

T.C.
RECEP TAYYIP ERDOĞAN ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

BAZI BENZİMİDAZOL TÜREVİ BİLEŞİKLERİN ASİDİK İYONLAŞMA SABİTİ DEĞERLERİNİN TERMODİNAMİK ÖZELLİKLER YARDIMI ile HESAPLANMASI

ZAFER HAŞİMOĞLU

TEZ DANIŞMANI

DOÇ. DR. FATİH İSLAMOĞLU

TEZ JÜRİLERİ

DOÇ. DR. FATİH İSLAMOĞLU

DOÇ. DR. SERKAN NACİ KOÇ

YRD. DOÇ. DR. EMİNE AKYÜZ TURUMTAY

YÜKSEK LİSANS TEZİ
KİMYA ANABİLİM DALI

RİZE-2015

Her Hakkı Saklıdır

T.C.
RECEP TAYYİP ERDOĞAN ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**BAZI BENZİMİDAZOL TÜREVİ BİLEŞİKLERİN ASİDİK İYONLAŞMA
SABİTİ DEĞERLERİNİN TERMODİNAMİK ÖZELLİKLER YARDIMI İLE
HESAPLANMASI**

Doç.Dr. Fatih İSLAMOĞLU danışmanlığında, Zafer HAŞİMOĞLU tarafından hazırlanan bu çalışma, Enstitü Yönetim Kurulu kararıyla oluşturulan jüri tarafından .21/..08/2015 tarihinde Kimya Anabilim Dalı'nda **YÜKSEK LİSANS** tezi olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri

Ünvanı Adı Soyadı

İmzası

Başkan

: Doç.Dr. Fatih İSLAMOĞLU

Üye

: Doç.Dr. Serkan Naci KOÇ

Üye

: Yrd.Doç.Dr. Emine AKYÜZ TURUMTAY

Prof. Dr. Selami ŞAŞMAZ Y.

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRÜ



ÖNSÖZ

Lisansüstü eğitimim boyunca bana tüm bilgi ve deneyimleriyle yardımlarını esirgemeyen, her zaman bana destek olan hoşgörü ve sabır gösteren danışmanım ve değerli hocam Doç. Dr. Fatih İSLAMOĞLU'na teşekkür ederim.

Hayatımın her aşamasında desteğini esirgemeyen eşim Dilek HAŞİMOĞLU'na, annem Fatma HAŞİMOĞLU'na kızlarım İrem HAŞİMOĞLU'na ve Elif HAŞİMOĞLU'na teşekkür ederim.

Zafer HAŞİMOĞLU

TEZ ETİK BEYANNAMESİ

Tarafımdan hazırlanan “Bazı benzimidazol türevi bileşiklerin asidik iyonlaşma sabiti değerlerinin termodinamik özellikler yardımı ile hesaplanması” başlıklı bu tezin, Yükseköğretim Kurulu Bilimsel Araştırma ve Yayın Etiği Yönergesindeki hususlara uygun olarak hazırladığımı ve aksinin ortaya çıkması durumunda her türlü yasal işlemi kabul ettiğimi beyan ederim. 15/07/2015

Zafer HAŞİMOĞLU

***Uyarı:** Bu tezde kullanılan özgün ve/veya başka kaynaklardan sunulan içeriğin kaynak olarak kullanımı, 5846 sayılı Fikir ve Sanat Eserleri Kanunundaki hükümlere tabidir.*

ÖZET

BAZI BENZİMİDAZOL TÜREVİ BİLEŞİKLERİN ASİDİK İYONLAŞMA SABİTİ DEĞERLERİNİN TERMODİNAMİK ÖZELLİKLER YARDIMI ile HESAPLANMASI

Zafer HAŞİMOĞLU

Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Kimya Ana Bilim Dalı
Yüksek Lisans Tezi
Danışmanı: Doç. Dr. Fatih İSLAMOĞLU

Bu çalışmada dört adet (Fenil[2-(3-bromobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (1), Fenil[2-(3-florobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (2), Fenil[2-(3-klorobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (3) ve Fenil[2-(3-metilbenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (4)] benzimidazol türevi bileşiklerin moleküllerin geometrik optimizasyonu yapıldıktan sonra yarı deneysel kuantum kimyasal metotlar (AM1, MNDO, MNDOD, PM3, PM6, PM6-DH2, PM7 ve RM1) kullanılarak onbir farklı çözücü (Su, Etanol, Metanol, *N*-Propanol, 2-Propanol, *N*-Butanol, *Tert*-Butanol, Etilen Glikol, *N,N*-Dimetilformamit (DMF), Dimetil Sülfoksit (DMSO) ve Asetonitril) fazında entalpi değişimleri (ΔH°) ve entropi değişimleri (ΔS°) MOPAC 2012 bilgisayar programıyla hesaplanmıştır. Bulunan termodinamik değerler kullanılarak pKa değerleri hesaplanmıştır. Deneysel olarak çalışılan bu moleküllere ait literatürde kayıtlı deneysel pKa ve SPARC metoduna göre teorik olarak hesaplanmış pKa değerleri ile elde edilen değerler karşılaştırılmıştır.

2015, 111 Sayfa

Anahtar Kelimeler: MOPAC 2012 bilgisayar programı, pKa, Benzimidazol türevi

ABSTRACT

STUDIES on ACIDITY BEHAVIOURS OF SOME BENZIMIDAZOLE DERIVATIVE COMPOUNDS

Zafer HAŞİMOĞLU

Recep Tayyip Erdoğan University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Chemistry
Master Thesis
Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Fatih İSLAMOĞLU

In this study, four number (Phenyl[2-(2-bromobenzyl)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-yl]methanone (1), Phenyl[2-(2-fluorobenzyl)-1*H*-1,3-benzimidazole-5-yl]methanone (2), Phenyl[2-(2-chlorobenzyl)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-yl]methanone (3) and Phenyl[2-(2-methylbenzyl)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-yl]methanone (4)] benzimidazole derivative compounds were calculated enthalpy (ΔH°) and entropies (ΔS°) by a computer program MOPAC 2012 using semi-empirical quantum chemical methods (AM1, MNDO, MNDOD, PM3, PM6, PM6-DH2, PM7 ve RM1) after completed the geometric optimization of molecules in eleven different solvent (Water, Ethanol, Methanol, *N*-Propanol, 2-Propanol, *N*-Butanol, *Tert*-Butanol, Ethylene Glycol, *N,N*-Dimethylformamide (DMF), Dimethyl Sulfoxide (DMSO) and Acetonitrile) phase. Acidity constants (pKa) values of each compound were calculated with the aid of the obtained values. The pKa values found as theoretically have been investigated parallels between the experimental data. The results of the calculations are found to give suitable results of the calculations made with semi-empirical quantum chemical methods.

2015, 111 pages

Keywords: MOPAC 2012 computer program, Acidity constants (pKa), Benzimidazole

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ	I
TEZ ETİK BEYANNAMESİ..	II
ÖZET	III
ABSTRACT	IV
İÇİNDEKİLER	V
ŞEKİLLERİN DİZİNİ	VII
TABLolar DİZİNİ	IX
SEMBOLLER ve KISALTMALAR DİZİNİ.....	XII
1. GENEL BİLGİLER.....	1
1.1. Giriş.....	1
1.2. Asitler ve Bazlar.....	2
1.2.1. Arrhenius Asit-Baz Tanımı.....	2
1.2.2. Lowry-Bronsted Asit-Baz Tanımı.....	3
1.2.3. Lewis Asit-Baz Tanımı.....	4
1.3. Asitlik Sabitleri.....	5
1.3.1. Asitlik ve Bazlık Sabitlerini Etkileyen Faktörler.....	7
1.3.1.1. Çözücü Etkisi.....	8
1.3.1.2. Elektronegatiflik	8
1.3.1.3. Hibritleşme	9
1.3.1.4. İndüktif Etkiler	10
1.3.1.5. Rezonans Etkiler	11
1.3.1.6. Sterik Etkiler	13
1.3.1.7. Büyüklük.....	13
1.3.2. Asitlik Sabitlerinin Kullanım Alanları	14
1.4. Denge Sabiti (K) ve Standart Serbest Enerji Değişimi (ΔG°) Arasındaki İlişki.....	14
1.5. Kimyada Kullanılan Hesaplama Yöntemleri ve Bilgisayar Programları	15
1.5.1. Teorik Hesaplama Yöntemleri.....	16
1.5.2. Bilgisayarla Kimya Hesaplamaları	17
1.5.2.1. Moleküler Mekanik.....	18

1.5.2.2.	Elektronik Yapı Yöntemleri	19
1.6.	Benzimidazoller	21
2.	YAPILAN ÇALIŞMALAR	24
2.1.	Çalışılan Moleküller	24
2.2.	Materyal ve Metot	26
2.2.1.	Hesaplama Metodu	26
2.2.2.	Geometri Optimizasyon	27
2.3.	Yarı Deneysel Yöntemlerle Asitlik Sabitlerinin Bulunması ...	27
3.	BULGULAR	29
4.	SONUÇLAR VE TARTIŞMA	66
5.	ÖNERİLER	96
	KAYNAKLAR	97
	ÖZGEÇMİŞ	100

ŞEKİLLERİN DİZİNİ

Şekil 1. Benzimidazol halkasının numaralandırılması.	21
Şekil 2. Benzimidazol oluşum mekanizması.	22
Şekil 3. Çalışılan1.Molekül(Fenil[2-(3-bromobenzil)-1 <i>H</i> -1,3-benzimidazol -5- il]metanon).	24
Şekil 4. Çalışılan 2. Molekül (Fenil[2-(3-florobenzil)-1 <i>H</i> -1,3-benzimidazol -5- il]metanon).	25
Şekil 5. Çalışılan3.Molekül(Fenil[2-(3-klorobenzil)-1 <i>H</i> -1,3-benzimidazol -5-il]metanon).	25
Şekil 6. Çalışılan4.Molekül(Fenil[2-(3-metilbenzil)-1 <i>H</i> -1,3-benzimidazol -5-il]metanon).	26
Şekil 7. AM1 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması.	71
Şekil 8. MNDO metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması.	71
Şekil 9. MNDOD metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması.	72
Şekil 10. PM3 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması.	72
Şekil 11. PM6 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması.	73
Şekil 12. PM6-DH2 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması. ..	73
Şekil 13. PM7 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması.	74
Şekil 14. RM1 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması.	74
Şekil 15. Su ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması.	75
Şekil 16. Etanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması.	75
Şekil 17. Metanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması.	76
Şekil 18. N-Propanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması.	76
Şekil 19. 2-Propanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması.	77
Şekil 20. N-Butanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması.	77
Şekil 21. Tert-Butanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması.	78
Şekil 22. Etilen glikol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması.	78
Şekil 23. DMF ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması.	79
Şekil 24. DMSO ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması.	79
Şekil 25. Asetonitril ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması.	80
Şekil 26. 1. Molekül için deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması.	80
Şekil 27. 2. Molekül için deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması.	81

Şekil 28. 3. Molekül için deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması. 81

Şekil 29. 4. Molekül için deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması.82

TABLolar DİZİNİ

Tablo 1. Asit ve konjuge bazlarının kuvvetliliđi.	7
Tablo 2. Elektron verici ve elektron çekici bazı gruplar.	11
Tablo 3. Su ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deđerleri.	29
Tablo 4. Etanol ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deđerleri.	30
Tablo 5. Metanol ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deđerleri.	30
Tablo 6. N-Propanol ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deđerleri.	30
Tablo 7. İzo-Propanol ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deđerleri.	31
Tablo 8. N-Butanol ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deđerleri.	31
Tablo 9. Tert-Butanol ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deđerleri.	31
Tablo 10. Etilen Glikol ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deđerleri.	32
Tablo 11. DMF ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deđerleri.	32
Tablo 12. DMSO ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deđerleri.	32
Tablo 13. Asetonitril ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deđerleri.	33
Tablo 14. 1. Molekülün AM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deđerleri.	34
Tablo 15. 1. Molekülün MNDO yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deđerleri.	35
Tablo 16. 1. Molekülün MNDOD yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deđerleri.	36
Tablo 17. 1. Molekülün PM3 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deđerleri.	37

Tablo 18. 1. Molekülün PM6 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	38
Tablo 19. Molekülün PM6-DH2 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	39
Tablo 20. 1. Molekülün PM7 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	40
Tablo 21. 1. Molekülün RM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	41
Tablo 22. 2. Molekülün AM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	42
Tablo 23. 2. Molekülün MNDO yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	43
Tablo 24. 2. Molekülün MNDOD yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	44
Tablo 25. 2. Molekülün PM3 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	45
Tablo 26. 2. Molekülün PM6 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	46
Tablo 27. 2. Molekülün PM6-DH2 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	47
Tablo 28. 2. Molekülün PM7 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	48
Tablo 29. 2. Molekülün RM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	49
Tablo 30. 3. Molekülün AM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	50
Tablo 31. 3. Molekülün MNDO yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	51
Tablo 32. 3. Molekülün MNDOD yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	52
Tablo 33. 3. Molekülün PM3 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	53
Tablo 34. 3. Molekülün PM6 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	54

Tablo 35. 3. Molekülün PM6-DH2 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	55
Tablo 36. 3. Molekülün PM7 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	56
Tablo 37. 3. Molekülün RM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	57
Tablo 38. 4. Molekülün AM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	58
Tablo 39. 4. Molekülün MNDO yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	59
Tablo 40. 4. Molekülün MNDOD yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	60
Tablo 41. 4. Molekülün PM3 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	61
Tablo 42. 4. Molekülün PM6 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	62
Tablo 43. 4. Molekülün PM6-DH2 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	63
Tablo 44. 4. Molekülün PM7 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	64
Tablo 45. 4. Molekülün RM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	65
Tablo 46. 1. Molekülün çalışılan çözücü ortamlarında yarı deneysel kuantum kimyasal metoda göre hesaplanan pKa değerleri.	67
Tablo 47. 2. Molekülün çalışılan çözücü ortamlarında yarı deneysel kuantum kimyasal metoda göre hesaplanan pKa değerleri.	68
Tablo 48. 3. Molekülün çalışılan çözücü ortamlarında yarı deneysel kuantum kimyasal metoda göre hesaplanan pKa değerleri.	69
Tablo 49. 4. Molekülün çalışılan çözücü ortamlarında yarı deneysel kuantum kimyasal metoda göre hesaplanan pKa değerleri.	70
Tablo 50. 1. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin sıralanması.	87
Tablo 51. 2. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin sıralanması.	88
Tablo 52. 3. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin sıralanması.	89
Tablo 53. 4. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin sıralanması.	90

Tablo 54. 1. Molekölün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin çalışılan modellere göre sıralanması.	92
Tablo 55. 2. Molekölün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin çalışılan modellere göre sıralanması.	93
Tablo 56. 3. Molekölün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin çalışılan modellere göre sıralanması.	94
Tablo 57. 4. Molekölün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin çalışılan modellere göre sıralanması.	95

SEMBOLLER ve KISALTMALAR DİZİNİ DİZİNİ

Ka	Denge Sabiti
pKa	Asitlik iyonlaşma sabitinin eksi logaritması
pH	Hidrojen iyonlarının aktivesinin eksi logaritması
ΔG	Serbest enerji değişimi
ΔH	Entalpi değişimi
ΔS	Entropi değişimi
DMF	<i>N,N</i> -dimetilformamit
DMSO	dimetilsülfoksit
Ksu	Suyun iyonlaşma sabiti

1. GENEL BİLGİLER

1.1. Giriş

Organik kimyanın en büyük sınıfını heterohalkalı bileşikler oluşturur ve bu bileşikler günlük yaşamımızda da önemli bir yeri teşkil eder. Birçok ilacın ve doğal bileşiklerin yapısında da bulunan heterohalkalı bileşiklere, karbonhidratlar, nükleik asitler, peptitler ve proteinler örnek olarak verilebilir. Heterohalkalı bileşiklerde halkayı oluşturan karbon ve hidrojen atomları dışında farklı bir element atomu da molekül içerisinde yer alır. Halkadaki karbonla yer değiştiren bu farklı element atomu (hetero atom) genelde oksijen, azot, kükürt ve çok az olmakla birlikte bor, arsenik, fosfor, silisyum, selen ve tellür'dür. Son yıllar içerisinde organik kimyanın gerek teorik, gerekse yarı-deneysel alanda büyük gelişme göstermesinde en önemli faktörlerden biri de fiziksel yöntemlerin uygulanması olmuştur. Çeşitli fiziksel metotların yardımı olmadan bir kimya araştırmasının artık günümüzde yeterli olacağını düşünmek yanlış olacaktır (Kalafatçioğlu, 2005).

Moleküllerin enerji, yapı ve diğer özelliklerinin belirlenmesinde kimyasal hesaplamalar kimyasal araştırmalarda çok önemli bir yere sahiptir. Fakat hesaplamalar ve deneysel yöntemler arasında çok büyük farklılıklar vardır. Teorik hesaplamalar, şimdiye kadar elde edilmemiş bileşikler için bile kolayca uygulanabilmektedir. Hızla gelişen bilgisayar teknolojisi kimyacıların birçok çalışma alanına girmiş ve özellikle deneysel sonuçların teorik hesaplamalarla desteklenmesini zorunlu hale getirmiştir (Kalafatçioğlu, 2005).

Kimyasal amaçlara yönelik bugünün standart yöntemleri olan paket programlarda daha pratik hesaplamalara ağırlık verilmektedir. Bu tür yöntemler çalışma alanının sınırlarını genişletmiş ve yalnızca yapılabilir bileşiklerle çalışma zorunluluğunu ortadan kaldırmıştır (Taşçı, 2004).

1.2. Asitler ve Bazlar

Kimyasal reaksiyonların çoğu asit-baz reaksiyonu olduğundan, asitler ve bazlar kimyanın özellikle Analitik Kimya'nın en önemli konularından birisidir. Asit-baz reaksiyonları yardımı ile kimyanın temel prensipleri gözden geçirilerek kimyasal reaksiyonlar hakkında daha geniş ve ayrıntılı bilgiler elde edilebilir. Özellikle organik kimyada gerçekleşen reaksiyonların çoğu asit-baz reaksiyonu olabileceği gibi reaksiyonun bir kısmında asit-baz etkileşmesi de görülebilir. Kısaca ifade etmek gerekirse, asit-baz reaksiyonları kimyacıların bir reaksiyonun mekanizmasını anlayabilmesi için çok temel bir örnektir. Bir araştırmacı bu reaksiyonları inceleyerek bağ kırılmalarının veya yeni bağ oluşumlarının mekanizması hakkında bir fikir sahibi olabilir (Kalafatçıoğlu, 2005). Asit-baz reaksiyonları molekül yapısı ile molekül reaktifliği arasında nasıl bir ilişki bulunduğunu açıklayarak, reaksiyon dengeye ulaşırken ne kadar ürün oluştuğunu veya oluşabileceğini tahmin etmede bazı termodinamik özelliklerin nasıl kullanılabileceği hakkında ayrıntılı bilgiler verir. Ayrıca asit-baz reaksiyonları çözücülerin kimyasal tepkimelerde ne gibi rollere sahip olduğunu da ortaya koyar, organik sentezler hakkında geniş bilgiler verir (Solomons, 1996).

1.2.1. Arhenius Asit-Baz Tanımı

Arhenius, asit-baz tanımını 1883 yılında suyun iyonlaşma dengesini temel alarak yapmıştır. Suyun iyonlaşması;



şeklindedir. Suyun iyonlaşması için denge bağıntısı;

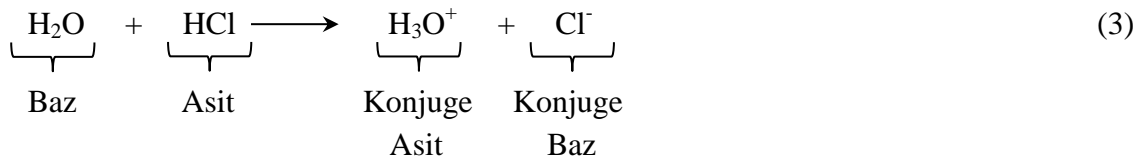
$$K_{su} = [\text{H}^+].[\text{OH}^-] \quad (2)$$

şeklinde yazılabilir. 25°C için $K_{su}=1.01 \times 10^{-14}$, tür. Şayet ortamda; $[\text{H}^+] > [\text{OH}^-]$ ise çözelti asidik, $[\text{H}^+] = [\text{OH}^-]$ ise çözelti nötr, $[\text{H}^+] < [\text{OH}^-]$ ise çözelti bazıktır. Bu

ifadelere baktığımızda görüleceği gibi Arrhenius tanımı, sulu çözeltilerde proton veren her maddeyi asit, hidroksit grubu veren her maddeyi ise baz olarak nitelendirmiştir. Bu tanıma göre asit molekülü yapısında kesinlikle hidrojen, baz molekülü ise yapısında hidroksit taşımakta olup HCl, HNO₃, HClO₄, CH₃COOH, H₂SO₄, H₃PO₃ gibi maddeler asit; Ca(OH)₂, KOH ve NaOH gibi maddeler ise baz özelliği gösterir. Ancak Arrhenius'un bu tanımı sulu çözeltilerde asit-baz özelliği gösteren CO₂, SO₃, NH₃ gibi maddelerin bu özelliklerini açıklamada yetersiz kalmaktadır (Taşçı, 2004).

1.2.2. Lowry-Bronsted Asit-Baz Tanımı

Lowry-Bronsted asit-baz tanımına göre, asit proton verebilen, baz ise proton alabilen madde olarak tanımlanmıştır.



Bu asit-baz reaksiyonunda HCl bir protonunu suya vermekte, su da bu protonu almaktadır. Reaksiyon sonucunda oluşan hidronyum iyonu (H₃O⁺) ve klorür iyonudur (Cl⁻). Lowry-Bronsted asit-baz tanımına göre bir asidin proton kaybetmesi sonucu oluşan molekül veya iyon bu asidin konjuge (eşlenik) bazı denir. Bir bazın proton alması sonucu oluşan molekül veya iyon ise bu bazın konjuge (eşlenik) asidi denir. Yukarıdaki reaksiyonda hidronyum iyonu suyun konjuge asidi, klorür iyonu ise HCl'nin konjuge bazıdır (Kalafatçıoğlu, 2005). Benzer örnekler aşağıda verilmiştir.



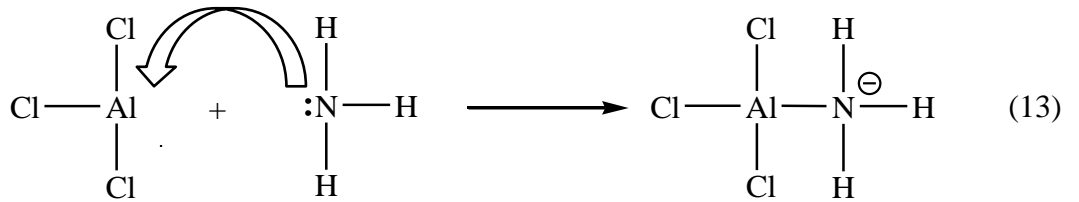
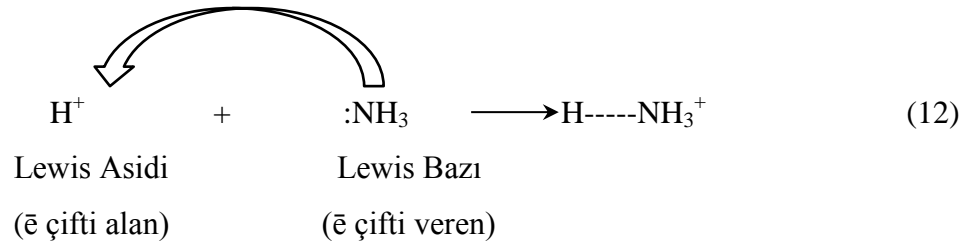
Sülfürik asit (H_2SO_4) gibi iki proton transfer edebilen maddelere diprotik asitler denir. Bu olay aşağıdaki gibi genel bir reaksiyon ifadesi ile yazılabilir (Kalafatçıoğlu, 2005).

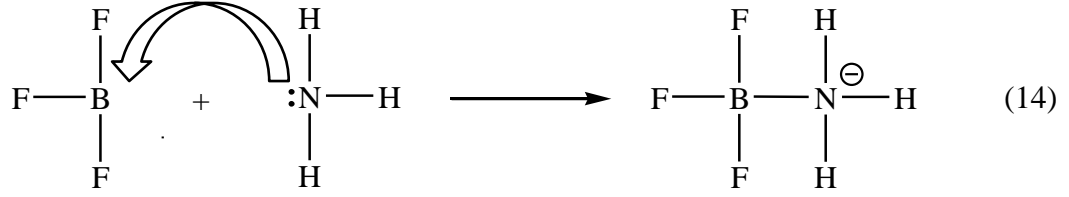


Burada verilen örneklerde de olduğu gibi asitler ve bazlar pozitif veya negatif yüke sahip olabileceği gibi nötr'de olabilir. Bir reaksiyonda asit olarak rol alan bir molekül yada iyon başka bir reaksiyonda baz olabilmektedir (Solomons, 1996).

1.2.3. Lewis Asit-Baz Tanımı

Asit-baz tanımı 1923 yılında Lewis tarafından önemli ölçüde genişletilmiştir. Lewis asit ve baz tanımını; asitlerin elektron çifti alabilen maddeler, bazların ise elektron çifti verebilen maddeler şeklinde tanımlamıştır. Lewis'e göre asit yalnızca proton anlamına gelmez. Başka maddeler de asit özelliği gösterebilir. Örneğin, AlCl_3 ve BF_3 'ün amonyak ile reaksiyonu da aynen bir protonun reaksiyonu gibidir (Kalafatçıoğlu, 2005).





Yukarıda verilen örneklerde aynen protonun yaptığı gibi; BF_3 ve AlCl_3 , azotla kovalent bağ oluşturmak üzere amonyağın elektron çiftini alır. Bu kovalent bağın sebebi alüminyum ve boron atomlarının 6'şar elektronlarının olması yani elektron eksikliği durumunda olmalarıdır. Bu atomlar birer elektron çifti kabul ederek oktet yapısına ulaşırlar. Elektron çifti kabul ettikleri için de Lewis asiti olarak adlandırılırlar (Solomons, 1996).

Lewis asitleri genel olarak 3 temel grupta incelenir. Bunlar;

- 1) Elektron (\bar{e}) çifti alabilen bütün katyonlar
- 2) Değerlik orbitallerinde \bar{e} eksikliği olan ve merkez atomun koordinasyon sayısını artırabildiği maddeler
- 3) Merkez atomunda bir veya daha fazla sayıda çoklu bağı olan moleküller (SO_3 , CO_2 gibi)'dir (Kalafatçioğlu, 2005).

1.3. Asitlik Sabitleri

Kimyasal tepkimelerin gerçekleşmesi sırasında bir denge söz konusudur. Bir tepkimenin ne ölçüde yürüdüğünü ortaya koyan bir de denge sabiti vardır ve K ile gösterilir. Denge sabiti, derişim değerlerinin molarite, M, olarak ifade edildiği aşağıdaki eşitlik ile tayin edilir (Kalafatçioğlu, 2005).

$$K = \frac{\text{Reaksiyon sonucunda oluşan ürünlerin derişimleri, M}}{\text{Reaksiyona giren maddelerin derişimleri, M}} \quad (15)$$

HCl , H_2SO_4 gibi kuvvetli asitlere karşın, asetik asit zayıf asittir ve asetik asidin sulu çözeltisinde meydana gelen tepkime bir denge tepkimesi olduğundan dolayı onu denge sabitiyle tanımlayabiliriz (Kalafatçioğlu, 2005).



Yapılan deneylerde, 25°C'de 0,1 M'lik asetik asit çözeltisinde, asetik asit moleküllerinin ancak %1'inin protonlarını suya verdiği gözlemlenmiştir. Asetik asit suda tam olarak iyonlaşmadığından bir denge sabiti yazılması gerekir.

$$K_a = \frac{[\text{CH}_3\text{COO}^-][\text{H}_3\text{O}^+]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]} \quad (17)$$

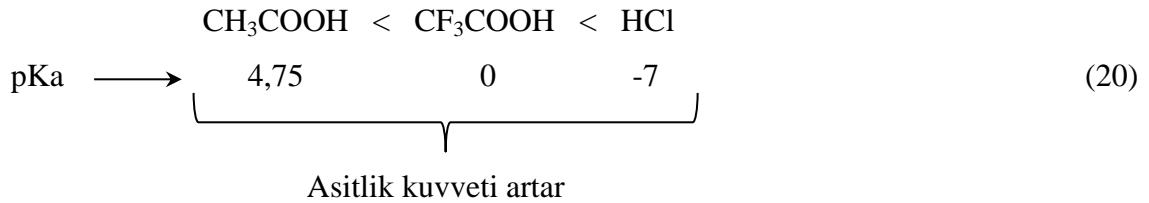
Asetik asit için 25°C'de bulunan $K_a = 1,76 \times 10^{-5}$ 'tir (Solomons, 2002). K_a 'nın büyük değerleri asidin kuvvetli olduğu, küçük K_a değerleri ise asidin zayıf olduğunu belirtir. Kimyacılar genelde asitlik sabitini, K_a 'yı onun negatif logaritması olarak, pKa şeklinde ifade ederler (Kalafatçioğlu, 2005).

$$\text{pKa} = -\log K_a \quad (18)$$


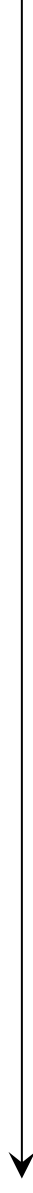
Çözeltide bulunan hidronyum iyon konsantrasyonunun negatif logaritması alındığında;

$$\text{pH} = -\log [\text{H}_3\text{O}^+] \quad (19)$$

eşitliği elde edilir. Asetik asit için literatürdeki pKa değeri 4,75 olarak verilmiştir. Bu eşitlikten de görüleceği gibi pKa değerinin büyük olması o asidin zayıf bir asit olduğu anlamına gelir (Taşçı, 2004).



Tablo 1. Asit ve konjuge bazlarının kuvvetliliği.

Kuvvetli Asit	Asit	Yaklaşık pKa	Konjuge Baz	Zayıf Baz
	HSbF ₆	> -12	SbF ₆ ⁻	
	HI	-10	I ⁻	
	H ₂ SO ₄	-9	HSO ₄ ⁻	
	HBr	-9	Br ⁻	
	HCl	-7	Cl ⁻	
	C ₆ H ₅ SO ₃ H	-6,5	C ₆ H ₅ SO ₃ ⁻	
	H ₃ O ⁺	-1,74	H ₂ O	
	CF ₃ CO ₂ H	0,18	CF ₃ CO ₂ ⁻	
	HNO ₃	1,4	NO ₃ ⁻	
	HF	3,2	F ⁻	
	CH ₃ CO ₂ H	4,75	CH ₃ CO ₂ ⁻	
	NH ₄ ⁺	9,2	NH ₃	
	C ₆ H ₅ OH	9,9	C ₆ H ₅ O ⁻	
	CH ₃ NH ₃ ⁺	10,6	CH ₃ NH ₂	
	H ₂ O	15,7	OH ⁻	
	CH ₃ CH ₂ OH	16	CH ₃ CH ₂ O ⁻	
	(CH ₃) ₃ COH	18	(CH ₃) ₃ CO ⁻	
	C ₂ H ₂	25	C ₂ H ⁻	
	H ₂	35	H ⁻	
	NH ₃	38	NH ₂ ⁻	
C ₂ H ₄	44	C ₂ H ₃ ⁻		
C ₂ H ₆	50	C ₂ H ₅ ⁻		
Zayıf Asit				Kuvvetli Baz

1.3.1. Asitlik ve Bazlık Sabitlerini Etkileyen Faktörler

Asit baz tepkimeleri tersinirdir ve denge konumunda kararlı denge ürünleri daha çok bulunur. Kısaca ayrılmamış bir asidin ve eşlenik bazının göreceli kararlılığı asitlik kuvvetini etkiler. Asitliği etkileyen faktörleri aşağıdaki gibi gruplandırabiliriz (Kalafatçioğlu, 2005).

- 1) Çözücü etkisi
- 2) Elektronegatiflik
- 3) Büyüklük
- 4) Hibritleşme
- 5) İndüktif etki
- 6) Rezonans etki
- 7) Sterik etkiler

1.3.1.1. Çözücü Etkisi

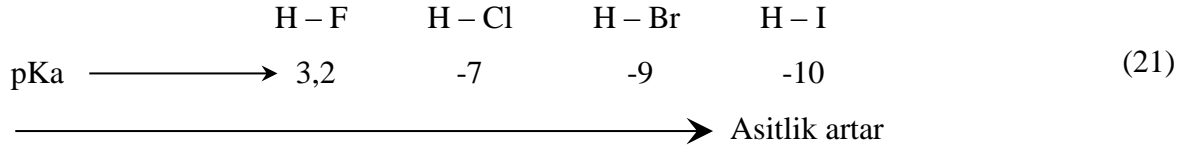
Organik bileşiklerin asitlikleri ve bazlıkları içinde çözüldükleri çözücünün özelliklerine bağlıdır. Bir çözücü de iyonlaşma şunlara bağlıdır.

