

T.C.
RECEP TAYYİP ERDOĞAN ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

BAZI YENİ BENZİMİDAZOL TÜREVİ BİLEŞİKLERİN pKa
DEĞERLERİNİN POTANSİYOMETRİK TİTRASYON METODU
İLE BELİRLENMESİ

Naciye ERDOĞAN

Tez Danışmanı
Doç. Dr. Fatih İSLAMOĞLU

YÜKSEK LİSANS TEZİ
KİMYA ANABİLİM DALI

RİZE 2013

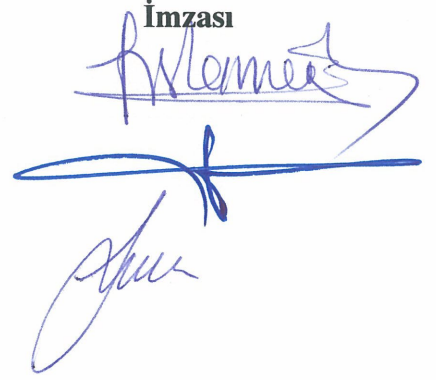
T.C.
RECEP TAYYİP ERDOĞAN ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

BAZI YENİ BENZİMİDAZOL TÜREVİ BİLEŞİKLERİN pKa DEĞERLERİNİN
POTANSİYOMETRİK TİTRASYON METODU İLE BELİRLENMESİ

Bu çalışma, 03 / 12 / 2013 tarihinde yapılan sınav ile Kimya Anabilim Dalı'nda
YÜKSEK LİSANS tezi olarak kabul edilmiştir.

	Ünvanı, Adı, Soyadı
Tez Danışmanı	: Doç. Dr. Fatih İSLAMOĞLU
Jüri Üyesi	: Prof. Dr. Oktay TORUL
Jüri Üyesi	: Doç. Dr. Selçuk BİLGİN

İmzası



ONAY

08. / 01. / 2014.


Doç. Dr. Fatih YILMAZ
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü



ÖNSÖZ

Üniversitemizde sentezlenen on adet yeni benzimidazol türevi bileşiklerin amfiprotik ve dipolar aprotik çözücülerde TBAH ile potansiyometrik yöntem kullanılarak pKa değerleri tespit edilmiştir.

Bu tez konusunun seçiminde, deneysel çalışmalarımızı gerçekleştirmemizde tez yazılımda, tezin düzeltilmesinde bize yardım eden ve en önemlisi bana her zaman yol gösteren hiçbir zaman yardımlarını benden esirgemeyen hocam Doç. Dr. Fatih İSLAMOĞLU' na sonsuz saygı ve teşekkürlerimi sunarım. Bu tez çalışmamızda yeni benzimidazol türevi bileşikleri sentezleyip çalışmamız için bize sunan değerli hocam Prof. Dr. Bahittin KAHVECİ' ye ve değerli bilgileriyle bizlere destek olan değerli bölüm hocalarıma ayrıca teşekkür ederim.

Yüksek lisansım boyunca bana her konuda yardım eden eşim Hamdi ERDOĞAN' a ve bu süreçte yanımdan bir an olsun ayrılmayan kızım Zehra Rabia ERDOĞAN' a teşekkürlerimi sunarım.

Naciye ERDOĞAN

RİZE 2013

ÖZET

Bazı Yeni Benzimidazol Türevi Bileşiklerin pKa Değerlerinin Potansiyometrik Titrasyon Metodu ile Belirlenmesi

On adet yeni benzimidazol türevi bileşiği ilk kez sentezlenerek bunların potansiyometrik incelenmesi yapıldı. Bu bileşiklerin biyolojik aktif oldukları tespit edildi. Bu nedenle pek çok pratik uygulamada önem kazanmışlardır. Sentezlenen bileşiklerin sudaki çözünürlükleri çok küçük olduğundan susuz ortam tercih edildi. Çözücülerin seçiminde çözücünün farklı çözücü gruplarından olması, susuz ortam çözücüsü olarak yaygın kullanılması, dielektrik sabitleri ve otoprotoliz sabitlerinin farklı olması önemli etken oldu. Susuz ortamda çözücü olarak amfiprotik nötral çözücülerden 2-propanol ve *tert*-butil alkol, dipolar aprotik çözücülerden asetonitril ve *N,N*-dimetilformamid tercih edildi. Titrant olarak susuz ortam titrasyonlarında geniş kullanım alanı olan tetrabutilamonyum hidroksit (TBAH) 2-propanoldeki çözeltisi kullanıldı. Asitlik tayininde titrimetrik analiz yöntemlerinde dönüm noktasının belirlenmesi için kullanılan potansiyometrik metod uygulandı. Titrasyon sonucunda elde edilen sonuçlar tablolar ve grafikler halinde verildi. Grafikler incelendiğinde tipik sigmoidal titrasyon eğrileri elde edildi. Yarı nötralizasyon metoduyla elde edilen veriler ve grafikler kullanılarak bileşiklerin çözücülerdeki asitlik sabitleri hesaplandı. Elde edilen verilere göre bileşiklerin asitlik kuvvetlerinin çözücülerde farklılaştığı belirlendi. On yeni benzimidazol türevi bileşiğinin değişik çözücülerdeki asitlik kuvvetleri, çözücünün dielektrik sabiti, otoprotoliz sabiti ve seviyeleme-farklandırma etkileri incelendi. Bileşiklerin pKa değerleri 2-propanolde 12,44 - 15,82, *N,N*-dimetilformamidte 13,82 - 16,42, *tert*-butanolde 12,98 - 16,31 ve asetonitrilde 13,28 - 16,52 bulundu. Deneysel yöntemler ile elde edilen pKa değerleri, SPARC programından (online teorik pKa hesaplama programı) hesaplanan teorik pKa değerleriyle karşılaştırıldı.

Anahtar Kelimeler: Susuz Ortam, pKa Değeri, Potansiyometrik Titrasyon, SPARC program

SUMMARY

Determination of pKa Values Some New Benzimidazole Derivative Compounds with Potentiometric Titration Method

Ten new benzimidazole derivative compounds were first time synthesized and investigated by potentiometric method. It was determined that the benzimidazole derivative were biological active compounds. Because of that, the benzimidazole derivative compounds are very important in many practical application.

