

JOTCSA, 2(3), 2015

## **Molecular Structure Analyses of Some Crystals Containing Aromatic-Structured Acids by X-ray Diffraction Method and Quantum Mechanical Calculations**

### **Aromatik Asit İçeren Bazı Kristallerin Molekül Yapılarının X-ışınları Kırınımı Yöntemiyle İncelenmesi ve Kuantum Mekaniksel Hesaplamaları**

Mehmet ASLANTAŞ<sup>1\*</sup>, Arzu KARAYEL<sup>2,3</sup>, Ömer ÇELİK<sup>4</sup>, Akif ARSLAN<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Associate Professor of Physics. Kahramanmaraş Sütçü İmam University, Faculty of Sciences and Arts, Department of Physics, Kahramanmaraş, Türkiye. Corresponding author. E-mail: [aslantas@ksu.edu.tr](mailto:aslantas@ksu.edu.tr).

<sup>2</sup>Assistant Professor of Physics. Hitit University, Faculty of Sciences and Arts, Department of Physics, Çorum, Türkiye. E-mail: [arzukarayel@hitit.edu.tr](mailto:arzukarayel@hitit.edu.tr).

<sup>3</sup>Assistant Professor of Physics. Bilkent University, Department of Physics, Ankara, Türkiye. E-mail: [karayelarzu@gmail.com](mailto:karayelarzu@gmail.com).

<sup>3</sup>Associate Professor of Physics. Dicle University, DUPTAM, Diyarbakır, Türkiye. E-mail: [celiko21@yahoo.com](mailto:celiko21@yahoo.com).

<sup>4</sup>Doctor Lecturer. Korkut Ata University, Düziçi Vocational School, Osmaniye, Türkiye. E-mail: [akifarslan@hotmail.com](mailto:akifarslan@hotmail.com).

## **ABSTRACT**

Aromatic-structured acids and their complexes are having with biological importance, in particular molecules which are used in the food industry due to enzymatic activity and antimicrobial properties. In this study, crystal structure analyses were performed by X-ray diffraction method, and biological analysis of synthesized aromatic-structured complex molecules determined. In order to support and compare of the experimental results for these complexes, the quantum mechanical Hartree-Fock (HF) and Density Functional Theory (DFT) methods were investigated by theoretical calculations. Many information at the atomic level for the complex molecules such as, conformations in the unit cell, energies, bond lengths and angles, molecular packing, intra- and inter-molecular hydrogen bonding interactions were presented.

## ÖZET

Aromatik yapılı asitler ve kompleksleri biyolojik öneme sahip olup, özellikle antimikrobiyal ve enzimatik aktivite özelliklerinden dolayı gıda sektöründe kullanılan moleküllerdir. Bu çalışmada sentezlenen aromatik asitli kompleks moleküllerin biyolojik analizleri ve kristal yapıları X-ışınları kırınımı tekniği ile belirlendi. Deneysel sonuçları desteklemek ve karşılaştırma yapmak üzere kristal yapısı belirlenen moleküller kuantum mekaniksel Hartree-Fock (HF) ve Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT) kuramsal hesaplama metotları ile incelendi. Moleküllerin birim hücre içerisindeki konformasyonları, enerjileri, bağ uzunluğu ve açıları, moleküler istiflenmesi, molekülüğü ve moleküllerarası hidrojen bağı etkileşmeleri gibi birçok atomik düzeyde bilgiler ortaya konuldu.