

# Crystal Structure of Zwitterionic (E)-9-(((3-hydroxyphenyl)iminio)methyl)-1,2,3,5,6,7- Hexahydropyrido[3,2,1-ij]Quinolin-8-Olate

Hasan İnaç<sup>a,1</sup><sup>a</sup> Kırıkkale University, Faculty of Education, Kırıkkale, Turkey  
ORCID ID: 0000-0002-8870-5317

## Abstract

The title compound (1), C<sub>19</sub>H<sub>20</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, crystallized with single molecule in the asymmetric unit and is present in the zwitterionic form. The compound was synthesized from the condensation reaction of 8-hydroxyjulolidine-9-carbaldehyde and 3-aminophenol. In solid state compound adopts the keto–amine tautomeric form, with the H atom attached to the N atom, which participates in an intramolecular N—H···O hydrogen bond with an S(6) ring motif. The conformation about the C=N bond is E. The aromatic ring of the julolidine moiety is inclined to the phenol ring by 13.00 (10)°. The fused non-aromatic rings of the julolidine moiety adopts a screw-boat conformations. In the crystal, the molecules are connected by N—H···O and O—H···O hydrogen bonds, with adjacent molecules related by a 21 screw axis, generating A–B–A–B–zigzag chains extending along [010]. Furthermore, adjacent molecules are linked by pairs of C—H···O interactions, forming a ladder-like structure propagating along the *a*-axis direction. Density functional theory (DFT) optimized structures at the B3LYP/6–311 G(d,p) level is compared with the experimentally determined molecular structure in the solid state.

**Keywords:** “Crystal structure, schiff base, julolidine, 8-hydroxyjulolidine-9-carboxaldehyde, hydrogen bonding, zwitterion, 3-aminophenol.”

## 1. Giriş

### 1.1. Kimyasal İçerik

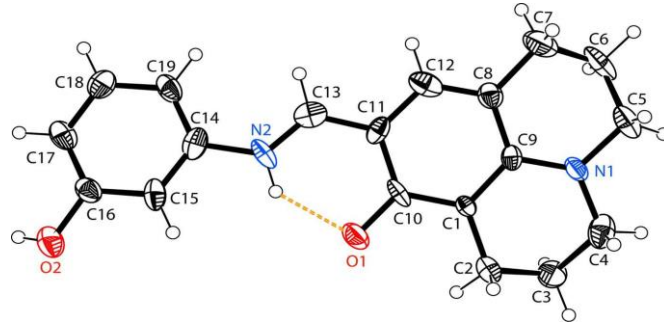
Julolidin, kimyasal olarak, aromatik halkaya geri halkalar oluşturan iki N-alkil bir anilin türevidir. Yalnız birbirine nitrojen elektron çifti halkası ile bağlanarak olağandışı tepkimeye yol açar. 8-Hydroxyjulolidine-9-carboxaldehyde, floresans kemosenörlerinde kullanılan iyi bilinen bir kromofordur. Çünkü julolidine kısmı genellikle sulu solüsyonlarda çözünür [1,2,3]. Julolidin halkası içeren bileşikler, ölçüm için flüoresan probalar olarak kullanılan uyarılmış durumda molekül içi proton transferi sergiler [4]. Hücre zarı viskozitesinin ölçüsü Bazı moleküllerde julolidin halka sisteminin varlığı, onları bakır, çinko, demir ve alüminyum iyonlarının yanı sıra florür iyonlarının kromojenik çıplak gözle tespiti olarak yararlı kılar [5,6,7]. Julolidin bazı malzemeler, dikiyanometilpiran modüllerine bağlandığında OLED'lerde kırmızı yayıcılar olarak da kullanılır[8]. Julolidinmalononitril, büyük hiperpolarize edilebilirliğe sahip "itme-çekme" molekülü görevi görür ve moleküllerin doğrusal olmayan optik özelliklerini anlamak için bir model sistem olarak kullanılır [9]. Literatürde 8-hidroksijulolidin-9-karboksaldehit bazı Schiff bazları ve bunların metal sensörler olarak uygulamaları hakkında birçok rapor bulunmaktadır (10,7,8). Mevcut çalışma, julolidin halka sistemine dayalı Schiff bazlarının devam eden yapısal çalışmasının bir parçasıdır (11,12,13). Bu çalışmada julolidine halka sisteminin kristal yapısı ve DFT hesaplamaları elde edildi. B3LYP/6–311 G(d,p) seviyesinde gerçekleştirilen yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) ile yapılan hesaplamalar, katı halde deneysel olarak belirlenen moleküler yapı ile karşılaştırıldı.