- 1) Çözücünün dielektrik sabitine,
- 2) Çözücünün, çözünenin iyonlarını sarma ve onları çözeltiye çekme (solvasyon) özelliğine,
- 3) Çözücünün asitliği veya bazlığına.

Asitlik sabitleri, alkoller içinde sudakilere göre 10000-100000 defa daha küçüktürler. Çünkü alkollerin dielektrik sabitleri suyunkinden çok küçüktür. Buna karşılık sıvı amonyak sudan daha bazik olduğundan çözdüğü asitler daha çok iyonlarına ayırır. Öte yandan asetik asit sudan daha asidik olduğundan, içinde sadece birkaç asit %100 iyonlaşır (Gündüz, 1993).

1.3.1.2. Elektronegatiflik

Bir asidin kuvveti, o maddeden protonun ayrılabilmesine ve bir baza aktarılabilmesine bağlıdır. Bu noktada protonun olduğu bağın kırılması ve konjuge bazın elektriksiz olarak daha negatif yapılması gerekir. Örneğin, H-X maddesindeki bağ ne kadar kuvvetli olursa hidrojenin kopması o kadar zor olacak ve ortamın asitliği de o kadar az olacaktır (Kalafatçıoğlu, 2005).



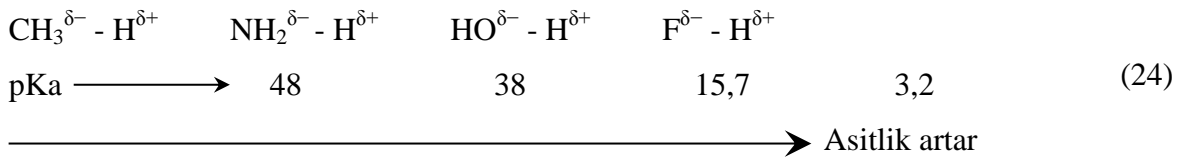
Asitlerin kuvvetliliği arttığında, o asidin konjuge bazının kuvvetliliği azalır.



Elektronegatifliği fazla olan atom, bağ elektronlarını, az olandan daha çok çeker. Bu kuralı anyonlara uyguladığımızda; negatif yüklü atomun elektronegatifliği ne kadar fazla olursa, anyonu da o kadar daha kararlı yapar (Solomons, 2002). Periyodik cetvelde aynı yatay sıradaki elementlerin asitliklerini karşılaştırdığımızda soldan sağa doğru arttığını görürüz. Burada hidrojene bağlı atomun elektronegatifliği belirleyici faktör olur (Kalafatçioğlu, 2005). Örneğin; H-A ve H-B asitlerini inceleyelim,



H-A asidindeki hidrojenin kısmi pozitifliğinin H-B'dekinden daha fazla olduğu görülür. Bu durumda H-A'daki H⁺ ortama daha kolay verilir. A⁻ daha negatif durumdadır. Dolayısıyla; HA, HB'den daha kuvvetli asit olur (Kalafatçioğlu, 2005).



1.3.1.3. Hibritleşme

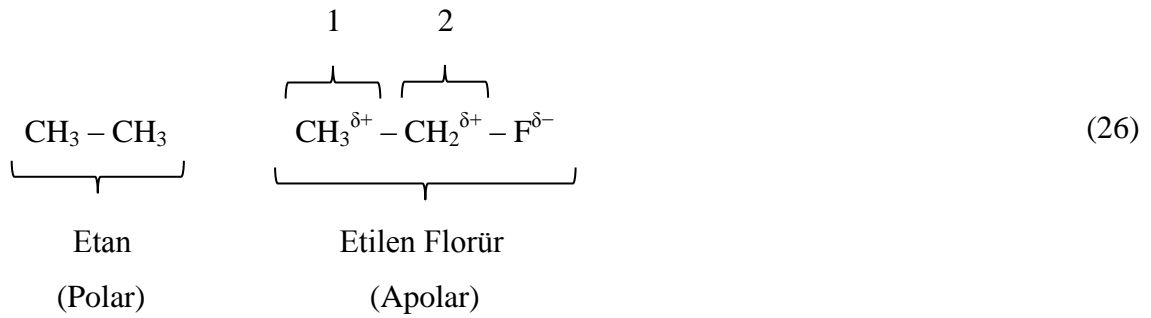
Organik bir asitin asitliği; sp³, sp² veya sp hibrit orbitaline sahip olmasına göre değişir. Hibritleşme etkisini daha iyi anlamak için karbon atomundaki hibritleşme incelenebilir. 2s orbitallerinin elektronları 2p orbitallerinin elektronlarından daha düşük enerjilidir. Çünkü 2s orbitallerindeki elektronlar, çekirdeğe 2p orbitallerindeki elektronlardan daha yakın olacak şekilde yönelmişlerdir. Bundan dolayı melez

orbitallerinin daha fazla s karakterine sahip olması, anyonun elektronlarının daha düşük enerjili olacağını ve anyonun daha kararlı olacağını ifade eder (Solomons, 2002). Organik bazın bazikliğinde ise durum asitliğin tam tersi olarak düşünülür. Yani melez orbitaldeki s karakteri arttıkça bazlık azalır. Hidrokarbonların bağıl asitlikleri aşağıdaki şekilde değişir (Kalafatçıoğlu, 2005).



1.3.1.4. İndüktif Etkiler

Asitliğe hidrojeni taşıyan molekül dışında etki eden faktörlerden biri de indüktif etkilerdir. İndüktif etkileri daha iyi anlayabilmek için C_2H_6 ve C_2H_5F moleküllerini inceleyelim:



F atomunun elektronegativitesi fazla olduğundan elektronları kendisine çeker ve kısmi negatif (δ^-) yüklenir, diğer kısım ise kısmi pozitif (δ^+) olur. C_1 atomu florüre daha yakın olduğundan C_2 atomuna göre daha pozitif yüklenmiştir. C_1 ve C_2 arasındaki bağda meydana gelen δ^+ yükten dolayı bu iki C atomu arasında bir polarizasyon oluşur. Bu etki indüktif etki olarak adlandırılır. İndüktif etki elektron çekici olabileceği gibi elektron itici de olabilmektedir. İndüktif etkinin kuvveti sübstitüentin uzaklığı ile de ilgilidir. Sübstitüentin uzaklığı arttıkça indüktif etki azalır. Molekülde elektron çekici grupların komşu atomda oluşturduğu kısmi pozitif yük asidi kararsız yaparken, anyonun kararlılığını artırır. Yani elektron çeken gruplar asitliği artırırken, bazlığı azaltırlar. Diğer yandan elektron iten gruplar asitliği azaltırken, bazlığı arttırırlar. Elektron veren (itici) gruplar, elektron çeken grupların aksine anyonun

kararlılığını azaltırlar böylece elektron çeken grupların tam aksi bir etki yaparlar. Bazı elektron çekici ve verici gruplar Tablo 2'de verilmiştir (Taşçı, 2004).

Tablo 2. Elektron verici ve elektron çekici bazı gruplar

Elektron Verici Gruplar	Elektron Çekici Gruplar
-NH ₂	-NO ₂
-OCH ₃	-Cl
-OC ₂ H ₅	-Br
-CH ₃	-COR
-CH ₂	

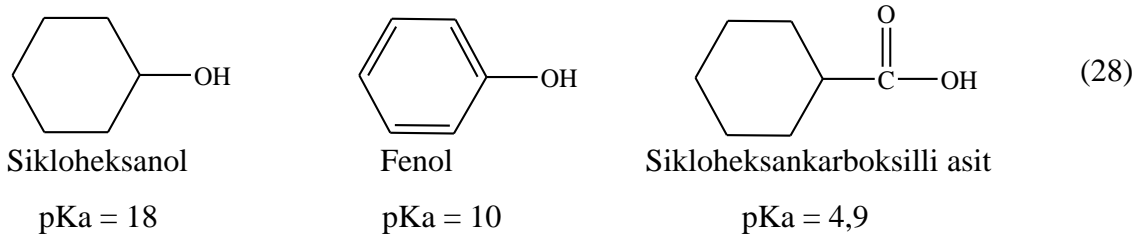
Bu olaya örnek olarak; Asetik asit- Kloroasetik asit karşılaştırmasını verebiliriz.



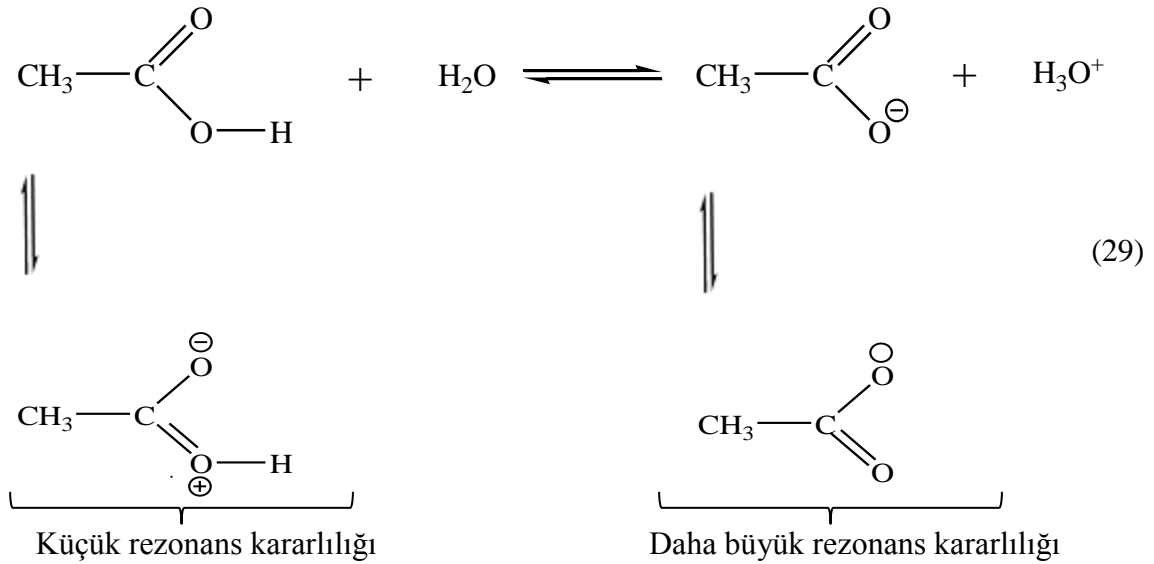
Kloroasetik asit, asetik asitten daha kuvvetlidir. Buna klor atomunun elektronegatifliği neden olmaktadır. İyonlaşmış asitte Cl atomunun elektron çekmesinden dolayı, karbonunda pozitif yük oluşur. Böylece komşu iki atomda pozitif yük oluşur ve yüksek enerjili bir yapı meydana gelir. Karboksil grubuna yakın konumdaki elektronegatif gruplar, asidin kararlılığını azaltarak ve anyonun kararlılığını artırarak, asitlik kuvvetini arttırırlar (Kalafatçıoğlu, 2005).

1.3.1.5. Rezonans Etkiler

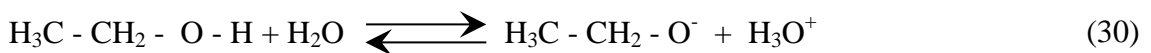
Rezonans teorisine göre; molekül ve iyonlar iki veya daha fazla eşdeğer rezonans yapıyla gösterilebildiklerinde rezonans kararlılığına sahiptirler (Solomons, 2002). Elektronları ya da elektriksel yükleri delokalize olmuş sistemler, lokalize sistemlere kıyasla daha karardır. π elektronlarının delokalize olması yapıyı karard kılar. Bir eşlenik bazdaki n elektronlarının delokalize olması o anyonun kararlılığını dolayısı ile asidin asitlik gücünü arttırır (Kalafatçıoğlu, 2005).



Bu üç örnek bileşikten en zayıf asit sikloheksanoldür. Çünkü eşlenik bazında negatif yük oksijen üzerinde lokalizedir. Oysa fenolün eşlenik bazı rezonans kararlıdır. Aromatik halkadaki bulutu negatif yükü delokalize eder ve böylece fenol sikloheksanolden daha asidik olur. Sikloheksankarboksilli asit bu üç asitten en asidik olanıdır. Sikloheksankarboksilli asidin eşlenik bazı da fenolün eşlenik bazı gibi rezonans kararlıdır. Ancak bu asidin eşlenik bazında negatif yük iki oksijen atomuna dağılmıştır. Oysa fenolün eşlenik bazında negatif yükü paylaşan atomlardan yalnızca biri oksijendir. Bundan dolayı sikloheksankarboksilli asit bu üç asit içinde en asidik olanıdır (Taşçı, 2004).

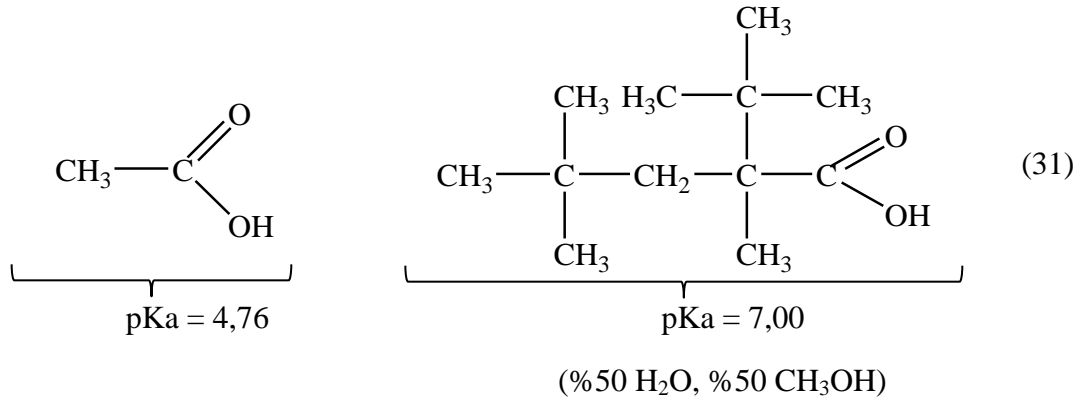


Alkol ve anyonu için rezonans kararlılığı söz konusu değildir (Solomons, 2002).



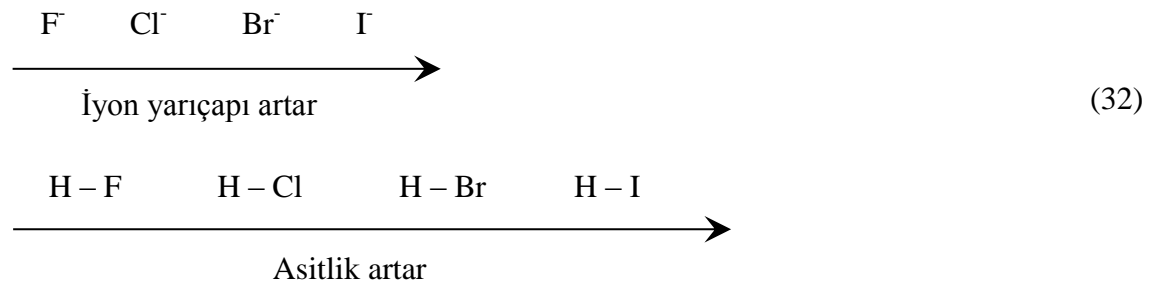
1.3.1.6. Sterik Etkiler

Küçük bir iyon olan protonun bir molekülden diğer bir moleküle bağlanması her iki molekül için de önemli bir hacim değişikliğine neden olmaz. Bu sayede de bir bileşiğin birincil, ikincil veya üçüncül olması durumundaki asitlik ve bazlıkları birbirine yakınlık gösterir. Bu nedenle asit-baz reaksiyonları sterik etkilere çok duyarlı değildir. Ancak sterik olarak çok engelli bir bileşikte, protonun ayrılması sonunda oluşan anyonun çözücü tarafından iyi solvatize edilmemesi dolaylı bir sterik engel oluşturarak asitlikte azalmaya neden olur (Taşçı, 2004).



1.3.1.7. Atom Yarıçapı

Hacmi büyük olan atomlar negatif yükü, küçük atomlara göre daha iyi dağıtırlar. Yük dağılımının fazla olması, anyonun daha kararlı olmasını sağlar. Büyüklüğün etkisi elektronegatiflikten daha önemlidir. Kükürt atomunun elektronegativitesi 2,5, oksijen atomunun elektronegativitesi 3,5 olmasına rağmen, H_2S sudan daha asidiktir (Badger, 1961). HF asidi de bu duruma örnek olarak verilebilir. F atomu en elektronegatif halojen olmasına rağmen diğer halojenli asitler içinde asitlik kuvveti en az olan HF asitidir (Kalafatçıoğlu, 2005).



1.3.2. Asitlik Sabitlerinin Kullanım Alanları

Asitlik sabitlerinin kullanıldıkları alanlar çok geniştir. Asitlik sabiti ile maddenin yapısı, özellikleri, tautomerik durumu, elde edilmesi, girebileceği reaksiyonlar arasında yakın bir ilgi vardır (Yarlıgan, 2001). Asitlik sabitleri, bir molekülde bulunan iyonlaşabilen grupların varlığını ve özelliklerini saptamak için kullanılmış, fakat bu uygulama modern yapı aydınlatma yöntemlerinin yaygın olarak kullanılmaya başlamasından sonra azalmıştır (Cookson, 1974).

Asitlik sabitleri, asidik veya bazik özelliğe sahip bir molekülün steriokimyasal yapısının belirlenmesinde ve konformasyonel analizlerinde kullanılmaktadır. Organik reaksiyonlarda elektrofilik veya nükleofilik atağın yönü ve kuvveti, ara ürünlerin kararlılığı ve gerekli aktivasyon enerjisinin büyüklüğü hakkında yararlı bilgiler verirler. Biyokimyada, enzimlerin aktif merkezlerinin saptanmasında kullanılan maddelerin proton alma ve verme sabitlerinden yararlanılmaktadır (Yarlıgan, 2001).

İlaç olarak kullanılan maddelerin çoğu zayıf asit veya baz özelliği göstermesi nedeni ile, ilaç molekülünün zarlardan geçişi, dağılımı, tasınım ve reseptörlere bağlanması olaylarında iyonlaşma sabitlerinin büyük etkisi vardır. Zayıf asit ve bazların sulu ortamda iyonize olma oranları, asitlik sabitleri ve ortamın pH'ı ile ilgilidir (Öğretir ve Demirayak, 1985; Öğretir, 1979).

1.4. Denge Sabiti (K) ve Standart Serbest Enerji Değişimi (ΔG°) Arasındaki İlişki

Genel olarak $\Delta G^\circ = -2.303 RT / \log K$ olarak ifade edilir. Burada R: gaz sabiti ($1,987 \text{ kcalK}^{-1} \times \text{mol}^{-1}$), T: sıcaklık birimi ($^\circ\text{K}$)'dir. Bu denklemde, $K > 1$ olduğu durumlarda, ΔG° 'nin negatif değer alması reaksiyon dengeye ulaşırken ürün oluşumunun daha baskın olduğunu ifade eder. Örneğin ΔG° 'si -3 kkal.mol^{-1} ise denge durumuna ulaşıldığında girenlerin hemen hemen tamamının ürünlere dönüştüğü anlaşılır (Kalafatçıoğlu, 2005).

$K < 1$ olduğu durumlarda ise; ΔG° 'nin pozitif değer alması denge durumuna ulaşıldığında girenlerin daha baskın olduğunu gösterir. Standart serbest enerji değişimi ΔG° iki değişkene bağlı olarak değişir:

$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T\Delta S^\circ \quad (31)$$

ΔH° : Entalpi değişimi

ΔS° : Entropi değişimi

ΔH° , reaksiyonda oluşan ve kopan bağların kuvvetliliğine bağlı olarak değişir. Sistemde oluşan bağlar, kopan bağlara göre daha kuvvetli ise, sistemin entalpi değişimi $\Delta H^\circ < 0$ olur ve sistem ekzotermik olarak ifade edilir. Tersini durumda ise ($\Delta H^\circ > 0$) sistem endotermik olarak ifade edilir. ΔH° değerinin negatif değer alması, ΔG° 'nin de negatif olmasına neden olur. Böylece, reaksiyon ürünler lehine baskın hale gelir. İki farklı asidin iyonlaşması düşünüldüğünde, ΔH° değeri daha negatif olanın, daha iyi iyonlaşmış olduğu ve daha kuvvetli asit olduğu anlaşılır (Kalafatçıoğlu, 2005).

ΔS° değeri ise sistemdeki düzensizlik değişimini ifade eder. ΔS° 'nin sıfırdan büyük olduğu durumda sistem düzenli bir yapıdan daha düzensiz bir yapıya geçmiş demektir. ΔS° 'in (+) işaretli olması ΔG° üzerinde daha da azaltıcı bir etki yapar. Reaksiyon enerji yönünden incelendiğinde ürünler lehine ilerlemektedir. Reaktif ve ürünlerin molekül sayılarının eşit olması durumunda sistemdeki entropi değişimi (ΔS°) sıfıra yakın değer alır. Bu durumda reaksiyonun hangi taraf lehine baskın olduğunu belirlemede entalpi değişiminin (ΔH°) büyüklüğü ve işareti önemli rol oynar. ΔH° eksi işaretli olursa ΔG° değeri de eksi değer alacağından reaksiyon ürünler lehine baskın, ΔH° değeri pozitif ve büyükse, standart serbest enerji (ΔG°) değeri de pozitif olacağından sistem girenler lehine baskın hale gelir (Demirtaş, 2003).

1.5. Kimyada Kullanılan Hesaplama Yöntemleri ve Bilgisayar Programları

Günümüzde yapılan son çalışmalar sonucunda deneyler, hesaplamalar ve bilgisayara dayalı hesaplamalar ile ilgili yeni fikirler ortaya çıkmış, kimya biliminde kuantum mekaniği ve bilgisayara dayalı teorik hesaplamalar arasında belirli bir sınır

çizgisi kalmamıştır. Bilgisayar biliminin gelişmesiyle birlikte, kuantum kimyasal hesaplamalardaki yetersizlik ve başarısızlık ortadan kalkmış, böylece bilgisayar hesaplamaları (computational chemistry) popüler hale gelmiştir (Schaefer, 2001).

Bilgisayar hesaplamaları sayesinde bazı deneysel hataların da önceden tahmin edilebileceğine ilişkin John Pople'nin bir tespiti bulunmaktadır. Pople'nin görüşüne göre öncelikle tahmini bir model oluşturulur. Tahmini modelin parametreleri gerçek modellerle karşılaştırılarak birbiri ile uyum içerisinde olup olmadığı araştırılır. Eğer uyum sağlanırsa tahmini modelin parametrelerine güven duyulabilir ve bu parametreler deneysel sonuçlan olmayan diğer moleküller için de kullanılabilir (Hargittai, 2001).

Matematiksel ve teorik hesaplamaların kimyadaki uygulamaları için pek çok farklı örnekten bahsedilebilir. Tüm bu örneklerin ışığında matematiksel hesaplamaların ve bilgisayar hesaplamalarının kimya bilimi ile ne kadar iç içe olduğu anlaşılmaktadır (Demirtaş, 2003).

1.5.1. Teorik Hesaplama Yöntemleri

Günümüzde kimyasal araştırmalarda moleküllerin yapısı, enerjisi ve diğer özelliklerin kuramsal incelenmesinde yaygın olarak kullanılan teorik hesaplama yöntemleri ile moleküllerin birçok özelliği deney yapmaya gerek kalmadan hesaplanmaya başlanmıştır. Deneysel verileri bilinen sistemlerle ilgili teorik inceleme ile teorik yaklaşımın eksikleri belirlenebilmekte ve daha iyi teorik yaklaşımlar türetilmektedir. Hatta bu yaklaşımlar ile şimdiye kadar elde edilmemiş veya edilememiş ve gerçek koşullarda var olamayacak bileşiklerle ilgili uygun sonuçlar alınabilmektedir (Kalafatçıoğlu, 2005).

Bir tek deneyle moleküler yapı, termodinamik değerler, dipol moment, iyonlaşma potansiyeli, elektron yükleri, elektron yoğunlukları, bağ uzunlukları vb. birçok bilgiyi elde etmek mümkün değildir. Fakat teorik hesaplama yöntemleri ile bu bilgilere çok daha kısa sürede ve az maliyetle ulaşmak mümkün olmaktadır. Bu tür verilerin deneysel yöntemler ile hesaplanmasında sonuçların güvenilirliği de göz önünde bulundurulursa,

yaygınlaşmakta olan bir çok hesaplama yöntemi sonuçlarının, deneysel sonuçlara göre ne kadar güvenilir olduğu görülebilir. Sonuçta yapılan en hassas çalışmalarda bile elde edilen değerlerin doğruluğu bu çalışmayı yürüten kişinin gözlemlerine ve titizliğine bağlı olacaktır. Ayrıca reaksiyon ortamında oluşabilecek yan ürünlerin varlığı da sonuçların güvenilirliğini azaltacaktır. Ancak tüm bu olumlu özelliklerine rağmen hiçbir zaman teorik hesaplamalar deneysel hesaplamaların yerini alamaz. Sonuçta önemli olan, elde edilen sonuçların güncel yaşamda kullanışlı olduğundan, her kimyager için en gerçek ve güvenilir sonuç deneysel veriler olacaktır. Bunun yanında teorik veriler her zaman deneysel çalışmayı yönlendirici ve aydınlatıcı olmakta ve birkaç istisna dışında teorik çalışma ile deneysel çalışma kıyaslanarak olarak kullanılmakta ve yorumlanmaktadır. Böylece deneysel çalışmaların veya bulguların güvenilirliği artmakta veya yöntem desteklenmektedir (Yarlıgan, 2001).

1.5.2. Bilgisayarla Kimya Hesaplamaları

Uzun yıllardır kimya eğitiminde moleküllerin yapılarını anlamak için çoğunlukla modeller kullanılmış ancak son zamanlarda bu modellerin yerini bilgisayarlarda kimyasal çizim programları almaya başlamıştır. Bununla beraber fiziğin temel kanunlarının bir kısmını veya tümünü esas alarak, kimyasal yapıları ve reaksiyonları taklit ederek bilgisayarla kimya hesaplamaları adı verilen bir yöntem geliştirilmiştir. Bilgisayarla kimya hesaplamaları, reaksiyonları ve bileşikleri deneysel olarak inceleme yerine kimyasal olayları bilgisayarla çalışma olanağı sağlar. Bu amaçla kullanılan bazı yöntemler sadece kararlı molekülleri değil, aynı zamanda kısa ömürlü, kararsız ara ürünleri ve hatta geçiş hallerini modellemekte kullanılır (Taşçı, 2004).

Bilgisayarla kimya hesaplamaları hem bağımsız bir araştırma alanı hem de deneysel çalışmalara çok önemli katkıları olan teorik kimya hesaplamaları sağlar. Bilgisayarla kimya hesaplamalarının moleküllerin yapılarını ve bunların reaktivitelerini inceleyen iki alanı vardır. Bunlar moleküler mekanik ve elektronik yapı kuramıdır (Yarlıgan, 2001).

1.5.2.1. Moleküler Mekanik

Moleküler mekanikte benzer moleküllerin özelliklerini ve yapısını tahmin etmek için klasik fiziğin kanunları kullanılır. Moleküler mekanik yöntemler HYPERCHEM, QUANTA, SYBYL, ALCHEM, MACMIMIC, PCMODEL, CHEM3D, MACROMODEL gibi birçok bilgisayar programında mevcuttur. Kullanılan bu moleküler mekanik yöntemlerden her biri kendine özgü güç alanı karakterize eder (Kalafatçıoğlu, 2005). Bir güç alanı oluşturan faktörler aşağıdaki gibidir:

1) Molekülü meydana getiren atomların yerleşimi ile bu molekülün potansiyel enerjisinin nasıl değiştiğini tanımlayan eşitlikler verir.

2) Kendine özgü kimyasal şartlar içinde bir elementin karakteristik özelliğini tanımlar, bir karbon atomuna, üç hidrojene bağlı bulunan bir karbon atomundan farklı işlem yapar. Atom tiplerini, hibritleşmeye, yüke ve atomun bağlı olduğu diğer atomların tipine bağlı olarak oluşturur.

3) Bir veya daha fazla parametre seti. Bu parametreler bağ uzunluğu, bağ açıları, enerji bileşenleri ile ilişkili eşitliklerde kullanılan kuvvet sabitlerini tayin eder (Yarlıgan, 2001) (Kalafatçıoğlu, 2005).

Moleküler mekanik hesaplamalar bir molekül sistemindeki elektronlar yerine çekirdekler arası etkileşimleri göz önüne alan hesaplamaları yapar. Bu programlar oldukça hızlıdır ve temel haldeki sistemin enerjisini tam olarak hesaplayabilirler (Demirtaş, 2003).

Moleküler mekanik hesaplamalar binlerce atomdan meydana gelmiş çok büyük sistemleri de inceleme imkanı verir. Enzimler gibi büyük yapıları sistemler için bile tepkime ısısı ve konformasyon kararlılıkları gibi nicelikler hesaplanabilir. Bununla beraber bu yöntemlerle elektronik yapıya bağlı olan özellikler yada elektronik yapı hakkında bilgi edinilememektedir. Bir tepkime sistemi modellenerek bağ oluşumu yada bağ parçalanmasını içeren işlemler yapılamaz (Yarlıgan, 2001).

1.5.2.2. Elektronik Yapı Yöntemleri

Elektronik yapı yöntemleri hesaplamalarda klasik fizikten daha çok kuantum mekaniğinin kanunlarını kullanır. Kuantum mekaniği, bir molekülün enerjisinin ve enerji ile ilişkili diğer özelliklerinin Schrödinger eşitliğinin ($\hat{H}\psi = E\psi$) çözülmesiyle elde edilebileceğini ifade eder. Elektronik yapı yöntemleri bu eşitliği çeşitli matematiksel yaklaşımlar ile çözümlenmeye çalışır. Bu amaçla yarı deneysel (semi-empirik) moleküler orbital yöntemler ve ab-initio moleküler orbital yöntemler kullanılır. Yöntemlerden ikisi de aynı temel hesaplamaları gerçekleştirir. Ancak her birinin iyi yada kötü olduğu durumlar mevcuttur (Yarlıgan, 2001).

Ab-initio yöntemlerde hesaplamalar deneysel parametreler kullanılmadan yapılır. Ab-initio teoride birçok basitleştirici yaklaşım ve ön kabuller vardır. Ab-initio moleküler orbital yöntemleri kuantum mekaniksel temellere dayanır ve bu yöntemler ile elektronik yapı ve buna bağlı özellikler hesaplanabilir (Foresman ve Frisch, 1996). Teoride bir tepkime sistemi tam olarak modellenebilir. Hesaplama süresi moleküler mekanik yöntemlere göre oldukça fazladır. Hesaplama süresini azaltmak için geometrilerde ve kullanılan parametrelerde bazı basitleştirmeler yapılabilir. Ancak bu basitleştirmeler kesin olmayan sonuçların elde edilmesine neden olur (Richards and Cooper, 1983).

Yarı deneysel moleküler orbital (SE-MO) yöntemleri ise moleküler mekanik yöntemler ile Ab-initio yöntemler arasında yer alır. Ab-initio moleküler orbital yöntemleri gibi SE-MO yöntemleri de kuantum mekaniksel esaslara dayanır. Bu yöntemlerde moleküler özelliklerin deneysel değerlerine yakın sonuçlar verecek parametreler mevcuttur. Bu parametreler referans bileşikler için gözlenebilir büyüklüklerin, hesaplanan değerlerle aynı olmasını sağlayacak özellikte seçilir (Kalafatçıoğlu, 2005).

Moleküler mekanikte olduğu gibi incelenen sistem için tüm parametrelerin uygun olması gerekir. SE-MO yöntemlerde etkileşim integralleri için yaklaşık fonksiyonların kullanılmasıyla hesaplama süresi Ab-initio yöntemlerin hesaplama süresiyle

karşılaştırılmayacak kadar azalır. Çok küçük sistemler için kullanılabilmesi gibi büyük kimyasal sistemler için de kullanılabilir. Hesaplamaları kolaylaştırmak için deneysel verilerden elde edilen parametreler SE-MO yöntemlerinde kullanılmaktadır. Bunlar Schrödinger eşitliğinin yaklaşık formunu çözmektedirler (Yarlıgan, 2001).

Değişik yaklaşımları anlayabilmek için SCF yönteminin açıklanması gerekir. Hückel kuramında, moleküler orbitaller ve atomik orbitallerin doğrusal bileşimi yazılır. Bu LCAO-SCF (Linear Combinations of Atomic Orbitals-Self Consistent Field) yaklaşımıdır. SCF yöntemi serbest tanecik yöntemini esas alır. Her elektronun, diğer elektronların ve çekirdeğin yarattığı bir elektrostatik alan içinde hareket ettiğini kabul eder. Genelde bir moleküler sistem için tam bir Hamiltonian (H), çekirdek ve elektronların orbital ve spin hareketinden oluşan manyetik momentler arasındaki etkileşimleri içerir (Demirtaş, 2003).