Because of scarcely low solubility of the compounds in water, non-aqueous media were preferred. The following principles were considered in choosing then on-aqueous solvents used; They should be widely used in then on-aqueous solution media, be from different solvents groups, and have distinct auto protolysis constants. In non-aqueous medium, 2-propanol and *tert*-butylalcohol among the amphiprotic type, and acetonitrile and *N,N*-dimethylformamide among the dipolaraprotic type were taken as solvent. Tetrabutylammoniumhydroxide (TBAH) in 2-propanol, a titrant widely used in non-aqueous titrations, was used as titrant in all titrations. The potentiometric method used in determining the end-points in titrimetric analysis was utilized for the determination of acidity. The results obtained from the titrations are presented in table and graphs. Typical sigmoid shaped titration curves are observed in the graphs. The acidity constants of the compounds in the solvents chosen were calculated using the graphs and the data obtained with half-neutralization method. The acidity strength of the compounds was observed to differ from the information obtained. The acidity strength of ten new benzimidazole derivative compounds in different solvents, dielectric constant of the solvents, autoprotolysis constant and leveling-differentiation effects were investigated. pKa values of compounds were in the range of 12,44 - 15,82 for 2-propanol, 13,82 - 16,42 for *N,N*-dimethylformamide, 12,98 - 16,31 for *tert*-butylalcohol, 13,28 - 16,52 for acetonitrile. The pKa values obtained experimentally were compared to theoretic pKa values obtained from SPARC programme (online theoretic pKa calculation programme).

Keywords: Non-Aqueous Media, pKa Values, Potentiometric Titration.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa No
ÖNSÖZ	I
ÖZET	II
SUMMARY	III
İÇİNDEKİLER	IV
ŞEKİLLER DİZİNİ	VI
TABLolar DİZİNİ	IX
SEMBOLLER VE KISALTMALAR DİZİNİ	XI
1. GENEL BİLGİLER.....	1
1.1. Giriş	1
1.2. Benzimidazol Bileşiklerinin Özellikleri	3
1.3. İyonlaşma Sabiti	4
1.3.1. İyonlaşma Sabitinin Kullanımı	6
1.3.2. İyonlaşmada Çözücü Etkisi	7
1.3.3. İyonlaşmada Sıcaklık Etkisi.....	7
1.3.4. İyonlaşma Sabiti Tayin Metotları	7
1.4. Spektroskopik Yöntem	8
1.5. Potansiyometrik Yöntem	8
1.6. Organik Bileşiklerde Asitlik ve Bazlık	11
1.7. Susuz Çözücülerin Faydaları	12
1.8. Organik Çözücüler	13
1.9. Uygun Çözücünün Seçilmesi.....	14
1.10. Çözücünün Yeterince Asidik veya Bazik Olması.....	15
1.11. Çözücünün Dengeleme Etkisi.....	16
1.12. Çözücülerde Bulunan Safsızlıkların Tayini	16
1.13. Titrasyonun Doğruluğunu Etkileyen Faktörler	17
1.14. Susuz Çözücülerde Otoprotoliz ve pH.....	17
2. YAPILAN ÇALIŞMALAR	19
2.1. DeneYlerde Kullanılan Madde ve Cihazlar	19
2.1.1. Çalışılan Maddeler	19
2.1.2. Çözücüler	22
2.1.3. Titrantlar	22

2.1.4. Cihazlar	22
2.2. Hazırlanan Çözeltiler	23
2.3. Deneyin Yapılışı	23
2.4. Asitlik Sabitlerinin Tayini	23
2.4.1. Yarı Nötralizasyon Metodu	23
2.5. Online Hesaplama Programları.....	24
2.5.1. SPARC Online Teorik pKa Hesaplama Programı	25
3. BULGULAR.....	26
4. TARTIŞMA VE SONUÇ	61
5. ÖNERİLER.....	76
6. KAYNAKLAR	77
ÖZGEÇMİŞ	80

ŞEKİLLER DİZİNİ

Sayfa No

Şekil 1. İmidazol	3
Şekil 2. Benzimidazol	3
Şekil 3. 2-(2-Klorobenzil)-5,6-dikloro-1 <i>H</i> -benzo[<i>d</i>]imidazol (1. Bileşik).....	19
Şekil 4. 2-(3-Klorobenzil)-5,6-dikloro-1 <i>H</i> -benzo[<i>d</i>]imidazol (2. Bileşik).....	19
Şekil 5. 2-(4-Klorobenzil)-5,6-dikloro-1 <i>H</i> -benzo[<i>d</i>]imidazol (3. Bileşik).....	19
Şekil 6. 2-(3-Metilbenzil)-5,6-dikloro-1 <i>H</i> -benzo[<i>d</i>]imidazol (4. Bileşik)	20
Şekil 7. 2-(4-Metilbenzil)-5,6-dikloro-1 <i>H</i> -benzo[<i>d</i>]imidazol (5. Bileşik)	20
Şekil 8. 2,2'-Bis(2-Klorobenzil)-1 <i>H</i> ,1' <i>H</i> -5,5'-bibenzimidazol (6. Bileşik)	20
Şekil 9. 2,2'-Bis(3-Klorobenzil)-1 <i>H</i> ,1' <i>H</i> -5,5'-bibenzimidazol (7. Bileşik).....	21
Şekil 10. 2,2'-Bis(4-Klorobenzil)-1 <i>H</i> ,1' <i>H</i> -5,5'-bibenzimidazol (8. Bileşik).....	21
Şekil 11. 2,2'-Bis(3-Metilbenzil)-1 <i>H</i> ,1' <i>H</i> -5,5'-bibenzimidazol (9. Bileşik).....	21
Şekil 12. 2,2'-Bis(4-Metilbenzil)-1 <i>H</i> ,1' <i>H</i> -5,5'-bibenzimidazol (10. Bileşik).....	22
Şekil 13. Potansiyometrik titrasyon deney düzeneği	23
Şekil 14. Termodinamik döngü	25
Şekil 15. 1. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen pH-mL grafiği	28
Şekil 16. 1. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen mV-mL grafiği	28
Şekil 17. 1. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiği.....	29
Şekil 18. 1. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiği.....	29
Şekil 19. 2. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen pH-mL grafiği	31
Şekil 20. 2. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen mV-mL grafiği	31
Şekil 21. 2. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiği.....	32
Şekil 22. 2. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiği.....	32
Şekil 23. 3. bileşiğin titrasyonundan elde edilen pH-mL grafiği.....	34
Şekil 24. 3. bileşiğin titrasyonundan elde edilen mV-mL grafiği.....	34
Şekil 25. 3. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiği.....	35
Şekil 26. 3. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiği	35
Şekil 27. 4. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen pH-mL grafiği	37
Şekil 28. 4. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen mV-mL grafiği	37
Şekil 29. 4. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiği.....	38
Şekil 30. 4. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiği	38