<sup>1</sup> Corresponding Author  
E-mail Address: hinac@kku.edu.tr

## 2. Materyal ve Yöntem

### 2.1. Yapısal Yorum

Başlıkta belirtilen bileşik (Şekil 1) katı halde zitteriyonik formda bulunmaktadır. Molekül içi bir N—H···O hidrojen bağı, moleküler yapıyı stabilize eder (Tablo 1 ve Şekil 2); Bu, ilgili imin-fenol bileşiklerinde yaygın olmayan bir özelliktir. -175,8 (6)°'lik bir C11—C13—N2—C14 burulma açısı sergileyen imin grubu molekülün genel düzlemsel olmamasına katkıda bulunur. Julolidin parçasının aromatik halkası (C1/C8—C12) fenol halkasına (C14—C19) 13.00 (10)° eğimlidir. Julolidin parçasının erimiş aromatik olmayan halkaları, bir vidalı tekne konformasyonlarını benimser. Tatomerlere bağlı olarak, Schiff bazlarında iki tür molekül içi hidrojen bağı gözlenir: fenol-imin'de O—H···N ve keto-amin tautomerlerinde N—H···O. Mevcut analiz, başlıktaki bileşiğin fenol-imin formunda var olduğunu göstermektedir (Şekil 1). Bir S(6) halka motifi oluşturan molekül içi bir N—H···O hidrojen bağı sergiler (Şekil 1 ve Tablo 1). Bu molekül içi N—H···O hidrojen bağı daha önce julolidin türevlerinde bulunmamış [14,11,12], ancak salisilaldehit türevi schiff bazında tespit edilmiştir [15]. C10—O1 [1.296 (6) Å] bağ uzunluğu, çift bağ ve destekleyici keto-amin tatomeri ile uyumludur. C16—O2 [1.360 (7) Å] bağ uzunluğu, benzer bileşikler için bildirilen değerlerle uyumludur, yani. 5-dietil-amino-2-[(E)-(2,4-dimetoksifenil)iminometil]fenol ve 8-[(E)-(4-klorofenil)imino]-metil-1,1,7,7-tetra-metil-1,2,3,5,6,7-heksahidropirido[3,2,1-ij]kinolin-9-ol [16].

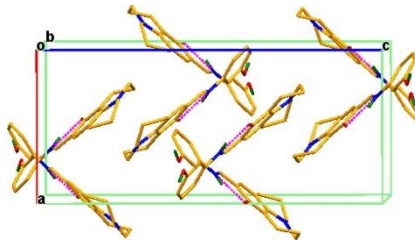


Şekil 1. Başlıktaki bileşiğin moleküler yapısı, atom işaretlemesi ve molekül içi N—H···O hidrojen bağının kesikli bir çizgi olarak görünümü (ayrıntılar için Tablo 1'e bakın). Yer değiştirme elipsoidleri %40 olasılık seviyesinde çizilmiştir.

Tablo 1. Hidrojen bağı geometrisi (Å)

$D-H\cdots A$	$D-H$	$H\cdots A$	$D\cdots A$	$D-H\cdots A$
O2—H2···O1 <sup>i</sup>	0.82	1.73	2.546 (6)	172.6
N2—H2C···O1	0.86	1.90	2.599 (7)	137.1
C13—H13···O2 <sup>ii</sup>	0.93	2.50	3.161 (8)	128.2
C5—H5B···O2 <sup>iii</sup>	0.97	2.55	3.398 (9)	146.2

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



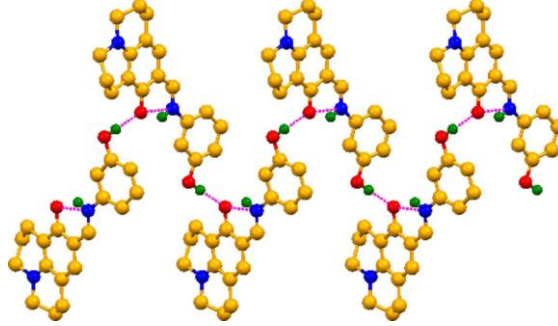
Şekil 2. b eksenini boyunca uzanan tek boyutlu -A-B-A-B- zikzak hidrojen bağı zincirinin bir görünümü. Hidrojen bağları kesikli çizgilerle gösterilmiştir.