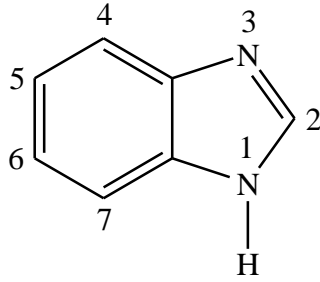
CNDO; LCAO-SCF moleküler orbital yaklaşımına dayanan ilk yarı deneysel moleküler orbital yöntemi. Daha sonraları INDO ve NDDO yaklaşımları geliştirilmiştir. 1975 yılına kadar birçok organik bileşiğin hesaplanmasında bu yöntemler kullanılmıştır. CNDO ve INDO yöntemleri moleküler özelliklerin hesaplanmasında oldukça zayıftır. Dewar ve arkadaşları bu yaklaşımlara dayanarak MINDO/3 adını verdikleri yeni bir yöntem geliştirmişlerdir. Sadece on element için geliştirilen bu yöntem C, H, N ve O içeren moleküllerin oluşum ısılarında, bağ uzunluklarında ve iyonlaşma potansiyellerinde uygun sonuçlar vermesine rağmen yine de bazı yetersizlikleri vardı. Diatomik parametrelerin kullanılması nedeniyle diğer elementler için bu yöntemi geliştirmek oldukça zordu. Bu nedenle Dewar ve arkadaşları tarafından NDDO yaklaşımına dayanan MNDO yöntemi geliştirildi. Bu yöntemle C, H, N ve O içeren moleküllerin hesaplanan çeşitli değerlerindeki ortalama hatalar azaldı. Bu yöntemlerde sadece atomik parametre kullanıldığından yöntemin diğer elementler için de gelişimini sağlamak oldukça kolaydı. Bundan sonraki sekiz yıl içinde C, H, N ve O elementlerine ek olarak 16 element için de bu yöntem kullanılabilir hale geldi (Taşçı, 2004).

Austin Model 1 adı verilen AM1 yöntemi tarafından MNDO yönteminin geliştirilmiş halidir. Bu yöntem esas olarak moleküldeki büyük itmeleri ortadan

kaldırmak için MNDO yönteminin çekirdek-çekirdek itme fonksiyonlarında küçük bir değişiklik yapılmasıyla oluşturulmuştur. MNDO-PM olarak adlandırılan ve MNDO'nun üçüncü parametrizasyonu olduğunu göstermek için PM3 (parametrik metot 3) şeklinde gösterilen program ise en son geliştirilen yöntemlerden birisidir. Çok sayıda element için parametreleri aynı anda optimize edebilen bir yaklaşımdır. MINDO/3, MNDO, AM1 ve PM3 gibi yarı deneysel moleküler orbital yöntemleri deneysel oluşum ısısını (heat of formation) ve deneysel olarak gözlenen geometrileri 25°C'de oluşturmak üzere optimize edilmişlerdir (Yarlıgan, 2001).

1.6. Benzimidazoller

Benzimidazol, benzen ve imidazol halkalarından oluşmuş bir halka sistemidir. Bu halka sisteminde numaralandırmaya, üzerinde hidrojen atomu taşıyan ve 'imino azotu' olarak adlandırılan azot atomundan başlanır. Bu azot 'pirol azotu' olarak da adlandırılır. Numaralandırmaya tersiyer yapıdaki 'piridin azotu' ya da 'tersiyer azot' olarak adlandırılan azot atomuna doğru devam edilmektedir (Preston, 1974).

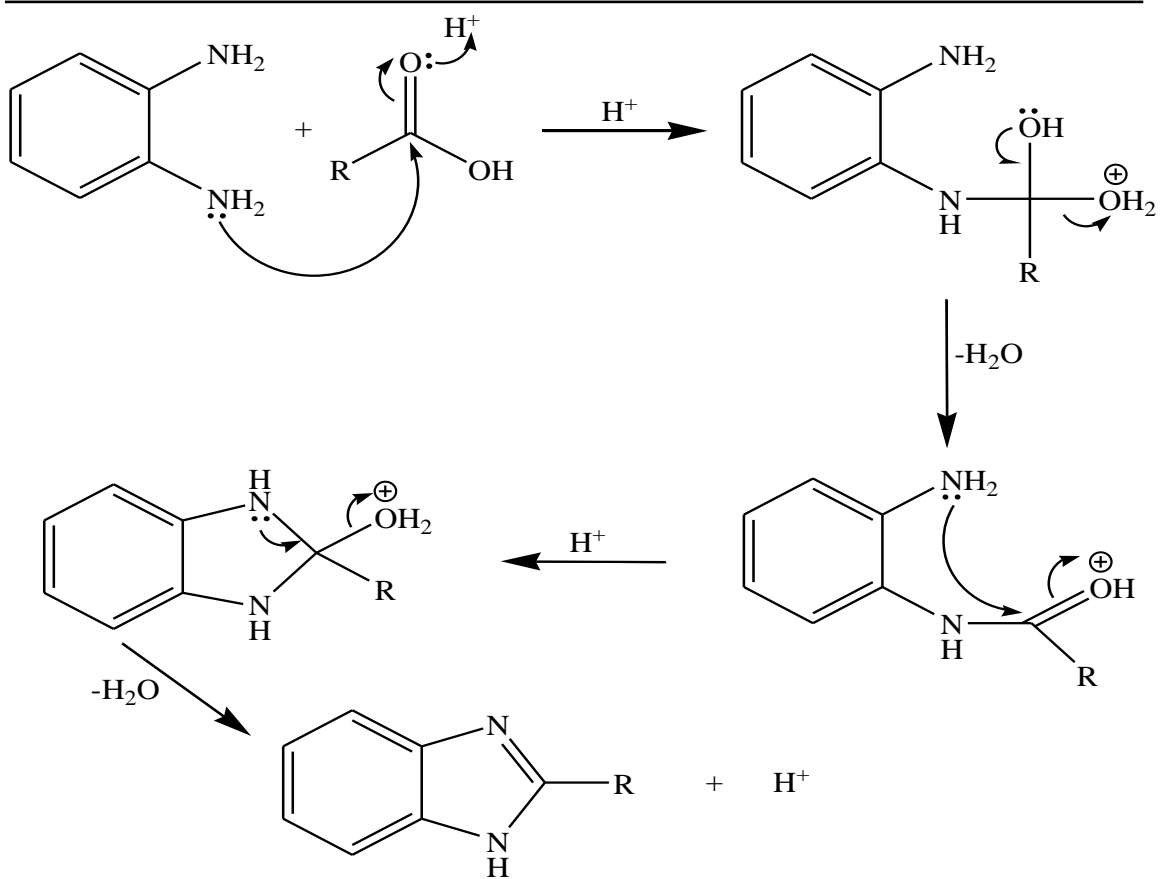


Şekil 1. Benzimidazol halkasının numaralandırılması

Benzimidazollerin imino hidrojeninin zayıf bazik özelliğinin yanı sıra, zayıf asit özelliğe de sahip 'amfoter' karakterde bileşiklerdir (Vogel et al. 1996). Bazik karakterleri, asit karakterlerinden daha fazla olan benzimidazoller, bazik özelliklerini, üzerlerindeki ortaklanmamış elektron çiftini reaksiyona girdikleri atom ya da gruba verebilme özelliğinde olan tersiyer azot atomu nedeni ile gösterirler (Brown 2008). Asit özelliklerini, taşıdıkları imino hidrojenini ortama proton halinde vererek gösteren

benzimidazoller, elektron çekici gruplar ile süstitüe edildiklerinde asit özelliklerini artırır (Wang 2010).

Benzimidazol, vitamin B12 ve birçok doğal bileşiğin ön bileşeni olarak çok geniş farmakolojik özellikler gösterir. Örneğin, anti-tümör etki (Ram et al. 1992) ve nükleik asit sentezinin inhibisyonu (Carter 1967). Bazı anti-kanser ilaçlar, örneğin imet 3393 (cytostasan) yapısı benzimidazol halkaya sahiptir (Preston 1974). Bazı benzimidazol türevlerinin metal kompleksleri birçok biyolojik molekül için model bileşik olarak kullanılır. Bunlara metalloenzimler (Brown et al. 1984) ve serine proteases (Jones and Taylor 1977) örnek verilebilir. Benzimidazol türevleri aynı zamanda anti-viral ve anti-fungal etki göstermektedir (Alessio et al. 1997).



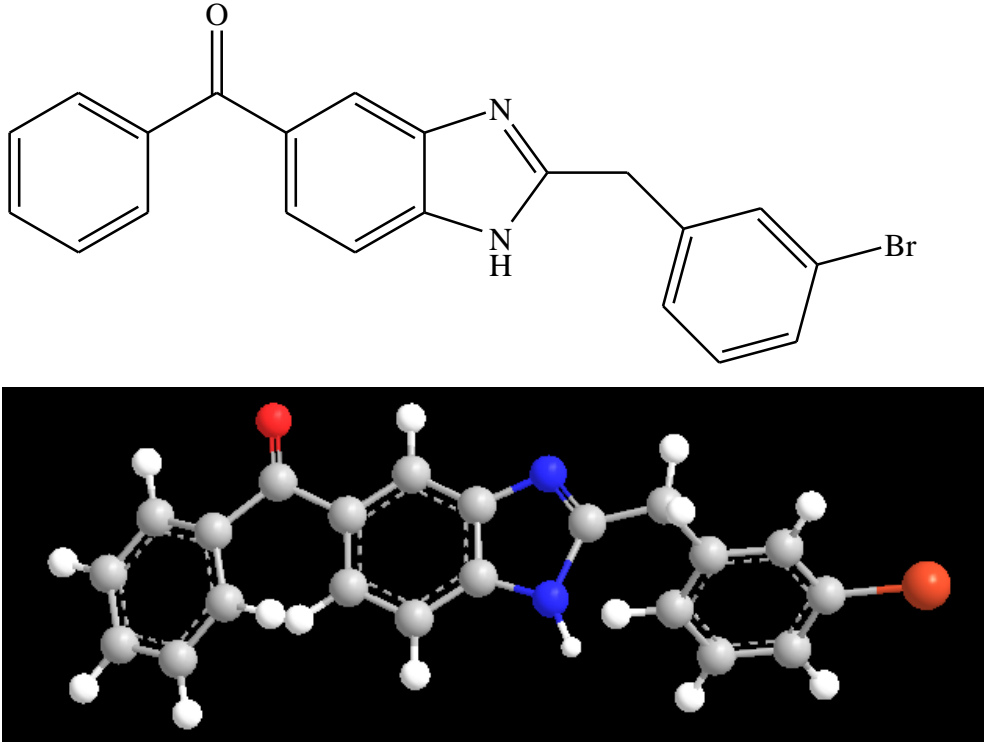
Şekil 2. Benzimidazol oluşum mekanizması

Benzimidazoller, genellikle kristal yapıda, yüksek erime ve kaynama noktasına sahip, polar çözücüler içinde çözünen, apolar çözücülerde çözünürlükleri sınırlı olan katı bileşiklerdir. Benzimidazoller, bir serbest imino hidrojeni bulunduran tautomerik sistemlerdir. İmino hidrojenindeki süstitasyon erime ve kaynama noktasının düşmesine neden olur. Çünkü N-süstitüe benzimidazoller asosiyasyon yapamazlar. Benzimidazoller ile imidazollerin pek çok açıdan benzerliği vardır. Her iki yapıda asidik ve bazik karakterlere sahiptir. Benzimidazoldeki -NH- grubu çok zayıf bazik ve görel olarak güçlü asidik özellik gösterir. Çoğu benzimidazoller sulu asit ve sulu baz çözeltilerinde çözünürler. Benzimidazoller, imidazollere göre suda çok az çözünürler. Fakat bazı örneklerde görüleceği gibi sıcak suda kristallendirilebilirler (Tutkun, 2013).

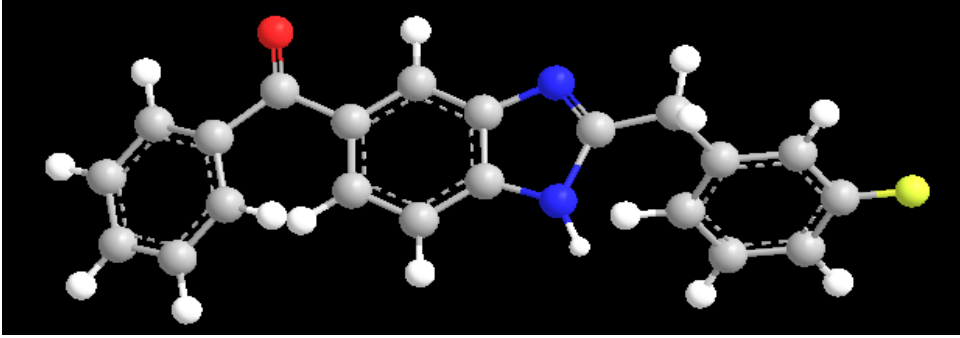
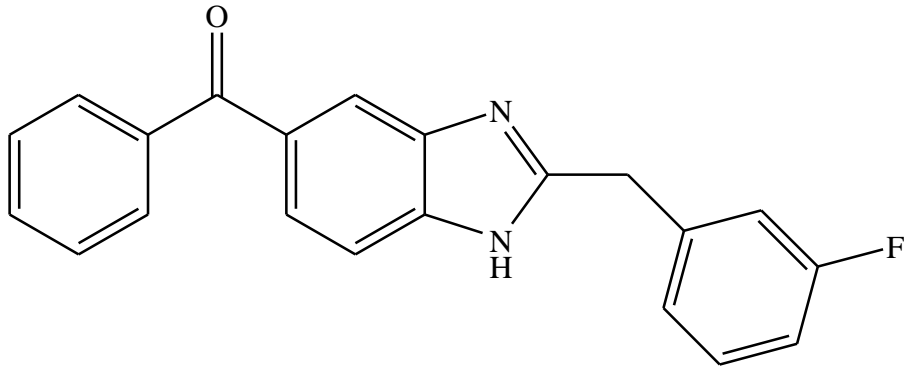
2. YAPILAN ÇALIŞMALAR

2.1. Çalışılan Moleküller

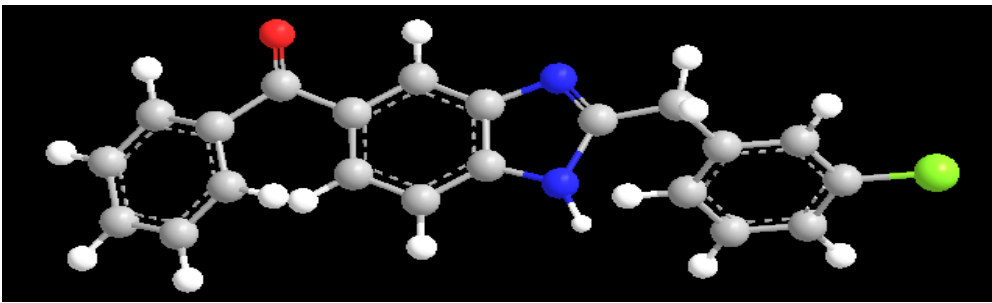
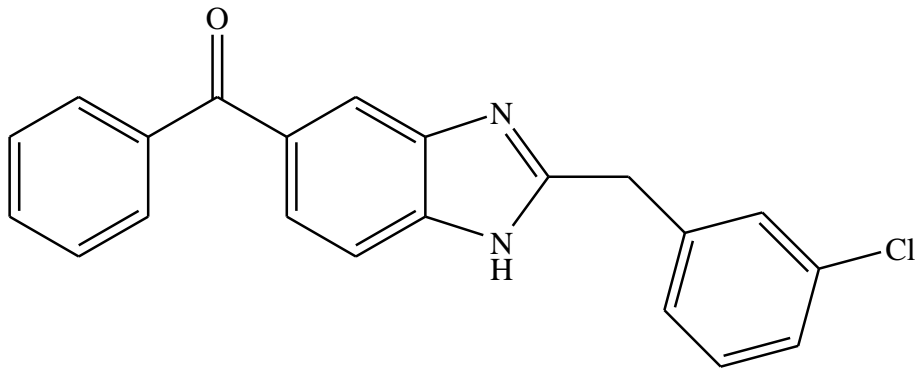
Bu yüksek lisans çalışmamızda dört adet (Fenil[2-(3-bromobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (1), Fenil[2-(3-florobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (2), Fenil[2-(3-klorobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (3) ve Fenil[2-(3-metilbenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (4)] benzimidazol türevi bileşik kullanılmıştır. Bu bileşiklerin molekül formülleri aşağıda Şekil 3-6'da verilmiştir.



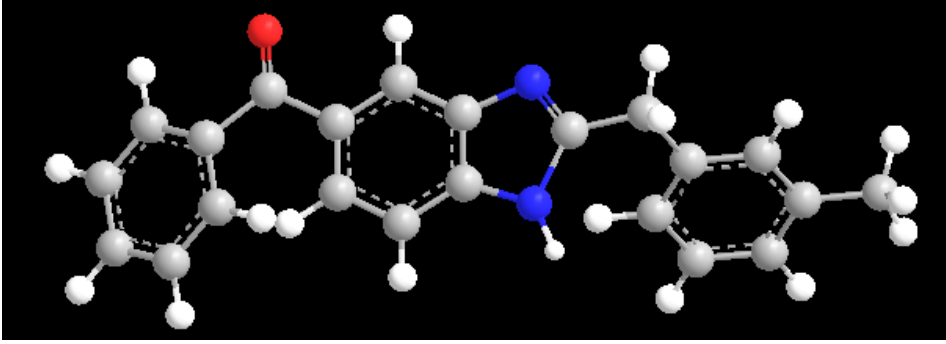
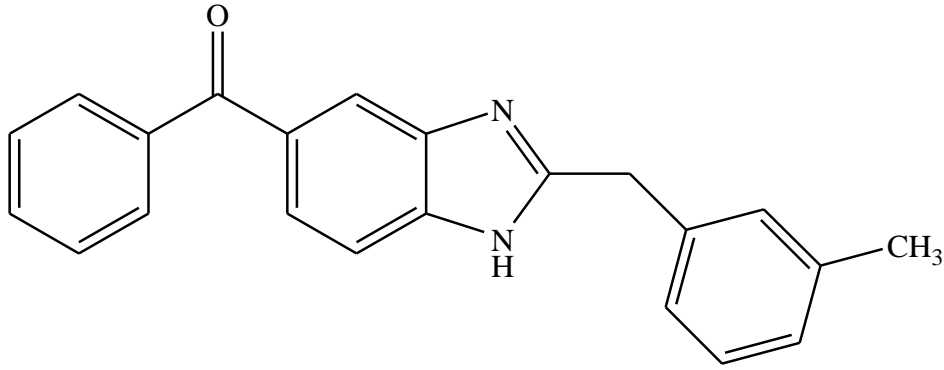
Şekil 3. Çalışılan 1. Molekül:
Fenil[2-(3-bromobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon



Şekil 4. Çalışılan 2. Molekül:
Fenil[2-(3-florobenzil)-1H-1,3-benzimidazol-5-il]metanon



Şekil 5. Çalışılan 3. Molekül:
Fenil[2-(3-klorobenzil)-1H-1,3-benzimidazol-5-il]metanon



Şekil 6. Çalışılan 4. Molekül:
Fenil[2-(3-metilbenzil)-1H-1,3-benzimidazol-5-il]metanon

Bu dört farklı benzimidazol türevi bileşiğin pKa değerleri teorik olarak MOPAC2012 bilgisayar programı ile tayin edildi. pKa değerleri hesaplanan moleküller, yukarıda açık yapıları ile birlikte verilmiştir. Bu moleküller Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi Fen – Edebiyat Fakültesi Organik Kimya Araştırma Laboratuvarı'nda sentezlenmiştir.

2.2. Materyal ve Metot

2.2.1. Hesaplama Metodu

Bilgisayar ile kimyasal hesaplamalarında kullanılan iki yöntem vardır. Bunlar moleküler mekanik ve elektronik yapı kuramıdır. Elektronik yapı kuramında yarı deneysel (semi-ampirik) ve ab-initio yöntemleri yer almaktadır. Yapılan temel hesaplamalar her iki yöntemde de aynıdır. Molekülün enerjisi hesaplanıp optimize edildikten, sonra atomların titreşim frekansları hesaplanır (Açıkkalp ve ark., 2011;

Özöğüt ve ark., 2011). Yarı-deneysel yöntem hesaplamalarında MOPAC2012 programı kullanılmıştır. Hesaplamalar oda sıcaklığında ($T = 298^{\circ}\text{K}$) ve su, etanol, metanol, *n*-propanol, *izo*-propanol, *n*-butanol, *tert*-butanol, etilen glikol, *N,N*-dimetilformamit (DMF), dimetil sülfoksit (DMSO) ve asetonitril fazında yapılmıştır.

2.2.2. Geometri Optimizasyon

Molekülde hesaplamalar; molekülü tanımlayan bağ uzunlukları, bağ açıları gibi koordinatlarla tanımlanır ve enerjisi minimuma indirilir. Enerji değeri sabit olana kadar geometrisi değiştirilir. Gradient norm değeri 0 olduğunda uygun kabul edilir. Gradient norm değeri atomların konumlarının bir fonksiyonu olduğu molekülün enerjisindeki değişimin hızıdır. Gradient normun beklenen değeri 0,4'dür. Bu civardaki değerlerde molekülün enerjisinin minimum olduğu söylenebilir (Açikkalp ve ark., 2011; Özöğüt ve ark., 2011).

2.3. Yarı Deneysel Yöntemlerle Asitlik Sabitlerinin Bulunması

Zayıf bir asidin (HA) herhangi bir çözücü (S) ortamında iyonlaşması



reaksiyon denklemi ile ifade edilebilir. Bu çalışmamızda kullandığımız MOPAC2012 bilgisayar programı ile yukarıda ki reaksiyonda yer alan tüm türlerin (HA, S, SH^+ ve A^-) entalpi değişimleri (ΔH°) ve entropi değişimleri (ΔS°) 298°K 'de birincil işlem olarak hesaplandı. Hesaplanan bu değerler kullanılarak;

$$\Delta G^{\circ} = \Delta H^{\circ} - T \cdot \Delta S^{\circ} \quad (33)$$

formülü yardımıyla her bir türün serbest enerji değişimi (ΔG°) hesaplandı. Hesaplanan bu serbest enerji değişimleri kullanılarak;

$$\sum \Delta G^{\circ} = [\Delta G^{\circ}_{(\text{SH}^+)} + [\Delta G^{\circ}_{(\text{A}^-)}] - [\Delta G^{\circ}_{(\text{HA})} + [\Delta G^{\circ}_{(\text{S})}] \quad (34)$$

reaksiyonun toplam serbest enerji deęiřimi hesaplanmıřtır. Hesaplanan bu son toplam serbest enerji deęiřimi kullanılarak ařaęıda verilen;

$$pK_a = \sum \Delta G^\circ / 2,303 \cdot R \cdot T \quad (35)$$

formül yardımıyla her bir molekül sekiz farklı yarı deneysel kuantum kimyasal metotla (AM1, MNDO, MNDOD, PM3, PM6, PM6-DH2, PM7 ve RM1) ve onbir farklı çözücü (su, etanol, metanol, *n*-propanol, *izo*-propanol, *n*-butanol, *tert*-butanol, etilen glikol, *N,N*-dimetilformamit (DMF), dimetil sülfoksit (DMSO) ve asetonytril) fazında pK_a deęerleri bu yöntem üzerinden hesaplanmıřtır.

3. BULGULAR

Çalışılan on bir farklı çözücünün (su, etanol, metanol, *n*-propanol, *izo*-propanol, *n*-butanol, *tert*-butanol, etilen glikol, *N,N*-dimetilformamit (DMF), dimetil sülfoksit (DMSO) ve asetonitril) sekiz farklı yarı deneysel kuantum kimyasal metotla (AM1, MNDO, MNDOD, PM3, PM6, PM6-DH2, PM7 ve RM1) hesaplanan $\Delta H_{(S)}$ (kcal/mol), $\Delta H_{(SH^+)}$ (kcal/mol), $\Delta S_{(S)}$ (cal/K.mol), $\Delta S_{(SH^+)}$ (cal/K.mol), $\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol), $\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol) ve $\sum \Delta G$ (kcal/K.mol) değerleri Tablo 3-13'de verilmiştir. Aynı türden hesaplamalar çalışılan her bir benzimidazol türevi bileşik içinde yapılmıştır. Fenil[2-(3-bromobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (1. Molekül) için hesaplanan değerler Tablo 14-21'da, fenil[2-(3-florobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (2. Molekül) için Tablo 22-29'de, fenil[2-(3-klorobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (3. Molekül) için Tablo 30-37'de ve fenil[2-(3-metilbenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (4. Molekül) için ise Tablo 38-45 arasında verilmiştir.

Tablo 3. Su ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	MODEL	$\Delta H_{(S)}$ (kcal/ mol)	$\Delta H_{(SH^+)}$ (kcal/ mol)	$\Delta S_{(S)}$ (cal/ K.mol)	$\Delta S_{(SH^+)}$ (cal/ K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/ K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/ K.mol)
Su	AM1	-5,9132	14,3175	4,4996	4,6102	-7,2541	12,9437
	MNDO	-6,0825	13,3882	4,4855	4,6016	-7,4192	12,0169
	MNDOD	-6,0816	13,3896	4,4856	4,8192	-7,4183	11,9534
	PM3	-5,3326	15,8748	4,4899	4,5943	-6,6706	14,5057
	PM6	-5,4197	14,0801	4,4907	4,6345	-6,7580	12,6990
	PM6-DH2	-5,4197	14,0800	4,4907	4,6345	-6,7580	12,6989
	PM7	-5,7684	14,5755	4,4961	4,8558	-7,1083	13,1285
	RM1	-5,7739	14,0150	4,4967	4,6056	-7,1139	12,6426

Tablo 4. Etanol ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	MODEL	$\Delta H_{(S)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(SH^+)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(S)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(SH^+)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)
Etanol	AM1	-6,2576	12,5488	6,4569	6,8237	-8,1817	10,5153
	MNDO	-6,2906	12,6507	6,3959	6,4691	-8,1966	10,7229
	MNDOD	-6,2867	12,6505	6,5047	6,6420	-8,2251	10,6712
	PM3	-5,6775	14,3615	6,4798	6,5621	-7,6086	12,4060
	PM6	-5,4780	12,2874	6,7353	7,1179	-7,4851	10,1662
	PM6-DH2	-5,4920	12,2668	7,0098	6,9303	-7,5809	10,2016
	PM7	-5,5758	12,7453	6,7183	7,0461	-7,5779	10,6456
	RM1	-5,5694	13,0857	6,5475	6,6668	-7,5206	11,0990

Tablo 5. Metanol ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	MODEL	$\Delta H_{(S)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(SH^+)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(S)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(SH^+)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)
Metanol	AM1	-5,6939	13,7982	5,6815	5,7842	-7,3870	12,0746
	MNDO	-5,7264	13,5061	5,7111	5,9457	-7,4283	11,7343
	MNDOD	-5,7239	13,4604	5,6969	5,8303	-7,4216	11,7230
	PM3	-5,1794	21,9032	5,7008	5,8570	-6,8782	20,1578
	PM6	-4,8249	13,7419	5,7335	5,7961	-6,5335	12,0146
	PM6-DH2	-4,8259	13,7390	5,7334	5,7917	-6,5345	12,0130
	PM7	-4,8840	14,3945	5,7287	5,9106	-6,5912	12,6331
	RM1	-5,0027	14,4607	5,6810	5,8627	-6,6956	12,7136

Tablo 6. N-Propanol ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	MODEL	$\Delta H_{(S)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(SH^+)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(S)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(SH^+)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)
N-Propanol	AM1	-6,9444	11,8377	7,3627	7,4722	-9,1385	9,6109
	MNDO	-6,7641	12,0906	7,3053	7,4026	-8,9411	9,8846
	MNDOD	-6,7588	12,0964	7,3053	7,4026	-8,9357	9,8904
	PM3	-6,2121	13,8501	7,3781	7,4759	-8,4107	11,6223
	PM6	-5,9998	11,7179	7,6022	7,7314	-8,2652	9,4139
	PM6-DH2	-6,0341	11,6791	7,6032	7,7356	-8,2999	9,3739
	PM7	-6,0984	12,2622	7,5203	7,7076	-8,3394	9,9653
	RM1	-6,0828	12,5668	7,2825	7,3759	-8,2530	10,3688

Tablo 7. İzo-Propanol ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	MODEL	$\Delta H_{(s)}$ (kcal/ mol)	$\Delta H_{(SH^+)}$ (kcal/ /mol)	$\Delta S_{(s)}$ (cal/ K.mol)	$\Delta S_{(SH^+)}$ (cal/ K.mol)	$\Delta G_{(s)}$ (kcal/ K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/ K.mol)
İzo-Propanol	AM1	-6,7954	11,4692	7,2865	7,4236	-8,9667	9,2569
	MNDO	-6,5337	12,1412	7,2021	7,2654	-8,6799	9,9761
	MNDOD	-6,5283	12,1470	7,2022	7,2656	-8,6745	9,9818
	PM3	-6,3867	13,0653	7,2453	7,4126	-8,5458	10,8563
	PM6	-6,4817	10,4579	7,5498	7,5488	-8,7315	8,2085
	PM6-DH2	-6,5194	10,4117	7,5528	7,5556	-8,7701	8,1601
	PM7	-6,5221	11,0397	7,4518	7,6435	-8,7428	8,7619
	RM1	-6,4672	11,6556	7,1748	7,2761	-8,6054	9,4874

Tablo 8. N-Butanol ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	MODEL	$\Delta H_{(s)}$ (kcal/ mol)	$\Delta H_{(SH^+)}$ (kcal/ mol)	$\Delta S_{(s)}$ (cal/ K.mol)	$\Delta S_{(SH^+)}$ (cal/ K.mol)	$\Delta G_{(s)}$ (kcal/ K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/ K.mol)
N-Butanol	AM1	-7,6232	11,1136	8,1766	8,2433	-10,0598	8,6572
	MNDO	-7,2363	11,5874	8,1003	8,1637	-9,6502	9,1546
	MNDOD	-7,2295	11,5946	8,1000	8,1642	-9,6433	9,1616
	PM3	-6,7499	13,2769	8,1386	8,2420	-9,1752	10,8208
	PM6	-6,4816	11,1619	8,4479	8,5863	-8,9991	8,6033
	PM6-DH2	-6,5388	11,0994	8,4521	8,5934	-9,0575	8,5385
	PM7	-6,5855	11,6959	8,3289	8,6328	-9,0675	9,1233
	RM1	-6,5763	12,0306	8,0350	8,1297	-8,9707	9,6079

Tablo 9. Tert-Butanol ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	MODEL	$\Delta H_{(s)}$ (kcal/ mol)	$\Delta H_{(SH^+)}$ (kcal/ mol)	$\Delta S_{(s)}$ (cal/ K.mol)	$\Delta S_{(SH^+)}$ (cal/ K.mol)	$\Delta G_{(s)}$ (kcal/ K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/ /K.mol)
Tert-Butanol	AM1	-7,1522	10,7519	7,8942	8,1827	-9,5047	8,3134
	MNDO	-6,4214	12,0291	7,7545	7,8012	-8,7323	9,7044
	MNDOD	-6,4145	12,0363	7,7548	7,8016	-8,7254	9,7114
	PM3	-7,1193	11,9709	7,8281	8,2014	-9,4522	9,5269
	PM6	-7,4984	8,9193	8,0539	8,4187	-9,8985	6,4106
	PM6-DH2	-7,5725	8,8310	8,0520	8,4270	-9,9720	6,3197
	PM7	-7,4601	9,1517	7,9842	9,4866	-9,8395	6,3246
	RM1	-7,5199	10,3342	7,7196	7,8918	-9,8204	7,9824

Tablo 10. Etilen Glikol ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	MODEL	$\Delta H_{(S)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(SH^+)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(S)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(SH^+)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)
Etilen Glikol	AM1	-10,7332	8,5246	7,2826	7,4312	-12,9034	6,3102
	MNDO	-10,5943	8,5592	7,0679	7,4168	-12,7005	6,3491
	MNDOD	-10,5892	8,5648	7,0680	7,4170	-12,6955	6,3546
	PM3	-9,5069	10,8587	7,2983	7,5591	-11,6818	8,6062
	PM6	-9,2373	9,2372	7,7367	7,5156	-11,5429	6,9976
	PM6-DH2	-9,2624	9,2081	7,7370	7,5099	-11,5680	6,9702
	PM7	-9,2776	9,8442	7,6510	7,8048	-11,5576	7,5183
	RM1	-9,3825	9,6687	7,1328	7,5600	-11,5080	7,4158

Tablo 11. DMF ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	MODEL	$\Delta H_{(S)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(SH^+)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(S)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(SH^+)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)
DMF	AM1	-3,6879	14,0588	8,0304	7,8193	-6,0810	11,7287
	MNDO	-3,7390	14,9451	8,1791	7,5399	-6,1764	12,6983
	MNDOD	-3,7321	14,5858	8,3453	7,6688	-6,2190	12,3004
	PM3	-4,4582	14,1739	7,8167	7,7933	-6,7876	11,8514
	PM6	-4,0822	14,2031	8,0644	8,6321	-6,4854	11,6308
	PM6-DH2	-4,1406	14,2116	8,1158	8,5099	-6,5592	11,6757
	PM7	-4,3784	12,9635	7,9778	8,3616	-6,7559	10,4717
	RM1	-4,1435	11,0532	7,9633	8,1560	-6,5165	8,6228

