analiz istek formunda belirtilmelidir.
- Kağıt paket veya alüminyum folyo içinde getirilecek numuneler kabul edilmeyecektir.
- Element analiz ücretlerini web adresimizden öğrenebilirsiniz.(www.inonu.edu.tr/mal)

**UYUYŞUNDUR**

Ek Çizelge 64. (20) kompleksinin elementel analiz sonucu



**İNÖNÜ ÜNİVERSİTESİ**  
**BİLİMSEL VE TEKNOLOJİ**  
**MERKEZ ARAŞTIRMA LABORATUVARI**  
İnönü Üniversitesi, Kampüs 44280 MALATYA  
Tel: (0.422) 377 49 50  
Faks: (0.422) 3410319  
<http://ibtam.inonu.edu.tr>

### ELEMENTEL ANALİZ İSTEK FORMU

Analiz İsteyen Kişi / Kuruluş : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu Uzman Eftal Çimen Adres – Tel :Kafhas Üniversitesi Fen Edb.Fak.Kimya Böl. KARS	Örnek Tanıma Kodu  B8
---	-----------------------------

Analizi istenen elementler : C-H-N-S  
Örneğin kapalı formülü :  
Nem çekiciliği :

	(%) C	(%) H	(%) N	(%) S	(%) O	
Teorik Değerler						Üniversite
Analiz Sonuçları	50.75	4.513	8.391	-		Endüstri

Analiz Ücretini ödeyenin Adı, Soyadı, Ünvanı : Prof.Dr.H.Ali Necefoğlu Adres – Tel. : .  İmza Uzman Eftal Çimen	Analiz ücretinin yatırılacağı hesap No:  Ziraat Bankası İnönü Üniv. Şubesi TR 880001001490403232975005
---	--

### KURUM TARAFINDAN DOLDURULACAK

LABORATUVAR KAYIT NO.	GELİŞ TARİHİ	BİTİŞ TARİHİ	ANALİZ TUTARI
800/719	20.01.2011	20.01.2011	37TL
Analizi yapanın imzası :  Bülent DURMAZ	Laboratuvar Müdürünün imzası : 		

İki nüsha doldurunuz.

- Analiz sonunda geri istenilen numunelerin analiz yapıldıktan sonra en geç 1 ay içinde alınması gerekmektedir.
- Zehirli ve sağlığa zararlı numuneler analiz istek formunda belirtilmelidir.
- Kağıt paket veya alüminyum folyo içinde getirilecek numuneler kabul edilmeyecektir.
- Element analiz ücretlerini web adresimizden öğrenebilirsiniz.([www.inonu.edu.tr/mal](http://www.inonu.edu.tr/mal))

**UYGUNDUR**

Ek Çizelge 65. (21) kompleksinin elementel analiz sonucu

## ÖZGEÇMİŞ

**Adı Soyadı** : Efdal ÇİMEN  
**Doğum Yeri** : Ceyhan/ADANA  
**Doğum Tarihi** : 04.03.1967  
**Medeni Hali** : Evli  
**Yabancı Dili** : İngilizce

### Eğitim Durumu (Kurum ve Yıl)

Lise : Adana Erkek Lisesi-1985  
Lisans : Çukurova Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü-1992  
Yüksek Lisans: Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü-2004

### Çalıştığı Kurum/Kurumlar ve Yıl

Kafkas Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü (1993- )

### Yayımları (SCI ve diğer)

1. Necefoğlu, H., Çimen, E., Tercan, B., Dal, H., Hökelek, T., “Tetrakis( $\mu$ -4-methylbenzoato- $\kappa^2O,O'$ )bis[(isonicotinamide- $\kappa N^1$ )cupper(II)]”, Acta Cryst. E66, m334-m335 (2010).
2. Necefoğlu, H., Çimen, E., Tercan, B., Ermiş, E., Hökelek, T., “Diaquabis(4-methylbenzoato- $\kappa O$ )bis-(nicotinamide- $\kappa N^1$ )nickel(II)”, Acta Cryst. E66, m361-m362 (2010).
3. Necefoğlu, H., Çimen, E., Tercan, B., Süzen, Y., Hökelek, T., “Aquabis(isonicotinamide- $\kappa N^1$ )bis(4-methylbenzoato)- $\kappa O;\kappa^2O,O'$ -cadmium(II) monohydrate”, Acta Cryst. E66, m392-m393 (2010).
4. Necefoğlu, H., Çimen, E., Tercan, B., Dal, H., Hökelek, T., “Tetrakis( $\mu$ -4-methylbenzoato- $\kappa^2O,O'$ )bis[(*N,N*-diethylnicotinamide- $\kappa N^1$ )zinc(II)]”, Acta Cryst. E66, m485-m486 (2010) .
5. Necefoğlu, H., Çimen, E., Tercan, B., Dal, H., Hökelek, T., “Diaquabis(4-methylbenzoato- $\kappa O$ )bis(nicotinamide- $\kappa N^1$ )manganese(II)”, Acta Cryst. E66, m490-m491 (2010).

