

Nikotinamid İçeren Çinko (II) Kompleksinin Moleküler Özellikleri ve Titreşim Spektrumu

Molecular Properties and Vibrational Spectra of Zinc (II) Complex with Nicotinamide

Hacer GÜMÜŞ*

Kocaeli Üniversitesi, Gölcük MYO, 41380, Kocaeli

• Geliş tarihi / Received: 01.02.2018 • Düzeltilerek geliş tarihi / Received in revised form: 12.08.2018 • Kabul tarihi / Accepted: 21.08.2018

Öz

Bu makalede, $(C_6H_{11}N_2)[ZnBr_3(C_6H_6N_2O)]$ (1a) molekülünün yapısal parametreleri üzerine teorik bir çalışma rapor edilmiştir. Molekül 1a için moleküler geometrik yapısı, harmonik titreşim dalgasayıları, moleküler sınır orbital (HOMO-LUMO) enerjileri, Mulliken, APT ve NBO atom yükleri ve moleküler elektrostatik potansiyel (MEP) yüzeyleri Gaussian programı kullanılarak hesaplanmıştır. Gaussian programında hesaplanan teorik hesaplamaların tümü DFT/B3LYP ve DFT/HSEH1PBE metotları ile 6-311++G(d,p) seti ile hesaplanmıştır.

Anahtar kelimeler: DFT, Dipol moment, IR ve Raman spektroskopisi, Moleküler orbital enerji

Abstract

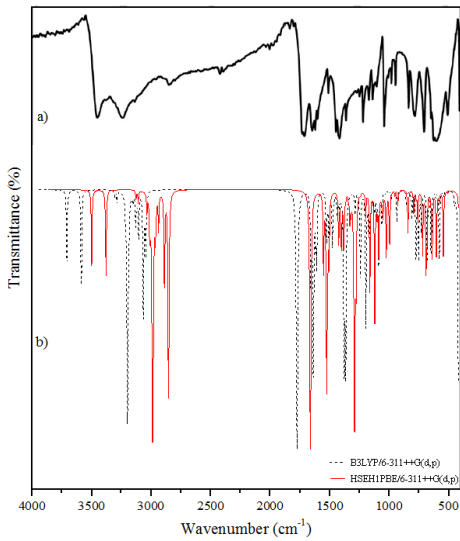
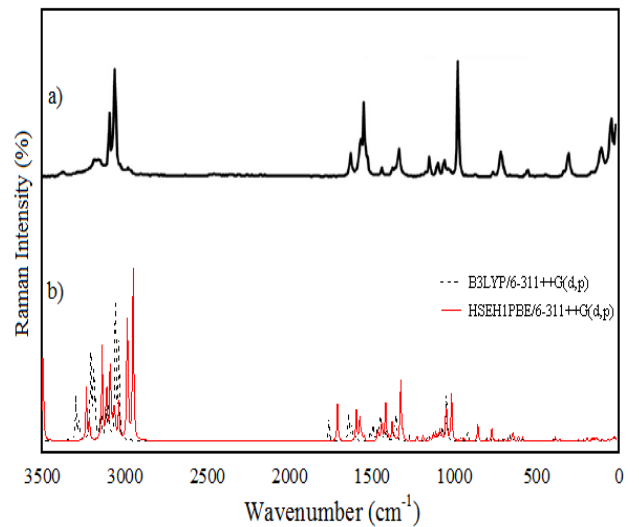
In this paper, we report a theoretical study on structure parameters of $(C_6H_{11}N_2)[ZnBr_3(C_6H_6N_2O)]$ (1a) molecule. Molecular geometry, harmonic vibration waves, molecular frontier orbital (HOMO-LUMO) energies, mulliken, APT and NBO atomic charges and molecular electrostatic potential (MEP) surfaces were calculated for molecule 1a by using the Gaussian program. All of the theoretical calculations calculated in the Gaussian program were calculated using B3LYP and HSEH1PBE methods at 6-311 ++ G (d,p) set.