Tablo 12. DMSO ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	MODEL	$\Delta H_{(S)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(SH^+)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(S)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(SH^+)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)
DMSO	AM1	-3,9330	10,8449	7,6987	7,9142	-6,2272	8,4864
	MNDO	0,3899	14,2972	7,4405	7,5961	-1,8273	12,0336
	MNDOD	-3,3506	12,5200	7,3383	7,5544	-5,5374	10,2688
	PM3	-3,8765	11,2737	7,6832	7,9773	-6,1661	8,8965
	PM6	-3,2701	11,3777	7,7737	8,3209	-5,5867	8,8981
	PM6-DH2	-3,3021	11,3336	7,7761	8,1538	-5,6193	8,9038
	PM7	-3,7518	11,1081	7,7773	8,1515	-6,0694	8,6790
	RM1	-4,1245	11,0027	7,6170	7,8013	-6,3944	8,6779

Tablo 13. Asetonitril ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deęerleri

ÇÖZÜCÜ	MODEL	$\Delta H_{(S)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(SH^+)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(S)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(SH^+)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)
Asetonitril	AM1	1,9210	19,5689	5,9548	5,8591	0,1464	17,8229
	MNDO	1,9162	20,7315	5,9476	5,8568	0,1438	18,9862
	MNDOD	1,9195	20,7353	5,9477	5,8569	0,1470	18,9900
	PM3	2,3209	19,7427	5,9737	5,8502	0,5408	17,9994
	PM6	2,0470	19,0507	5,9654	5,8706	0,2693	17,3012
	PM6-DH2	2,0354	19,0340	5,9651	5,8706	0,2578	17,2845
	PM7	1,8173	18,9273	5,9591	5,8563	0,0414	17,1821
	RM1	2,1717	18,9071	5,9552	5,8405	0,3971	17,1666

Tablo 14. 1. Molekölün AM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deęerleri

MOLEKÖL : 1									
YÖNTEM : AM1									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	8,8954	5,9012	15,1146	15,1477	4,3912	1,3872	-7,2541	12,9437	17,1937
Etanol	8,7175	5,7832	14,8123	14,8447	4,3034	1,3595	-8,1817	10,5153	15,7530
Metanol	7,8280	5,1931	13,3008	13,3300	3,8644	1,2208	-7,3870	12,0746	16,8180
N-Propanol	8,5396	5,6652	14,5100	14,5418	4,2156	1,3317	-9,1385	9,6109	15,8655
2-Propanol	8,3617	5,5471	14,2077	14,2388	4,1278	1,3039	-8,9667	9,2569	15,3997
N-Butanol	8,1838	5,4291	13,9054	13,9359	4,0400	1,2762	-10,0598	8,6572	15,9532
Tert-Butanol	8,0059	5,3111	13,6031	13,6329	3,9522	1,2485	-9,5047	8,3134	15,1144
Etilen Glikol	7,6500	5,0750	12,9986	13,0270	3,7764	1,1930	-12,9034	6,3102	16,6301
DMF	7,1163	4,7210	12,0917	12,1182	3,5130	1,1098	-6,0810	11,7287	15,4065
DMSO	7,4721	4,9570	12,6963	12,7241	3,6886	1,1652	-6,2272	8,4864	12,1902
Asetonitril	7,2942	4,8390	12,3940	12,4211	3,6008	1,1375	0,1464	17,8229	15,2132

Tablo 15. 1. Molekölün MNDO yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deęerleri

MOLEKÖL : 1.									
YÖNTEM : MNDO									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	6,0859	1,9111	15,3711	15,9645	1,5053	-2,8463	-7,4192	12,0169	15,0845
Etanol	5,9642	1,8729	15,0637	15,6452	1,4752	-2,7894	-8,1966	10,7229	14,6549
Metanol	5,3556	1,6818	13,5266	14,0488	1,3247	-2,5047	-7,4283	11,7343	15,3332
N-Propanol	5,8425	1,8347	14,7563	15,3259	1,4451	-2,7324	-8,9411	9,8846	14,6482
2-Propanol	5,7207	1,7964	14,4488	15,0066	1,4150	-2,6756	-8,6799	9,9761	14,5655
N-Butanol	5,5990	1,7582	14,1414	14,6873	1,3849	-2,6186	-9,6502	9,1546	14,8013
Tert-Butanol	5,4773	1,7200	13,8340	14,3681	1,3548	-2,5617	-8,7323	9,7044	14,5202
Etilen Glikol	5,2339	1,6435	13,2191	13,7295	1,2946	-2,4479	-12,7005	6,3491	15,3071
DMF	4,8687	1,5289	12,2969	12,7716	1,2042	-2,2770	-6,1764	12,6983	15,3934
DMSO	5,1122	1,6053	12,9117	13,4102	1,2645	-2,3909	-1,8273	12,0336	10,2054
Asetonitril	4,9904	1,5671	12,6043	13,0909	1,2343	-2,3340	0,1438	18,9862	15,2741

Tablo 16. 1. Molekülün MNDOD yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 1.									
YÖNTEM : MNDOD									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	6,0563	3,4591	15,4765	15,5431	1,4443	-1,1727	-7,4183	11,9534	16,7547
Etanol	5,9352	3,3899	15,1670	15,2322	1,4154	-1,1493	-8,2251	10,6712	16,3316
Metanol	5,3295	3,0440	13,6193	13,6779	1,2709	-1,0320	-7,4216	11,7230	16,8416
N-Propanol	5,8140	3,3207	14,8574	14,9214	1,3865	-1,1259	-8,9357	9,8904	16,3137
2-Propanol	5,6929	3,2516	14,5479	14,6105	1,3576	-1,1023	-8,6745	9,9818	16,1963
N-Butanol	5,5718	3,1824	14,2384	14,2997	1,3288	-1,0789	-9,6433	9,1616	16,3972
Tert-Butanol	5,4507	3,1132	13,9289	13,9888	1,2999	-1,0555	-8,7254	9,7114	16,0814
Etilen Glikol	5,2084	2,9748	13,3098	13,3671	1,2421	-1,0086	-12,6955	6,3546	16,7994
DMF	4,8450	2,7673	12,3812	12,4345	1,1554	-0,9382	-6,2190	12,3004	16,4258
DMSO	5,0873	2,9056	13,0003	13,0562	1,2132	-0,9851	-5,5374	10,2688	13,6078
Asetonitril	4,9662	2,8365	12,6907	12,7453	1,1844	-0,9616	0,1470	18,9900	16,6970

Tablo 17. 1. Molekölün PM3 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deęerleri

MOLEKÜL : 1.									
YÖNTEM : PM3									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	6,7151	3,6893	16,4620	15,8059	1,8094	-1,0209	-6,6706	14,5057	18,3460
Etanol	6,5808	3,6155	16,1328	15,4898	1,7732	-1,0005	-7,6086	12,4060	17,2409
Metanol	5,9093	3,2466	14,4866	13,9092	1,5923	-0,8983	-6,8782	20,1578	24,5454
N-Propanol	6,4465	3,5417	15,8035	15,1737	1,7371	-0,9801	-8,4107	11,6223	17,3159
2-Propanol	6,3122	3,4679	15,4743	14,8575	1,7009	-0,9596	-8,5458	10,8563	16,7416
N-Butanol	6,1779	3,3942	15,1450	14,5414	1,6647	-0,9391	-9,1752	10,8208	17,3922
Tert-Butanol	6,0436	3,3204	14,8158	14,2253	1,6285	-0,9187	-9,4522	9,5269	16,4319
Etilen Glikol	5,7750	3,1728	14,1573	13,5931	1,5561	-0,8779	-11,6818	8,6062	17,8539
DMF	5,3721	2,9514	13,1696	12,6447	1,4476	-0,8167	-6,7876	11,8514	16,3747
DMSO	5,6407	3,0990	13,8281	13,2770	1,5199	-0,8575	-6,1661	8,8965	12,6851
Asetonitril	5,5064	3,0252	13,4988	12,9608	1,4838	-0,8371	0,5408	17,9994	15,1377

Tablo 18. 1. Molekülün PM6 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 1.									
YÖNTEM : PM6									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	6,3351	2,6455	15,8107	16,5012	1,6235	-2,2719	-6,7580	12,6990	15,5616
Etanol	6,2084	2,5926	15,4945	16,1712	1,5910	-2,2264	-7,4851	10,1662	13,8338
Metanol	5,5749	2,3280	13,9134	14,5211	1,4287	-1,9993	-6,5335	12,0146	15,1201
N-Propanol	6,0817	2,5397	15,1783	15,8412	1,5586	-2,1810	-8,2652	9,4139	13,9396
2-Propanol	5,9550	2,4868	14,8621	15,5111	1,5261	-2,1355	-8,7315	8,2085	13,2784
N-Butanol	5,8283	2,4339	14,5458	15,1811	1,4937	-2,0901	-8,9991	8,6033	14,0187
Tert-Butanol	5,7016	2,3810	14,2296	14,8511	1,4612	-2,0446	-9,8985	6,4106	12,8033
Etilen Glikol	5,4482	2,2751	13,5972	14,1910	1,3962	-1,9538	-11,5429	6,9976	15,1904
DMF	5,0681	2,1164	12,6486	13,2010	1,2988	-1,8175	-6,4854	11,6308	14,9999
DMSO	5,3215	2,2222	13,2810	13,8610	1,3638	-1,9084	-5,5867	8,8981	11,2127
Asetonitril	5,1948	2,1693	12,9648	13,5310	1,3313	-1,8629	0,2693	17,3012	13,8377

Tablo 19. 1. Molekülün PM6-DH2 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 1.									
YÖNTEM : PM6-DH2									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	5,5431	1,8462	15,9175	15,9607	0,7997	-2,9101	-6,7580	12,6989	15,7471
Etanol	5,4322	1,8093	15,5992	15,6415	0,7836	-2,8519	-7,5809	10,2016	14,1470
Metanol	4,8779	1,6247	14,0074	14,0454	0,7037	-2,5608	-6,5345	12,0130	15,2830
N-Propanol	5,3214	1,7724	15,2808	15,3223	0,7677	-2,7936	-8,2999	9,3739	14,1124
2-Propanol	5,2105	1,7354	14,9625	15,0031	0,7517	-2,7355	-8,7701	8,1601	13,4430
N-Butanol	5,0997	1,6985	14,6441	14,6838	0,7358	-2,6773	-9,0575	8,5385	14,1830
Tert-Butanol	4,9888	1,6616	14,3258	14,3646	0,7197	-2,6191	-9,9720	6,3197	12,9529
Etilen Glikol	4,7671	1,5877	13,6891	13,7262	0,6877	-2,5027	-11,5680	6,9702	15,3477
DMF	4,4345	1,4770	12,7340	12,7686	0,6398	-2,3280	-6,5592	11,6757	15,2671
DMSO	4,6562	1,5508	13,3707	13,4070	0,6717	-2,4445	-5,6193	8,9038	11,4069
Asetonitril	4,5453	1,5139	13,0524	13,0878	0,6557	-2,3863	0,2578	17,2845	13,9848

Tablo 20. 1. Molekülün PM7 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 1.									
YÖNTEM : PM7									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	6,3703	2,9309	16,1928	16,2721	1,5448	-1,9182	-7,1083	13,1285	16,7738
Etanol	6,2429	2,8723	15,8689	15,9467	1,5140	-1,8798	-7,5779	10,6456	14,8297
Metanol	5,6059	2,5792	14,2497	14,3194	1,3595	-1,6880	-6,5912	12,6331	16,1768
N-Propanol	6,1155	2,8137	15,5451	15,6212	1,4831	-1,8414	-8,3394	9,9653	14,9802
2-Propanol	5,9881	2,7550	15,2212	15,2958	1,4522	-1,8031	-8,7428	8,7619	14,2494
N-Butanol	5,8607	2,6964	14,8974	14,9703	1,4213	-1,7647	-9,0675	9,1233	15,0048
Tert-Butanol	5,7333	2,6378	14,5735	14,6449	1,3904	-1,7264	-9,8395	6,3246	13,0473
Etilen Glikol	5,4785	2,5206	13,9258	13,9940	1,3286	-1,6496	-11,5576	7,5183	16,0977
DMF	5,0962	2,3447	12,9542	13,0177	1,2358	-1,5346	-6,7559	10,4717	14,4572
DMSO	5,3511	2,4620	13,6020	13,6686	1,2977	-1,6112	-6,0694	8,6790	11,8395
Asetonitril	5,2236	2,4033	13,2781	13,3431	1,2667	-1,5729	0,0414	17,1821	14,3010

Tablo 21. 1. Molekülün RM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 1.									
YÖNTEM : RM1									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	5,3534	2,2152	15,6360	13,4362	0,6939	-1,7888	-7,1139	12,6426	17,2738
Etanol	5,2463	2,1709	15,3233	13,1675	0,6800	-1,7530	-7,5206	11,0990	16,1866
Metanol	4,7110	1,9494	13,7597	11,8239	0,6106	-1,5741	-6,6956	12,7136	17,2245
N-Propanol	5,1393	2,1266	15,0106	12,8988	0,6661	-1,7172	-8,2530	10,3688	16,2384
2-Propanol	5,0322	2,0823	14,6978	12,6300	0,6523	-1,6814	-8,6054	9,4874	15,7591
N-Butanol	4,9251	2,0380	14,3851	12,3613	0,6383	-1,6457	-8,9707	9,6079	16,2946
Tert-Butanol	4,8181	1,9937	14,0724	12,0926	0,6245	-1,6099	-9,8204	7,9824	15,5684
Etilen Glikol	4,6039	1,9051	13,4470	11,5551	0,5967	-1,5383	-11,5080	7,4158	16,7888
DMF	4,2827	1,7722	12,5088	10,7490	0,5551	-1,4310	-6,5165	8,6228	13,1532
DMSO	4,4969	1,8608	13,1342	11,2864	0,5829	-1,5025	-6,3944	8,6779	12,9868
Asetonitril	4,3898	1,8165	12,8215	11,0177	0,5690	-1,4668	0,3971	17,1666	14,7337

Tablo 22. 2. Molekülün AM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 2.									
YÖNTEM : AM1									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	3,8936	0,8383	14,5212	13,5400	-0,4337	-3,1966	-7,2541	12,9437	17,4349
Etanol	3,8157	0,8215	14,2308	13,2692	-0,4251	-3,1327	-8,1817	10,5153	15,9894
Metanol	3,4264	0,7377	12,7787	11,9152	-0,3817	-2,8130	-7,3870	12,0746	17,0302
N-Propanol	3,7379	0,8048	13,9404	12,9984	-0,4163	-3,0687	-9,1385	9,6109	16,0970
2-Propanol	3,6600	0,7880	13,6499	12,7276	-0,4077	-3,0048	-8,9667	9,2569	15,6264
N-Butanol	3,5821	0,7712	13,3595	12,4568	-0,3990	-2,9409	-10,0598	8,6572	16,1751
Tert-Butanol	3,5042	0,7545	13,0691	12,1860	-0,3904	-2,8769	-9,5047	8,3134	15,3316
Etilen Glikol	3,3485	0,7209	12,4882	11,6444	-0,3730	-2,7491	-12,9034	6,3102	16,8375
DMF	3,1149	0,6706	11,6170	10,8320	-0,3470	-2,5573	-6,0810	11,7287	15,5993
DMSO	3,2706	0,7042	12,1978	11,3736	-0,3643	-2,6851	-6,2272	8,4864	12,3928
Asetonitril	3,1928	0,6874	11,9074	11,1028	-0,3556	-2,6212	0,1464	17,8229	15,4109

Tablo 23. 2. Molekülün MNDO yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 2.									
YÖNTEM : MNDO									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	1,1902	-2,4089	14,9102	15,0885	-3,2530	-6,9053	-7,4192	12,0169	15,7839
Etanol	1,1664	-2,3607	14,6120	14,7867	-3,1880	-6,7671	-8,1966	10,7229	15,3403
Metanol	1,0474	-2,1198	13,1210	13,2779	-2,8627	-6,0766	-7,4283	11,7343	15,9486
N-Propanol	1,1426	-2,3125	14,3138	14,4850	-3,1229	-6,6290	-8,9411	9,8846	15,3196
2-Propanol	1,1188	-2,2644	14,0156	14,1832	-3,0578	-6,4910	-8,6799	9,9761	15,2229
N-Butanol	1,0950	-2,2162	13,7174	13,8814	-2,9928	-6,3529	-9,6502	9,1546	15,4447
Tert-Butanol	1,0712	-2,1680	13,4192	13,5797	-2,9277	-6,2148	-8,7323	9,7044	15,1497
Etilen Glikol	1,0236	-2,0717	12,8228	12,9761	-2,7976	-5,9386	-12,7005	6,3491	15,9086
DMF	0,9522	-1,9271	11,9282	12,0708	-2,6024	-5,5242	-6,1764	12,6983	15,9529
DMSO	0,9998	-2,0235	12,5246	12,6743	-2,7325	-5,8004	-1,8273	12,0336	10,7930
Asetonitril	0,9760	-1,9753	12,2264	12,3726	-2,6675	-5,6623	0,1438	18,9862	15,8475

Tablo 24. 2. Molekölün MNDOD yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deęerleri

MOLEKÜL : 2.									
YÖNTEM : MNDOD									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	1,2219	-2,3781	14,8212	15,3420	-3,1948	-6,9500	-7,4183	11,9534	15,6165
Etanol	1,1975	-2,3305	14,5248	15,0352	-3,1309	-6,8110	-8,2251	10,6712	15,2162
Metanol	1,0753	-2,0927	13,0427	13,5010	-2,8114	-6,1160	-7,4216	11,7230	15,8400
N-Propanol	1,1730	-2,2830	14,2284	14,7283	-3,0671	-6,6720	-8,9357	9,8904	15,2211
2-Propanol	1,1486	-2,2354	13,9319	14,4215	-3,0031	-6,5330	-8,6745	9,9818	15,1264
N-Butanol	1,1241	-2,1879	13,6355	14,1146	-2,9393	-6,3941	-9,6433	9,1616	15,3501
Tert-Butanol	1,0997	-2,1403	13,3391	13,8078	-2,8754	-6,2550	-8,7254	9,7114	15,0571
Etilen Glikol	1,0508	-2,0452	12,7462	13,1941	-2,7476	-5,9770	-12,6955	6,3546	15,8206
DMF	0,9775	-1,9025	11,8570	12,2736	-2,5559	-5,5600	-6,2190	12,3004	15,5153
DMSO	1,0264	-1,9976	12,4498	12,8873	-2,6836	-5,8380	-5,5374	10,2688	12,6518
Asetonitril	1,0020	-1,9500	12,1534	12,5804	-2,6197	-5,6990	0,1470	18,9900	15,7638

Tablo 25. 2. Molekülün PM3 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 2.									
YÖNTEM : PM3									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	1,6005	-1,3708	15,1589	14,3468	-2,9169	-5,6461	-6,6706	14,5057	18,4470
Etanol	1,5685	-1,3434	14,8557	14,0599	-2,8585	-5,5333	-7,6086	12,4060	17,3398
Metanol	1,4084	-1,2063	13,3398	12,6252	-2,5669	-4,9686	-6,8782	20,1578	24,6343
N-Propanol	1,5365	-1,3160	14,5525	13,7729	-2,8001	-5,4203	-8,4107	11,6223	17,4128
2-Propanol	1,5045	-1,2886	14,2494	13,4860	-2,7418	-5,3074	-8,5458	10,8563	16,8365
N-Butanol	1,4725	-1,2611	13,9462	13,1991	-2,6835	-5,1944	-9,1752	10,8208	17,4850
Tert-Butanol	1,4405	-1,2337	13,6430	12,9121	-2,6251	-5,0815	-9,4522	9,5269	16,5227
Etilen Glikol	1,3764	-1,1789	13,0367	12,3382	-2,5085	-4,8557	-11,6818	8,6062	17,9409
DMF	1,2804	-1,0966	12,1271	11,4774	-2,3335	-4,5169	-6,7876	11,8514	16,4556
DMSO	1,3444	-1,1515	12,7335	12,0513	-2,4502	-4,7428	-6,1661	8,8965	12,7700
Asetonitril	1,3124	-1,1241	12,4303	11,7644	-2,3918	-4,6299	0,5408	17,9994	15,2205

Tablo 26. 2. Molekülün PM6 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 2.									
YÖNTEM : PM6									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	1,3096	-2,3753	15,2103	15,1402	-3,2231	-6,8871	-6,7580	12,6990	15,7930
Etanol	1,2834	-2,3278	14,9061	14,8374	-3,1586	-6,7493	-7,4851	10,1662	14,0606
Metanol	1,1524	-2,0903	13,3851	13,3234	-2,8364	-6,0607	-6,5335	12,0146	15,3238
N-Propanol	1,2572	-2,2803	14,6019	14,5346	-3,0942	-6,6116	-8,2652	9,4139	14,1617
2-Propanol	1,2310	-2,2328	14,2977	14,2318	-3,0297	-6,4739	-8,7315	8,2085	13,4958
N-Butanol	1,2048	-2,1853	13,9935	13,9290	-2,9653	-6,3361	-8,9991	8,6033	14,2315
Tert-Butanol	1,1786	-2,1378	13,6893	13,6262	-2,9008	-6,1984	-9,8985	6,4106	13,0115
Etilen Glikol	1,1263	-2,0428	13,0809	13,0206	-2,7718	-5,9229	-11,5429	6,9976	15,3894
DMF	1,0477	-1,9002	12,1682	12,1122	-2,5784	-5,5096	-6,4854	11,6308	15,1850
DMSO	1,1001	-1,9953	12,7767	12,7178	-2,7074	-5,7852	-5,5867	8,8981	11,4070
Asetonitril	1,0739	-1,9477	12,4724	12,4150	-2,6429	-5,6474	0,2693	17,3012	14,0274

Tablo 27. 2. Molekülün PM6-DH2 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 2.									
YÖNTEM : PM6-DH2									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	0,5561	-3,1354	15,2315	15,4643	-3,9829	-7,7438	-6,7580	12,6989	15,6960
Etanol	0,5450	-3,0727	14,9269	15,1550	-3,9032	-7,5889	-7,5809	10,2016	14,0968
Metanol	0,4894	-2,7592	13,4037	13,6086	-3,5049	-6,8146	-6,5345	12,0130	15,2378
N-Propanol	0,5339	-3,0100	14,6222	14,8457	-3,8235	-7,4340	-8,2999	9,3739	14,0633
2-Propanol	0,5227	-2,9473	14,3176	14,5364	-3,7439	-7,2791	-8,7701	8,1601	13,3950
N-Butanol	0,5116	-2,8846	14,0130	14,2272	-3,6643	-7,1243	-9,0575	8,5385	14,1360
Tert-Butanol	0,5005	-2,8219	13,7084	13,9179	-3,5846	-6,9694	-9,9720	6,3197	12,9069
Etilen Glikol	0,4782	-2,6964	13,0991	13,2993	-3,4253	-6,6596	-11,5680	6,9702	15,3039
DMF	0,4449	-2,5083	12,1852	12,3714	-3,1863	-6,1950	-6,5592	11,6757	15,2262
DMSO	0,4671	-2,6337	12,7945	12,9900	-3,3457	-6,5047	-5,6193	8,9038	11,3640
Asetonitril	0,4560	-2,5710	12,4898	12,6807	-3,2660	-6,3498	0,2578	17,2845	13,9428

Tablo 28. 2. Molekülün PM7 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 2.									
YÖNTEM : PM7									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	1,3078	-2,1288	15,6738	15,1704	-3,3630	-6,6496	-7,1083	13,1285	16,9502
Etanol	1,2816	-2,0862	15,3603	14,8670	-3,2958	-6,5166	-7,5779	10,6456	15,0027
Metanol	1,1509	-1,8733	13,7929	13,3500	-2,9594	-5,8516	-6,5912	12,6331	16,3321
N-Propanol	1,2555	-2,0436	15,0468	14,5636	-3,2284	-6,3836	-8,3394	9,9653	15,1496
2-Propanol	1,2293	-2,0011	14,7334	14,2602	-3,1613	-6,2506	-8,7428	8,7619	14,4153
N-Butanol	1,2032	-1,9585	14,4199	13,9568	-3,0939	-6,1176	-9,0675	9,1233	15,1671
Tert-Butanol	1,1770	-1,9159	14,1064	13,6534	-3,0267	-5,9846	-9,8395	6,3246	13,2062
Etilen Glikol	1,1247	-1,8308	13,4795	13,0465	-2,8922	-5,7187	-11,5576	7,5183	16,2494
DMF	1,0462	-1,7030	12,5390	12,1363	-2,6904	-5,3196	-6,7559	10,4717	14,5984
DMSO	1,0986	-1,7882	13,1660	12,7431	-2,8249	-5,5856	-6,0694	8,6790	11,9876
Asetonitril	1,0724	-1,7456	12,8525	12,4397	-2,7576	-5,4526	0,0414	17,1821	14,4457

Tablo 29. 2. Molekülün RM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 2.									
YÖNTEM : RM1									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	0,3383	-1,9970	14,6293	15,3582	-4,0212	-6,5737	-7,1139	12,6426	17,2040
Etanol	0,3315	-1,9571	14,3367	15,0510	-3,9408	-6,4423	-7,5206	11,0990	16,1181
Metanol	0,2977	-1,7574	12,8738	13,5152	-3,5387	-5,7849	-6,6956	12,7136	17,1630
N-Propanol	0,3248	-1,9171	14,0441	14,7439	-3,8603	-6,3108	-8,2530	10,3688	16,1714
2-Propanol	0,3180	-1,8772	13,7515	14,4367	-3,7799	-6,1793	-8,6054	9,4874	15,6934
N-Butanol	0,3112	-1,8372	13,4590	14,1295	-3,6996	-6,0478	-8,9707	9,6079	16,2304
Tert-Butanol	0,3045	-1,7973	13,1664	13,8224	-3,6191	-5,9164	-9,8204	7,9824	15,5055
Etilen Glikol	0,2909	-1,7174	12,5812	13,2081	-3,4583	-5,6534	-11,5080	7,4158	16,7287
DMF	0,2706	-1,5976	11,7034	12,2866	-3,2170	-5,2590	-6,5165	8,6228	13,0973
DMSO	0,2842	-1,6775	12,2886	12,9009	-3,3778	-5,5220	-6,3944	8,6779	12,9281
Asetonitril	0,2774	-1,6375	11,9960	12,5937	-3,2974	-5,3904	0,3971	17,1666	14,6765

Tablo 30. 3. Molekülün AM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 3.									
YÖNTEM : AM1									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	7,6936	4,9942	14,8316	14,8725	3,2738	0,5622	-7,2541	12,9437	17,4862
Etanol	7,5397	4,8943	14,5350	14,5751	3,2083	0,5509	-8,1817	10,5153	16,0397
Metanol	6,7704	4,3949	13,0518	13,0878	2,8810	0,4947	-7,3870	12,0746	17,0754
N-Propanol	6,7704	4,3949	13,0518	13,0878	2,8810	0,4947	-9,1385	9,6109	16,3632
2-Propanol	7,2320	4,6945	13,9417	13,9802	3,0774	0,5284	-8,9667	9,2569	15,6746
N-Butanol	7,0781	4,5947	13,6451	13,6827	3,0119	0,5173	-10,0598	8,6572	16,2224
Tert-Butanol	6,9242	4,4948	13,3484	13,3853	2,9464	0,5060	-9,5047	8,3134	15,3777
Etilen Glikol	6,6165	4,2950	12,7552	12,7904	2,8155	0,4835	-12,9034	6,3102	16,8816
DMF	6,1549	3,9954	11,8653	11,8980	2,6190	0,4498	-6,0810	11,7287	15,6405
DMSO	6,4626	4,1951	12,4585	12,4929	2,7500	0,4722	-6,2272	8,4864	12,4358
Asetonitril	6,3088	4,0952	12,1619	12,1955	2,6846	0,4609	0,1464	17,8229	15,4529

Tablo 31. 3. Molekülün MNDO yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 3.									
YÖNTEM : MNDO									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	5,0507	1,5860	15,3254	15,9170	0,4837	-3,1573	-7,4192	12,0169	15,7951
Etanol	4,9497	1,5543	15,0189	15,5987	0,4741	-3,0941	-8,1966	10,7229	15,3513
Metanol	4,4446	1,3957	13,4864	14,0070	0,4257	-2,7784	-7,4283	11,7343	15,9586
N-Propanol	4,8487	1,5226	14,7124	15,2803	0,4644	-3,0309	-8,9411	9,8846	15,3304
2-Propanol	7,2320	4,6945	13,9417	13,9802	3,0774	0,5284	-8,6799	9,9761	16,1070
N-Butanol	4,6466	1,4591	14,0994	14,6436	0,4450	-2,9047	-9,6502	9,1546	15,4551
Tert-Butanol	4,5456	1,4274	13,7929	14,3253	0,4353	-2,8415	-8,7323	9,7044	15,1598
Etilen Glikol	4,3436	1,3640	13,1798	13,6886	0,4160	-2,7152	-12,7005	6,3491	15,9184
DMF	4,0406	1,2688	12,2603	12,7336	0,3870	-2,5258	-6,1764	12,6983	15,9619
DMSO	4,2426	1,3322	12,8733	13,3703	0,4064	-2,6521	-1,8273	12,0336	10,8024
Asetonitril	4,1416	1,3005	12,5668	13,0519	0,3967	-2,5890	0,1438	18,9862	15,8567

Tablo 32. 3. Molekülün MNDOD yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 3.									
YÖNTEM : MNDOD									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	5,1020	1,5797	14,9773	15,8697	0,6388	-3,1495	-7,4183	11,9534	15,5835
Etanol	5,0000	1,5481	14,6778	15,5523	0,6260	-3,0865	-8,2251	10,6712	15,1838
Metanol	4,4898	1,3901	13,1800	13,9653	0,5622	-2,7716	-7,4216	11,7230	15,8109
N-Propanol	4,8979	1,5165	14,3782	15,2349	0,6132	-3,0235	-8,9357	9,8904	15,1894
2-Propanol	4,7959	1,4849	14,0787	14,9175	0,6004	-2,9605	-8,6745	9,9818	15,0953
N-Butanol	4,6938	1,4533	13,7791	14,6001	0,5876	-2,8975	-9,6433	9,1616	15,3197
Tert-Butanol	4,5918	1,4217	13,4796	14,2827	0,5749	-2,8345	-8,7254	9,7114	15,0274
Etilen Glikol	4,3877	1,3585	12,8805	13,6479	0,5493	-2,7086	-12,6955	6,3546	15,7922
DMF	4,0816	1,2638	11,9818	12,6958	0,5110	-2,5195	-6,2190	12,3004	15,4888
DMSO	4,2857	1,3269	12,5809	13,3305	0,5366	-2,6456	-5,5374	10,2688	12,6240
Asetonitril	4,1836	1,2954	12,2814	13,0132	0,5237	-2,5825	0,1470	18,9900	15,7367

Tablo 33. 3. Molekölün PM3 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deęerleri

MOLEKÜL : 3.									
YÖNTEM : PM3									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	5,2699	2,6575	15,5720	15,6469	0,6294	-2,0053	-6,6706	14,5057	18,5416
Etanol	5,1645	2,6044	15,2606	15,3340	0,6168	-1,9651	-7,6086	12,4060	17,4326
Metanol	4,6375	2,3386	13,7034	13,7693	0,5539	-1,7647	-6,8782	20,1578	24,7175
N-Propanol	5,0591	2,5512	14,9491	15,0210	0,6043	-1,9251	-8,4107	11,6223	17,5037
2-Propanol	4,9537	2,4981	14,6377	14,7081	0,5917	-1,8849	-8,5458	10,8563	16,9255
N-Butanol	4,8483	2,4449	14,3262	14,3951	0,5791	-1,8448	-9,1752	10,8208	17,5721
Tert-Butanol	4,7429	2,3918	14,0148	14,0822	0,5665	-1,8047	-9,4522	9,5269	16,6079
Etilen Glikol	4,5321	2,2855	13,3919	13,4563	0,5413	-1,7245	-11,6818	8,6062	18,0222
DMF	4,2159	2,1260	12,4576	12,5175	0,5035	-1,6042	-6,7876	11,8514	16,5312
DMSO	4,4267	2,2323	13,0805	13,1434	0,5287	-1,6844	-6,1661	8,8965	12,8495
Asetonitril	4,3213	2,1792	12,7690	12,8305	0,5161	-1,6443	0,5408	17,9994	15,2982

Tablo 34. 3. Molekülün PM6 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 3.									
YÖNTEM : PM6									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	5,1267	1,4369	15,8249	15,6969	0,4109	-3,2408	-6,7580	12,6990	15,8053
Etanol	5,0242	1,4082	15,5084	15,3830	0,4027	-3,1759	-7,4851	10,1662	14,0727
Metanol	4,5115	1,2645	13,9259	13,8133	0,3616	-2,8519	-6,5335	12,0146	15,3347
N-Propanol	4,9216	1,3794	15,1919	15,0690	0,3944	-3,1112	-8,2652	9,4139	14,1735
2-Propanol	4,8191	1,3507	14,8754	14,7551	0,3862	-3,0463	-8,7315	8,2085	13,5074
N-Butanol	4,7166	1,3219	14,5589	14,4411	0,3780	-2,9815	-8,9991	8,6033	14,2428
Tert-Butanol	4,6140	1,2932	14,2424	14,1272	0,3698	-2,9167	-9,8985	6,4106	13,0226
Etilen Glikol	4,4090	1,2357	13,6094	13,4993	0,3534	-2,7871	-11,5429	6,9976	15,4000
DMF	4,1014	1,1495	12,6599	12,5575	0,3287	-2,5926	-6,4854	11,6308	15,1948
DMSO	4,3064	1,2070	13,2929	13,1854	0,3451	-2,7222	-5,5867	8,8981	11,4174
Asetonitril	4,2039	1,1783	12,9764	12,8715	0,3369	-2,6574	0,2693	17,3012	14,0376