Şekil 31. 5. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen pH-mL grafiđi	40
Şekil 32. 5. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen mV-mL grafiđi	40
Şekil 33. 5. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiđi.....	41
Şekil 34. 5. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiđi	41
Şekil 35. 6. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen pH-mL grafiđi	43
Şekil 36. 6. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen mV-mL grafiđi	43
Şekil 37. 6. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiđi.....	44
Şekil 38. 6. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiđi	44
Şekil 39. 7. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen pH-mL grafiđi	46
Şekil 40. 7. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen mV-mL grafiđi	46
Şekil 41. 7. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiđi.....	47
Şekil 42. 7. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiđi	47
Şekil 43. 8. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen pH-mL grafiđi	49
Şekil 44. 8. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen mV-mL grafiđi	49
Şekil 45. 8. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiđi.....	50
Şekil 46. 8. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiđi	50
Şekil 47. 9. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen pH-mL grafiđi	52
Şekil 48. 9. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen mV-mL grafiđi	52
Şekil 49. 9. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiđi.....	53
Şekil 50. 9. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiđi	53
Şekil 51. 10. bileşiğın titrasyonundan elde edilen pH-mL grafiđi.....	55
Şekil 52. 10. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen mV-mL grafiđi	55
Şekil 53. 10. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiđi.....	56
Şekil 54. 10. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiđi	56
Şekil 55. 1. Bileşik için elde edilen deneysel ve teorik pKa deđerlerinin karşılaştırılması	67
Şekil 56. 2. Bileşik için elde edilen deneysel ve teorik pKa deđerlerinin karşılaştırılması	67
Şekil 57. 3. Bileşik için elde edilen deneysel ve teorik pKa deđerlerinin karşılaştırılması	68
Şekil 58. 4. Bileşik için elde edilen deneysel ve teorik pKa deđerlerinin karşılaştırılması	68

Şekil 59. 5. Bileşik için elde edilen deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması	69
Şekil 60. 6. Bileşik için elde edilen deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması	69
Şekil 61. 7. Bileşik için elde edilen deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması	70
Şekil 62. 8. Bileşik için elde edilen deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması	70
Şekil 63. 9. Bileşik için elde edilen deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması	71
Şekil 64. 10. Bileşik için elde edilen deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması	71

TABLolar DİZİNİ

	Sayfa No
Tablo 1. 1. Bileşğin titrasyonundan elde edilen değerlerin ortalaması.....	27
Tablo 2. 2. Bileşğin titrasyonundan elde edilen değerlerin ortalaması.....	30
Tablo 3. 3. bileşğin titrasyonundan elde edilen değerlerin ortalaması.	33
Tablo 4. 4. Bileşğin titrasyonundan elde edilen değerlerin ortalaması.....	36
Tablo 5. 5. Bileşğin titrasyonundan elde edilen değerlerin ortalaması.....	39
Tablo 6. 6. Bileşğin titrasyonundan elde edilen değerlerin ortalaması.....	42
Tablo 7. 7. Bileşğin titrasyonundan elde edilen değerlerin ortalaması.....	45
Tablo 8. 8. Bileşğin titrasyonundan elde edilen değerlerin ortalaması.....	48
Tablo 9. 9. Bileşğin titrasyonundan elde edilen değerlerin ortalaması.....	51
Tablo 10. 10. Bileşğin titrasyonundan elde edilen değerlerin ortalaması.....	54
Tablo 11. 1. Bileşik için bilgisayar programı ile hesaplanan serbest enerji değişimleri .	57
Tablo 12. 2. Bileşik için bilgisayar programı ile hesaplanan serbest enerji değişimleri	57
Tablo 13. 3. Bileşik için bilgisayar programı ile hesaplanan serbest enerji değişimleri	57
Tablo 14. 4. Bileşik için bilgisayar programı ile hesaplanan serbest enerji değişimleri	57
Tablo 15. 5. Bileşik için bilgisayar programı ile hesaplanan serbest enerji değişimleri	58
Tablo 16. 6. Bileşik için bilgisayar programı ile hesaplanan serbest enerji değişimleri	58
Tablo 17. 7. Bileşik için bilgisayar programı ile hesaplanan serbest enerji değişimleri	58
Tablo 18. 8. Bileşik için bilgisayar programı ile hesaplanan serbest enerji değişimleri	59
Tablo 19. 9. Bileşik için bilgisayar programı ile hesaplanan serbest enerji değişimleri	59
Tablo 20. 10. Bileşik için bilgisayar programı ile hesaplanan serbest enerji değişimleri	60
Tablo 21. 1. Bileşik için hesaplanan pKa ve HNP (mV) değerleri.....	62
Tablo 22. 2. Bileşik için hesaplanan pKa ve HNP (mV) değerleri.....	62
Tablo 23. 3. Bileşik için hesaplanan pKa ve HNP (mV) değerleri.....	62
Tablo 24. 4. Bileşik için hesaplanan pKa ve HNP (mV) değerleri.....	62
Tablo 25. 5. Bileşik için hesaplanan pKa ve HNP (mV) değerleri.....	63
Tablo 26. 6. Bileşik için hesaplanan pKa ve HNP (mV) değerleri.....	63
Tablo 27. 7. Bileşik için hesaplanan pKa ve HNP (mV) değerleri.....	63
Tablo 28. 8. Bileşik için hesaplanan pKa ve HNP (mV) değerleri.....	63
Tablo 29. 9. Bileşik için hesaplanan pKa ve HNP (mV) değerleri.....	64
Tablo 30. 10. Bileşik için hesaplanan pKa ve HNP (mV) değerleri.....	64
Tablo 31. Bilgisayar programı ile 1. Bileşik için hesaplanan teorik pKa değerleri.....	64