## 3. Bulgular ve Sonuç

### 3.1. DFT Çalışması

DFT kuantum-kimyasal hesaplamaları, GAUSSIAN09'da [17] uygulandığı gibi B3LYP/6-311 G(d,p) seviyesinde [18] yapılmıştır. DFT yapı optimizasyonu (I) X-ışını geometrisinden başlanarak yapıldı ve değerler deneysel değerlerle karşılaştırıldı

(bkz. Tablo 3). Bu sonuçlardan, 6–311 G(d,p) temel setinin deneysel verilere yaklaşımı açısından çok uygun olduğu sonucuna varabiliriz. LUMO ve HOMO yörünge enerji parametreleri, bir molekülün yük transferi, kimyasal reaktivitesi ve kinetik/termodinamik kararlılığı için önemli ölçüde sorumludur. DFT çalışması, HOMO ve LUMO'nun tüm julolidin halkasından HOMO-1, HOMO, LUMO ve LUMO+1 enerji seviyelerinin salisilaldehit halkası ve elektron dağılımı Şekil 3'te gösterilmiştir. HOMO'nun moleküler orbitalinde hem sigma hem de  $\pi$  karakteri bulunurken HOMO-1 ve  $\pi$ -orbital yoğunlukla hakimdir. LUMO esas olarak  $\sigma$  yoğunluğundan oluşurken, LUMO+1 hem  $\sigma$  hem de  $\pi$  elektronik yoğunluktan oluşur. HOMO-LUMO boşluğu 0,08167 a.u. olarak bulundu ve sınır moleküler yörünge enerjileri, EHOMO ve ELUMO sırasıyla -0.11077 ve -0.02910 a.u. olarak bulundu.



Şekil 3 Başlıktaki bileşiğin kristal dolgusunun c eksenini boyunca bir görünümü.

Tablo 2. Hesaplanan (DFT) ve X-ışını verilerinden (I) (Å, °) için seçilen geometrik verilerin karşılaştırılması.

Bonds	X-ray	B3LYP/6–311 G(d,p).
C10—O1	1.231 (3)	1.231
C3—O2	1.345 (3)	1.345
C1—C2	1.431 (3)	1.431
N1—C5	1.381 (2)	1.381
O1—C1—C2	126.2 (2)	126.22
C1—C2—C3	121.34 (18)	120.25
C11—N1—C10	116.83 (15)	116.81

### 3.2. Supramoleküler Özellikler

Kristalde, moleküller N—H $\cdots$ O ve O—H $\cdots$ O hidrojen bağları ile birbirine bağlıdır ve bitişik moleküller 21 vidalı bir eksenle bağlantılıdır ve dolayısıyla uzayan A—B—A—B—zikkak zincirleri oluşturur. [010] boyunca Kristalde bitişik moleküller, C—H $\cdots$ O etkileşim çiftleri tarafından birbirine bağlanır ve a eksenini yönünde ilerleyen merdiven benzeri bir yapı oluşturur.

### 3.3. Veri tabanı Araştırması

Literatürde benzer bileşiklerin çok az örneği vardır ve bildiğimiz kadarıyla, Kimyasal bağlam bölümünde bahsedilen sulu çözeltide Zn<sup>2+</sup>'nin seçici tespiti için yeni floresan kemosensör [6] kristalografik olarak karakterize edilmemiştir. Cambridge Structural Database'de (CSD, Sürüm 5.37, güncelleme Mayıs 2016; [19] yapılan aramada, julolidine kısmı için 123 sonuç bulundu. Bunlardan altı tanesi 8 pozisyonunda bir OH grubuna sahiptir ve dördü ayrıca 1 pozisyonunda bir C=N grubuna sahiptir. 9-{{(4-kloro-fenil)imino} metil}-1,1,7,7-tetrametil-2,3,6,7-tetrahidro-1H,5H-pirido[3,2,1-ij] kinolin-8-olate[16]. Çalışmamdaki bileşiğe benzer ancak molekül içi bir O—H $\cdots$ N hidrojen bağıyla fenol-imin formunda bulunur. Çok benzer bileşikler olarak 9,9-{{(1E,1E)-[1,4-fenilenbis (azanililiden)]bis(metanililiden)}}bis(2,3,6,7-tetrahidro-1H,5H-pirido[3,2,1-ij]kinolin-8-ol) ve (E)-9-{{[4-(dietilamino)fenil]imino}-metil}-2,3,6,7-tetrahidro-1H, 5H pirido[3,2,1-ij]kinolin-8-ol görülmüştür. Ancak her iki bileşik de molekül içi O—H $\cdots$ N hidrojen bağı etkileşimi göstermektedir.