Tablo 35. 3. Molekülün PM6-DH2 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 3.									
YÖNTEM : PM6-DH2									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	4,3427	0,6457	15,5433	16,1938	-0,2892	-4,1801	-6,7580	12,6989	15,5661
Etanol	4,2558	0,6328	15,2324	15,8699	-0,2835	-4,0964	-7,5809	10,2016	13,9695
Metanol	3,8216	0,5682	13,6781	14,2505	-0,2545	-3,6784	-6,5345	12,0130	15,1235
N-Propanol	4,1690	0,6199	14,9216	15,5460	-0,2776	-4,0128	-8,2999	9,3739	13,9386
2-Propanol	4,0821	0,6070	14,6107	15,2222	-0,2719	-3,9292	-8,7701	8,1601	13,2729
N-Butanol	3,9953	0,5940	14,2998	14,8983	-0,2660	-3,8457	-9,0575	8,5385	14,0163
Tert-Butanol	3,9084	0,5811	13,9890	14,5744	-0,2603	-3,7621	-9,9720	6,3197	12,7900
Etilen Glikol	3,7347	0,5553	13,3672	13,9267	-0,2487	-3,5949	-11,5680	6,9702	15,1921
DMF	3,4742	0,5166	12,4346	12,9550	-0,2313	-3,3440	-6,5592	11,6757	15,1222
DMSO	3,6479	0,5424	13,0564	13,6028	-0,2429	-3,5112	-5,6193	8,9038	11,2548
Asetonitril	3,5610	0,5295	12,7455	13,2789	-0,2372	-3,4276	0,2578	17,2845	13,8362

Tablo 36. 3. Molekülün PM7 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 3.									
YÖNTEM : PM7									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	5,0669	1,6183	15,9561	16,2438	0,3120	-3,2224	-7,1083	13,1285	16,7025
Etanol	4,9656	1,5859	15,6370	15,9189	0,3058	-3,1579	-7,5779	10,6456	14,7598
Metanol	4,4589	1,4241	14,0414	14,2945	0,2746	-2,8357	-6,5912	12,6331	16,1141
N-Propanol	4,8642	1,5536	15,3179	15,5940	0,2995	-3,0934	-8,3394	9,9653	14,9118
2-Propanol	4,7629	1,5212	14,9987	15,2692	0,2933	-3,0290	-8,7428	8,7619	14,1824
N-Butanol	4,6615	1,4888	14,6796	14,9443	0,2870	-2,9646	-9,0675	9,1233	14,9392
Tert-Butanol	4,5602	1,4565	14,3605	14,6194	0,2808	-2,9001	-9,8395	6,3246	12,9832
Etilen Glikol	4,3575	1,3917	13,7222	13,9697	0,2683	-2,7713	-11,5576	7,5183	16,0363
DMF	4,0535	1,2946	12,7649	12,9950	0,2496	-2,5779	-6,7559	10,4717	14,4001
DMSO	4,2562	1,3594	13,4031	13,6448	0,2621	-2,7068	-6,0694	8,6790	11,7796
Asetonitril	4,1549	1,3270	13,0840	13,3199	0,2559	-2,6423	0,0414	17,1821	14,2425

Tablo 37. 3. Molekülün RM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 3.									
YÖNTEM : RM1									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	4,0670	1,5450	15,2470	14,6194	-0,4766	-2,8116	-7,1139	12,6426	17,4215
Etanol	3,9857	1,5141	14,9421	14,3270	-0,4670	-2,7553	-7,5206	11,0990	16,3313
Metanol	3,5790	1,3596	13,4174	12,8651	-0,4194	-2,4742	-6,6956	12,7136	17,3544
N-Propanol	3,9043	1,4832	14,6371	14,0346	-0,4576	-2,6991	-8,2530	10,3688	16,3802
2-Propanol	3,8230	1,4523	14,3322	13,7422	-0,4480	-2,6429	-8,6054	9,4874	15,8979
N-Butanol	3,7416	1,4214	14,0272	13,4498	-0,4385	-2,5866	-8,9707	9,6079	16,4305
Tert-Butanol	3,6603	1,3905	13,7223	13,1575	-0,4289	-2,5304	-9,8204	7,9824	15,7013
Etilen Glikol	3,4976	1,3287	13,1124	12,5727	-0,4099	-2,4180	-11,5080	7,4158	16,9157
DMF	3,2536	1,2360	12,1976	11,6955	-0,3813	-2,2493	-6,5165	8,6228	13,2713
DMSO	3,4163	1,2978	12,8075	12,2803	-0,4003	-2,3617	-6,3944	8,6779	13,1109
Asetonitril	3,3349	1,2669	12,5025	11,9879	-0,3908	-2,3055	0,3971	17,1666	14,8549

Tablo 38. 4. Molekülün AM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 4.									
YÖNTEM : AM1									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	7,5854	4,6731	14,8726	15,1751	3,1534	0,1509	-7,2541	12,9437	17,1954
Etanol	7,4337	4,5796	14,5751	14,8716	3,0903	0,1479	-8,1817	10,5153	15,7545
Metanol	6,6752	4,1123	13,0879	13,3541	2,7750	0,1328	-7,3870	12,0746	16,8194
N-Propanol	7,2820	4,4862	14,2777	14,5681	3,0272	0,1449	-9,1385	9,6109	15,8671
2-Propanol	7,1303	4,3927	13,9802	14,2646	2,9642	0,1418	-8,9667	9,2569	15,4012
N-Butanol	6,9786	4,2993	13,6828	13,9611	2,9011	0,1389	-10,0598	8,6572	15,9548
Tert-Butanol	6,8269	4,2058	13,3853	13,6576	2,8381	0,1358	-9,5047	8,3134	15,1159
Etilen Glikol	6,5234	4,0189	12,7904	13,0506	2,7119	0,1298	-12,9034	6,3102	16,6316
DMF	6,0683	3,7385	11,8981	12,1401	2,5227	0,1208	-6,0810	11,7287	15,4078
DMSO	6,3717	3,9254	12,4930	12,7471	2,6488	0,1268	-6,2272	8,4864	12,1916
Asetonitril	6,2200	3,8319	12,1955	12,4436	2,5857	0,1237	0,1464	17,8229	15,2145

Tablo 39. 4. Molekülün MNDO yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 4.									
YÖNTEM : MNDO									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	5,0095	1,6086	15,1627	15,8363	0,4910	-3,1106	-7,4192	12,0169	15,8345
Etanol	4,9093	1,5764	14,8594	15,5196	0,4812	-3,0484	-8,1966	10,7229	15,3899
Metanol	4,4084	1,4156	13,3432	13,9359	0,4321	-2,7373	-7,4283	11,7343	15,9932
N-Propanol	4,8091	1,5443	14,5562	15,2028	0,4714	-2,9861	-8,9411	9,8846	15,3682
2-Propanol	4,7089	1,5121	14,2529	14,8861	0,4615	-2,9240	-8,6799	9,9761	15,2705
N-Butanol	4,6087	1,4799	13,9497	14,5694	0,4517	-2,8618	-9,6502	9,1546	15,4913
Tert-Butanol	4,5376	1,4760	13,6011	14,5713	0,4845	-2,8662	-8,7323	9,7044	15,0860
Etilen Glikol	4,3082	1,3834	13,0399	13,6192	0,4223	-2,6751	-12,7005	6,3491	15,9522
DMF	4,0076	1,2869	12,1302	12,6690	0,3928	-2,4885	-6,1764	12,6983	15,9934
DMSO	4,2080	1,3512	12,7367	13,3025	0,4125	-2,6129	-1,8273	12,0336	10,8355
Asetonitril	4,1078	1,3191	12,4334	12,9858	0,4026	-2,5507	0,1438	18,9862	15,8891

Tablo 40. 4. Molekülün MNDOD yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 4.									
YÖNTEM : MNDOD									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	5,0418	1,6400	15,1123	16,1903	0,5383	-3,1847	-7,4183	11,9534	15,6487
Etanol	4,9410	1,6072	14,8101	15,8665	0,5276	-3,1210	-8,2251	10,6712	15,2477
Metanol	4,4368	1,4432	13,2988	14,2475	0,4738	-2,8026	-7,4216	11,7230	15,8683
N-Propanol	4,8401	1,5744	14,5078	15,5427	0,5168	-3,0573	-8,9357	9,8904	15,2520
2-Propanol	4,7393	1,5416	14,2056	15,2189	0,5060	-2,9936	-8,6745	9,9818	15,1566
N-Butanol	4,6385	1,5088	13,9033	14,8951	0,4953	-2,9299	-9,6433	9,1616	15,3796
Tert-Butanol	4,4727	1,8849	14,2516	14,2160	0,2257	-2,3515	-8,7254	9,7114	15,8596
Etilen Glikol	4,3359	1,4104	12,9966	13,9237	0,4629	-2,7389	-12,6955	6,3546	15,8483
DMF	4,0334	1,3120	12,0898	12,9522	0,4306	-2,5478	-6,2190	12,3004	15,5410
DMSO	4,2351	1,3776	12,6943	13,5999	0,4522	-2,6752	-5,5374	10,2688	12,6788
Asetonitril	4,1343	1,3448	12,3921	13,2760	0,4415	-2,6114	0,1470	18,9900	15,7901

Tablo 41. 4. Molekülün PM3 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 4.									
YÖNTEM : PM3									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	4,9697	2,0943	15,8351	15,7956	0,2508	-2,6128	-6,6706	14,5057	18,3127
Etanol	4,8703	2,0524	15,5184	15,4797	0,2458	-2,5606	-7,6086	12,4060	17,2082
Metanol	4,3733	1,8430	13,9349	13,9001	0,2207	-2,2992	-6,8782	20,1578	24,5161
N-Propanol	4,7709	2,0105	15,2017	15,1638	0,2408	-2,5083	-8,4107	11,6223	17,2839
2-Propanol	4,6715	1,9686	14,8850	14,8479	0,2358	-2,4561	-8,5458	10,8563	16,7103
N-Butanol	4,5721	1,9268	14,5683	14,5320	0,2307	-2,4037	-9,1752	10,8208	17,3615
Tert-Butanol	4,4727	1,8849	14,2516	14,2160	0,2257	-2,3515	-9,4522	9,5269	16,4019
Etilen Glikol	4,2739	1,8011	13,6182	13,5842	0,2157	-2,2470	-11,6818	8,6062	17,8253
DMF	3,9758	1,6754	12,6681	12,6365	0,2007	-2,0903	-6,7876	11,8514	16,3480
DMSO	4,2630	1,2771	13,4269	13,7985	0,2618	-2,8349	-6,1661	8,8965	11,9660
Asetonitril	4,0752	1,7173	12,9848	12,9524	0,2057	-2,1425	0,5408	17,9994	15,1104

Tablo 42. 4. Molekülün PM6 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 4.									
YÖNTEM : PM6									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	5,0750	1,5203	15,9844	16,4268	0,3116	-3,3749	-6,7580	12,6990	15,7705
Etanol	4,9735	1,4899	15,6647	16,0983	0,3054	-3,3074	-7,4851	10,1662	14,0385
Metanol	4,4660	1,3379	14,0663	14,4556	0,2742	-2,9699	-6,5335	12,0146	15,3040
N-Propanol	4,8720	1,4595	15,3450	15,7697	0,2992	-3,2399	-8,2652	9,4139	14,1400
2-Propanol	4,7705	1,4291	15,0253	15,4412	0,2930	-3,1724	-8,7315	8,2085	13,4747
N-Butanol	4,6690	1,3987	14,7056	15,1127	0,2867	-3,1049	-8,9991	8,6033	14,2108
Tert-Butanol	3,8577	0,6492	14,2684	14,9052	-0,3943	-3,7925	-9,8985	6,4106	12,9108
Etilen Glikol	4,3645	1,3075	13,7466	14,1270	0,2680	-2,9023	-11,5429	6,9976	15,3701
DMF	3,9758	1,6754	12,6681	12,6365	0,2007	-2,0903	-6,4854	11,6308	15,8252
DMSO	4,2630	1,2771	13,4269	13,7985	0,2618	-2,8349	-5,5867	8,8981	11,3882
Asetonitril	4,1615	1,2466	13,1072	13,4700	0,2556	-2,7675	0,2693	17,3012	14,0089

Tablo 43. 4. Molekülün PM6-DH2 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 4.									
YÖNTEM : PM6-DH2									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	4,2863	0,7213	15,8538	16,5613	-0,4381	-4,2140	-6,7580	12,6989	15,6811
Etanol	4,2006	0,7069	15,5367	16,2301	-0,4293	-4,1297	-7,5809	10,2016	14,0822
Metanol	3,7719	0,6347	13,9513	14,5739	-0,3856	-3,7083	-6,5345	12,0130	15,2248
N-Propanol	4,1148	0,6924	15,2196	15,8988	-0,4206	-4,0454	-8,2999	9,3739	14,0490
2-Propanol	4,0291	0,6780	14,9026	15,5676	-0,4119	-3,9611	-8,7701	8,1601	13,3809
N-Butanol	3,9434	0,6636	14,5855	15,2364	-0,4031	-3,8768	-9,0575	8,5385	14,1222
Tert-Butanol	3,8577	0,6492	14,2684	14,9052	-0,3943	-3,7925	-9,9720	6,3197	12,8934
Etilen Glikol	3,6862	0,6203	13,6343	14,2427	-0,3768	-3,6240	-11,5680	6,9702	15,2910
DMF	3,4290	0,5770	12,6830	13,2490	-0,3505	-3,3712	-6,5592	11,6757	15,2142
DMSO	3,6005	0,6059	13,3172	13,9115	-0,3680	-3,5397	-5,6193	8,9038	11,3514
Asetonitril	3,5148	0,5915	13,0001	13,5803	-0,3592	-3,4554	0,2578	17,2845	13,9305

Tablo 44. 4. Molekülün PM7 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 4.									
YÖNTEM : PM7									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	4,9900	1,6883	16,2027	16,5443	0,1616	-3,2419	-7,1083	13,1285	16,8333
Etanol	4,8902	1,6545	15,8786	16,2134	0,1584	-3,1771	-7,5779	10,6456	14,8880
Metanol	4,3912	1,4857	14,2584	14,5590	0,1422	-2,8529	-6,5912	12,6331	16,2292
N-Propanol	4,7904	1,6208	15,5546	15,8825	0,1551	-3,1122	-8,3394	9,9653	15,0374
2-Propanol	4,6906	1,5870	15,2305	15,5516	0,1519	-3,0474	-8,7428	8,7619	14,3054
N-Butanol	4,5908	1,5532	14,9065	15,2208	0,1487	-2,9826	-9,0675	9,1233	15,0595
Tert-Butanol	4,4910	1,5195	14,5824	14,8899	0,1454	-2,9177	-9,8395	6,3246	13,1010
Etilen Glikol	4,2914	1,4519	13,9343	14,2281	0,1390	-2,7881	-11,5576	7,5183	16,1488
DMF	3,9920	1,3506	12,9622	13,2354	0,1293	-2,5935	-6,7559	10,4717	14,5048
DMSO	4,1916	1,4182	13,6103	13,8972	0,1357	-2,7232	-6,0694	8,6790	11,8895
Asetonitril	4,0918	1,3844	13,2862	13,5663	0,1325	-2,6584	0,0414	17,1821	14,3498

Tablo 45. 4. Molekülün RM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

MOLEKÜL : 4.									
YÖNTEM : RM1									
ÇÖZÜCÜ	$\Delta H_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\Sigma \Delta G$ (kcal/K.mol)
Su	3,9397	1,7168	15,8847	15,5434	-0,7939	-2,9151	-7,1139	12,6426	17,6353
Etanol	3,8609	1,6825	15,5670	15,2325	-0,7781	-2,8568	-7,5206	11,0990	16,5409
Metanol	3,4669	1,5108	13,9785	13,6782	-0,6987	-2,5653	-6,6956	12,7136	17,5426
N-Propanol	3,7821	1,6481	15,2493	14,9217	-0,7622	-2,7986	-8,2530	10,3688	16,5854
2-Propanol	3,7033	1,6138	14,9316	14,6108	-0,7463	-2,7402	-8,6054	9,4874	16,0989
N-Butanol	3,6245	1,5795	14,6139	14,2999	-0,7304	-2,6819	-8,9707	9,6079	16,6272
Tert-Butanol	3,5457	1,5451	14,2962	13,9891	-0,7146	-2,6237	-9,8204	7,9824	15,8937
Etilen Glikol	3,3881	1,4764	13,6608	13,3673	-0,6828	-2,5071	-11,5080	7,4158	17,0996
DMF	3,1518	1,3734	12,7078	12,4347	-0,6351	-2,3321	-6,5165	8,6228	13,4423
DMSO	3,3093	1,4421	13,3431	13,0565	-0,6669	-2,4487	-6,3944	8,6779	13,2905
Asetonitril	3,2306	1,4078	13,0255	12,7456	-0,6510	-2,3904	0,3971	17,1666	15,0301

4. SONUÇ VE TARTIŞMA

Fenil[2-(3-bromobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (1. Molekül), fenil[2-(3-florobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (2. Molekül), fenil[2-(3-klorobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (3. Molekül) ve fenil[2-(3-metilbenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (4. Molekül)'ün su, etanol, metanol, *n*-propanol, *izo*-propanol, *n*-butanol, *tert*-butanol, etilen glikol, *N,N*-dimetilformamit (DMF), dimetil sülfoksit (DMSO) ve asetonitril ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotlar (AM1, MNDO, MNDOD, PM3, PM6, PM6-DH2, PM7 ve RM1) yardımı ile hesaplanan $\Delta H_{(S)}$ (kcal/mol), $\Delta H_{(SH^+)}$ (kcal/mol), $\Delta S_{(S)}$ (cal/K.mol), $\Delta S_{(SH^+)}$ (cal/K.mol), $\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol), $\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol) ve $\delta\Delta G$ (kcal/K.mol) değerleri kullanılarak;

$$pK_a = \sum \Delta G^\circ / 2,303 \cdot R \cdot T \quad (36)$$

formülü yardımıyla her bir molekülün pKa değerleri her bir çözücü ortam ve her bir yarı deneysel kuantum kimyasal metoda göre hesaplandı. Bulunan pKa değerleri Tablo 46-49'de verilmiştir. Elde edilen bu değerlerin yarı deneysel kuantum kimyasal metotlara göre karşılaştırılması Şekil 4-11'de, çözücü ortam dikkate alınarak yapılan karşılaştırma grafikleri ise Şekil 12-22'da verilmiştir. Bu çalıştığımız moleküllerin pKa değerleri bir yüksek lisans tez çalışmasında deneysel olarak potansiyometrik titrasyon yöntemiyle yarı nötralizasyon metoduna göre ve teorik olarak SPARC bilgisayar programı ile hesaplanmıştır (Çakır, 2014). Bu yüksek tez çalışmasındaki veriler kullanılarak bizim elde ettiğimiz sonuçlar ile karşılaştırma yapılmıştır. Bu çalışmamızda kullandığımız sekiz farklı metodun ortalama sonucu alınarak karşılaştırma yapılmıştır. Bu karşılaştırma grafiksel olarak Şekil 23-36'da verilmiştir.

Tablo 46. 1. Molekülün çalışılan çözücü ortamlarında yarı deneysel kuantum kimyasal metoda göre hesaplanan pKa değerleri

MOLEKÜL : 1.								
ÇÖZÜCÜ	pKa							
	METOT							
	AM1	MNDO	MNDOD	PM3	PM6	PM6-DH2	PM7	RM1
Su	12,6084	11,0617	12,2865	13,4534	11,4116	11,5476	12,3005	12,6672
Etanol	11,5519	10,7467	11,9762	12,6431	10,1446	10,3742	10,8749	11,8699
Metanol	12,3329	11,2441	12,3502	17,9996	11,0878	11,2073	11,8627	12,6310
N-Propanol	11,6344	10,7418	11,9631	12,6980	10,2221	10,3489	10,9852	11,9079
2-Propanol	11,2929	10,6811	11,8770	12,2769	9,7373	9,8580	10,4493	11,5564
N-Butanol	11,6988	10,8540	12,0244	12,7540	10,2802	10,4006	11,0033	11,9491
Tert-Butanol	11,0837	10,6479	11,7928	12,0498	9,3889	9,4986	9,5678	11,4166
Etilen Glikol	12,1951	11,2250	12,3193	13,0926	11,1394	11,2547	11,8047	12,3115
DMF	11,2979	11,2882	12,0453	12,0079	10,9997	11,1956	10,6017	9,6455
DMSO	8,9393	7,4838	9,9788	9,3022	8,2225	8,3649	8,6821	9,5234
Asetonitril	11,1561	11,2008	12,2442	11,1007	10,1474	10,2553	10,4872	10,8045

Tablo 47. 2. Molekülün çalışılan çözücü ortamlarında yarı deneysel kuantum kimyasal metoda göre hesaplanan pKa değerleri

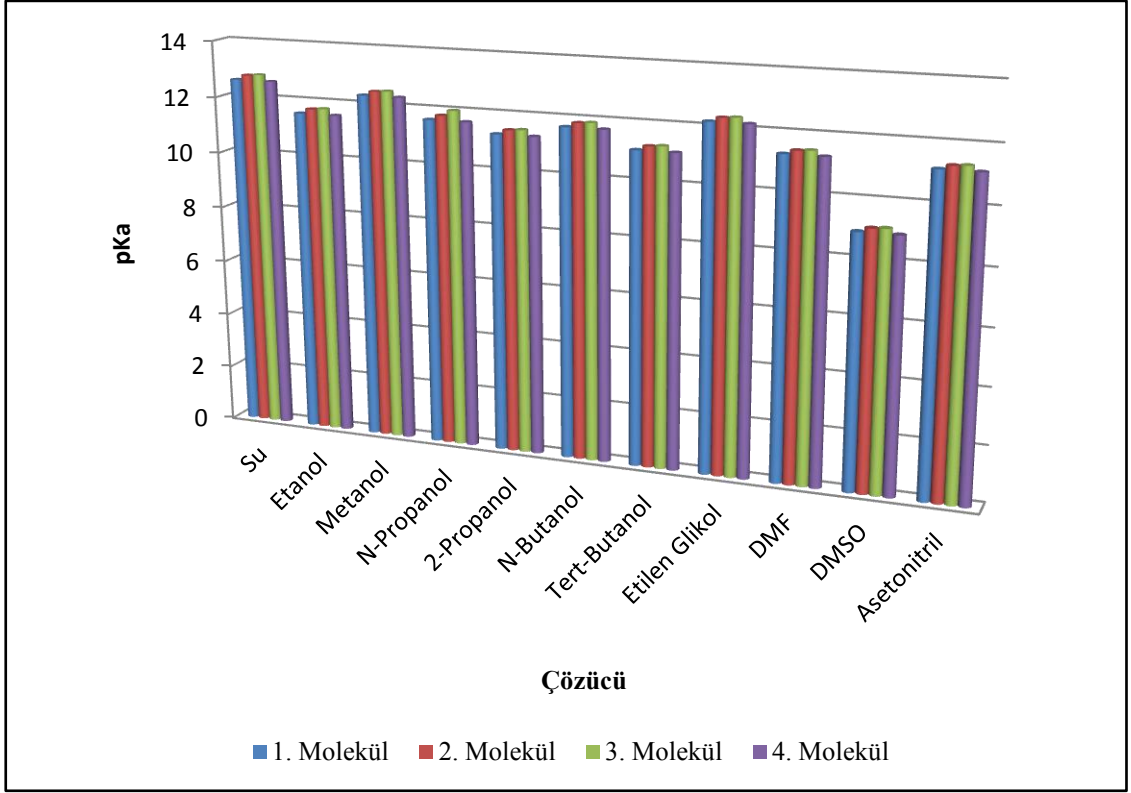
MOLEKÜL : 2.								
ÇÖZÜCÜ	pKa							
	METOT							
	AM1	MNDO	MNDOD	PM3	PM6	PM6-DH2	PM7	RM1
Su	12,7853	11,5746	11,4518	13,5275	11,5813	11,5101	12,4299	12,6160
Etanol	11,7253	11,2493	11,1583	12,7156	10,3109	10,3374	11,0017	11,8197
Metanol	12,4885	11,6954	11,6157	18,0648	11,2372	11,1741	11,9766	12,5859
N-Propanol	11,8042	11,2341	11,1619	12,7691	10,3850	10,3129	11,1095	11,8588
2-Propanol	11,4591	11,1632	11,0925	12,3465	9,8967	9,8228	10,5710	11,5082
N-Butanol	11,8615	11,3259	11,2565	12,8221	10,4362	10,3662	11,1223	11,9020
Tert-Butanol	11,2429	11,1095	11,0416	12,1164	9,5416	9,4649	9,6843	11,3705
Etilen Glikol	12,3472	11,6661	11,6015	13,1564	11,2853	11,2226	11,9160	12,2674
DMF	11,4392	11,6985	11,3776	12,0672	11,1354	11,1656	10,7053	9,6045
DMSO	9,0879	7,9147	9,2778	9,3645	8,3650	8,3334	8,7907	9,4804
Asetonitril	11,3011	11,6212	11,5599	11,1615	10,2865	10,2245	10,5933	10,7625

Tablo 48. 3. Molekülün çalışılan çözücü ortamlarında yarı deneysel kuantum kimyasal metoda göre hesaplanan pKa değerleri

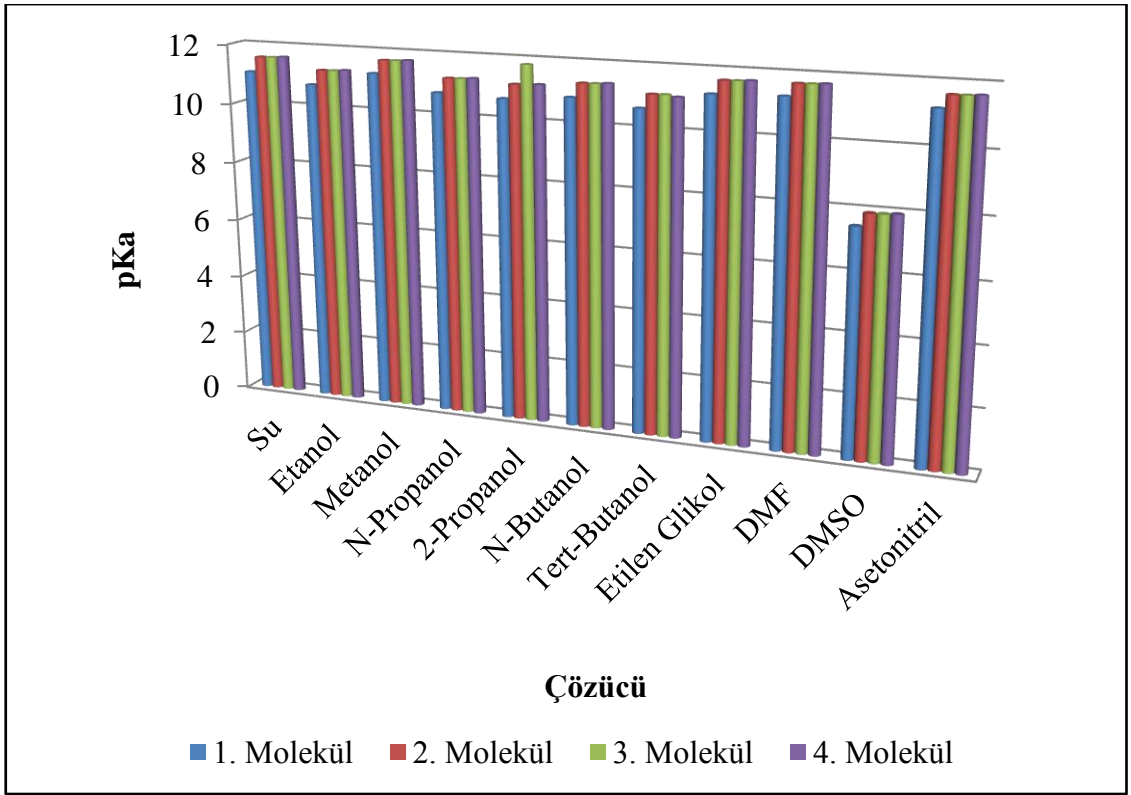
MOLEKÜL : 3.								
ÇÖZÜCÜ	pKa							
	METOT							
	AM1	MNDO	MNDOD	PM3	PM6	PM6-DH2	PM7	RM1
Su	12,8229	11,5828	11,4277	13,5969	11,5903	11,4149	12,2482	12,7755
Etanol	11,7622	11,2574	11,1345	12,7836	10,3198	10,2441	10,8236	11,9760
Metanol	12,5217	11,7027	11,5944	18,1258	11,2452	11,0903	11,8167	12,7263
N-Propanol	11,9994	11,2420	11,1386	12,8358	10,3937	10,2214	10,9351	12,0119
2-Propanol	11,4945	11,8115	11,0696	12,4118	9,9052	9,7332	10,4002	11,6582
N-Butanol	11,8962	11,3335	11,2342	12,8859	10,4445	10,2784	10,9552	12,0488
Tert-Butanol	11,2767	11,1169	11,0199	12,1789	9,5497	9,3791	9,5208	11,5140
Etilen Glikol	12,3796	11,6732	11,5807	13,2160	11,2931	11,1406	11,7597	12,4046
DMF	11,4694	11,7051	11,3582	12,1226	11,1426	11,0894	10,5598	9,7321
DMSO	9,1194	7,9216	9,2574	9,4228	8,3726	8,2533	8,6382	9,6144
Asetonitril	11,3319	11,6280	11,5400	11,2184	10,2940	10,1463	10,4443	10,8934

Tablo 49. 4. Molekülün çalışılan çözücü ortamlarında yarı deneysel kuantum kimyasal metoda göre hesaplanan pKa değerleri

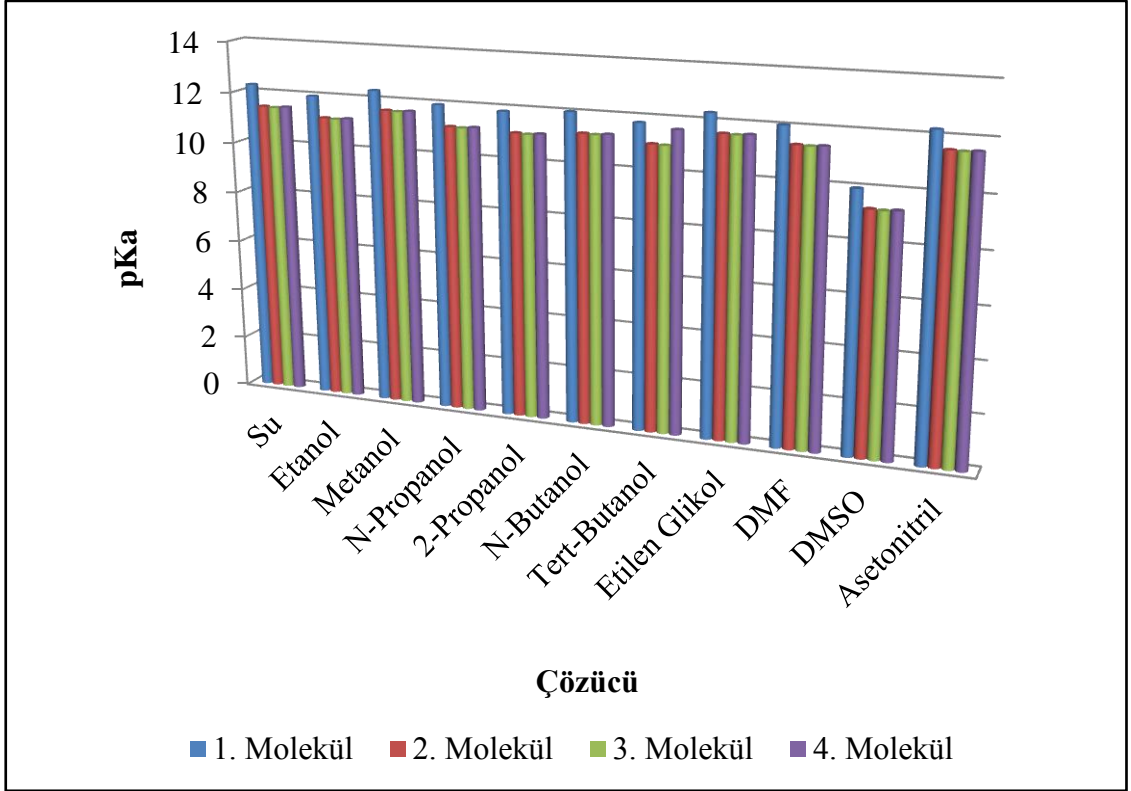
MOLEKÜL : 4.								
ÇÖZÜCÜ	pKa							
	METOT							
	AM1	MNDO	MNDOD	PM3	PM6	PM6-DH2	PM7	RM1
Su	12,6097	11,6117	11,4755	13,4290	11,5648	11,4992	12,3442	12,9323
Etanol	11,5530	11,2857	11,1814	12,6191	10,2947	10,3267	10,9176	12,1297
Metanol	12,3340	11,7281	11,6365	17,9781	11,2227	11,1646	11,9012	12,8643
N-Propanol	11,6356	11,2698	11,1846	12,6746	10,3691	10,3024	11,0272	12,1624
2-Propanol	11,2940	11,1981	11,1146	12,2540	9,8812	9,8124	10,4904	11,8056
N-Butanol	11,6999	11,3600	11,2781	12,7315	10,4210	10,3561	11,0434	12,1930
Tert-Butanol	11,0848	11,0628	11,6301	12,0278	9,4677	9,4550	9,6072	11,6551
Etilen Glikol	12,1962	11,6980	11,6218	13,0716	11,2712	11,2132	11,8422	12,5394
DMF	11,2988	11,7282	11,3965	11,9883	11,6049	11,1568	10,6366	9,8575
DMSO	8,9403	7,9459	9,2976	8,7749	8,3512	8,3242	8,7188	9,7462
Asetonitril	11,1571	11,6518	11,5792	11,0807	10,2730	10,2155	10,5230	11,0218