Keywords: DFT, Dipole moment, IR and Raman spectroscopy, Molecular orbital energy

* Hacer GÜMÜŞ; haker.gumus@kocaeli.edu.tr; Tel: (0262) 422 38 55; orcid.org/0000-0002-6486-0515

Tablo 1. Deneysel (Chunyan vd., 2015) ve teorik olarak hesaplanan parametreler

	Deneyisel	Teorik Hesaplamalar	
	X-Ray	DFT/B3LYP	DFT/HSEH1PBPE
Bağ Uzunluğu (Å)			
Br1-Zn1	2.381(3)	2.42784	2.41378
Br2-Zn1	2.372(3)	2.46662	2.45115
Br3-Zn1	2.377(3)	2.43082	2.41830
Zn1-N1	2.041(10)	2.13939	2.12538
O1-C6	1.215(17)	1.21642	1.22737
N1-C5	1.327(17)	1.33753	1.34413
N1-C1	1.350(18)	1.34300	1.34997
N2-C6	1.323(17)	1.37278	1.37790
C1-C2	1.373(19)	1.38784	1.39413
C4-C5	1.420(17)	1.39666	1.40301
C4-C6	1.466(19)	1.50406	1.50630
N3-C10	1.30(2)	1.33564	1.34450
N3-C8	1.35(3)	1.38048	1.38302
N3-C7	1.48(2)	1.46804	1.46645
N4-C10	1.29(2)	1.33640	1.34513
N4-C9	1.34(3)	1.38149	1.38397
N4-C11	1.51(3)	1.47887	1.47776
C8-C9	1.33(3)	1.36010	1.36954
C11-C12	1.43(3)	1.52537	1.52611
Bağ Açısı (°)			
N1-Zn1-Br2	106.4(3)	103.88046	103.47660
N1-Zn1-Br3	108.4(3)	104.56211	104.25783
Br2-Zn1-Br3	112.51(11)	110.88851	110.51273
N1-Zn1-Br1	103.8(4)	107.03142	106.49252
Br2-Zn1-Br1	114.86(10)	113.97281	115.18544
Br3-Zn1-Br1	110.24(10)	115.29440	115.46173
C5-N1-C1	117.9(12)	119.28563	119.31655
C5-N1-Zn1	119.6(9)	118.71325	121.78398
C1-N1-Zn1	122.3(9)	121.78381	118.70663
N1-C1-C2	122.4(14)	122.14260	122.08113
C3-C2-C1	119.1(15)	118.77830	118.82795
C2-C3-C4	121.7(13)	119.25463	119.24972
C3-C4-C5	114.9(12)	118.19970	118.20529
C3-C4-C6	126.6(12)	123.68233	123.77162
C5-C4-C6	118.5(12)	118.09446	117.98805
N1-C5-C4	123.9(13)	122.31585	122.29320
O1-C6-N2	121.3(14)	122.58632	122.76342
O1-C6-C4	121.3(12)	121.70773	121.76648
N2-C6-C4	117.3(14)	115.68717	115.44436
C10-N3-C8	107.3(18)	108.59582	108.75866
C10-N3-C7	126(2)	125.03148	124.68229
C8-N3-C7	127(2)	125.91704	125.98034
C10-N4-C9	109.3(19)	108.44193	108.59022
C9-C8-N3	108(2)	107.03127	107.00112
C8-C9-N4	106(2)	107.16208	107.16729
N4-C10-N3	109.3(18)	108.76075	108.47157
C12-C11-N4	115(2)	112.42370	112.47622

**Şekil 3.** (a) Deneysel (Chunyan vd., 2015) FT-IR (b) Teorik kırmızı-altı (IR) spektrumu**Şekil 4.** (a) Deneysel (Chunyan vd., 2015) ve (b) Teorik Raman spektrumu

Şekil 4'deki deneysel ve teorik Raman spektrumlarındaki titreşim bandları 3500-500 cm^{-1} arasındaki bölgede uyumlu, 500 cm^{-1} in altında ise band şiddetlerinde ise değişimler gözlenmiştir.