### 3.4. Sentez ve Kristalleşme

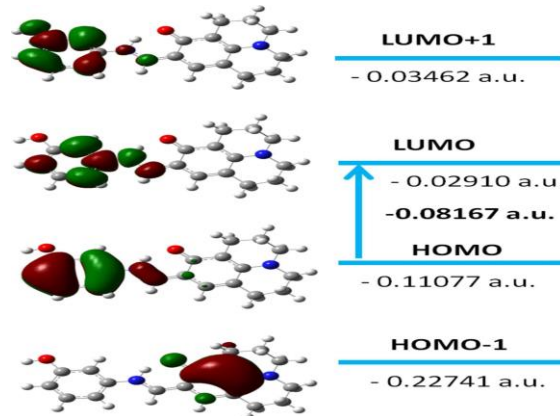
Mutlak etanol (3 ml) içindeki 3-aminofenole (50 mg, 0.46 mmol) 8-hidroksijulolidin-9-karboksaldehidin (100 mg, 0.46 mmol) etanolik bir çözeltisi eklendi. Reaksiyon çözeltisine iki damla HCl ilave edildi ve 2 saat oda sıcaklığında karıştırıldı. Nihai sarı çökelti, süzme yoluyla geri kazanıldı, birkaç kez küçük porsiyonlarda buz EtOH ve ardından dietil eter ile yıkanarak 122 mg (%86) başlık bileşiği elde edildi. X-ışını kırınım analizi için uygun sarı blok benzeri kristaller, metanol içindeki bir çözeltinin yavaş buharlaştırılmasıyla üç gün içinde elde edildi.

### 3.5. İyileştirme

Kristal verileri, veri toplama ve yapı arıtma detayları Tablo 2'de özetlenmiştir. N—H ve H atomları, bir fark Fourier haritasında yerleştirilmiştir. Konumsal ve izotropik termal parametreleri, iyileştirmenin sonraki aşamalarında dahil edildi. Tüm C'ye bağlı H atomları geometrik olarak konumlandırıldı ve C—H = 0.93–0.97 Å ve Uiso(H) = 1.2–1.5Ueq(C) ile bir sürme modeli kullanılarak rafine edildi. OH ve H atomları hesaplanan pozisyonlara dahil edildi ve sürme atomları olarak ele alındı: O—H = 0.82 Å. DFT kuantum-kimyasal hesaplamaları, B3LYP/6–311 G(d,p) seviyesinde yapılmıştır [19,9]. Bu hesaplamalar GAUSSIAN09'da uygulandığı gibi kontrol edilmiştir [18]. (I)'in DFT yapı optimizasyonu, X-ışını geometrisinden başlayarak gerçekleştirildi.

**Tablo 3. Deneysel ayrıntılar**

Crystal data	
Chemical formula	C <sub>19</sub> H <sub>20</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
$M_r$	308.37
Crystal system, space group	Orthorhombic, <i>Pbca</i>
Temperature (K)	100
$a, b, c$ (Å)	9.5290 (16), 15.010 (3), 21.493 (4)
$V$ (Å <sup>3</sup> )	3074.2 (9)
$Z$	8
Radiation type	Mo $K\alpha$
$\mu$ (mm <sup>-1</sup> )	0.09
Crystal size (mm)	0.20 × 0.15 × 0.10
Data collection	
Diffractometer	BRUKER SMART APEX CCD diffractometer
Absorption correction	Multi-scan SADABS (Bruker, 2003)
$T_{min}, T_{max}$	0.955, 0.988
No. of measured, independent and observed [ $I > 2\sigma(I)$ ] reflections	29002, 2462, 1180
$R_{int}$	0.245
$(\sin \theta/\lambda)_{max}$ (Å <sup>-1</sup> )	0.577
Refinement	
$R[F^2 > 2\sigma(F^2)], wR(F^2), S$	0.106, 0.244, 1.06
No. of reflections	2462
No. of parameters	209
No. of restraints	7
H-atom treatment	H-atom parameters constrained
$\Delta\rho_{max}, \Delta\rho_{min}$ (e Å <sup>-3</sup> )	0.56, -0.20