Tablo 32. Bilgisayar programı ile 2. Bileşik için hesaplanan teorik pKa değerleri.....	64
Tablo 33. Bilgisayar programı ile 3. Bileşik için hesaplanan teorik pKa değerleri.....	65
Tablo 34. Bilgisayar programı ile 4. Bileşik için hesaplanan teorik pKa değerleri.....	65
Tablo 35. Bilgisayar programı ile 5. Bileşik için hesaplanan teorik pKa değerleri.....	65
Tablo 36. Bilgisayar programı ile 6. Bileşik için hesaplanan teorik pKa değerleri.....	65
Tablo 37. Bilgisayar programı ile 7. Bileşik için hesaplanan teorik pKa değerleri.....	66
Tablo 38. Bilgisayar programı ile 8. Bileşik için hesaplanan teorik pKa değerleri.....	66
Tablo 39. Bilgisayar programı ile 9. Bileşik için hesaplanan teorik pKa değerleri.....	66
Tablo 40. Bilgisayar programı ile 10. Bileşik için hesaplanan teorik pKa değerleri.....	66
Tablo 41. Çalışılan on adet yeni benzimidazol türevi bileşiğinin deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması ve % hata değerleri.....	74

SEMBOLLER VE KISALTMALAR DİZİNİ

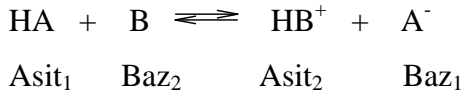
DMSO	Dimetil sülfoksit
DMF	<i>N,N</i> -dimetilformamid
THF	Tetrahidrofüran
pK_s	Otoprotoliz sabiti
pK_a	Asit iyonlaşma sabiti
TBAH	Tetrabutilamonyum hidroksit
EMK	Elektromotor kuvvet
pH	Hidrojen iyonlarının aktivitesinin eksi logaritması
mV	Mili volt
HNP	Yarı nötralizasyon potansiyeli

1. GENEL BİLGİLER

1.1. Giriş

Asit ve bazlar çok eski çağlardan beri bilinmektedir. Kimyasal tepkimelerin çok önemli bir kısmı asit-baz tepkimeleridir. Önceleri sulu çözeltilerde deneysel olarak gözlenen özellikler asit ve bazları tanımlamakta kullanılmaktaydı. Madde yapısı hakkındaki bilgiler ve genellemeler arttıkça, bilim adamları asidik ve bazik özellikler gösteren maddelerle, bu maddelerin yapısal özellikleri arasındaki ilişkileri araştırmaya yöneldiler.

1923' te J.N.Bronsted ve T.M.Lowry asitlerin proton veren maddeler, bazların proton alan maddeler olduğunu söylemişlerdir. Bu tanıma göre nötralleşme, bir asitten bir baza proton aktarımı olayıdır.



Bu denge tepkimesinde HA asidi, B ise bazı göstermektedir. Geri tepkime düşünüldüğünde HB^+ 'nın bir asit, A^- 'nin bir baz olduğu kolaylıkla görülür. Tepkimede HA ile A^- arasındaki fark yalnızca protonlanmış olma veya olmamadır. Aynı maddenin protonlanmış haline asit, protonlanmamış haline de baz denir. Böylece oluşan HA ve A^- çiftine konjuge asit-baz çifti denir. Benzer şekilde B ve HB^+ da konjuge asit-baz çiftidir. Bronsted-Lowry' nin asit-baz tanımı yalnızca sudaki çözeltiler için değil, proton içeren diğer çözücülerdeki veya gaz fazındaki tepkimeler içinde geçerlidir. Asitler ve bazlar için kullanılan en önemli özellik asitlik veya bazlık kuvvetidir. Asitlik veya bazlık kuvveti iyonlaşma denge sabiti ile ilgili özelliktir. Tam olarak iyonlaşan asit veya bazlara kuvvetli asit veya baz denir. Kuvvetli asitlerin sudaki çözeltilerinin denge sabitinin sonsuz büyüklükte olduğu söylenebilir.

Genel olarak saf suyun dışındaki diğer çözücüler içinde gerçekleşen reaksiyonlar susuz ortam reaksiyonlar olarak adlandırılır. Bu tanımlama, pek doğru olmamakla birlikte bazı çözücülerin suyla karıştırılması ile meydana gelen çözücülerdeki reaksiyonlara da aynı şekilde susuz ortam reaksiyonları olarak nitelendirilmektedir. Bir reaksiyonun gerçekleşmesinde çözücü çok önemli bir etkidir. Başka bir ifadeyle; bir çözücü reaksiyona girecek maddeleri çözen, onların en küçük taneciklerinin çarpışmalarına imkan veren inert bir ortam değil, aksine çarpışan taneciklerin

reaksiyona girmelerini kolaylařtıran bir vasıtaadır. Tarihte her maddeyi çözecek bir çözücü her zaman aranmıştır. Bu tip bir çözücü üniversal çözücü olarak tanımlanabilir. Çözücünün üniversal olmasında, çözücünün hidrojen bağı akseptörlüğünün veya donörlüğünün, ortaklanmamış elektron çifti donörlüğünün veya akseptörlüğünün, dipol momentinin, dielektrik sabitinin, kaynama ve donma noktasının, atmosfere karşı inertliğinin çok büyük bir önemi görölmektedir. Bu özellikler dikkate alındığında su üniversal olmaya aday en uygun çözücü olduđu söylenebilir. Fakat, üniversal bir çözücü olarak değıl, sadece çözünlüğü çok yüksek bir çözücüdür. Suyun en büyük eksikliği organik maddelerin çok büyük bir çoğunluğunu çözememesidir. Bu maddelerinde uygun bir çözücüde çözümlenmesi ve özelliklerinin araştırılması gerekir. Bu noktadan hareketle suyun çözemediğı maddelerin de çözümlenmesi ve çeşitli kimyasal ve fiziksel özelliklerinin araştırılması amacıyla susuz çözücülere (organik çözücüler) gereksinim duyulmuştur. Birçok sayıda susuz çözücü olduğundan, suda çözünmeyen sayısız organik maddeyi bu çözücülerde çözmek ve titre etmek olanaklı hale gelmiştir. Bu vesile ile organik maddeler hakkında daha çok bilgilere ulaşılmıştır. Bu bilgiler içinde analitik bilgiler önemli bir yer teşkil eder. Çünkü susuz ortamlarda gerçekleştirilen pek çok reaksiyon, sulu ortamlarda gerçekleşmesi beklenen pek çok analitik istekleri yerine getirir. Bunları kısaca maddeler halinde ifade etmek istersek;

- Reaksiyonun yeteri derecede hızlı olması
- Reaksiyonun nicel denecek oranda sağı doğru gerçekleşmesi
- Reaksiyonun tekrarlanabilir olması
- Reaksiyonun stokiyometrik olması
- Reaksiyonun dönüm noktasının kolaylıkla tespit edilebilir olması

şeklinde tanımlayabiliriz (Yüksek vd., 2002) .