Tablo 2'de verildiği gibi asimetrik NH_2 gerilme titreşim bandı deneysel (Chunyan vd., 2015) 3404 cm^{-1} de çok güçlü olarak gözlenmişken B3LYP ve HSEH1PBE metotlarında hesaplanan teorik değerleri 3689 cm^{-1} ve 3480 cm^{-1} orta şiddette gözlemlenmiştir. Asimetrik NH_2 gerilme titreşim

bandı ise deneysel (Chunyan vd., 2015) 3152 cm^{-1} de orta şiddette gözlenmişken B3LYP ve HSEH1PBE metotlarında hesaplanan teorik değerleri 3567 cm^{-1} ve 3360 cm^{-1} orta şiddette gözlemlenmiştir. Önemli piklerden olan CO gerilme titreşim bandı ise deneysel (Chunyan vd., 2015) 1683 cm^{-1} de çok güçlü olarak gözlenmişken B3LYP ve HSEH1PBE metotlarında hesaplanan teorik değerleri 1755 cm^{-1} ve 1641 cm^{-1} de çok güçlü şiddette gözlemlenmiştir.

Tablo 2. Deneysel (Chunyan vd., 2015) ve teorik titreşimsel dalgasayıları ve işaretlemeleri

Assignments	Deneysel (cm^{-1})		Teorik Hesaplamalar			
	IR	Raman	B3LYP		HSEH1PBE	
			IR	Raman	IR	Raman
$\nu_{\text{asym}}(\text{NH}_2)$	3404vs	-	3689.61m	3689.61m	3480.23m	3480.23s
$\nu_{\text{asym}}(\text{NH}_2)$	3306m	-	-	-	-	-
$\nu_{\text{sym}}(\text{NH}_2)$	3152m	3152w	3567.38w	3567.38s	3360.02m	3360.02vs
$\nu_{\text{ring}}(\text{CH})$	3065m	3069s	3195.78vw	3195.78vs	3015.89w	3015.89vs
$\nu_{\text{im}}(\text{CH}_3)$	-	2953m	3025.41w	3025.41vs	2863.65w	2863.65vs
$\nu(\text{CO})$	1683vs	1683w	1755.02vs	1755.02w	1641.96vs	1641.96s
$\delta(\text{NH}_2)$	1621sh	-	1618.98s	1618.98w	1504.82vs	1504.82m
$\nu_{\text{py}}(\text{ring})$	1605s	1601s	1613.99w	1613.99w	1532.09m	1532.09s
$\nu_{\text{im}}(\text{CN})$	1569s	1569m	1588.84m	1588.84w	1497.03m	1497.03w
$\nu_{\text{am}}(\text{CN})$	1389m	1390w	1408.35w	1408.35m	1359.88m	1359.88s
$\nu_{\text{am}}(\text{CN})$	1385vs	-	1395.02m	1395.02w	1323.22w	1323.22m
$\delta_{\text{py}}(\text{CH})$	1329w	1199w	1358.68s	1358.68m	1272.24vs	1272.24s
$\nu_{\text{im}}(\text{ring})$	1169s	1165m	1176.13s	1176.13vw	1101.65s	1101.65m
Ring def. $\delta_{\text{py}}(\text{ring})$	1032vs	1034vs	1044.27m	1044.27s	1005.59m	1005.59m
CH op. Rock in imidazole ring	757s	757vw	733.23m	733.23vw	671.46m	671.46w
Ring op. bend. $\gamma_{\text{py}}(\text{ring})$	691vs	701w	710.08m	710.08vw	663.11m	663.11w
NH_2 wagging	646s	652w	661.69m	661.69w	616.73m	616.73m
Ring ip. def., $\delta_{\text{py}}(\text{ring})$	621m	-	627.28m	627.28w	583.42m	583.42w
CH op. bend., $\gamma_{\text{py}}(\text{CH})$	516s	-	521.63m	521.63w	488.73vw	488.73w
$\nu(\text{ZnN})$	424m	415w	431.81m	431.81w	397.88w	397.88vw
$\delta(\text{ZnBr})$	-	177vs	190.46s	190.46m	185.03m	185.03w