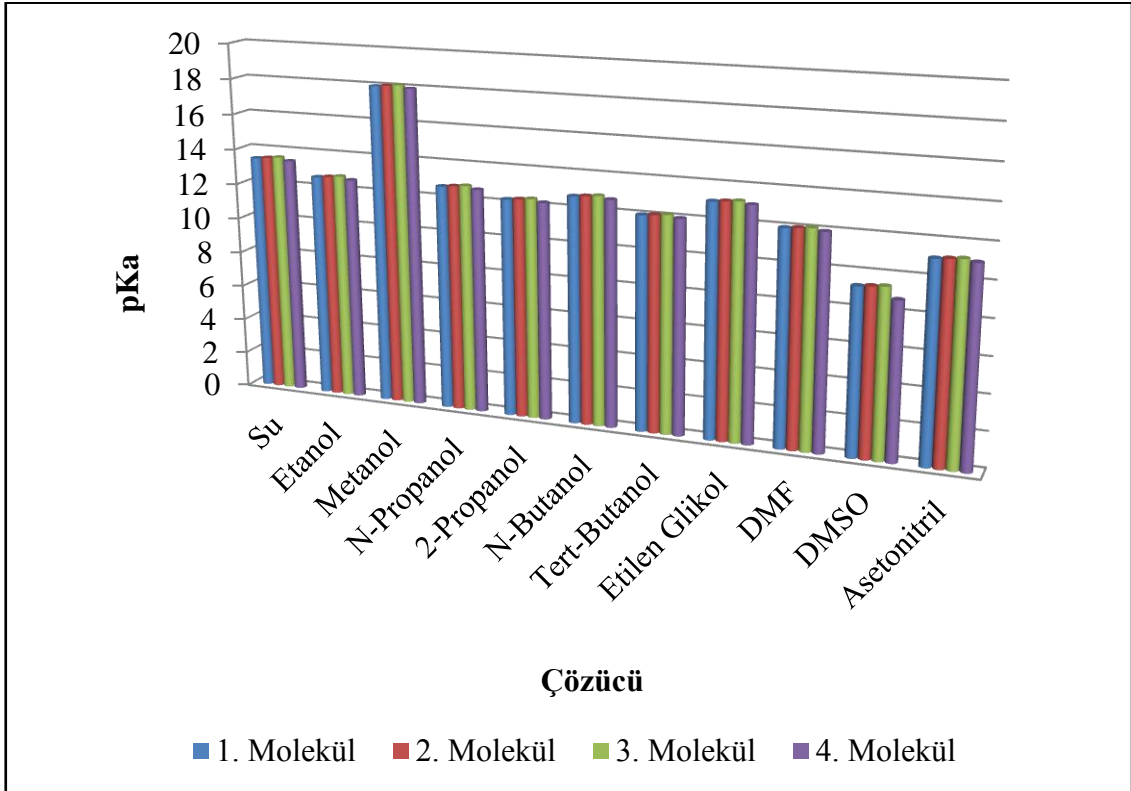
Şekil 7. AM1 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



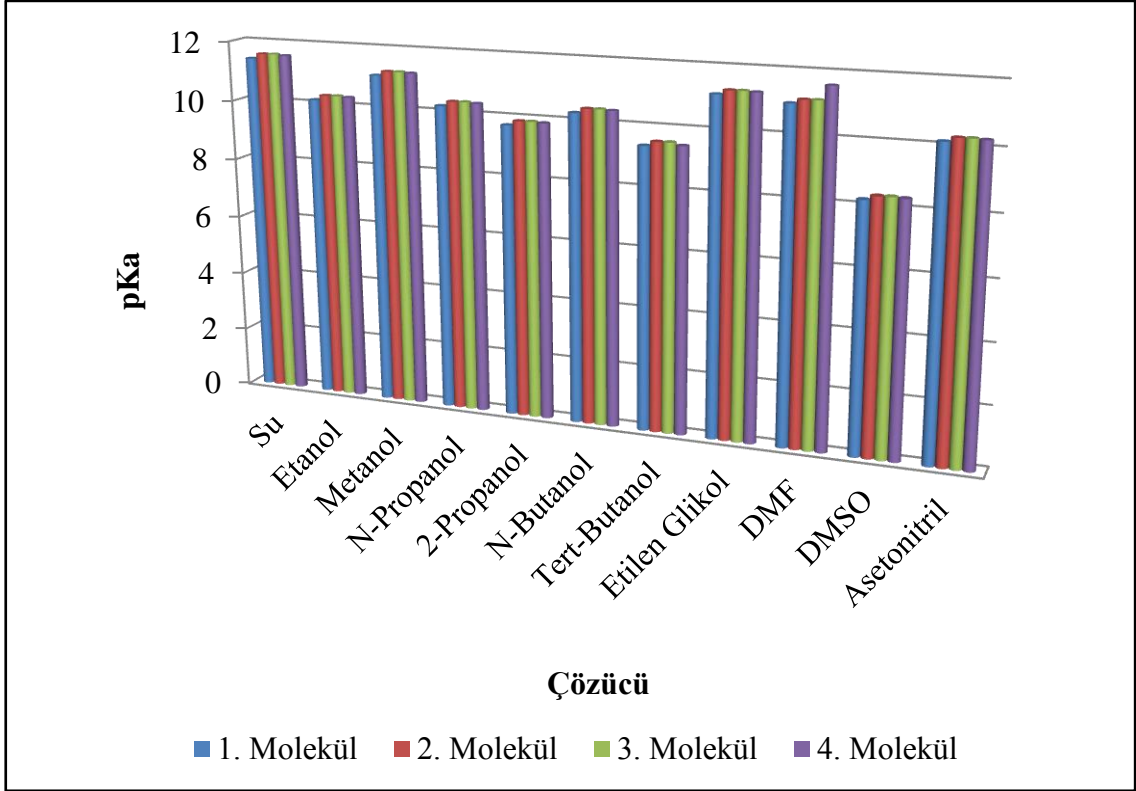
Şekil 8. MNDO metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



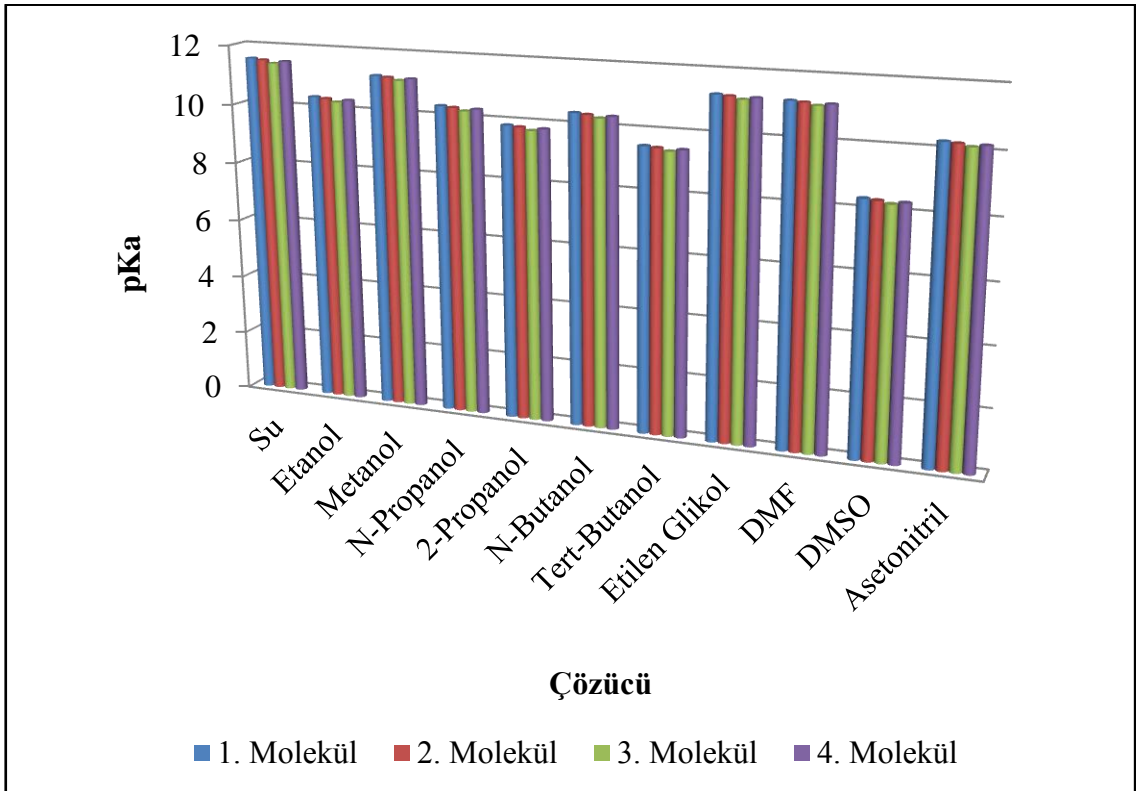
Şekil 9. MNDOD metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



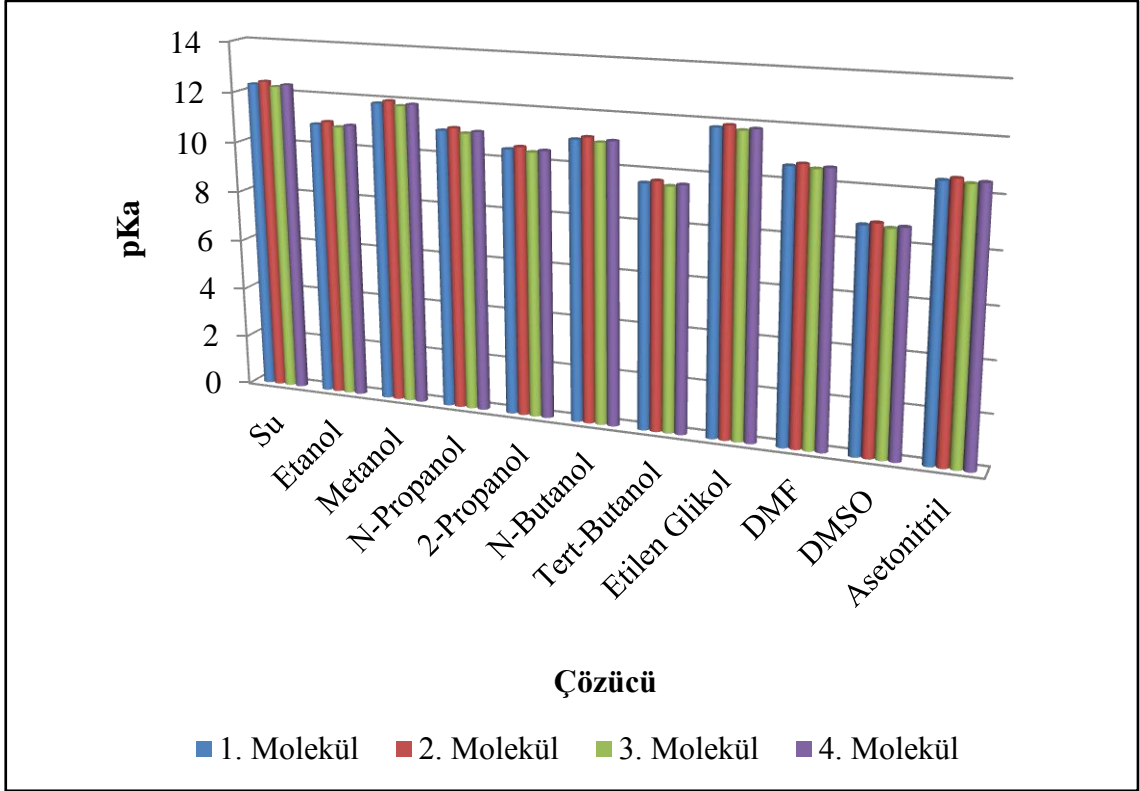
Şekil 10. PM3 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



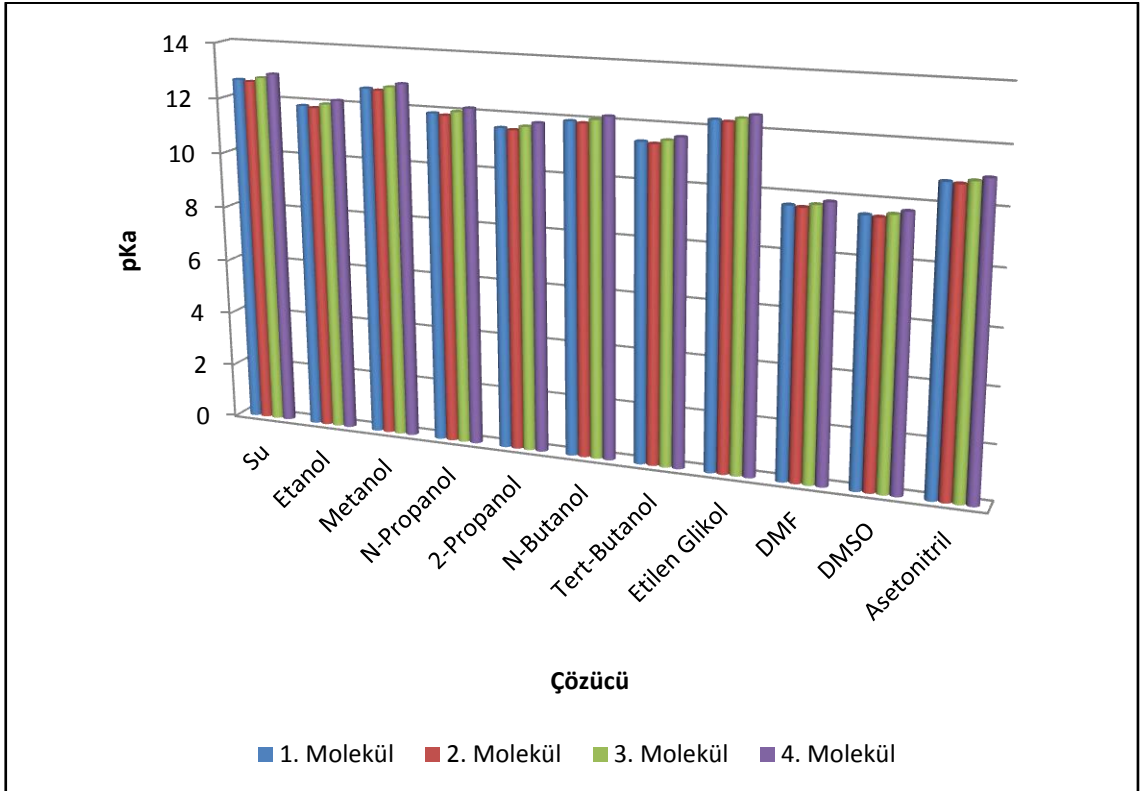
Şekil 11. PM6 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



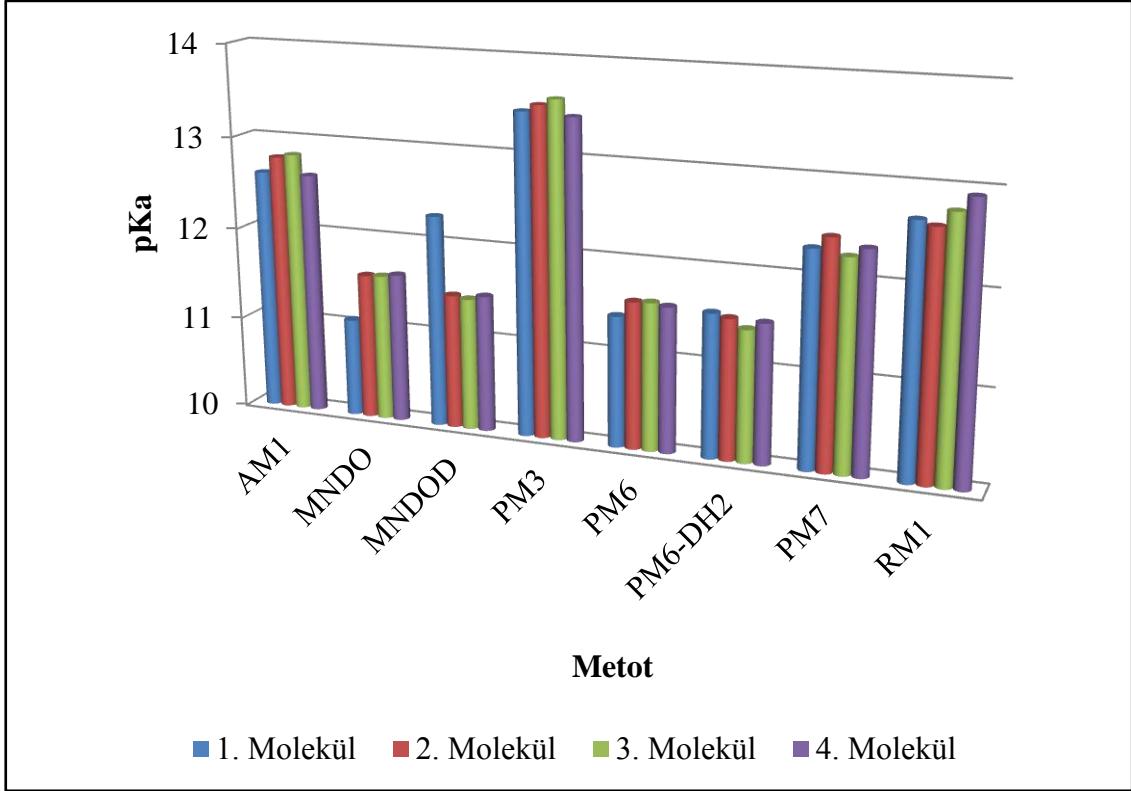
Şekil 12. PM6-DH2 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



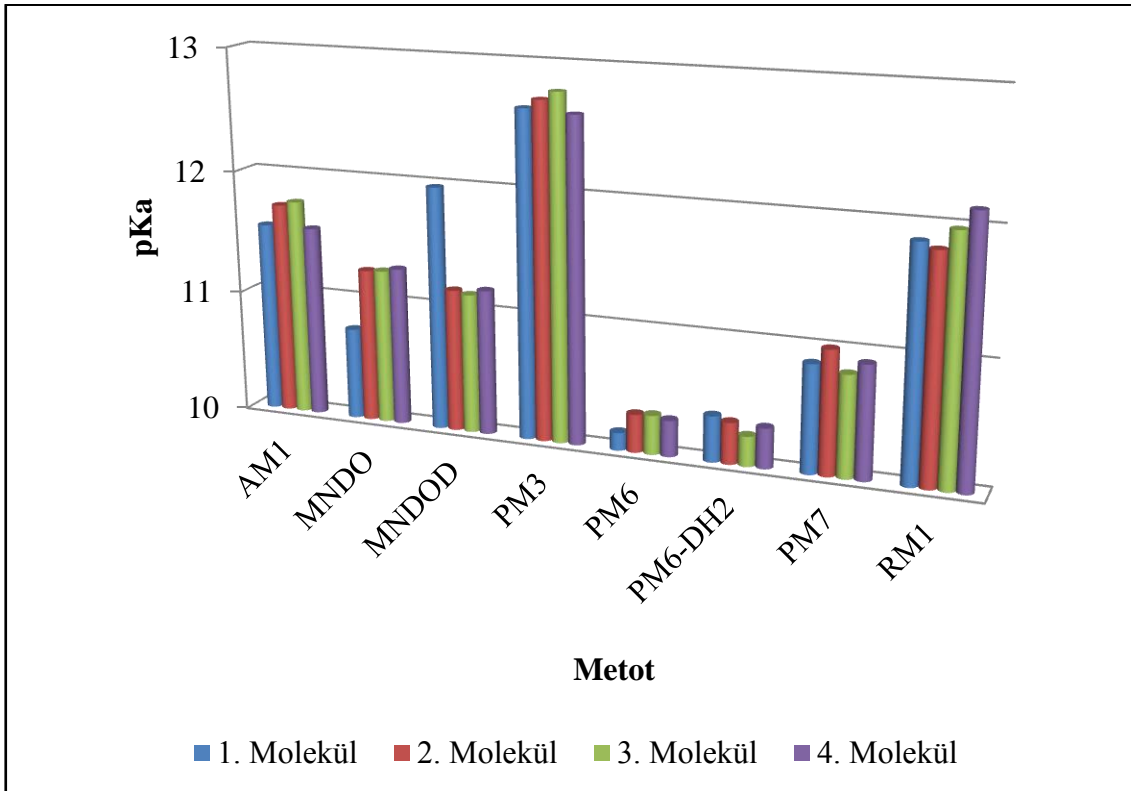
Şekil 13. PM7 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



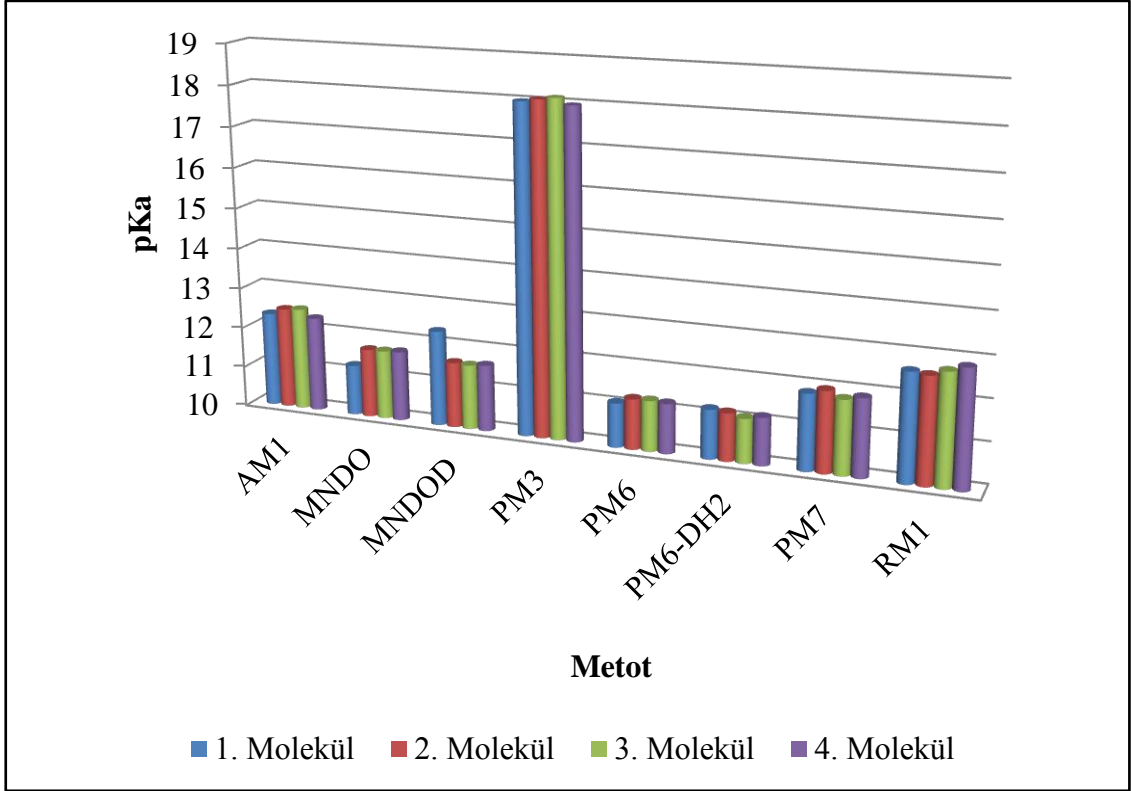
Şekil 14. RM1 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



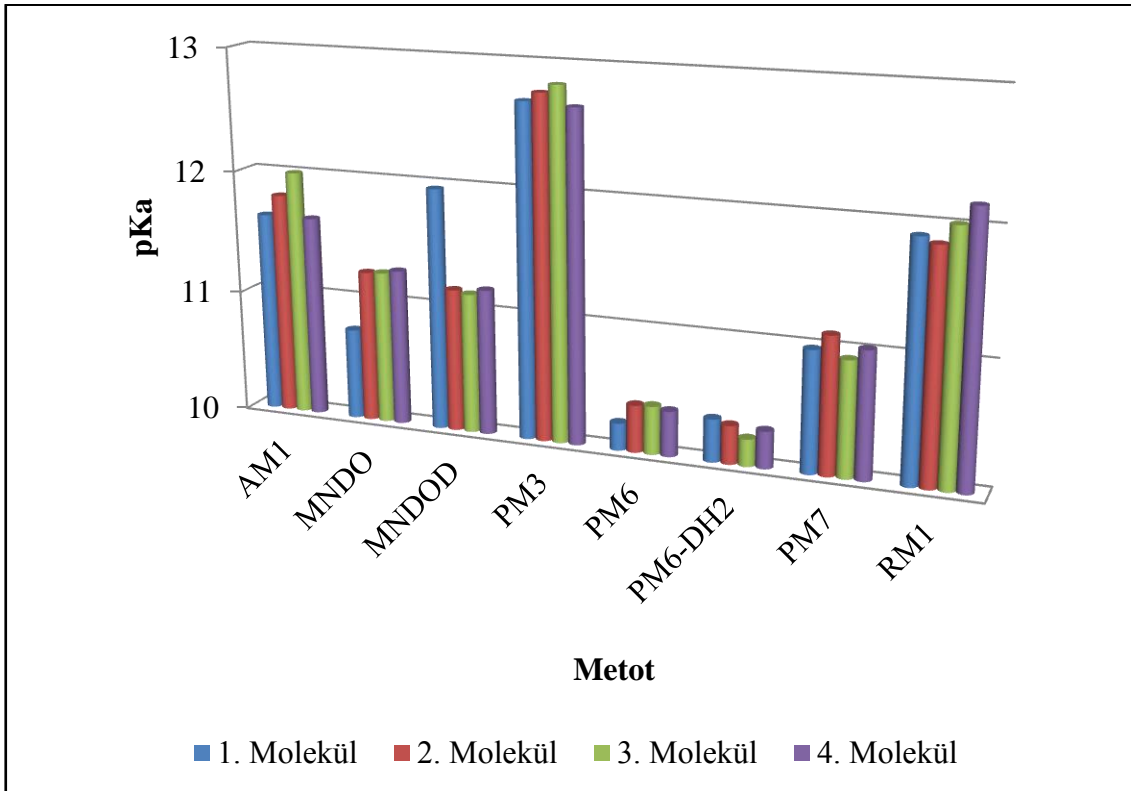
Şekil 15. Su ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



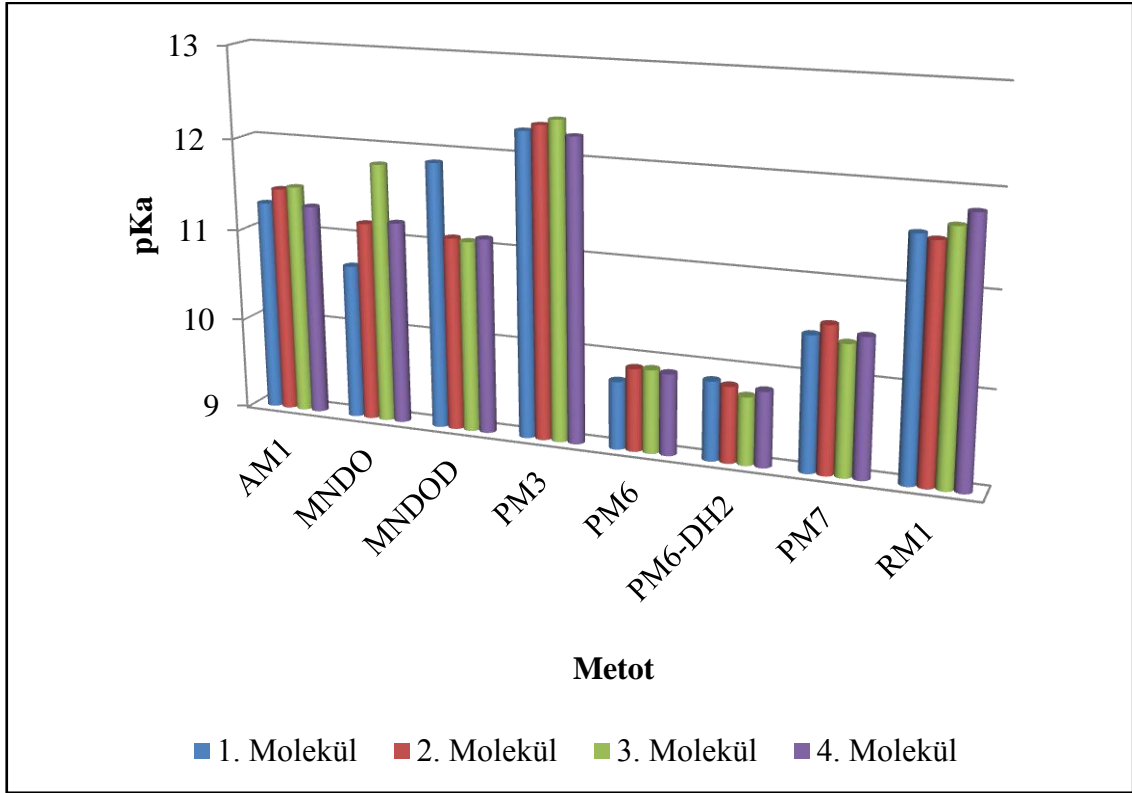
Şekil 16. Etanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



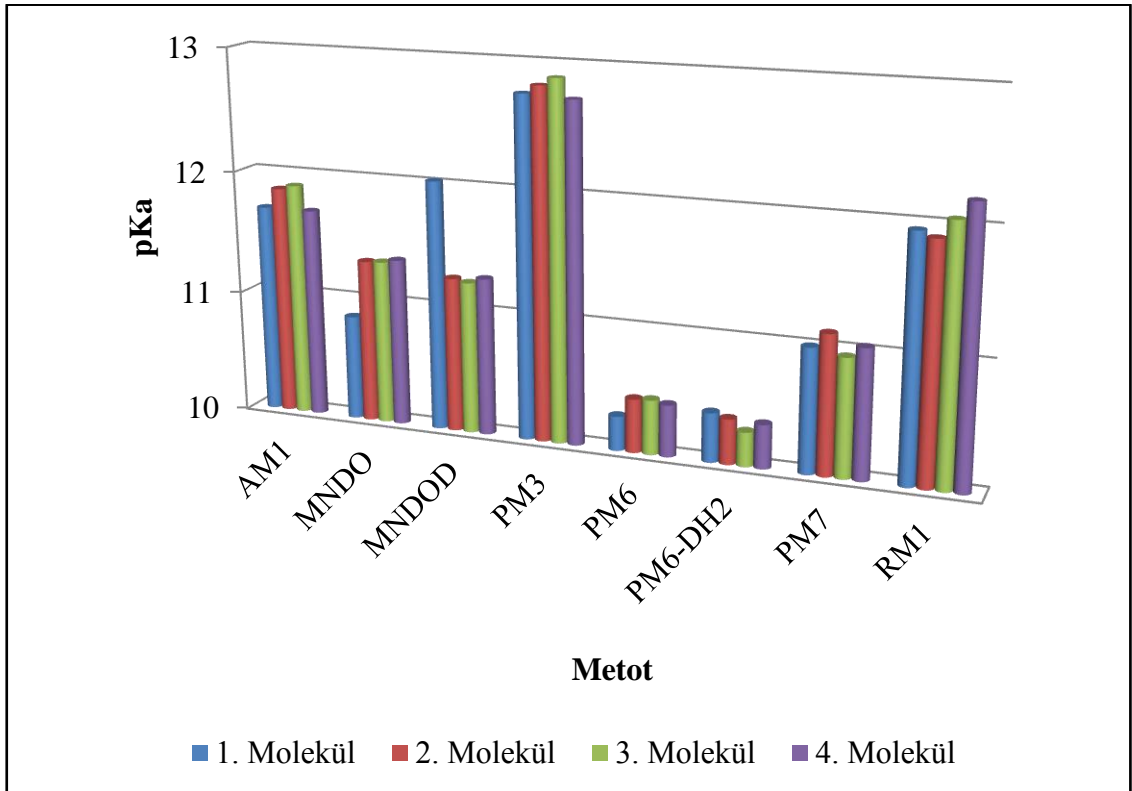
Şekil 17. Metanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