Sulu ortamlarda olduđu gibi susuz ortamlardaki kantitatif tayinlerde, maddelerin asitliğinden, bazlığında, yükseltgenmesinden, indirgenmesinden, çökmesinden vs. yararlanılabilir.

Susuz ortam reaksiyonu 1910 yılında Folin ve Wenworth tarafından gerçekleştirilmiştir. Bu bilim adamları, bazı yağ asitlerini kloroform ve karbon tetraklorür çözücülerinde çözerek bunları fenolftalein indikatörlüğünde sodyum etoksit ile titre etmişlerdir. Susuz ortamla ilgili olarak yapılan bu ilk çalışma zamanında fazla değıer bulmamış, bunu daha sonraları bir kaç çalışma takip etmiştir. 1948 yılında Hall ve arkadaşları tarafından zayıf bir asit olan ve su ortamında titre edilemeyen fenolün

etilendiamin içinde sodyum etoksit ile titre etmişlerdir. Daha sonraları ise Fritz grubunun bu alandaki yoğun çalışmaları konuyu daha ileri noktalara taşımışlardır. Bu çalışmalardan sonra kısa bir sürede çok miktarda çalışma yapılmıştır. Sonraki yıllarda daha da önem kazanmaya başlamıştır. Bu önem kazanmanın nedenleri şöyle özetlenebilir:

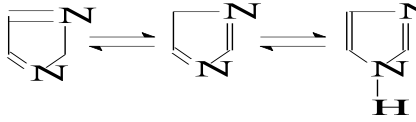
Bağlar üzerindeki çalışmaların giderek artması

Klasik metotların dışında metotların gelişmesi ve artması

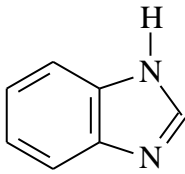
Çok saf metallere ihtiyaç duyulması, bilim insanını susuz ortam çalışmalarına ilgisini artırmıştır. Bu tip çalışmalarda metal katyonları önce koordinasyon bileşikleri halinde çöktürülmüş, daha sonra çöktürülen bu bileşikler susuz çözücülerde kristallendirilerek saflaştırılarak saf metaller elde edilmiştir (Gündüz vd., 1988) .

1.2. Benzimidazol Bileşiklerinin Özellikleri

İmidazol halkasına 4,5- konumunda bir benzen halkasının kaynaşmış olduğu halkalı yapı benzimidazol olarak adlandırılır. Halkalı yapı için 1,3-benzodiazol denilse de serinin genel bileşiğinin adı benzimidazoldür.



Şekil 1. İmidazol



Şekil 2. Benzimidazol

Benzimidazol halkasının değişik konumları imino grubuna 1 numarası verilerek numaralandırılır. Benzimidazoller, genellikle kristal yapıda yüksek erime ve kaynama noktasına sahip, polar çözücüler içinde çözünen, apolar çözücülerde çözünürlükleri az olan katı maddelerdir.

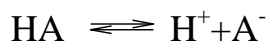
Benzimidazoller, bir serbest imino hidrojeni bulunduran tautomerik sistemlerdir. İmino hidrojenindeki süstitüsyon erime ve kaynama noktasının düşmesine sebep olur. Çünkü *N*-süstitüe benzimidazoller assosiyasyon yapmazlar. Benzimidazoller ile

imidazollerin pek çok açıdan benzer noktaları vardır. Her iki yapıda asidik ve bazik özelliklere sahiptir. Benzimidazoldeki -NH- grubu çok zayıf bazik ve göreceli olarak güçlü asidik özelliğe sahiptir. Çoğu benzimidazoller sulu asit ve sulu baz çözeltilerinde çözünürler. Benzimidazoller, imidazollere göre suda çok az çözünürler (Brown ve Diez, 2006). Benzimidazollerin en belirgin özelliklerinden biri kimyasal dayanıklılıklarıdır. Asitler ve bazlarla en etkin şekilde muameleye bile direnç gösterirler. İmidazol halkası yükseltgenmeye karşı çok dirençlidir. Benzimidazol $Kmno_4$ ile etkileştirildiğinde benzen halkası yükseltgenerek parçalanır ve 4,5-imidazolkarboksilik asit meydana gelir. Benzimidazoldeki imidazol halkası indirgenmeye karşı da çok güçlüdür. Hatta benzen halkası bile indirgenmeye karşı biraz direnç gösterir. Benzimidazoller Ni ve hidrojenle indirgenmezken, 2-metil-2-etil- ve 1,2-dimetilbenzimidazol buzlu asetik asit içinde platin oksit üzerinde hidrojenlendiği zaman karşılık gelen tetrahidro türevlerine dönüşür. 2-Fenilbenzimidazol bu koşullarda 2-sikloheksil-4,5,6,7-tetrahidrobenzimidazol meydana getirir.

Benzimidazolün kimyasal etkinliği, azotların tuz oluşumu, açılma ve alkillenme tepkimeleri ile benzen halkasının elektrofilik süstitüsyon tepkimesinden oluşmaktadır. 1-konumunda süstitüye grup bulundurmeyen benzimidazoller yüksek derecede asosiyasyon halde bulunmakta fakat asosiyasyon imino hidrojeni yer değiştirdiği zaman engel olmaktadır. Bu durumda oluşan sonuç asosiyasyonun bir molekülün imino hidrojeni ile bir diğer molekülün tersiyer azotu arasında oluşan hidrojen bağlarıdır. Bu sebepten 1-süstitüye benzimidazoller imino hidrojeni bulundurmadıkları için daha düşük erime ve kaynama noktasına sahiptirler.