**Şekil 4. (I) için HOMO-1, HOMO, LUMO ve LUMO+1 enerji seviyelerinin elektron dağılımı.**

### 3.6. Özel Detaylar

Geometri. Tüm e.s.d.'ler (iki l.s. düzlemi arasındaki dihedral açıdaki e.s.d. hariç) tam kovaryans matrisi kullanılarak tahmin edilir. Mesafeler, açılar ve burulma açıları cinsinden esd'lerin tahmininde hücre e.s.d.'leri ayrı ayrı dikkate alınır; hücre parametrelerindeki e.s.d.'ler arasındaki korelasyonlar, yalnızca kristal simetrisi ile tanımlandıklarında kullanılır. Hücre e.s.d.'lerinin yaklaşık (izotropik) bir işlemi, l.s.'yi içeren e.s.d.'leri tahmin etmek için kullanılır.

**Tablo 4.**

	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>	<i>U</i> <sub>iso</sub> */ <i>U</i> <sub>eq</sub>
O1	0.5099 (5)	0.4274 (3)	0.6039 (2)	0.0450 (13)
O2	0.7935 (5)	0.1658 (3)	0.4203 (2)	0.0511 (14)
H2	0.861298	0.136115	0.409280	0.077*
N1	0.3737 (6)	0.6897 (3)	0.7114 (2)	0.0366 (14)
N2	0.6977 (6)	0.4423 (3)	0.5168 (2)	0.0405 (15)
H2C	0.635694	0.411110	0.536107	0.049*
C10	0.5177 (7)	0.5127 (4)	0.6127 (3)	0.0331 (17)
C1	0.4341 (6)	0.5551 (4)	0.6572 (3)	0.0247 (15)
C9	0.4474 (6)	0.6480 (4)	0.6660 (3)	0.0281 (15)
C16	0.8332 (8)	0.2521 (4)	0.4281 (3)	0.0404 (18)
C11	0.6127 (7)	0.5655 (5)	0.5758 (3)	0.0359 (17)
C17	0.9484 (8)	0.2872 (4)	0.3999 (3)	0.0424 (18)
H17	1.004033	0.250785	0.375073	0.051*
C2	0.3356 (7)	0.5030 (4)	0.6956 (3)	0.0403 (18)
H2A	0.374559	0.444126	0.702697	0.048*
H2B	0.248064	0.495792	0.673141	0.048*
C8	0.5392 (7)	0.6996 (4)	0.6277 (3)	0.0375 (17)
C13	0.6992 (7)	0.5253 (5)	0.5299 (3)	0.0417 (18)
H13	0.760737	0.561765	0.507938	0.050*
C14	0.7852 (7)	0.3942 (5)	0.4746 (3)	0.0416 (18)
C18	0.9846 (7)	0.3754 (5)	0.4075 (3)	0.0452 (19)
H18	1.063894	0.398359	0.388031	0.054*
C15	0.7499 (7)	0.3060 (4)	0.4651 (3)	0.0414 (18)
H15	0.669718	0.282619	0.483607	0.050*
C19	0.8990 (8)	0.4306 (4)	0.4454 (3)	0.0437 (19)
H19	0.920003	0.490734	0.450208	0.052*
C12	0.6185 (8)	0.6575 (4)	0.5857 (3)	0.0474 (19)
H12	0.680571	0.691054	0.561946	0.057*
C5	0.3674 (8)	0.7864 (4)	0.7168 (3)	0.052 (2)
H5A	0.346460	0.802602	0.759445	0.063*
H5B	0.292520	0.808972	0.690578	0.063*
C6	0.5035 (9)	0.8280 (4)	0.6977 (4)	0.063 (2)
H6A	0.494810	0.892324	0.699165	0.076*
H6B	0.576478	0.810504	0.726690	0.076*
C3	0.3061 (8)	0.5461 (4)	0.7573 (3)	0.051 (2)
H3A	0.388668	0.542948	0.783539	0.061*
H3B	0.229991	0.515220	0.778074	0.061*
C4	0.2663 (8)	0.6422 (4)	0.7464 (3)	0.055 (2)
H4A	0.178380	0.644553	0.723727	0.065*
H4B	0.252407	0.671380	0.786172	0.065*
C7	0.5438 (8)	0.8002 (4)	0.6340 (4)	0.061 (2)
H7A	0.637830	0.821299	0.624875	0.074*
H7B	0.480110	0.826889	0.604084	0.074*

