

**I. ULUSLARARASI
BİLİMSEL VE MESLEKİ
ÇALIŞMALAR SEMPOZYUMU (BILMES 2017)
ÖZET KİTABI**



**I. INTERNATIONAL
SCIENTIFIC AND VOCATIONAL
STUDIES CONGRESS (BILMES 2017)
ABSTRACT BOOK**

EKİM/OCTOBER 2017

Kitabın Adı: I. Uluslararası Bilimsel ve Mesleki Çalışmalar
Sempozyumu Özet Kitabı

ISBN: 978-605-82164-0-2

Hazırlayanlar: Tolga YÜCEHAN
e-mail: tolgayucehan@gmail.com

Umut SARAY
e-mail: umutsaray@gmail.com

Yayın Tarihi: 06.11.2017



N, N-Dİ-N-PROPİL-N'-(4-KLOROBENZOİL) TİYOÜRE'NİN KRİSTAL YAPISI VE HİRSHFELD YÜZEY ANALİZİ

İlkay Gumus¹, Gun Binzet², Hakan Arslan³, Ummuhan Solmaz⁴, Birdal Arslan⁵, Ebru Keskin⁶

¹Mersin University, Faculty of Arts and Science, Department of Chemistry, Mersin
gumus.ilkay84@gmail.com

²Mersin University, Faculty of Education, Department of Science Education, Mersin
gunbinzet@gmail.com

³Mersin University, Faculty of Arts and Science, Department of Chemistry, Mersin
hakanarslan@mersin.edu.tr

⁴Mersin University, Faculty of Arts and Science, Department of Chemistry, Mersin
ummuhan.kurt33@gmail.com

⁵Mersin University, Faculty of Arts and Science, Department of Chemistry, Mersin
arslanb75@gmail.com

⁶Advanced Technology Research and Application Center, Mersin University, Mersin
ebruuvacin@gmail.com

Özet

N,N-Di-n-propil-N'-(4-klorobenzoil) tiyoüre, (HL), bileşiği sentezlendi ve yapısı FT-IR, ¹H NMR ve ¹³C NMR teknikleri ile karakterize edildi. Sentezlenen bileşiğin yapısal ve konformasyonel özellikleri aynı zamanda X-ışını tek kristal kırınım tekniği ile belirlendi. HL, C₁₄H₁₉ClN₂O₂S, bileşiği, monoklinik yapıda olup; hücre parametreleri a=11.1405 (16) Å, b=9.7015 (12) Å, c=14.790 (2) Å, β=106.547 (7)° ve Z=4 ile uzay grubu, P2₁/n'de (14 numara)'dir. HL bileşiğinin kristal yapısındaki molekül içi etkileşimlerin detaylı analizi, Hirshfeld yüzeyleri ve iki boyutlu parmak izi parselleri temel alınarak gerçekleştirilmiştir. Hirshfeld yüzey analizi ve ayrıştırılmış parmak izi grafikleri, bileşiğin moleküller arası H···H, H···S, O···H, N···H, C-H···π ve π···π etkileşimleri ile stabilize edildiğini ve bu etkileşimin çoğunlukla türlerin kristal içinde paketlenmesine katkıda bulunduğunu göstermektedir.

Anahtar Kelimeler: *Hirshfeld yüzeyi, Kovalent olmayan etkileşimler, Tiyoüre, X-ışınları Tek Kristal Difraktometres, Sentez.*

CRYSTAL STRUCTURE AND HIRSHFELD SURFACE ANALYSIS OF N,N-DI-N-PROPYL-N'-(4 CHLOROBENZOYL)THIOUREA

Abstract

N,N-Di-n-propyl-N'-(4-chlorobenzoyl)thiourea (HL) has been synthesized and characterized by FT-IR, ¹H NMR and ¹³C NMR techniques. Structural and conformational properties of the title compound were also determined by the X-ray single crystal diffraction technique. HL, C₁₄H₁₉ClN₂O₂S, crystallizes in the monoclinic space group P2₁/n (no. 14), with Z = 4, and unit cell parameters, a = 11.1405(16) Å, b = 9.7015(12) Å, c = 14.790(2) Å, β = 106.547(7)°. A detailed analysis of the intermolecular interactions in the crystal structure of the HL compound has been



performed based on the Hirshfeld surfaces and their two-dimensional fingerprint plots. Hirshfeld surface analysis and decomposed fingerprint plots show that the structures are stabilized by $H\cdots H$, $H\cdots S$, $O\cdots H$, $N\cdots H$, $C-H\cdots\pi$ and $\pi\cdots\pi$ intermolecular interactions and these interaction contribute mostly to packing of the species in the crystal.

Keywords: *Hirshfeld surfaces, Non-covalent interactions, Thiourea, X-ray single crystal diffraction, Synthesis.*