2.4. Elektronik Özellikleri

Bir yapının elektron yoğunluğu dağılımına bakılarak, iyonizasyon potansiyeli, elektron ilgisi, kimyasal sertlik ve yumuşaklık parametreleri, elektrostatik potansiyel ve moleküler orbital şekilleri hakkında bilgi edinilebilir. Moleküler orbitaller HOMO-LUMO diye adlandırılır. Buradaki HOMO molekülün elektronu verme eğilimidir ve dolu olan en yüksek enerjili orbitaldir. LUMO ise molekülün elektron alma eğilimidir ve boş olan en düşük enerjili orbitaldir (Pir Gümüş ve Atalay, 2017). Molekülün enerji farkı (ΔE) büyük olduğunda elektron dağılımı daha az değişime uğrar ve kutuplanma düşük olur. DFT/B3LYP ve DFT/HSEH1PBE metotlarında 6-311++G(d,p) taban setinde elektronik yapı parametreleri hesaplanmıştır ve Tablo 3'de bu

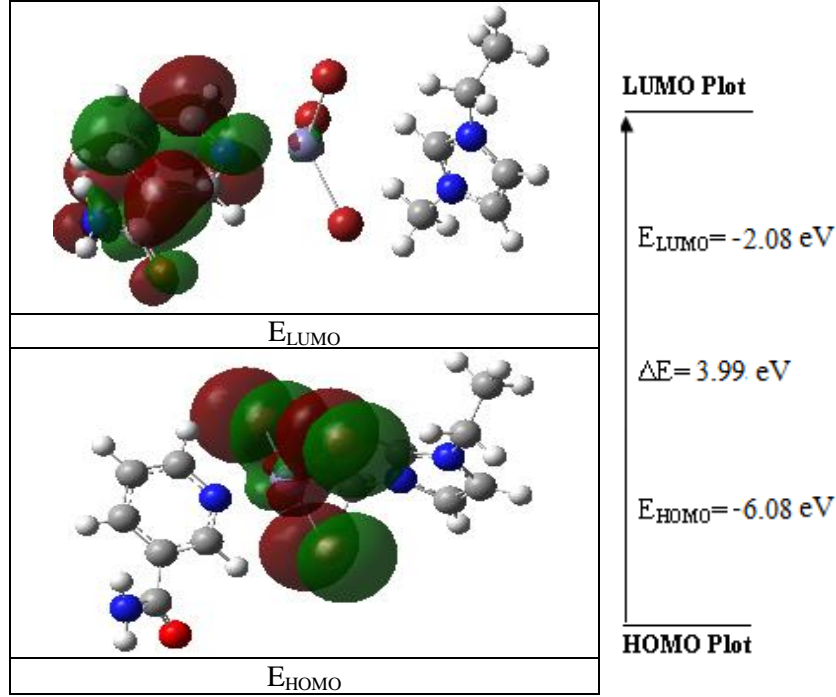
parametreler listelenmiştir. Tablo 3'de verilen HOMO ile LUMO enerji farkının 1.5 eV dan büyük olması termodinamik açıdan molekülün kararlı ve dayanıklı olduğunu gösterir. Ayrıca molekül kendi kendileri ile reaksiyon vermez, dimerleşme, polimerleşme gerçekleştirmez.

Tablo 3. Teorik elektronik yapı parametreleri

	B3LYP	HSEH1PBE
E_{HOMO} (eV)	-6.08	-5.18
E_{LUMO} (eV)	-2.08	-2.80
ΔE (eV)	3.99	2.39
I (eV)	6.08	5.18
A (eV)	2.08	2.80
χ (eV)	4.08	3.99
η (eV)	1.99	1.19
S (eV^{-1})	0.08	0.10
E_{TOTAL} (a.u)	-10263.96	-10261.46

HOMO ve LUMO dağılımlarının gösterimi şekil 5’de verilmiştir. Şekil 5’i incelediğimizde en düşük boş moleküler orbital olan LUMO enerjisi

en fazla brom atomları üzerinde, en yüksek dolu moleküler orbital olan HOMO enerjisi ise piridin halkası üzerindeki bağlardadır.