**Tablo 5. Atomik yer deęiřtirme parametreleri ( $\text{\AA}^2$ )**

	$U_{11}$	$U_{22}$	$U_{33}$	$U_{12}$	$U_{13}$	$U_{23}$
O1	0.053 (3)	0.030 (3)	0.053 (3)	-0.005 (2)	-0.003 (3)	-0.013 (2)
O2	0.059 (3)	0.038 (3)	0.057 (3)	0.011 (3)	0.002 (3)	-0.008 (3)
N1	0.040 (3)	0.021 (3)	0.048 (4)	0.004 (3)	0.000 (3)	-0.004 (3)
N2	0.051 (4)	0.023 (3)	0.048 (4)	0.005 (3)	-0.017 (3)	-0.014 (3)
C10	0.040 (4)	0.017 (4)	0.042 (4)	0.008 (3)	-0.018 (4)	-0.011 (3)
C1	0.027 (3)	0.019 (3)	0.028 (3)	0.004 (3)	-0.002 (3)	0.000 (3)
C9	0.029 (4)	0.031 (4)	0.025 (3)	0.009 (3)	-0.004 (3)	-0.003 (3)
C16	0.061 (5)	0.031 (4)	0.029 (4)	-0.004 (4)	-0.006 (4)	-0.001 (3)
C11	0.031 (4)	0.054 (5)	0.022 (3)	0.001 (4)	0.003 (3)	-0.006 (3)
C17	0.051 (5)	0.030 (4)	0.047 (4)	0.013 (4)	-0.011 (4)	0.000 (4)
C2	0.051 (5)	0.029 (4)	0.040 (4)	0.005 (4)	-0.004 (4)	-0.005 (3)
C8	0.039 (4)	0.034 (4)	0.039 (4)	0.007 (4)	-0.002 (4)	0.001 (4)
C13	0.034 (4)	0.054 (5)	0.037 (4)	-0.006 (4)	-0.012 (3)	0.008 (4)
C14	0.039 (4)	0.064 (5)	0.022 (4)	0.011 (4)	-0.007 (4)	-0.005 (4)
C18	0.049 (5)	0.057 (5)	0.030 (4)	0.003 (4)	-0.001 (4)	0.004 (4)
C15	0.048 (4)	0.042 (5)	0.035 (4)	0.019 (4)	-0.002 (4)	-0.008 (4)
C19	0.060 (5)	0.034 (4)	0.037 (4)	-0.003 (4)	-0.010 (4)	-0.012 (3)
C12	0.044 (5)	0.033 (4)	0.064 (5)	-0.003 (4)	-0.015 (4)	0.008 (4)
C5	0.057 (5)	0.032 (4)	0.068 (5)	0.009 (4)	-0.014 (5)	-0.016 (4)
C6	0.072 (6)	0.021 (4)	0.098 (7)	0.011 (4)	-0.024 (5)	-0.012 (4)
C3	0.059 (5)	0.042 (4)	0.052 (5)	0.012 (4)	0.009 (4)	0.016 (4)
C4	0.062 (5)	0.064 (5)	0.038 (4)	0.023 (4)	0.006 (4)	0.004 (4)
C7	0.058 (5)	0.034 (5)	0.092 (6)	-0.006 (4)	-0.001 (5)	0.004 (4)

**Tablo 6. Geometrik parametreler( $\text{\AA}$ ,  $^\circ$ )**

O1—C10	1.296 (6)	C8—C12	1.335 (9)
O2—C16	1.360 (7)	C8—C7	1.518 (8)
O2—H2	0.8200	C13—H13	0.9300
N1—C9	1.356 (7)	C14—C19	1.367 (9)
N1—C4	1.455 (8)	C14—C15	1.382 (9)
N1—C5	1.458 (7)	C18—C19	1.420 (9)
N2—C13	1.278 (7)	C18—H18	0.9300
N2—C14	1.428 (8)	C15—H15	0.9300
N2—H2C	0.8600	C19—H19	0.9300
C10—C1	1.398 (8)	C12—H12	0.9300
C10—C11	1.441 (8)	C5—C6	1.497 (10)
C1—C9	1.413 (8)	C5—H5A	0.9700
C1—C2	1.475 (8)	C5—H5B	0.9700
C9—C8	1.429 (9)	C6—C7	1.482 (10)