1.3. İyonlaşma Sabiti

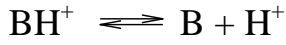
Asit ve bazların iyonizasyonunun tarifinde Bronsted-Lowry teorisi en yaygın ve en kullanışlı olanıdır. Bu teoriye göre proton veren maddeler asit, proton alabilen maddeler ise bazdır (Savcı ve Şahin, 1998). Asit ve bazların iyonizasyonunun aynı skala üzerinde gösterilmesi fikri ilk defa Bronsted tarafından ortaya atılmıştır. Asitler için iyonlaşma aşağıdaki şekilde ifade edilir.



iyonlaşma sabiti ise;

$$K_a = \frac{a_{H^+} \cdot a_{A^-}}{a_{HA}}$$

şeklinde gösterilir. Burada kullanılan a terimi her bir iyonik türün aktivitesini gösterir. Bazlar için ise iyonlaşma şu şekilde ifade edilir.



iyonlaşma sabiti ise;

$$K_a = a_{\text{H}^+} \cdot a_{\text{B}} / a_{\text{BH}^+} \quad \text{şeklinde ifade edilir.}$$

Bu denklemler her hangi bir sıcaklık için termodinamik iyonlaşma sabitleri olarak verilir. Bu iyonlaşma sabitleri konsantrasyondan bağımsızdır. Çünkü ifadelerdeki terimler aktivite cinsindedir. İyonlaşma sabitinin diğer bir ifade şekli ise konsantrasyon iyonlaşma sabiti olup, bu ifade de aktiviteler yerine konsantrasyon kullanılır. İyonlaşma sabitinin hesaplanmasında aktivitelere oranla konsantrasyon daha yaygın olarak kullanılmaktadır. Konsantrasyona göre iyonlaşma sabiti şu şekilde ifade edilir;

$$K_a = [\text{H}^+] [\text{A}^-] / [\text{HA}]$$

Buradaki köşeli parantez iyonik türün konsantrasyon cinsinden ifade edildiğini göstermektedir.

Herhangi bir çözeltilde çözülmüş olan maddenin iyonlarının aktivitesi ile konsantrasyonu arasında $a = f \cdot c$ şeklinde bir bağıntı vardır (Keskin vd., 1983). Buradaki a iyonun aktivitesi, c konsantrasyonu, f ise aktivite katsayısıdır. Yükü Z olan bir iyon için aktivite katsayısı seyreltik çözeltiler için Debye-Hückel denklemi ile verilir (Keskin vd., 1983).

$$-\log f = A Z^2 I^{1/2} / (1 + I^{1/2}) - 0.1 Z^2 I$$

Burada I, iyonik şiddet, A' ya Debye-Hückel parametresi denir. Bir değerli asit ve bazlar için iki sabit arasındaki fark çoğunlukla küçüktür. 0,01M ve 0,001 M'lık bir konsantrasyonda hemen hemen hiçbir fark yoktur.

Bir nötral molekülün aktivitesi, herhangi bir seyreltme nedeniyle konsantrasyonda olabilecek bir değişikliklerle önemli bir değişime uğramaz. H^+ iyonu konsantrasyonunu ölçmek yerine, H^+ iyonu aktivitesini (pH) ölçmek daha kolay ve iyi bir yoldur (Gündüz vd., 1999). Birçok madde suda çözüldükleri zaman suyun elektriksel iletkenliğini artırmazlar. Bunlar elektrolit olmayan maddeler olarak adlandırılırlar ve çözünme miktarlarıyla orantılı olarak suyun donma noktasını düşürürler. Eter, kloroform ve

benzen elektrolit olmayan özellikteki maddelerdir. Diğer taraftan asitler, bazlar ve tuzlar, suda çözüldükleri zaman suyun elektriksel iletkenliğini artırır. Bu maddeler ise elektrolit maddelerdir (Berkem vd., 1994). Tuzlardan farklı olarak, birçok asit ve baz çözeltide tamamen iyonlaşmazlar. Kuvvetli asit ve bazlar (HCl ve NaOH gibi) 0-14 pH aralığında tamamen iyonlaşırlar. Fakat zayıf asitler ve bazlar kısmen iyonlaşırlar.

1.3.1. İyonlaşma Sabitinin Kullanımı

İyonlaşma sabiti asit ve bazların kuvvetini ölçmek için kullanılan bir terimdir (Albert vd., 1984). Bu terim sayesinde tüm asitler ve bazlar ayırt edilebilmekte, farkları değerlendirilebilmektedir. Böylece kıyas yapmaya ve nicel değerlendirmelere olanak sağlamaktadır. Organik bileşikler asidik veya bazik gruplar içerebilirler. Bu gruplar, bileşiğin kimyasal, fiziksel ve biyolojik özelliklerini tayin eder. Bu gibi bileşiklerde moleküler, anyonik, katyonik türlerin birbirlerine oranı pKa ile hesaplanabilir. Bu hesaplama; (baz) / (asit) = 10^{pH-pKa} denklemi ile kolayca yapılabilir (Perrin vd., 1981). İyonlaşma sabitleri yardımıyla verilen herhangi bir pH' de, bir maddenin iyonlaşmasından oluşan değişik iyon türlerinin konsantrasyonları hesaplanabilir.

Değişik iyon türleri değişik UV spektrumuna sahiptirler ve sadece bunun bilinmesiyle önemli spektroskopik çalışmalar yapılabilir. Verilen bir maddenin iyonik türleri kimyasal ve biyolojik özelliklerinde olduğu gibi fiziksel özellikleri yönünden de farklıdır. İyonlaşma sabitleri, bir maddenin en az iyonlaştığı pH aralığını tanımlayarak, azami ürünün alınabileceği en iyi koşulları gösterir. İyonlaşma sabitleri, yeni sentezlenmiş bir maddenin yapısını aydınlatmada kullanıldığı gibi erime noktası belli olmayan iki maddenin kesin bir şekilde tanınmasında da kullanılır (Perrin vd., 1981). Kimyasal olarak birbirine çok benzeyen maddelerin birbirinden ayırt edilmesi pK_a yardımı ile yapılır.

İyonlaşma sabitleri nümerik olarak küçük ve kullanışsız sayılardır. Bu nedenle asit sabitlerinin eksi logaritmalarını (pK_a) kullanmak daha pratiktir. 25°C' de suyun iyonları çarpımının eksi logaritmalarının toplamı 14,00' tür. Bu su şekilde ifade edilebilir;

$$pK_a + pK_b = 14,00$$

Bazlar için kullanılan pK_b değerlerini pK_a cinsinden ifade edilmesi bu denklemden yararlanılarak rahatlıkla bulunabilir. Bu bilgiler doğrultusunda, pK_a değerleri asitlerin ve bazların kuvvetlerini karşılaştırmak için çok uygun bir yoldur (Berkem vd., 1994).

Bir asit ne kadar kuvvetli ise pK_a ' sı o kadar düşük, bir baz ne kadar kuvvetli ise pK_a ' sı o kadar yüksektir (Perrin vd., 1981).