Şekil 5. Üç boyutlu HOMO ve LUMO’ların gösterimi

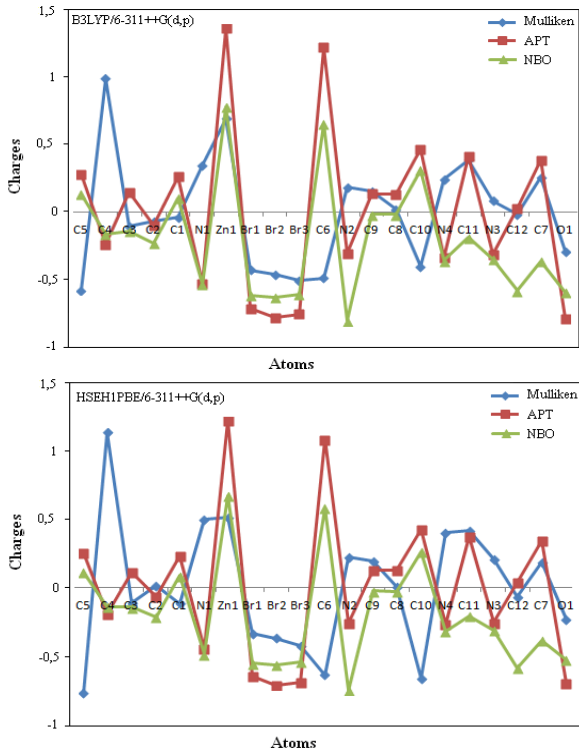
2.5. Mulliken, APT ve NBO Yük Analizleri

1a molekülünün moleküller arası etkileşimleri daha iyi anlayabilmek için moleküllerin atomik yükleri hesaplanıp Mulliken yoğunluk analizi, atomik polar tensör (APT) ve natural bağ orbital

(NBO) popülasyon analizi HSEH1PBE ve B3LYP metodları ile hesaplanarak Tablo 4’de listelenmiştir. 1a molekülü için Mulliken, atomik polar tensör (APT) ve natural bağ orbital (NBO) yük analizleri daha iyi anlaşılсын diye Şekil 6’da çizilmiştir.

Tablo 4. Teorik olarak hesaplanan Mulliken, APT ve NBO yük analizleri

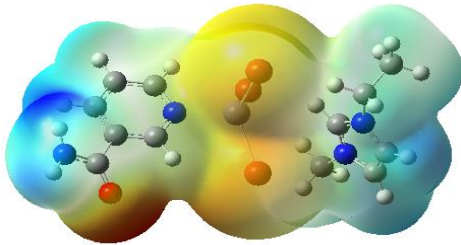
Atom	Mulliken		APT		NBO	
	B3LYP	HSEH1PBE	B3LYP	HSEH1PBE	B3LYP	HSEH1PBE
C5	-0.57797	-0.80915	0.28346	0.26472	0.13598	0.11374
C4	0.99026	1.18477	-0.23649	-0.20979	-0.16294	-0.15482
C3	-0.1027	-0.12299	0.14733	0.11068	-0.13651	-0.15556
C2	-0.06705	0.01333	-0.099	-0.07475	-0.22873	-0.2309
C1	-0.03825	-0.12513	0.26382	0.23611	0.10784	0.08615
N1	0.34711	0.51805	-0.52947	-0.47335	-0.53518	-0.51441
Zn1	0.69341	0.53706	1.36295	1.27267	0.77973	0.69563
Br1	-0.42773	-0.35492	-0.71534	-0.68478	-0.61706	-0.58463
Br2	-0.46107	-0.39138	-0.77914	-0.75159	-0.62909	-0.59417
Br3	-0.50452	-0.44921	-0.75379	-0.72995	-0.60805	-0.57271
C6	-0.48665	-0.67162	1.22258	1.132	0.65524	0.60429
N2	0.18464	0.23261	-0.30427	-0.27305	-0.80455	-0.78939
C9	0.15678	0.19572	0.1368	0.12606	-0.01593	-0.03074
C8	0.02124	0.00118	0.136	0.12655	-0.01702	-0.03226
C10	-0.4014	-0.69821	0.46768	0.44237	0.31382	0.27339
N4	0.24561	0.41981	-0.33453	-0.28546	-0.35742	-0.33607
C11	0.38946	0.43313	0.41726	0.38752	-0.1882	-0.22446
N3	0.08596	0.21552	-0.31308	-0.27244	-0.34842	-0.32816
C12	-0.0174	-0.07733	0.03132	0.03354	-0.58163	-0.61746
C7	0.25941	0.19265	0.38577	0.35699	-0.36274	-0.40761
O1	-0.28913	-0.24391	-0.78986	-0.73406	-0.59197	-0.55853