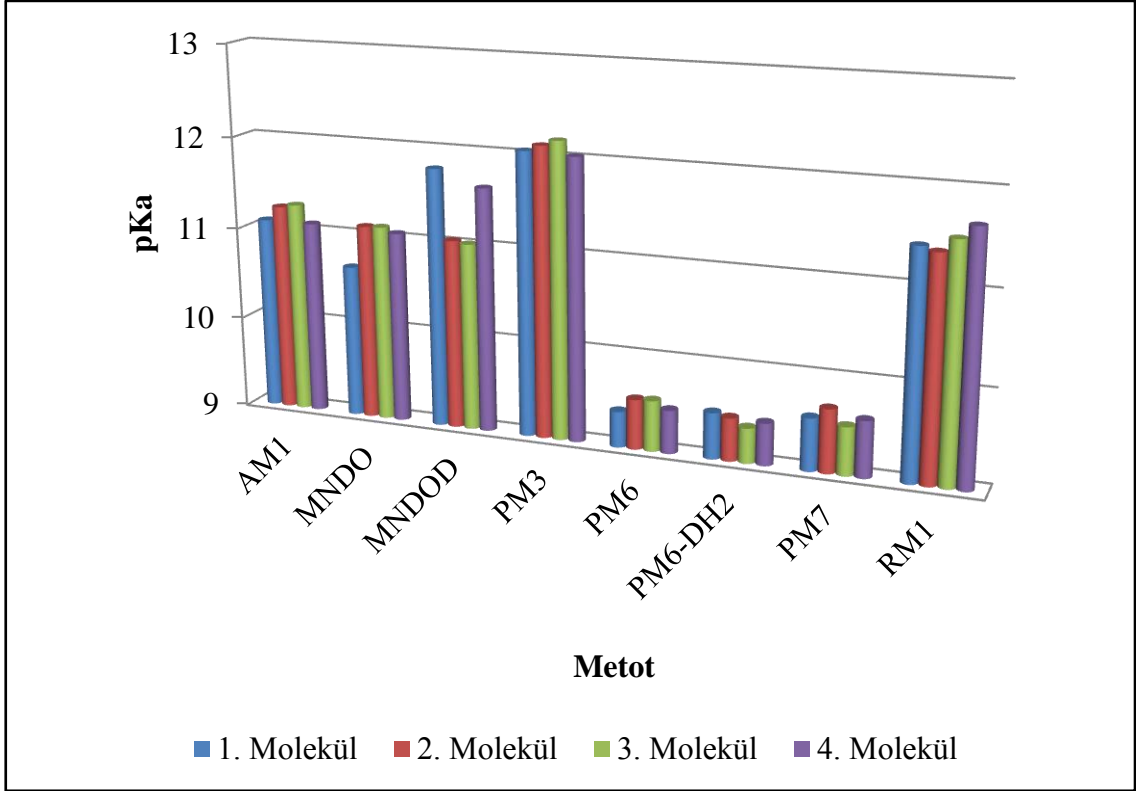
Şekil 18. N-Propanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



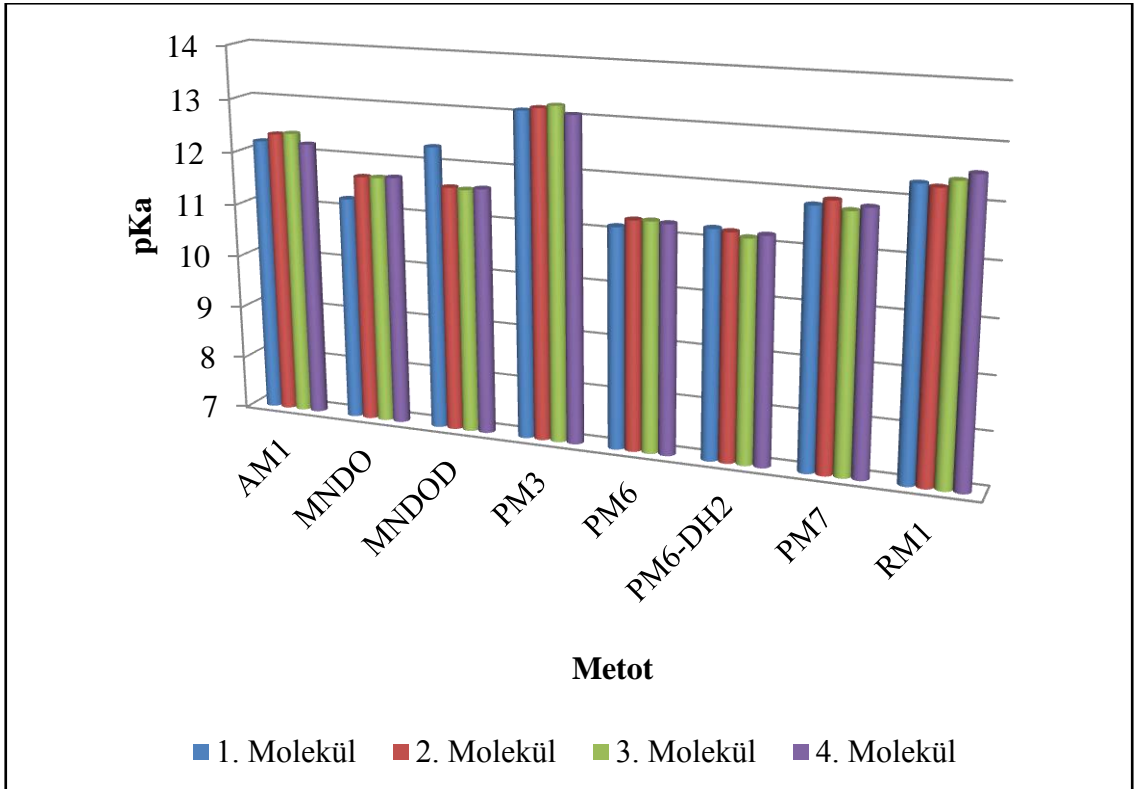
Şekil 19. 2-Propanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



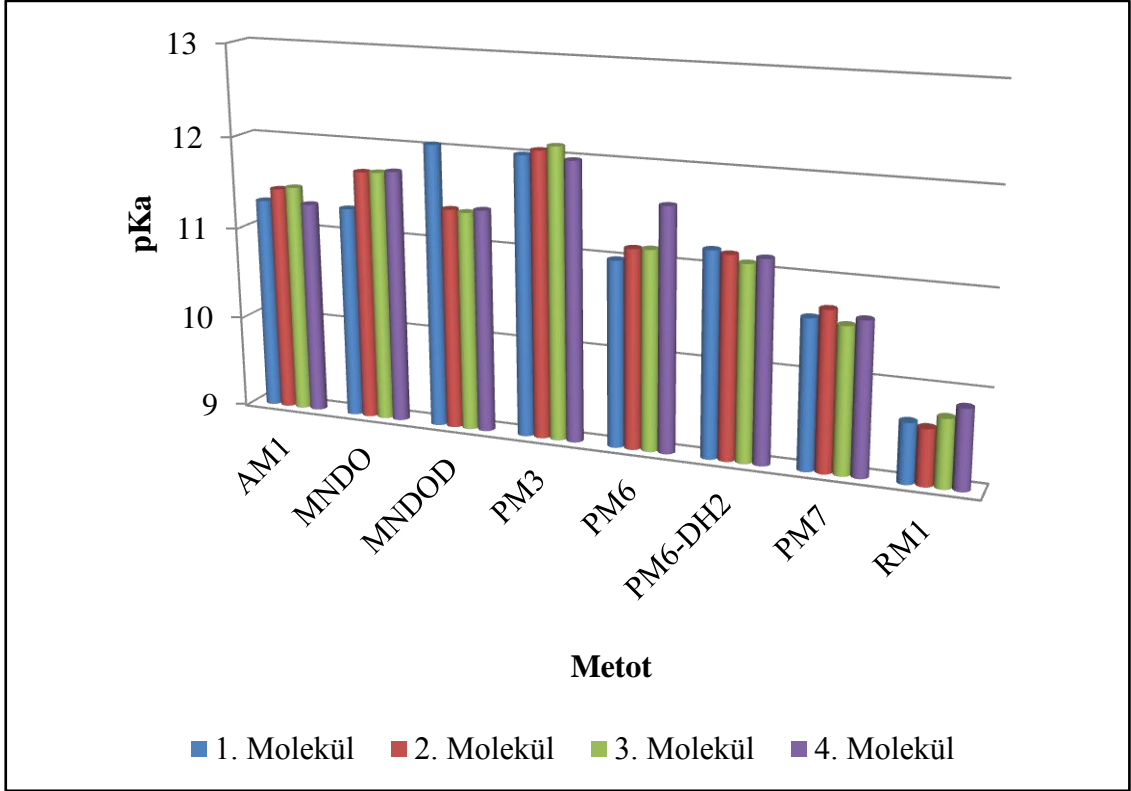
Şekil 20. N-Butanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



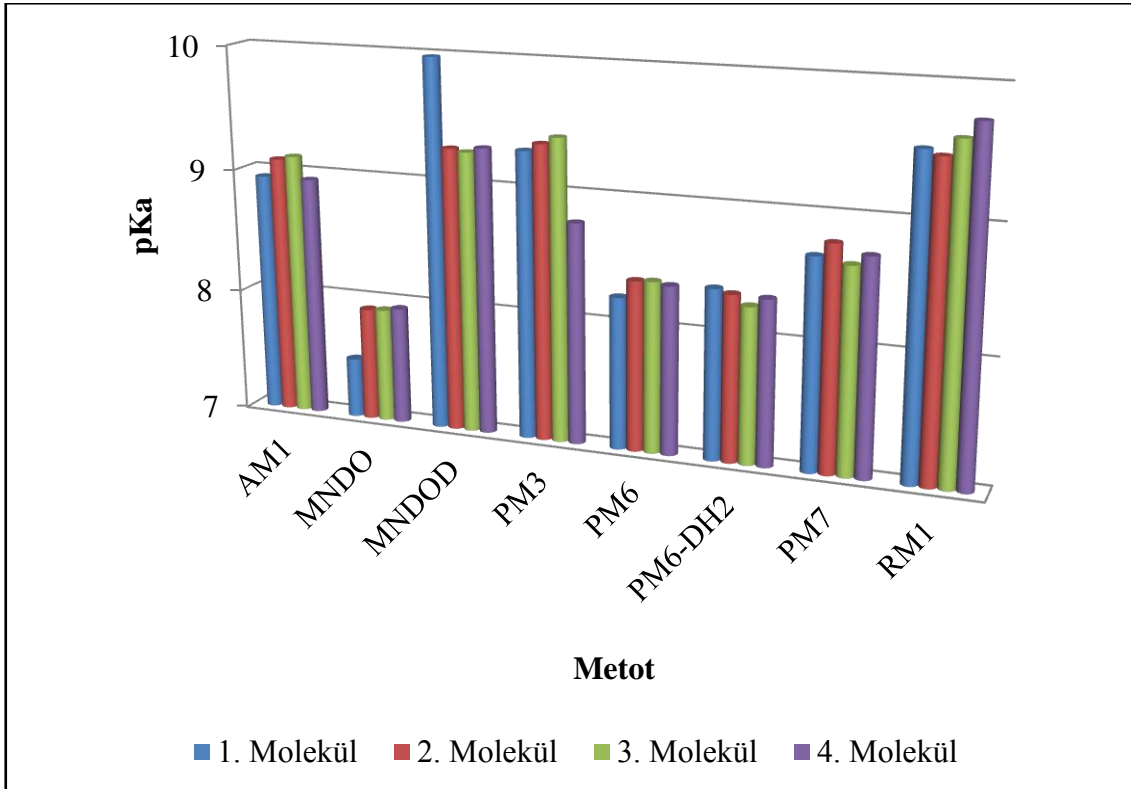
Şekil 21. Tert-Butanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



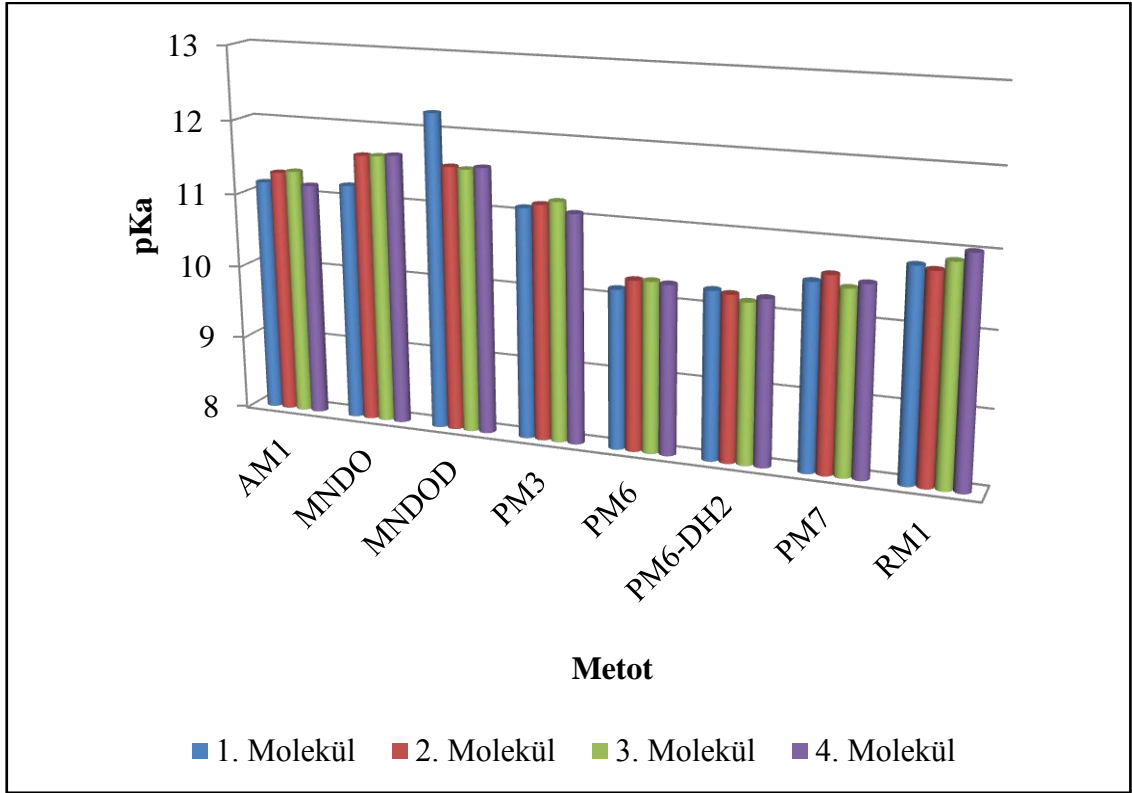
Şekil 22. Etilen glkol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



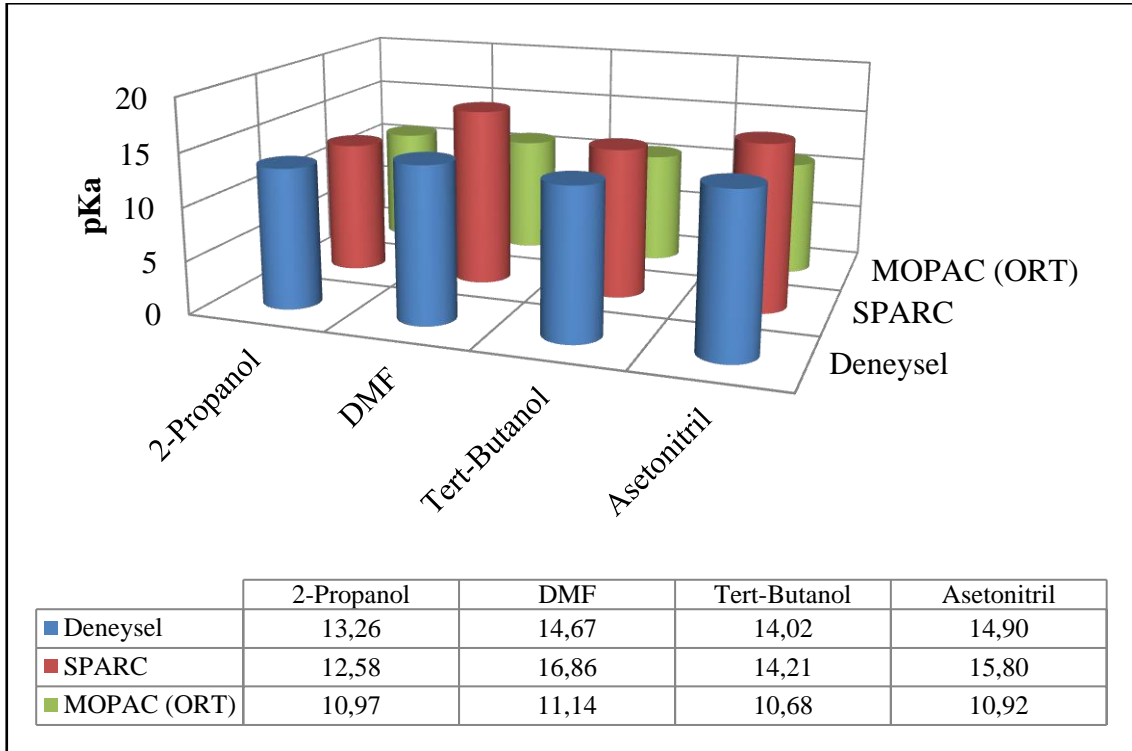
Şekil 23. DMF ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



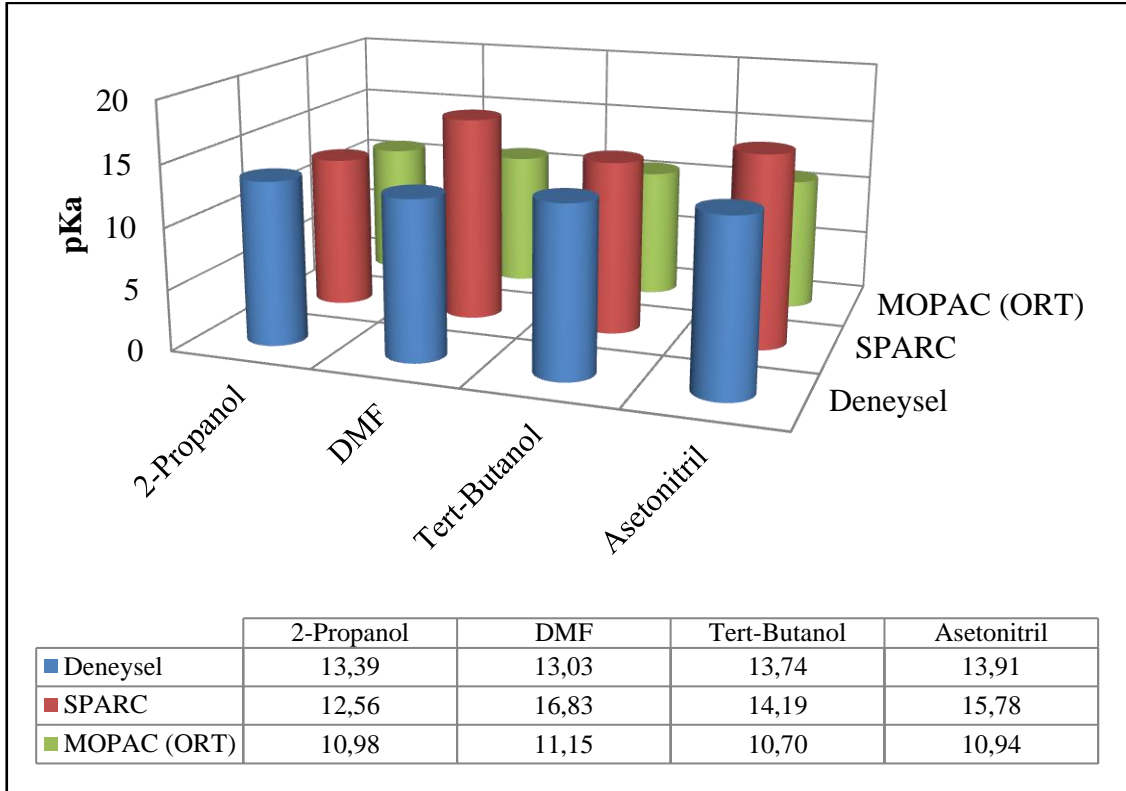
Şekil 24. DMSO ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



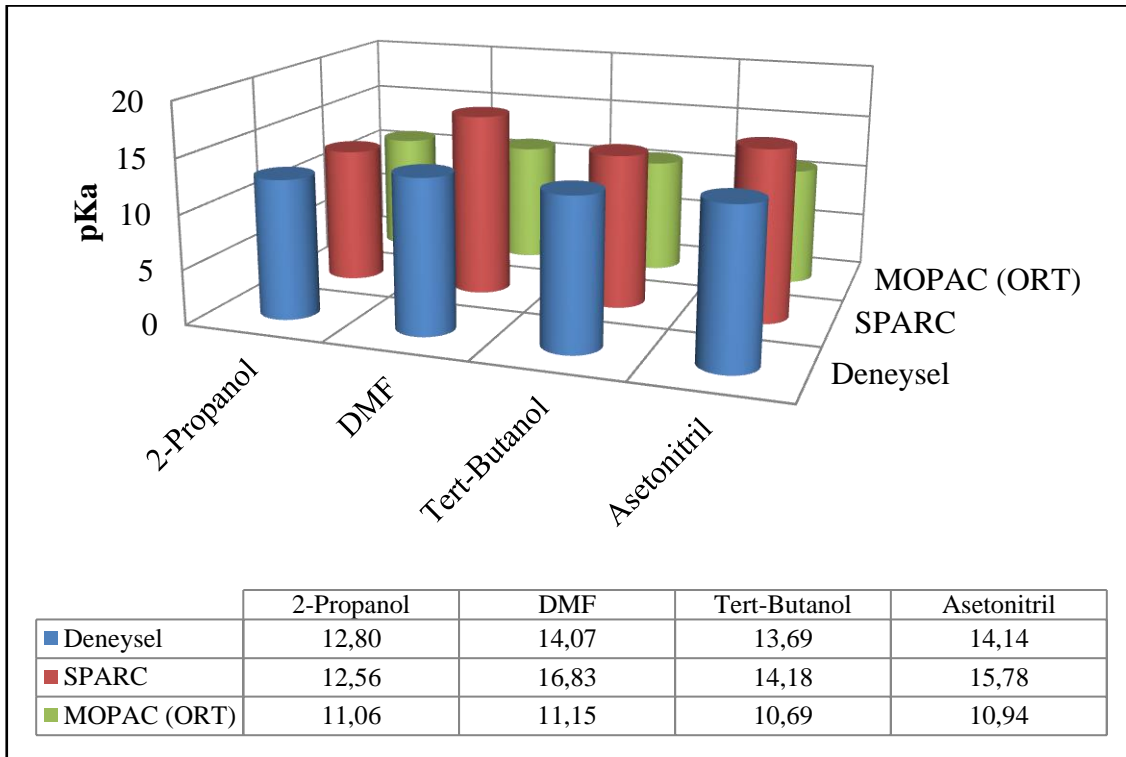
Şekil 25. Asetonitril ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



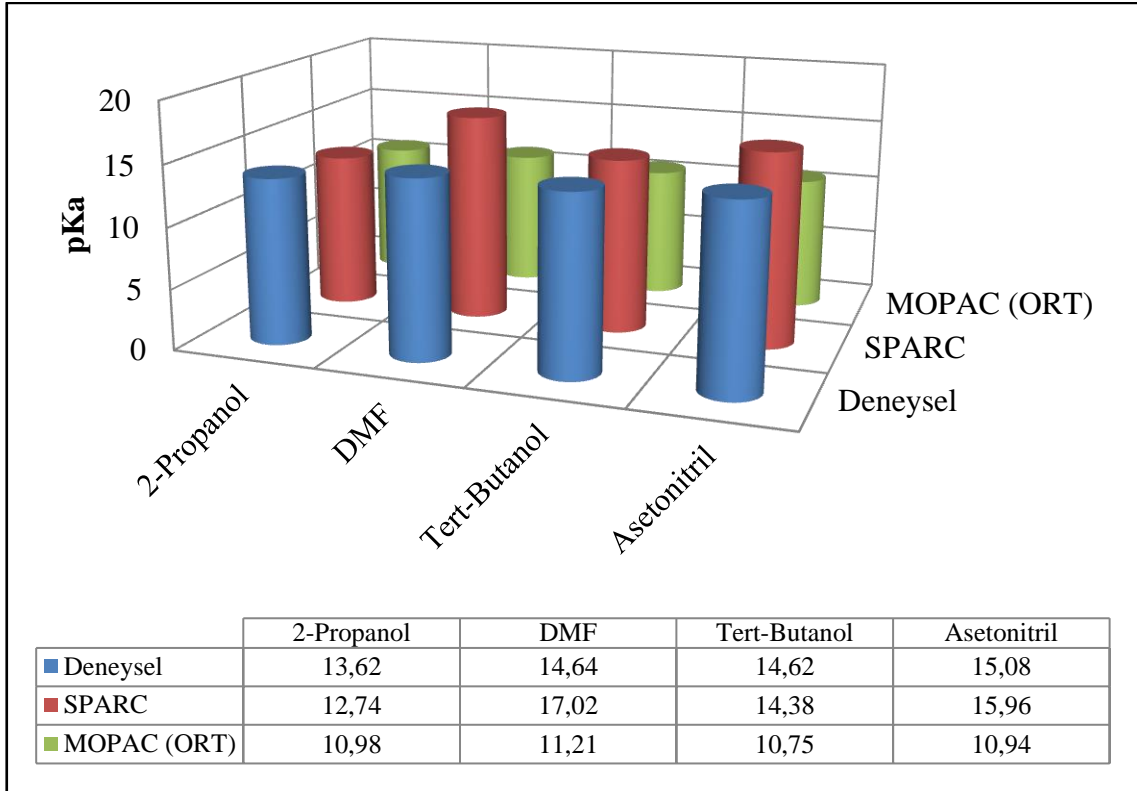
Şekil 26. 1. Molekül için deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması (*Deneysel ve SPARC değerleri kaynak (Çakır, 2014)'den alınmıştır.)



Şekil 27. 2. Molekül için deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması
(*Deneysel ve SPARC değerleri kaynak (Çakır, 2014)'den alınmıştır.)



Şekil 28. 3. Molekül için deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması
(*Deneysel ve SPARC değerleri kaynak (Çakır, 2014)'den alınmıştır.)



Şekil 29. 4. Molekül için deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması
(*Deneysel ve SPARC değerleri kaynak (Çakır, 2014)'den alınmıştır.)

Dört adet benzimidazol türevi bileşiğindeki halka sisteminde N-H protonunun zayıf asidik özellik gösterdiği bilinir. Sonuçlar çözücülerin dielektrik sabitine göre incelendiğinde teorik olarak asitlik sıralaması dielektrik sabitinin artmasıyla asitlik sabiti artar. Bu sonuca göre asitlik sabiti artışı ; su (D : 78) > DMSO (D : 46) > etilen glikol (D : 38) > DMF (D : 37) > asetonitril (D : 36) > metanol (D : 33) > etanol (D : 24) > n-propanol (D : 20,3) > 2-propanol (D : 19,4) > n-butanol (D : 17,5) > tert-butanol (D : 12) şeklindedir. Elde edilen sonuçlar pK_a değerindeki artışa göre (veya asitlikteki azalmaya göre sıralandığında) incelendiğinde 1. Molekülde;

AM1'e göre, DMSO > tert-butanol > asetonitril > 2-Propanol > DMF > etanol > n-propanol > n-butanol > etilen glikol > metanol > su,

MNDO'ya göre, DMSO > tert-butanol > 2-propanol > n-propanol > etanol > n-butanol > su > asetonitril > etilen glikol > metanol > DMF,

MNDOD'a göre, DMSO > tert-butanol > 2-propanol > n-propanol > etanol > n-butanol > DMF > asetonitril > su > etilen glikol > metanol,

PM3'e göre, DMSO > asetonitril > DMF > tert-butanol > 2-propanol > etanol > n-propanol > n-butanol > etilen glikol > su > metanol,

PM6'ya göre, DMSO > tert-butanol > 2-propanol > etanol > asetonitril > n-propanol > n-butanol > DMF > metanol > etilen glikol > su,

PM6-DH2'ye göre, DMSO > tert-butanol > 2-propanol > asetonitril > n-propanol > etanol > n-butanol > DMF > metanol > etilen glikol > su,

PM7'ye göre, DMSO > tert-butanol > 2-propanol > asetonitril > DMF > etanol > n-propanol > n-butanol > etilen glikol > metanol > su,

RM1'e göre, DMSO > DMF > asetonitril > tert-butanol > 2-propanol > etanol > n-propanol > n-butanol > etilen glikol > metanol > su,

2. Molekülde;

AM1'e göre, DMSO > tert-butanol > asetonitril > DMF > 2-propanol > etanol > n-propanol > n-butanol > etilen glikol > metanol > su,

MNDO'ya göre, DMSO > tert-butanol > 2-propanol > n-propanol > etanol > n-butanol > su > asetonitril > etilen glikol > metanol > DMF,

MNDOD'a göre, DMSO > tert-butanol > 2-propanol > etanol > n-propanol > n-butanol > DMF > su > asetonitril > etilen glikol > metanol,

PM3'e göre, DMSO > asetonitril > DMF > tert-butanol > 2-propanol > etanol > n-propanol > n-butanol > etilen glikol > su > metanol,

PM6'ya göre, DMSO > tert-butanol > 2-propanol > asetonitril > etanol > n-propanol > n-butanol > DMF > metanol > etilen glikol > su,

PM6-DH2'ye göre, DMSO > tert-butanol > 2-propanol > asetonitril > n-propanol > etanol > n-butanol > DMF > metanol > etilen glikol > su,

PM7'ye göre, DMSO > tert-butanol > 2-propanol > asetonitril > DMF > etanol > n-propanol > n-butanol > etilen glikol > metanol > su,

RM1'e göre, DMSO > DMF > asetonitril > tert-butanol > 2-propanol > etanol > n-propanol > n-butanol > etilen glikol > metanol > su,

3. Molekülde;

AM1'e göre, DMSO > tert-butanol > asetonitril > DMF > 2-propanol > etanol > n-butanol > n-propanol > etilen glikol > metanol > su,

MNDO'ya göre, DMSO > tert-butanol > n-propanol > etanol > n-butanol > su > asetonitril > etilen glikol > metanol > DMF > 2-propanol,

MNDOD'a göre, DMSO > tert-butanol > 2-propanol > etanol > n-propanol > n-butanol > DMF > su > asetonitril > etilen glikol > metanol,

PM3'e göre, DMSO > asetonitril > DMF > tert-butanol > 2-propanol > etanol > n-propanol > n-butanol > etilen glikol > su > metanol,

PM6'ya göre, DMSO > tert-butanol > 2-propanol > asetonitril > etanol > n-propanol > n-butanol > DMF > metanol > etilen glikol > su,

PM6-DH2'ye göre, DMSO > tert-butanol > 2-propanol > asetonitril > n-propanol > etanol > n-butanol > DMF > metanol > etilen glikol > su,

PM7'ye göre, DMSO > tert-butanol > 2-propanol > asetonitril > DMF > etanol > n-propanol > n-butanol > etilen glikol > metanol > su,

RM1'e göre, DMSO > DMF > asetonitril > tert-butanol > 2-propanol > etanol > n-propanol > n-butanol > etilen glikol > metanol > su,

4. Molekülde;

AM1'e göre, DMSO > tert-butanol > asetonitril > 2-propanol > DMF > etanol > n-propanol > n-butanol > etilen glikol > metanol > su,

MNDO'ya göre, DMSO > tert-butanol > 2-propanol > n-propanol > etanol > n-butanol > su > asetonitril > etilen glikol > metanol > DMF,

MNDOD'a göre, DMSO > 2-propanol > etanol > n-propanol > n-butanol > DMF > su > asetonitril > etilen glikol > tert-butanol > metanol,

PM3'e göre, DMSO > asetonitril > DMF > tert-butanol > 2-propanol > etanol > n-propanol > n-butanol > etilen glikol > su > metanol,

PM6'ya göre, DMSO > tert-butanol > 2-propanol > asetonitril > etanol > n-propanol > n-butanol > metanol > etilen glikol > su > DMF,

PM6-DH2'ye göre, DMSO > tert-butanol > 2-propanol > asetonitril > n-propanol > etanol > n-butanol > DMF > metanol > etilen glikol > su,

PM7'ye göre, DMSO > tert-butanol > 2-propanol > asetonitril > DMF > etanol > n-propanol > n-butanol > etilen glikol > metanol > su,

RM1'e göre, DMSO > DMF > asetonitril > tert-butanol > 2-propanol > etanol > n-propanol > n-butanol > etilen glikol > metanol > su şeklindedir. Bu sıralamaların daha iyi anlaşılabilmesi için bu veriler bir tablo halinde Tablo 50-53'de verilmiştir. Burada

asidik kuvvet bakımından 1. molekülün DMSO ortamında MNDO metoduna göre ($pK_a = 7,4838$) diğer moleküllere oranla daha kuvvetli, 3. molekülün metanol ortamında PM3 metoduna göre ($pK_a = 18,1258$) diğer moleküllere oranla daha az kuvvetli asidik özellik gösterdiği tespit edilmiştir.