**Tablo 7. Hidrojen baęı geometresi ( $\text{\AA}$ ,  $^\circ$ )**

$D—H\cdots A$	$D—H$	$H\cdots A$	$D\cdots A$	$D—H\cdots A$
O2—H2 $\cdots$ O1 <sup>i</sup>	0.82	1.73	2.546 (6)	173
N2—H2C $\cdots$ O1	0.86	1.90	2.599 (7)	137
C13—H13 $\cdots$ O2 <sup>ii</sup>	0.93	2.50	3.161 (8)	128
C5—H5B $\cdots$ O2 <sup>iii</sup>	0.97	2.55	3.398 (9)	146

Simetrik kodlamalar: (i)  $x+1/2, -y+1/2, -z+1$ ; (ii)  $-x+3/2, y+1/2, z$ ; (iii)  $-x+1, -y+1, -z+1$ .

**Referanslar**

- [1] Narayanaswamy, N. & Govindaraju, T. (2012). "Sens. Actuators B", Chem. 161, 304–310.
- [2] Maity, D., Manna, A. K., Karthigeyan, D., Kundu, T. K., Pati, S. K. & Govindaraju, T. (2011). "Chem. Eur. J". **17**, 11152–11161.
- [3] Noh, J. Y., Kim, S., Hwang, I. H., Lee, G. Y., Kang, J., Kim, S. H., Min, J., Park, S., Kim, C. & Kim, J. (2013). "Dyes Pigments", 99, 1016–1021.
- [4] Nano, A., Gullo, M. P., Ventura, B., Armaroli, N., Barbieri, A. & Ziessel, R. (2015). "Chem. Commun".**51**, 3351–3354.
- [5] Jo, T. G., Na, Y. J., Lee, J. J., Lee, M. M., Lee, S. Y. & Kim, C. (2015). "New J. Chem". 39, 2580–2587.
- [6] Choi, Y. W., Lee, J. J., You, G. R., Lee, S. Y. & Kim, C. (2015). "RSC Adv". **5**, 86463–86472.
- [7] Kim, Y. S., Lee, J. J., Choi, Y. W., You, G. R., Nguyen, L., Noh, I. & Kim, C. (2016). "Dyes Pigments", 129, 43–53.
- [8] Lee, S. A., You, G. R., Choi, Y. W., Jo, H. Y., Kim, A. R., Noh, I., Kim, S.-J., Kim, Y. & Kim, C. (2014). "Dalton Trans." 43, 6650–6659.
- [9] Mennucci, B., Cappelli, C., Guido, C. A., Cammi, R. & Tomasi, J. (2009). "J. Phys. Chem. A", 113, 3009–3020.
- [10] Park, G. J., Park, D. Y., Park, K.-M., Kim, Y., Kim, S.-J., Chang, P.-S. & Kim, C. (2014). "Tetrahedron", 70, 7429–7438.
- [11] Faizi, M. S. H., Ali, A. & Potaskalov, V. A. (2016). "Acta Cryst". **E72**, 1366–1369.
- [12] Faizi, M. S. H., Ahmad, M., Kapshuk, A. A. & Golenya, I. A. (2017a). "Acta Cryst". **E73**,38–40
- [13] Faizi, M. S. H., Dege, N. & Malysheva, M. L. (2017b). "Acta Cryst". **E73**, 791–794.
- [14] Na, Y. J., Hwang, I. H., Jo, H. Y., Lee, S. A., Park, G. J. & Kim, C. (2013). Inorg. "Chem. Commun". 35, 342–345.
- [15] Faizi, M. S. H., Iskenderov, T. S. & Sharkina, N. O. (2015). "Acta Cryst". **E71**, 28–30.
- [16] Kantar, E. N., Köysal, Y., Akdemir, N., Ağar, A. A. & Soylu, M. S. (2013). "Acta Cryst". **E69**,0883
- [17] Frisch, M. J., *et al.* (2009). *GAUSSIAN09*. Revision A. 02. Gaussian Inc., Wallingford, CT, USA.
- [18] Becke, A. D. (1993). "J. Chem. Phys". 98, 5648–5652.
- [19] Groom (2016). "The cabricke structural data base". Acta crystallographice B,**72**,171-179