Şekil 6. Hesaplanan yük analizi

2.6. Moleküler Elektrostatik Potansiyel Yüzeyi

Moleküler elektrostatik potansiyel (MEP), moleküler davranışların reaktivliği, yapı aktifliği ve hidrojen bağlarını açıklamakta kullanılan faydalı bir metoddur. Kırmızı bölgeler (-) yüklü elektrostatik potansiyel bölgelerdir ve moleküllerin elektron yoğunluğu derişikliği tarafından protonun çekimini (tek çiftlenim, π bağları ...) temsil eder. Mavi bölgeler (+) yüklü elektrostatik potansiyel bölgelerdir ve düşük elektron yoğunluğunun ve nükleer yükün tam olarak korunmamış olduğu bölgelerde atom çekirdekleri tarafından protonun itmesine karşılık gelir. Hesaplanan kısmi yükler ise sarı alanlar (-), kırmızı alanlar ise (+) olmak üzere protonlar ve (+) yüklere yaklaşımla molekülün nasıl bir etkileşim içinde olabileceğini gösterir.



Şekil 7. Üç boyutlu moleküler elektronik potansiyel enerji yüzeyleri

1a molekülünün B3LYP/6-311G++(d,p) metodu ile optimize olan yapılarının 3 boyutlu moleküler elektrostatik potansiyel yüzey haritaları Şekil 7'de

gösterilmiştir. Şekil 7 incelendiğinde, elektron yoğunluğunun en yüksek olduğu bölgenin oksijen O1 atomu civarında olduğu görülmektedir. Pozitif bölgeler ise, hidrojen atomları üzerinde mavi renk yoğunluğunun çoğunluklu olduğu bölgedir. N-H bölgesi de elektron yoğunluğunun en düşük olduğu bölgeleri göstermektedir.

3. Sonuç ve Yorumlar

Günümüzde kullanılan teorik hesaplama yöntemleri ile moleküllerin birçok özellikleri deneysel analizler yapılmasına gerek kalmadan incelenebilmektedir. Hatta bazı çalışmalarda deneysel yöntemden daha hassas ve güvenilir sonuçlar elde edilebilmektedir. Bir tek deneyle moleküler yapı, oluşum ısı, dipol moment, iyonlaşma potansiyeli, elektron yükleri, elektron yoğunlukları, bağ uzunlukları gibi birçok bilgiyi verebilecek bir yöntem yoktur. Bu tür verilerin deneysel yöntem ile hesaplanmasında sonuçların güvenilirliği göz önünde bulundurulursa, yaygınlaşmakta olan birçok hesaplama yöntemi sonuçlarının, deneysel sonuçlara göre ne kadar güvenilir olduğu görülebilir.

Bu sebeple, 1a molekülünün teorik olarak kutuplanma etkisini (atomlar birbirine yaklaştırıldığında diğer çekirdeklerin etkisiyle elektronik yoğunluk bozulur) azaltmak gerekir. Bu sebeple eklenen polarize fonksiyonları ve uyarılmış, iyonik moleküllerde elektron yoğunluğunun molekülün temel durumuna göre daha dağınık olma durumunu modellemek için eklenen difüze fonksiyonları içeren 6-311++G(d,p) seviyesi ile incelenmiştir. Elde edilen minimum enerjili yapılar literatürde bulunan X-ışını yöntemi ile incelenen deneysel değerlerle karşılaştırılmıştır ve moleküllerin geometrik parametreleri deneysel değerlerle uyumlu olduğu bulunmuştur.