1.3.2. İyonlaşmada Çözücü Etkisi

Su, kimyacılar için çok önemli bir çözücüdür. Çünkü kimyasal reaksiyonların çoğu sulu ortamda gerçekleşir. Dielektrik sabiti çözücü hakkında önemli bilgiler verir (Gündüz vd., 1999). Coulomb kanununa göre yükleri q_1 ve q_2 olan boşluktaki iki tanecik birbirinden r kadar uzaklığında iseler bunların arasındaki kuvvet;

$$f = q_1 \cdot q_2 / r^2$$

Bu iki tanecik herhangi bir ortamda olurlarsa aralarındaki kuvvet ortama bağlı olarak azalır. Ortamın etkisini gösterecek şekildeki denklem ise;

$$f = q_1 \cdot q_2 / D \cdot r^2$$

Burada D ' ye ortam faktörü veya dielektrik sabiti denir. D ' nin değeri boşluk için 1, su için 80' dir. Buradan şunu anlarız: Su içinde her hangi bir madde (örn; NaCl) çözüldüğünde Na^+ ve Cl^- iyonları arasındaki çekim kuvveti bu bağıntıya göre 80 kez azalacağından iki zıt işaretli iyon birbirinden kendiliğinden ayrılır, yani iyonlaşır.

1.3.3. İyonlaşmada Sıcaklık Etkisi

İyonlaşma sabiti sıcaklıkla değişir. Karboksili asitler ve birçok asidin iyonlaşma sabiti hassas sıcaklık kontrolüne gerek kalmadan tayin edilebilse de karboksilik olmayan organik asitlerin pek çoğu sıcaklıkla değişebilir (Berçin ve Uysal, 1996).

1.3.4. İyonlaşma Sabiti Tayin Metotları

İyonlaşma sabitlerinin belirlenmesinde kullanılan 3 temel yöntem bulunmaktadır. Bunlar;

1. Ultraviyole-Görünür Bölge Spektroskopisi (UV-VIS)
2. Potansiyometrik yöntem
3. Kapiler Elektroforez ile iyonizasyon

İyonlaşma sabitini tayin etmek için en uygun yöntem potansiyometrik titrasyon yöntemidir. Potansiyometrik yöntem bir iyonlaşma sabitinin tayini için 30-40 dakikaya ihtiyaç duyarken, UV spektroskopisi yöntemi genellikle bir çalışma gününün tamamını kapsamaktadır. Bununla beraber UV spektroskopisi yöntemi, cam elektrodunun çalışma sınırlarının dışında olan çok yüksek ve çok düşük pH aralıklarında ve özellikle çok az

çözünen maddelerin iyonlaşma sabitlerinin tayini için uygundur. UV spektroskopisi yöntemi sadece UV ve görünür ışığı absorbe eden maddeler için kullanılır. İyonik türler farklı dalga boylarında farklı absorpsiyon maksimumları göstermelidirler. İyonlaşma sabitinin potansiyometrik yöntemle tayininde numune tarafından bağlı olmayan H^+ iyonlarının ölçülmesine karşılık, spektroskopik yöntemde numune tarafından H^+ iyonlarının tutulduğu zamanki spektral kayma ölçülür (Perrin vd., 1981).

1.4. Spektroskopik Yöntem

Organik maddelerin spektroskopik analizi, absorplanan ışımın frekansının ve şiddetinin ölçülmesidir. Absorpsiyon spektrumlarının kaydedilmesi için kullanılan cihazlara spektrofotometre kısaca spektrometre denir. Tek veya çift ısıma (ısı) demetli olarak sınıflandırılır. Çift ışım demetli cihazlarda, kaynaktan çıkan ışım iki demete ayrılarak biri örnek çözeltinin bulunduğu hücreden, diğeri örneğin çözeltisinden geçirilir; sonra her ikisi, alıcıda toplanır ve toplam absorplama şiddetinden çözücünün absorplama şiddeti çıkarılarak örnek çözeltinin absorplama şiddeti kaydedilir. Böylece ısıma kaynağından gelecek değişikliklerin etkisi yok edildiği gibi, örneğin analizi de bir işlem ile yapılmış olur (Gülmez vd., 2008).

1.5. Potansiyometrik Yöntem

Potansiyometrik titrasyonlar çalışma ortamına bağlı olarak değişik şekillerde yapılır. Eğer tamamen sulu bir ortamda çalışılacaksa her reaktif ilavesinden sonra pH veya oluşturulan bir pilin potansiyeli ölçülür. Çalışma ortamının hiç su içermediği veya çok az su içerdiği durumlarda sadece potansiyel farkının ölçülmesi tavsiye edilir. Çünkü susuz ortamlarda, özellikle alkali bölgede pH ölçümleri hatalı sonuç verir.

Potansiyometrik titrasyonlar, reaktifin her ilavesinden sonra potansiyel veya pH ölçülmesi üzerine kurulmuştur. Mekanik bir karıştırıcı ile iyice karıştırılan çözeltiliye prensip olarak reaktif, dönüm noktasından önce fazla fazla ilave edilir ve dönüm noktasına doğru reaktif ilavesi azaltılır. Dönüm noktasına yaklaşıldığı, her reaktif ilavesinden sonra ölçülen potansiyel veya pH' de ki değişme miktarından anlaşılabilir. Dönüm noktasını kesin olarak bulabilmek için titrasyona dönüm noktasının ötesinde de bir süre devam edilir. Titrasyon hangi reaksiyona dayanırsa dayansın, reaktif özellikle dönüm noktası yakınında azar azar ilave edilir ve ölçümler bir kaç defa tekrarlanır. Reaktifin her ilavesinden sonra ölçülen potansiyel farklarının veya pH değerlerinin ilave edilen reaktifin mL değerlerine karşı grafiği çizilirse S şeklinde bir titrasyon eğrisi elde

edilir. Potansiyometrik yöntemde pH ölçümlerinde bir ortamda bulunan hidrojen iyonu konsantrasyonunu tayin etmek için iki elektroda ihtiyaç vardır (Berkem vd., 1994). Bunlar; cam elektrot ve hidrojen elektrotudur.

Cam elektrotla pH ölçümünde hidrojen iyonu aktivitesi ve dolayısıyla pH en iyi cam elektrotla tayin edilir. Bir cam elektrot kolaylıkla temin edilebilir ve uzun süre kullanılabilir. Böyle bir elektrotla kuvvetli yükseltgenler, kuvvetli indirgenler, gazlar (H_2S AsH_3 gibi) ve proteinler yanında pH ölçülebilir. Hatta jel halinde bulunan ortamın bile pH' si bu metot ile ölçülebilir (Gülmez vd., 2008). Son zamanlarda geliştirilen mikro cam elektrotlarla damla mertebesindeki bir çözeltinin pH' sini ölçmek mümkündür.