Tablo 50. 1. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin sıralanması

MOLEKÜL : 1.							
AM1	MNDO	MNDOD	PM3	PM6	PM6-DH2	PM7	RM1
DMSO (8,9393)	DMSO (7,4838)	DMSO (9,9788)	DMSO (9,3022)	DMSO (8,2225)	DMSO (8,3649)	DMSO (8,6821)	DMSO (9,5234)
Tert-Butanol (11,0837)	Tert-Butanol (10,6479)	Tert-Butanol (11,7928)	Asetonitril (11,1007)	Tert-Butanol (9,3889)	Tert-Butanol (9,4986)	Tert-Butanol (9,5678)	DMF (9,6455)
Asetonitril (11,1561)	2-Propanol (10,6811)	2-Propanol (11,8770)	DMF (12,0079)	2-Propanol (9,7373)	2-Propanol (9,8580)	2-Propanol (10,4493)	Asetonitril (10,8045)
2-Propanol (11,2929)	N-Propanol (10,7418)	N-Propanol (11,9631)	Tert-Butanol (12,0498)	Etanol (10,1446)	Asetonitril (10,2553)	Asetonitril (10,4872)	Tert-Butanol (11,4166)
DMF (11,2979)	Etanol (10,7467)	Etanol (11,9762)	2-Propanol (12,2769)	Asetonitril (10,1474)	N-Propanol (10,3489)	DMF (10,6017)	2-Propanol (11,5564)
Etanol (11,5519)	N-Butanol (10,8540)	N-Butanol (12,0244)	Etanol (12,6431)	N-Propanol (10,2221)	Etanol (10,3742)	Etanol (10,8749)	Etanol (11,8699)
N-Propanol (11,6344)	Su (11,0617)	DMF (12,0453)	N-Propanol (12,6980)	N-Butanol (10,2802)	N-Butanol (10,4006)	N-Propanol (10,9852)	N-Propanol (11,9079)
N-Butanol (11,6988)	Asetonitril (11,2008)	Asetonitril (12,2442)	N-Butanol (12,7540)	DMF (10,9997)	DMF (11,1956)	N-Butanol (11,0033)	N-Butanol (11,9491)
Etilen Glikol (12,1951)	Etilen Glikol (11,2250)	Su (12,2865)	Etilen Glikol (13,0926)	Metanol (11,0878)	Metanol (11,2073)	Etilen Glikol (11,8047)	Etilen Glikol (12,3115)
Metanol (12,3329)	Metanol (11,2441)	Etilen Glikol (12,3193)	Su (13,4534)	Etilen Glikol (11,1394)	Etilen Glikol (11,2547)	Metanol (11,8627)	Metanol (12,6310)
Su (12,6084)	DMF (11,2882)	Metanol (12,3502)	Metanol (17,9996)	Su (11,4116)	Su (11,5476)	Su (12,3005)	Su (12,6672)

Tablo 51. 2. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin sıralanması

MOLEKÜL : 2.							
AM1	MNDO	MNDOD	PM3	PM6	PM6-DH2	PM7	RM1
DMSO (9,0879)	DMSO (7,9147)	DMSO (9,2778)	DMSO (9,3645)	DMSO (8,3650)	DMSO (8,3334)	DMSO (8,7907)	DMSO (9,4804)
Tert-Butanol (11,2429)	Tert-Butanol (11,1095)	Tert-Butanol (11,0416)	Asetonitril (11,1615)	Tert-Butanol (9,5416)	Tert-Butanol (9,4649)	Tert-Butanol (9,6843)	DMF (9,6045)
Asetonitril (11,3011)	2-Propanol (11,1632)	2-Propanol (11,0925)	DMF (12,0672)	2-Propanol (9,8967)	2-Propanol (9,8228)	2-Propanol (10,5710)	Asetonitril (10,7625)
DMF (11,4392)	N-Propanol (11,2341)	Etanol (11,1583)	Tert-Butanol (12,1164)	Asetonitril (10,2865)	Asetonitril (10,2245)	Asetonitril (10,5933)	Tert-Butanol (11,3705)
2-Propanol (11,4591)	Etanol (11,2493)	N-Propanol (11,1619)	2-Propanol (12,3465)	Etanol (10,3109)	N-Propanol (10,3129)	DMF (10,7053)	2-Propanol (11,5082)
Etanol (11,7253)	N-Butanol (11,3259)	N-Butanol (11,2565)	Etanol (12,7156)	N-Propanol (10,3850)	Etanol (10,3374)	Etanol (11,0017)	Etanol (11,8197)
N-Propanol (11,8042)	Su (11,5746)	DMF (11,3776)	N-Propanol (12,7691)	N-Butanol (10,4362)	N-Butanol (10,3662)	N-Propanol (11,1095)	N-Propanol (11,8588)
N-Butanol (11,8615)	Asetonitril (11,6212)	Su (11,4518)	N-Butanol (12,8221)	DMF (11,1354)	DMF (11,1656)	N-Butanol (11,1223)	N-Butanol (11,9020)
Etilen Glikol (12,3472)	Etilen Glikol (11,6661)	Asetonitril (11,5599)	Etilen Glikol (13,1564)	Metanol (11,2372)	Metanol (11,1741)	Etilen Glikol (11,9160)	Etilen Glikol (12,2674)
Metanol (12,4885)	Metanol (11,6954)	Etilen Glikol (11,6015)	Su (13,5275)	Etilen Glikol (11,2853)	Etilen Glikol (11,2226)	Metanol (11,9766)	Metanol (12,5859)
Su (12,7853)	DMF (11,6985)	Metanol (11,6157)	Metanol (18,0648)	Su (11,5813)	Su (11,5101)	Su (12,4299)	Su (12,6160)

Tablo 52. 3. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin sıralanması

MOLEKÜL : 3.							
AM1	MNDO	MNDOD	PM3	PM6	PM6-DH2	PM7	RM1
DMSO (9,1194)	DMSO (7,9216)	DMSO (9,2574)	DMSO (9,4228)	DMSO (8,3726)	DMSO (8,2533)	DMSO (8,6382)	DMSO (9,6144)
Tert-Butanol (11,2767)	Tert-Butanol (11,1169)	Tert-Butanol (11,0199)	Asetonitril (11,2184)	Tert-Butanol (9,5497)	Tert-Butanol (9,3791)	Tert-Butanol (9,5208)	DMF (9,7321)
Asetonitril (11,3319)	N-Propanol (11,2420)	2-Propanol (11,0696)	DMF (12,1226)	2-Propanol (9,9052)	2-Propanol (9,7332)	2-Propanol (10,4002)	Asetonitril (10,8934)
DMF (11,4694)	Etanol (11,2574)	Etanol (11,1345)	Tert-Butanol (12,1789)	Asetonitril (10,2940)	Asetonitril (10,1463)	Asetonitril (10,4443)	Tert-Butanol (11,5140)
2-Propanol (11,4945)	N-Butanol (11,3335)	N-Propanol (11,1386)	2-Propanol (12,4118)	Etanol (10,3198)	N-Propanol (10,2214)	DMF (10,5598)	2-Propanol (11,6582)
Etanol (11,7622)	Su (11,5828)	N-Butanol (11,2342)	Etanol (12,7836)	N-Propanol (10,3937)	Etanol (10,2441)	Etanol (10,8236)	Etanol (11,9760)
N-Butanol (11,8962)	Asetonitril (11,6280)	DMF (11,3582)	N-Propanol (12,8358)	N-Butanol (10,4445)	N-Butanol (10,2784)	N-Propanol (10,9351)	N-Propanol (12,0119)
N-Propanol (11,9994)	Etilen Glikol (11,6732)	Su (11,4277)	N-Butanol (12,8859)	DMF (11,1426)	DMF (11,0894)	N-Butanol (10,9552)	N-Butanol (12,0488)
Etilen Glikol (12,3796)	Metanol (11,7027)	Asetonitril (11,5400)	Etilen Glikol (13,2160)	Metanol (11,2452)	Metanol (11,0903)	Etilen Glikol (11,7597)	Etilen Glikol (12,4046)
Metanol (12,5217)	DMF (11,7051)	Etilen Glikol (11,5807)	Su (13,5969)	Etilen Glikol (11,2931)	Etilen Glikol (11,1406)	Metanol (11,8167)	Metanol (12,7263)
Su (12,8229)	2-Propanol (11,8115)	Metanol (11,5944)	Metanol (18,1258)	Su (11,5903)	Su (11,4149)	Su (12,2482)	Su (12,7755)

Tablo 53. 4. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin sıralanması

MOLEKÜL : 4.							
AM1	MNDO	MNDOD	PM3	PM6	PM6-DH2	PM7	RM1
DMSO (8,9403)	DMSO (7,9459)	DMSO (9,2976)	DMSO (8,7749)	DMSO (8,3512)	DMSO (8,3242)	DMSO (8,7188)	DMSO (9,7462)
Tert-Butanol (11,0848)	Tert-Butanol (11,0628)	2-Propanol (11,1146)	Asetonitril (11,0807)	Tert-Butanol (9,4677)	Tert-Butanol (9,4550)	Tert-Butanol (9,6072)	DMF (9,8575)
Asetonitril (11,1571)	2-Propanol (11,1981)	Etanol (11,1814)	DMF (11,9883)	2-Propanol (9,8812)	2-Propanol (9,8124)	2-Propanol (10,4904)	Asetonitril (11,0218)
2-Propanol (11,2940)	N-Propanol (11,2698)	N-Propanol (11,1846)	Tert-Butanol (12,0278)	Asetonitril (10,2730)	Asetonitril (10,2155)	Asetonitril (10,5230)	Tert-Butanol (11,6511)
DMF (11,2988)	Etanol (11,2857)	N-Butanol (11,2781)	2-Propanol (12,2540)	Etanol (10,2947)	N-Propanol (10,3024)	DMF (10,6366)	2-Propanol (11,8056)
Etanol (11,5530)	N-Butanol (11,3600)	DMF (11,3965)	Etanol (12,6191)	N-Propanol (10,3691)	Etanol (10,3267)	Etanol (10,9176)	Etanol (12,1297)
N-Propanol (11,6356)	Su (11,6117)	Su (11,4755)	N-Propanol (12,6746)	N-Butanol (10,4210)	N-Butanol (10,3561)	N-Propanol (11,0272)	N-Propanol (12,1624)
N-Butanol (11,6999)	Asetonitril (11,6518)	Asetonitril (11,5792)	N-Butanol (12,7315)	Metanol (11,2227)	DMF (11,1568)	N-Butanol (11,0434)	N-Butanol (12,1930)
Etilen Glikol (12,1962)	Etilen Glikol (11,6980)	Etilen Glikol (11,6218)	Etilen Glikol (13,0716)	Etilen Glikol (11,2712)	Metanol (11,1646)	Etilen Glikol (11,8422)	Etilen Glikol (12,5394)
Metanol (12,3340)	Metanol (11,7281)	Tert-Butanol (11,6301)	Su (13,4290)	Su (11,5648)	Etilen Glikol (11,2132)	Metanol (11,9012)	Metanol (12,8643)
Su (12,6097)	DMF (11,7282)	Metanol (11,6365)	Metanol (17,9781)	DMF (11,6049)	Su (11,4992)	Su (12,3442)	Su (12,9323)

Sonuçlar otoprotoliz sabitine göre incelendiğinde çözücülerin otoprotoliz sabiti değerlerinin küçükten büyüğe doğru sıralanışı; su (pKs = 14), etilen glikol (pKs = 15,8), metanol (pKs = 16,5), DMF (pKs = 18), etanol (pKs = 18,7), n-propanol (pKs = 19,2), 2-propanol (pKs = 20,6), n-butanol (pKs = 21,6), tert-butanol (pKs = 22), asetonitril (pKs = 33) ve DMSO (pKs = 33) şeklindedir. 1. molekül, 2-propanol ortamında PM6, PM6-DH2, n-butanol ortamında PM6, PM6-DH2, tert-butanol ortamında PM6, PM6-DH2, PM7, MNDO, DMSO ve asetonitril ortamında ise tüm metotlara göre, 2., 3., ve 4. molekülde, 2-propanol ortamında PM6, PM6-DH2, n-butanol ortamında PM6, PM6-DH2, tert-butanol ortamında PM6, PM6-DH2, PM7, DMSO ve asetonitril ortamında ise tüm metotlara göre daha fazla asidik özelliğe sahip olduğu gözlenmiştir. Burada yapılan değerlendirmeyi tablosal olarak ifade etmek gerekirse, elde edilen değerlerin her bir çözücü ortamında metotlara göre değişimi Tablo 54-57 arasında verilmiştir.

Çözücülerin farklılaştırma ve seviyeleme etkileri incelendiğinde tüm bileşiklerin çalışılan çözücüler içerisinde farklılandırıldığı görüldü.

Tablo 54. 1. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin çalışılan modellere göre sıralanması

MOLEKÜL : 1.										
Su	Etanol	Metanol	N-Propanol	2-Propanol	N-Butanol	Tert-Butanol	Etilen Glikol	DMF	DMSO	Asetonitril
MNDO (11,0617)	PM6 (10,1446)	PM6 (11,0878)	PM6 (10,2221)	PM6 (9,7373)	PM6 (10,2802)	PM6 (9,3889)	PM6 (11,1394)	RM1 (9,6455)	MNDO (7,4838)	PM6 (10,1474)
PM6 (11,4116)	PM6-DH2 (10,3742)	PM6-DH2 (11,2073)	PM6-DH2 (10,3489)	PM6-DH2 (9,8580)	PM6-DH2 (10,4006)	PM6-DH2 (9,4986)	MNDO (11,2250)	PM7 (10,6017)	PM6 (8,2225)	PM6-DH2 (10,2553)
PM6-DH2 (11,5476)	MNDO (10,7467)	MNDO (11,2441)	MNDO (13,1576)	PM7 (10,4493)	MNDO (10,8540)	PM7 (9,5678)	PM6-DH2 (11,2547)	PM6 (10,9997)	PM6-DH2 (8,3649)	PM7 (10,4872)
MNDOD (12,2865)	PM7 (10,8749)	PM7 (11,8627)	PM7 (10,9852)	MNDO (10,6811)	PM7 (11,0033)	MNDO (10,6479)	PM7 (11,8047)	PM6-DH2 (11,1956)	PM3 (8,6821)	RM1 (10,8045)
PM7 (12,3005)	AM1 (11,5519)	AM1 (12,3329)	AM1 (11,6344)	AM1 (11,2929)	AM1 (11,6988)	AM1 (11,0837)	AM1 (12,1951)	MNDO (11,2882)	AM1 (8,9393)	PM3 (11,1007)
AM1 (12,6084)	RM1 (11,8699)	MNDOD (12,3502)	RM1 (11,9079)	RM1 (11,5564)	RM1 (11,9491)	RM1 (11,4146)	RM1 (12,3115)	AM1 (11,2979)	PM3 (9,3032)	AM1 (11,1561)
RM1 (12,6672)	MNDOD (11,9762)	RM1 (12,6310)	MNDOD (11,9631)	MNDOD (11,8770)	MNDOD (12,0244)	MNDOD (11,7928)	MNDOD (12,3193)	PM3 (12,0079)	RM1 (9,5234)	MNDO (11,2008)
PM3 (13,4534)	PM3 (12,6431)	PM3 (17,9996)	PM3 (12,6980)	PM3 (12,2769)	PM3 (12,7540)	PM3 (12,0498)	PM3 (13,0926)	MNDOD (12,0453)	MNDOD (9,9788)	MNDOD (12,2442)

Tablo 55. 2. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin çalışılan modellere göre sıralanması

MOLEKÜL : 2.										
Su	Etanol	Metanol	N-Propanol	2-Propanol	N-Butanol	Tert-Butanol	Etilen Glikol	DMF	DMSO	Asetonitril
MNDOD (11,4518)	PM6 (10,3109)	PM6-DH2 (11,1741)	PM6-DH2 (10,3129)	PM6-DH2 (9,8228)	PM6-DH2 (10,3662)	PM6-DH2 (9,4649)	PM6-DH2 (11,2226)	RM1 (9,6045)	MNDO (7,9147)	PM6-DH2 (10,2245)
PM6-DH2 (11,5101)	PM6-DH2 (10,3374)	PM6 (11,2372)	PM6 (10,3850)	PM6 (9,8967)	PM6 (10,4362)	PM6 (9,5416)	PM6 (11,2853)	PM7 (10,7053)	PM6-DH2 (8,3334)	PM6 (10,2865)
MNDO (11,5746)	PM7 (11,0017)	MNDOD (11,6157)	PM7 (11,1095)	PM7 (10,5710)	PM7 (11,1223)	PM7 (9,6843)	MNDOD (11,6015)	PM6 (11,1354)	PM6 (8,3650)	PM7 (10,5933)
PM6 (11,5813)	MNDOD (11,1583)	MNDO (11,6954)	MNDOD (11,1619)	MNDOD (11,0925)	MNDOD (11,2565)	MNDOD (11,0416)	MNDO (11,6661)	PM6-DH2 (11,1656)	PM7 (8,7907)	RM1 (10,7625)
PM7 (12,4299)	MNDO (11,2493)	PM7 (11,9766)	MNDO (11,2341)	MNDO (11,1632)	MNDO (11,3259)	MNDO (11,1095)	PM7 (11,9160)	MNDOD (11,3776)	AM1 (9,0879)	PM3 (11,1615)
RM1 (12,6160)	AM1 (11,7253)	AM1 (12,4885)	AM1 (11,8042)	AM1 (11,4591)	AM1 (11,8615)	AM1 (11,2429)	RM1 (12,2674)	AM1 (11,4392)	MNDOD (9,2778)	AM1 (11,3011)
AM1 (12,7853)	RM1 (11,8197)	RM1 (12,5859)	RM1 (11,8588)	RM1 (11,5082)	RM1 (11,9020)	RM1 (11,3705)	AM1 (12,3472)	MNDO (11,6985)	PM3 (9,3645)	MNDOD (11,5599)
PM3 (13,5275)	PM3 (12,7156)	PM3 (18,0648)	PM3 (12,7691)	PM3 (12,3465)	PM3 (12,8221)	PM3 (12,1164)	PM3 (13,1564)	PM3 (12,0672)	RM1 (9,4804)	MNDO (11,6212)

Tablo 56. 3. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin çalışılan modellere göre sıralanması

MOLEKÜL : 3.										
Su	Etanol	Metanol	N-Propanol	2-Propanol	N-Butanol	Tert-Butanol	Etilen Glikol	DMF	DMSO	Asetonitril
PM6-DH2 (11,4149)	PM6-DH2 (10,2441)	PM6-DH2 (10,0903)	PM6-DH2 (10,2214)	PM6-DH2 (9,7332)	PM6-DH2 (10,2784)	PM6-DH2 (9,3791)	PM6-DH2 (11,1406)	RM1 (9,7321)	MNDO (7,9216)	PM6-DH2 (10,1463)
MNDOD (11,4277)	MNDO (10,3198)	PM6 (11,2452)	PM6 (10,3937)	PM6 (9,9052)	PM6 (10,4445)	PM7 (9,5208)	PM6 (11,2931)	PM7 (10,5598)	PM6-DH2 (8,2533)	PM6 (10,2940)
MNDO (11,5828)	PM7 (10,8236)	MNDOD (11,5944)	PM7 (10,9351)	PM7 (10,4002)	PM7 (10,9552)	PM6 (9,5497)	MNDOD (11,5807)	PM6-DH2 (11,0894)	PM6 (8,3726)	PM7 (10,4443)
PM6 (11,5903)	MNDOD (11,1345)	MNDO (11,7027)	MNDOD (11,1386)	MNDOD (11,0696)	MNDOD (11,2342)	MNDOD (11,0199)	MNDO (11,6732)	PM6 (11,1426)	PM7 (8,6382)	RM1 (10,8934)
PM7 (12,2482)	MNDO (11,2574)	PM7 (11,8167)	MNDO (11,2420)	AM1 (11,4945)	MNDO (11,3335)	MNDO (11,1169)	PM7 (11,7597)	MNDOD (11,3582)	AM1 (9,1194)	PM3 (11,2184)
RM1 (12,7755)	AM1 (11,7622)	AM1 (12,5217)	AM1 (11,9994)	RM1 (11,6582)	AM1 (11,8962)	AM1 (11,2767)	AM1 (12,3796)	AM1 (11,4694)	MNDOD (9,2574)	AM1 (11,3319)
AM1 (12,8229)	RM1 (11,9760)	RM1 (12,7263)	RM1 (12,0119)	MNDO (11,8115)	RM1 (12,0488)	RM1 (11,5140)	RM1 (12,4046)	MNDO (11,7051)	PM3 (9,4228)	MNDOD (11,5400)
PM3 (13,5969)	PM3 (12,7836)	PM3 (18,1258)	PM3 (12,8358)	PM3 (12,4118)	PM3 (12,8859)	PM3 (12,1789)	PM3 (13,2160)	PM3 (12,1226)	RM1 (9,6144)	MNDO (11,6280)

Tablo 57. 4. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin çalışılan modellere göre sıralanması

MOLEKÜL : 4.										
Su	Etanol	Metanol	N-Propanol	2-Propanol	N-Butanol	Tert-Butanol	Etilen Glikol	DMF	DMSO	Asetonitril
MNDOD (11,4755)	PM6 (10,2947)	PM6-DH2 (11,1646)	PM6-DH2 (10,3024)	PM6-DH2 (9,8124)	PM6-DH2 (10,3561)	PM6-DH2 (9,4550)	PM6-DH2 (11,2132)	RM1 (9,8575)	MNDO (7,9459)	PM6-DH2 (10,2155)
PM6-DH2 (11,4992)	PM6-DH2 (10,3267)	PM6 (11,2227)	PM6 (10,3691)	PM6 (9,8812)	PM6 (10,4210)	PM6 (9,4677)	PM6 (11,2712)	PM7 (10,6366)	PM6-DH2 (8,3242)	PM6 (10,2730)
PM6 (11,5648)	PM7 (10,9176)	MNDOD (11,6365)	PM7 (11,0272)	PM7 (10,4904)	PM7 (11,0434)	PM7 (9,6072)	MNDOD (11,6218)	PM6-DH2 (11,1578)	PM6 (8,3512)	PM7 (10,5230)
MNDO (11,6117)	MNDOD (11,1814)	MNDO (11,7281)	MNDOD (11,1846)	MNDOD (11,1146)	MNDOD (11,2781)	MNDO (11,0628)	MNDO (11,6980)	AM1 (11,2988)	PM7 (8,7188)	RM1 (11,0218)
PM7 (12,3442)	MNDO (11,2857)	PM7 (11,9012)	MNDO (11,2698)	MNDO (11,1981)	MNDO (11,3600)	AM1 (11,0848)	PM7 (11,8422)	MNDOD (11,3965)	PM3 (8,7749)	PM3 (11,0807)
AM1 (12,6097)	AM1 (11,5530)	AM1 (12,3340)	AM1 (12,6356)	AM1 (11,2940)	AM1 (11,6999)	MNDOD (11,6301)	AM1 (12,1962)	PM6 (11,6049)	AM1 (8,9403)	AM1 (11,1571)
RM1 (12,9323)	RM1 (12,1297)	RM1 (12,8643)	RM1 (12,1624)	RM1 (11,8056)	RM1 (12,1930)	RM1 (11,6551)	RM1 (12,5394)	MNDO (11,7282)	MNDOD (9,2976)	MNDOD (11,5792)
PM3 (13,4290)	PM3 (12,6191)	PM3 (17,9781)	PM3 (12,6746)	PM3 (12,2540)	PM3 (12,7315)	PM3 (12,0278)	PM3 (13,0716)	PM3 (11,9883)	RM1 (9,7462)	MNDO (11,6518)

5. ÖNERİLER

Bu yüksek lisans çalışmamızda çalıştığımız fenil[2-(3-bromobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (1. Molekül), fenil[2-(3-florobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (2. Molekül), fenil[2-(3-klorobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (3. Molekül) ve fenil[2-(3-metilbenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (4. Molekül) bileşikleri dışında daha çok benzimidazol türevi bileşiğin pKa değeri hesaplamaları MOPAC 2012 bilgisayar programı ile daha farklı çözücü gruplarında yer alan birçok çözücü içerisinde yapılabilir. Bu yapılan teorik çalışmalar deneysel çalışmalar ile birlikte desteklenebilir. Deneysel olarak özellikle elektroanalitik yöntemlerden olan potansiyometri, kondüktometri ve voltametri gibi metotlar yanında, reaksiyon ısıları yardımıyla kalorimetriden, kimyasal kayma değerlerinden yararlanarak nükleer magnetik rezonans (NMR), dış bir elektrik alanın etkisi ile yüklü bir parçacığın çözelti içerisinde yönlendirilmesinden faydalanarak elektroforezden, kapasite faktörleri yardımı ile yüksek performanslı sıvı kromatografisinden (HPLC), moleküllerdeki elektronik geçişlerin verdiği spektrumları kullanarak UV/GB spektroskopisinden, mor ötesi ışık yayarak maddelerin uyarılması, belirlenmesi ve dışarı verilen floresan ışığın karakteristik dalga boyunun ölçümü ile bir maddenin çok küçük miktarlarının tanımlanması ve karakterizasyonunu ile florometriden, maddelerin içlerinden geçen polarizlenmiş ışık demetinin düzlemini değiştirmesinden yararlanarak polarimetriden, reaksiyon hızlarını kullanarak kinetik metotdan faydalanılarak pKa değerlerinin hesaplamaları bu metotlar yardımıyla yapılabilir. Bu yöntemler sonucunda elde edilen pKa değerleri kullanılarak çalışma zenginleştirilmiş olmasının yanında metotlar arasında sonuçların karşılaştırma imkanı da olur.

Günümüzde pKa'nın belirlenmesinde de birçok bilgisayar programları mevcuttur ve birçok çalışmada yaygın şekilde kullanılmaktadır. Bu programlardan bazıları seçilmek suretiyle bu moleküller için hesaplama yapılabilir ve sonuçlar hem teorik çalışmalar arasında hem de teorik ve deneysel çalışmalar arasında karşılaştırma yapılabilir.

KAYNAKLAR

- Açikkalp, E., Özögüt, D. ve Fidan, S., 2011.** 1,2,4-Triazol ve Türevlerinin pKa'larının Teorik Hesaplanması Eskişehir Osmangazi Üniversitesi Mühendislik Mimarlık Fakültesi Dergisi, 24, 51-69.
- Alessio, E., Macchi, M., Heath, S. L. and Marzilli, L. G., 1997.** Ordered Supramolecular Porphyrin Arrays from a Building Block Approach Utilizing Pyridylporphyrins and Peripheral Ruthenium Complexes and Identification of a New Type of Mixed-Metal Building Block. Inorganic Chemistry. 36 (24), 5614-5623.
- Badger, G.M., 1961.** The Chemistry of Heterocyclic Compounds. Academic Press, 28278342, ISBN:978-012-0715-50-3, 453, 350-351.
- Brown, D. J., 2008.** The Chemistry of Heterocyclic Compounds Introduction to the Series. Wiley&Sons Press, 1002, ISBN:978-047-0387-17-7, 344, 78.
- Brown, R.S., Zamkanei, M. and Cocho, J.L., 1984.** Tris (imidazole) Containing Phosphine: M^{2+} Complexes as Biomimetic Catalysts. Importance of a $L:M^{2+}OH^-$ in the Catalyzed. Bimolecular Hydrolysis of p-nitrophenyl Picolinate. Journal of American Chemical Society, 106 (18), 5222-5228.
- Ram, S., Wise, D.S., Wotring, L.L., McCall, J.W. and Townsend, L.B., 1991.** Synthesis and Biological Activity Of Certain Alkyl 5- (Alkoxy carbonyl) -1-H-Benzimidazole-2- Carbamates and Related Derivatives : a New Class of Potential Antineoplastic and Antifilarial Agents. Journal of Medicinal Chemistry, 35 (3), 539-547.
- Carter, S.B. and Bucknall, R.A., 1967.** A Reversible Inhibitor of Nucleic Acid Synthesis. Nature, 213, 1099-1101.
- Preston, P.N., 1991.** Synthesis Reactions and Spectroscopic Properties of Benzimidazoles. Chemical Reviews, 74 (3), 279-314.
- Cookson, R.F., 1974.** Determination of Acidity Constants . Chemical Reviews , 74, 5-28.
- Çakır, K., 2014.** Mebendazol Çekirdeği İçeren Bazı 2-Substitüe Benzimidazol Türevi Bileşiklerin pKa Değerlerinin Deneysel ve Teorik Olarak Belirlenmesi. Yüksek Lisans Tezi. Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalı, Rize, Türkiye, 108-109.
- Demirtaş, E., 2003.** Bazı Pridin N-Oksit Türevlerinin Asitlik-Bazlık Davranışlarının Teorik Olarak İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi. Osmangazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Eskişehir, Türkiye, 28-34

- Foresman, J.B. and Frisch, A., 1996.** Exploring Chemistry With Electronic Structure Methods. Gaussian Inc. Pittsburghç, ISBN: 978-06363-769-31, 118, 80-94.
- Gündüz, T., 2005.** Kalitatif Analiz Ders Kitabı. Gazi Yayınevi, ISBN: 975-7313-46-7, 230, 24-25
- Hargittai, M., Schulz, A., Reffy, B. and Kolonits., 2001.** Journal of American Chemical Society , 123, 1149-1158.
- Jones, J. B. and Taylor, K. E., 1977.** Hydroxymethylbenzimidazole Carboxylic Acid Models of the Asp-His-Ser charge Relay System of Serine Proteases. Canadian Journal of American Chemical Society , 55 (10), 1653-1657.
- Kalafatçioğlu, N., 2005.** Bazı Alkil Süstitüe Piridin Türevlerinin Asitlik ve Bazlık Davranışlarının Teorik Olarak İncelenmesi. Yüksek Lisans Tezi. Osmangazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalında, Eskişehir, Türkiye, 27-33
- Öğretir, C. ve Demirayak, S., 1985.** Bazı Benzimidazol Türevlerinin Sentezi ve Fizikokimyasal Özelliklerinin İncelenmesi, TBAG Proje, Anadolu Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi, Eskişehir, Türkiye, 43-45
- Öğretir, C., 1979.** Değişik Pirolo [3,4-d] Piridazin Türevlerinin Asitlik Sabitlerinin Bulunması ve Değerlendirilmesi. Doçentlik Tezi. Eskişehir Devlet Mühendislik Mimarlık Akademisi, Eskişehir, Türkiye, 51-56
- Özögüt, D. ve Kalafatçioğlu, N., 2011.** Theoretical Studies on Acid- Base Behaviour of Some Alkyl Substituted Pyridine Derivatives, Journal of Engineering and Architecture Faculty of Eskişehir Osmangazi University, 24(2), 145-165.
- Richards, W.G. and Cooper, D.L., 1983.** Ab Initio Molecular Orbital Calculations for Chemists. Oxford University Pres New York, ISBN: 9780198553694, 64-71
- Schaefer III, H.F., 2001.** Computers and Molecular Quantum Mechanics, 1965-2001, A Personal Perspective, Journal of Molecular Structure , 573, 129-137.
- Solomons, T.W.G., 2003.** Organic Chemistry, John Wiley& Sons Inc. ISBN: 0-471-41799-8, 15, 68-69.
- Taşçı, D., 2004.** Bazı Metil Süstitüe Piridin Türevlerinin Asitlik ve Bazlık Davranışlarının Teorik Olarak İncelenmesi. Yüksek Lisans Tezi. Osmangazi Üni., Fen Bil. Ens., Eskişehir, Türkiye, 43-45.
- Tutkun, B., 2013.** N-Heterohalkalı Benzimidazol Türevlerinin Sentezi Ve Metal Kompleksleri. Yüksek Lisans Tezi. Bülent Ecevit Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalı, Zonguldak, Türkiye, 29-33.

- Vogel, A.I., Tatchell, A.R., Furnis, B.S., Hannaford, A.J. and Smith, P.W.G., 1996.** Vogel's Textbook of Practical Organic Chemistry. Prentice Hall London, ISBN:978-0582462366, 1552.
- Wang, Z., 2010.** Phillips-Ladenburg Benzimidazole Synthesis. John Wiley & Sons, Inc. 57, 112
- Yarlıgan, S., 2001.** Bazı Piridazinon Türevleri Üzerinde Sentetik, Deneysel ve Teorik Çalışmalar.Doktora Tezi. Osmangazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Eskişehir, Türkiye.

ÖZGEÇMİŞ

Zafer HAŞİMOĞLU, 01/01/1975 tarihinde Ardeşen’de doğdu. İlköğretimini 1988 yılında Ardeşen ilçesinde, Ardeşen İlköğretim Okulu’nda ve Ortaöğretimini 1991 yılında Ardeşen ilçesinde Ardeşen Lisesinde tamamladı. 15/09/1992 tarihinde başladığı lisans eğitimini 04/09/1996 tarihinde Karadeniz Teknik Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Kimya bölümünde tamamladı. 2013 yılında Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya bölümünde başladığı yüksek lisans öğrenimini halen devam ettirmektedir. Rize İl Milli Eğitim Müdürlüğünde şube müdürü olarak görev yapmaktadır. Evli ve 2 çocuk babasıdır.