İlk olarak moleküllerin minimum enerjili yani kararlı yapısının bulunabilmesi amacıyla, geometri optimizasyonu yapılmıştır. İncelenen moleküllerin yapısı daha önceden X-ışını kırınım yöntemi ile belirlenmiş olduğundan, buradan elde edilen deneysel değerler, hesapladığımız geometrik parametrelerle karşılaştırılmıştır. Moleküllerin optimize yapısı kullanılarak harmonik olmayan titreşim frekansları hesaplanmıştır. Hesaplanan titreşim frekanslarının hangi titreşim türüne ait olduğunu belirleyebilmek için yani titreşimsel işaretlemelerin yapılması amacıyla benzer moleküller ve GaussView grafik ara yüzünde bulunan titreşim animasyonlarından yararlanılmıştır. Optimize edilen konfigürasyon-

ların titreřim frekansları deneysel deęerler ile uyumlu hale getirilebilmek için ölçekleme faktörleriyle çarpılıp düzeltilmiřtir ve kırmızı-altı ile Raman spektrumları çizilmiřtir. Deneysel deęerler ile karşılařtırılarak iyi bir uyum içinde olduęu saptanmıřtır. İncelenen 1a molekülünün öncü moleküler orbital enerjileri ve toplam enerjileri hesaplanmıřtır. HOMO-LUMO enerji farklarına ve bu enerjilerden moleküler parametreler (η ; moleküler sertlik ve χ ; elektronegatiflik) belirlenmiřtir. Mulliken, APT ve NBO atomik yük deęerlerinde ve NBO hibritleşme yüzdesi deęişimleri incelendiğinde çok küçük deęişimler olduęu görülmüřtür. Öngörülen moleküllerin yapılarının optimize olmuş halinde izole moleküllere göre oluşan yük farklılıkları çalışmamızda moleküller arası etkileşimlerin delillerinden biri olarak ele alınmıřtır. Ayrıca moleküler elektrostatik potansiyel enerji yüzey haritası (MEPS) belirlenmiřtir.

Bu çalışmaların devamı olarak; daha büyük ve kompleks moleküler grupları içeren bileşiklerin daha kapsamlı bilgisayar sistemlerinde, yapılar üzerinde çalışmaların sürdürüleceęi NBO ve konformasyon analizleri yapılabilir. Bilgisayarda hesaplanan simülasyonlar molekülün karakterizasyonunu belirlemede yardımcı olur.

Kaynaklar

- Akalin E. ve Akyuz S., 2006. Vibrational analysis of free and hydrogen bonded complexes of nicotinamide and picolinamide. *Vibrational Spectroscopy*, 42, 333-340.
- Bakiler, M., Bolukbasi, O., ve Yılmaz, A., 2007. An experimental and theoretical study of vibrational spectra of picolinamide, nicotinamide, and isonicotinamide. *Journal of Molecular Structure*, 826, 6-16.
- Becke, A. D., 1993. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. *Journal of Chemical Physics*, 98, 5648.
- Bolukbasi, O., ve Akyuz, S., 2005. Computational vibrational study on coordinated nicotinamide, *Journal of Molecular Structure*, 744, 961-971.
- Chunyan, L., Cui, F., Zhang, H. ve Xuan, X., 2015. Ionothermal synthesis, properties and vibrational spectra of zinc (II) complex with nicotinamide. *Spectrochimica Acta A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 134, 367-371.
- Frisch M. J., Pople J.A., Binkley J.S. 1984. Self-consistent molecular orbital methods 25.

Supplementary functions for Gaussian basis sets. *Journal of Chemical Physics*, 80, 3265.

