



# XIX.

## ULUSAL KİMYA KONGRESİ

30 Eylül - 4 Ekim 2005, Kuşadası



### Kimya 2005 BİLDİRİ ÖZETLERİ



**EBİLTEM**

Kimya Bölümü

Ege Üniversitesi  
Fen Fakültesi



**TÜBİTAK**

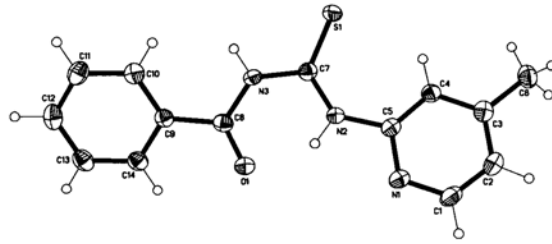
Biyokimya Bölümü

## 1-BENZOİL-3-(4-METİLPİRİDİN)-2-İL-TİYOÜRE

*Tuncay Yeşilkaynak, Gün Binzet, Fatih Mehmet Emen, Berna Acil, Hakan Arslan, Nevzat Külcü*

Mersin Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, 33343-Mersin, Türkiye

Bu çalışmada, 1-benzoil-3-(4-metilpiridin)-2-il-tiyoure bileşiği sentezlendi [1]. Tek kristal X-ışını kırınımı yöntemiyle, uygun bir kristalden elde edilen toplam 11451 yansıma kullanılarak molekülün kristal yapısı SHELXTL v.5.1 programı [2] ile hesaplandı.



Kristal sistemi: monoklinik, uzay grubu: P2(1)/c, birim hücre boyutları:  $a = 11.9247(15)\text{Å}$ ,  $b = 5.1952(7)\text{Å}$ ,  $c = 21.615(3)\text{Å}$ ,  $\beta = 96.962(3)^\circ$  olarak tespit edildi. Kristale ait bazı diğer veriler ise şöyledir:  $Z = 4$ ;  $D_x = 1.356\text{ Mg/m}^3$ ;  $F(000) = 568$ ;  $T = 120(2)\text{ K}$ ; R (bütün veriler):  $R1 = 0.0830$ ,  $wR2 = 0.1124$ . Bulunan bağ uzunluğu ve açıları, deneysel hata sınırları içinde olup, yapısı bilinen benzer bileşiklerin ki ile uyum halindedir.

Tablo. Seçilmiş geometrik parametreler.

Bağ uzunluğu (Å)		Bağ açısı (°)	
C(8)-O(1)	1.220(2)	C(9)-C(8)-O(1)	121.35 (17)
C(8)-N(3)	1.386(2)	O(1)-C(8)-N(3)	121.78(19)
N(3)-C(7)	1.387(2)	C(8)-N(3)-C(7)	128.30(16)
C(7)-N(2)	1.335(2)	N(3)-C(7)-S(1)	118.37(13)
C(7)-S(1)	1.6616(19)	C(7)-N(2)-C(5)	133.23(17)

#### Kaynaklar

- 1.H.Arslan, U.Flörke ve N.Külcü, *Transition Metal Chemistry*, **2003**, 28(7), 816-819.
- 2.G.M.Sheldrick, SHELXTL v.5.1 Structure Determination Software Suite, BrukerAXS, Madison, Wisconsin, USA **1998**.