6. Necefođlu, H., imen, E., Tercan, B., Ermiř, E., Hokelek, T., “Diaquabis(*N,N*-diethylnicotinamide- $\kappa N^I$ )bis(4-methylbenzoato- $\kappa O$ )cobalt(II)”, Acta Cryst. E66, m556-m557 (2010).
7. Hokelek, T., Dal, H., Tercan, B., imen, E., Necefođlu, H., “catena-Poly[[[4-methylbenzoato- $\kappa O$ )manganese(II)]- $\mu$ -aqua-bis( $\mu$ -4-methylbenzoato- $\kappa^2 O, O'$ )[(4-methylbenzoato- $\kappa O$ )manganese(II)]-bis( $\mu$ -*N,N*-diethylnicotinamide)- $\kappa^2 N^3:O;O:N^3$ ]", Acta Cryst. E66, m734-m735 (2010).
8. Hokelek, T., Ermiř, E., Tercan, B., imen, E., Necefođlu, H., “Bis( $\mu$ -4-methylbenzoato- $\kappa^2 O, O'$ )bis[aqua(4-methylbenzoato- $\kappa^2 O, O'$ )zinc(II)]-bis( $\mu$ -4-methylbenzoato- $\kappa^2 O, O'$ )bis[4-methylbenzoato- $\kappa O$ )-(nicotinamide)- $\kappa N$ ]zinc(II)]-water (1/1/2)”, Acta Cryst. E66, m841-m842 (2010).
9. Hokelek, T., Dal, H., Tercan, B., imen, E., Necefođlu, H., “catena-Poly[[bis(4-methylbenzoato- $\kappa^2 O, O'$ )lead(II)]- $\mu$ -nicotinamide)- $\kappa^2 N^I:O$ ]", Acta Cryst. E66, m953-m954 (2010).
10. Hokelek, T., Guner, S., Tercan, B., imen, E., Necefođlu, H., “Bis(isonicotinamide- $\kappa N^I$ )bis(4-methylbenzoato- $\kappa O$ )copper(II) dihydrate”, Acta Cryst. E66, m955-m956 (2010).

### Ulusal Kongrelerde Sunulan ve Bildiri Kitaplarında Basılan Bildiriler

1. Tagiyev, B., imen, E., “6-Karboksisakkarin-*N*-asetikasitin sentezi”, XII Ulusal Kimya Kongresi, Edirne, Bildiri zetleri, (1998).
2. Aliřođlu, V., imen, E., “Manganhipofosfitin 0 'de Br<sub>2</sub>/MnBr<sub>2</sub>/Mn(H<sub>2</sub>PO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O drtl sistemde znrlđ ve kristalleřme alanı”, XVI Ulusal Kimya Kongresi, Konya, Bildiri zetleri, AN-P106,347 (2002).
3. Aliřođlu, V., imen, E., “K<sub>2</sub>(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>/K<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>PO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>/Mn(H<sub>2</sub>PO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O drtl sistem izotermik yntemle 0 'de arařtırılması”, XVI Ulusal Kimya Kongresi, Konya Bildiri zetleri, AN-S36,230 (2002).
4. imen, E., Necefođlu, H., ztrkkkan, E. F., Sertelik, M. ve Aybirdi, ., “Mn(II), Ni(II), Zn(II) ve Pb(II) *p*-Metilbenzoatların Nikotinamid Kompleksleri”, XXV Ulusal Kimya Kongresi, Erzurum, Bildiri zetleri, AN-P53, IP-038 (2011).

5. Çimen, E., Necefoğlu H., Tercan, B., Dal, H., Saka, G. ve Hökelek, T., “Cu(II) *p*-Metilbenzoatların İzonikotinamid Kompleksleri”, XXV Ulusal Kimya Kongresi, Erzurum, Bildiri Özetleri, AN-P54, IP-039 (2011).
6. Özbek, E. F., Aybirdi, Ö., Çimen, E., Sertçelik, M. ve Necefoğlu, H., “Co(II), Ni(II) ve Mn(II) 2-Klorobenzoatların Nikotinamid/*N,N'*-Dietilnikotinamid Kompleksleri”, XXV Ulusal Kimya Kongresi, Erzurum, Bildiri Özetleri, AN-P68, IP-053 (2011).
7. Sertçelik, M., Aybirdi, Ö., Çimen, E., Özbek, E. F. ve Necefoğlu, H., “Mn(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II) ve Cd(II) 4-Formilbenzoatların *N,N'*-Dietilnikotinamid Kompleksleri”, XXV Ulusal Kimya Kongresi, Erzurum, Bildiri Özetleri, AN-P125, IP-110 (2011).
8. Aybirdi, Ö., Özbek E. F., Çimen, E., Sertçelik, M. ve Necefoğlu, H., “Co(II), Ni(II), Cu(II) ve Zn(II) *p*-Metilaminobenzoatların Nikotinamid Kompleksleri”, XXV Ulusal Kimya Kongresi, Erzurum, Bildiri Özetleri, AN-P125, IP-110 (2011).