- Frisch, M.J., Trucks, G.W., Schlegel, H.B., Scuseria, G.E., Robb, M.A., Cheeseman, J.R., Scalmani, G., Barone, V., Mennucci, B., Petersson, G.A., Nakatsuji, H., Caricato, M., Li, X., Hratchian, H.P., Izmaylov, A.F., Bloino, J., Zheng, G., Sonnenberg, J.L., Hada, M., Ehara, M., Toyota, K., Fukuda, R., Hasegawa, J., Ishida, M., Nakajima, T., Honda, Y., Kitao, O., Nakai, H., Vreven, T., Montgomery, J.A, Jr., Peralta, J.E., Ogliaro, F., Bearpark, M., Heyd, J.J., Brothers, E., Kudin, K.N., Staroverov, V.N., Kobayashi, R., Normand, J., Raghavachari, K., Rendell, A., Burant, J. C., Iyengar, S.S., Tomasi, J., Cossi, M., Rega, N., Millam, J. M., Klene, M., Knox, J.E., Cross, J. B., Bakken, V., Stratmann, R.E., Yazyev, O., Austin, A. J., Cammi, R., Pomelli, C., Ochterski, V.G., Voth, G.A., Salvador, P., Dannenberg, J.J., Dapprich, S., Daniels, A.D., Farkas, O., Foresman, J. B., Ortiz, J.V., Cioslowski, J. ve Fox D.J., 2009. Gaussian 09, Revision A.1, Gaussian, Inc., Wallingford CT.
- Heyd J. and Scuseria G.E. 2004b. Assessment and validation of a screened Coulomb hybrid density functional. *Journal of Chemical Physics*, 120, 7274.
- Heyd J., Peralta J. E., Scuseria G. E., and Martin R. L. 2005. Energy band gaps and lattice parameters evaluated with the Heyd-Scuseria-Ernzerhof screened hybrid functional. *Journal of Chemical Physics*, 123, 174101.
- Heyd J., Scuseria G. E., and Ernzerhof M. 2006. Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential. *Journal of Chemical Physics*, 124, 219906.
- Heyd, J. ve Scuseria G., 2004a. Efficient hybrid density functional calculations in solids: Assessment of the Heyd-Scuseria-Ernzerhof screened Coulomb hybrid functional. *Journal of Chemical Physics*, 121, 1187.
- Ide, S., Ataç, A. ve Yurdakul, ř., 2002. Spectroscopic and structural studies on dichlorobis (nicotinamide) zinc (II). *Journal of Molecular Structure*, 605, 103-107.
- Lee, C., Yang, W. ve Parr R.G., 1988. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Physics Review B*, 37, 785.
- Magel, E., Hillinger, A.C., Wagner, T. ve Holl, W., 2001. Oxidative pentose phosphate pathway and pyridine nucleotides in relation to heartwood formation in *Robinia pseudoacacia* L. *Phytochemistry* 57, 1061-1068.

- Pasaoglu, H., Güven, S., Heren, Z. ve Büyükgüngör, O., 2006. Synthesis, spectroscopic and structural investigation of ZnI 2 (nicotinamide) 2, ZnI 2 (isonicotinamide) 2 and [Zn (H 2 O) 2 (picolinamide) 2] I 2. Journal of Molecular Structure, 794, 270-276.
- Pir Gümüş, H., Atalay, Y., 2017. 3-hidroksi-4-hidroksimiinometil-5-hidroksimetil-1,2-dimetilpiridinyum iyodid molekülünün geometrik yapısının incelenmesi, sakarya university journal of science, 21 (3), 564-571.
- Raj, S.S., Fun, H.K., Zhao, P.S., Jian, F.F., Lu, L.D., Yang, X.J. ve Wang, X., 2000. Bis (2-aminopyridine-N) bis (benzoato-O) zinc. Acta Crystallographica C, 56, 742-743.
- Shibata, K., 1994. Reparative Effect of Nicotinamide and Nicotinic Acid on the Aggravation of Tryptophan-nicotinamide Metabolism Caused by 6-Aminonicotinamide. Bioscience, Biotechnology Biochemistry, 58, 1729-1730.
- Sismanoglu, T., 2003. Thermodynamics of stability constant of binary complex of nicotinamide with Mn. Chinese Chemical Letters, 14, 1207-1210.