Cam elektrot kullanılmasında su noktalara dikkat edilmesi gerekir :

1. Cam elektrodun çözeltilere daldırılıp ölçüm yapılan kısmına elle dokunulmamalıdır. Elektrot pisetten fışkırtılan saf suyla yıkanmalıdır.
2. Cam elektrot derisik sülfürik, nitrik asit ve derisik alkalilere daldırılmamalıdır. Ayrıca mutlak alkoller su çekici maddelerden de sakınılmalıdır.
3. Cam elektrot pH 10' un üstünde olan çözeltilere daldırılmamalıdır.
4. Konsantrasyonu 0,1 moların üstünde olan asit çözeltilerinin pH' si ölçülmez. Çünkü olduğundan daha fazla çıkar.
5. pH metre tampon çözeltilere karşı sık sık ayarlandığından, tampon çözeltinin çok iyi korunması gerekir.
6. Nötrale yakın çözeltilerin pH' sinin ölçülmesinde de dikkatli olmak gerekir. Çünkü, böyle çözeltilerde denge oldukça geç kurulur.
7. Cam elektrot uzun süre açıkta bırakılıp kurutulmamalıdır. Kurumuş bir elektrot kullanılmadan önce uzunca bir süre saf suya daldırılmalı ve su zaman zaman değiştirilmelidir. En iyisi elektrot kullanılmadığı zamanlarda 3 molar KCl ortamında muhafaza edilmelidir (Gündüz vd., 1999).

Bir çözeltinin elektrokimyasal bir hücre haline getirilerek önemli miktarda akım almadan potansiyelinin ölçülmesi bu potansiyelden faydalanılarak içindeki maddenin konsantrasyonunun tayin edilmesi prensibi üzerine kurulmuş metotlara potansiyometri veya potansiyometrik analiz metotları denir. Bu metot, renkli ve renksiz bütün maddelere uygulanabilmektedir. Potansiyometride kullanılan cihazlar, genelde basit ve ucuz cihazlardır.

Başlıca 3 kısımdan oluşur;

- 1) Referans elektrot
- 2) İndikatör elektrot
- 3) Potansiyel ölçme cihazı.

Titrant konsantrasyonundan etkilenmeyen elektrota referans elektrot denir. İyi bir referans elektrot, şu şartları yerine getirmelidir:

- 1) Tersinir olmalı ve Nernst denkleminde uymalıdır,
- 2) Zamanla bağımlı olmayan sabit bir potansiyel vermelidir,
- 3) Az miktarda akım alındıktan sonra eski haline kısa zamanda dönmelidir,
- 4) Sıcaklık değişmelerinden çok az etkilenmelidir.

Ancak, hiçbir referans elektrot yukarıda verilen şartların hepsine sahip olamaz. Referans elektrotlar 3'e ayrılırlar. Bunlar;

- 1) Standart Hidrojen Elektrot (SHE)
- 2) Kalomel Referans Elektrot
- 3) Gümüş / Gümüş Klorür Referans Elektrot

Hidrojen gaz elektrotlar, eskiden beri elektrokimyasal çalışmalarda sadece referans elektrotlar olarak değil, aynı zamanda pH tayinlerinde indikatör elektrotlar olarak da yaygın biçimde kullanılmıştır. Bu tip bir elektrotun yapısı;



Parantez içindeki terimlerden platin yüzeyindeki potansiyelin, çözeltideki hidrojen iyonu aktivitesine ve çözeltiyi doyurmak için kullanılan hidrojenin kısmi basıncına bağlı olduğu anlaşılır. Hidrojen elektrotun potansiyeli, sıcaklığa, hidrojen iyonu aktivitesine ve elektrot yüzeyindeki hidrojen basıncına bağlıdır. Geleneksel olarak bu elektrotun potansiyeli tüm sıcaklıklarda tam sıfır volt olarak kabul edilir. Standart hidrojen elektrot temelde çok önemli olmasına rağmen, elektrot yüzeyinin hazırlanmasında ve reaktif aktivitesinin kontrolünde karşılaşılan güçlük, elektrotun yeteri kadar pratik olmadığını gösterir. Bu nedenle günlük ölçümlerde nadiren kullanılır.

Çok yaygın olarak kullanılan ikinci bir referans elektrot doygun kalomel elektrottur (DKE). Bu elektrot civa (I) klorür ile doyurulmuş bir potasyum klorür çözeltisiyle temasta olan bir civa havuzundan ibarettir. Platin tel diğer iletkenle

elektiriksel temas saęlamak üzere civaya batırılmıştır. Bu referans elektrotun potansiyeli 0,24 V pozitifdir. Elektrot reaksiyonu şekildeki gibidir;



Bu elektrotların dezavantajı, sıcaklık deęiştğinde potansiyelin yeni bir deęere, potasyum klorür ile kalomelin çözünürlük dengesinin yeniden kurulmasının gerektirdiđi zaman nedeniyle, çok yavaş ulaşmasıdır.

1.6. Organik Bileşiklerde Asitlik ve Bazlık

Günümüzde geniş kapsamlı bir organik kimya bilgi birikiminin oluşmasında ve bu dalda yoğun bilimsel çalışmaların sürdürülmesinde, modern elektronik teorilerin katkısı çok büyüktür. Modern elektronik teorilerin yardımı ile organik kimyaya ilişkin bir çok alanda reaktivite ile moleküler yapı arasında korelasyon kurulması söz konusudur. Modern elektronik teorilerin ışığında, özellikle organik asitlerin ve bazların yapıları ile asitlik ve bazlık kuvvetleri arasında çok başarılı korelasyonlar kurulabilmektedir. Buna göre moleküler yapısı bilinen bir bileşiğin nedenli kuvvetli bir asit (veya baz) olacağı, modern elektronik teorilerin yardımı ile önceden kestirilebilir.

Organik monoproitik asitleri H-A olarak ifade edersek, A atomunun elektronegativitesinin asitliđi etkileyen en temel etkenlerin başında geldiđini belirtebiliriz. A atomunun elektronegativitesi ne kadar fazla ise, H-A bileşiklerine ilişkin asitlik o kadar fazla olacaktır. A atomunun elektronegativitesi arttıkça, bağ polarizasyonu artacaktır. Farklı bir ifade ile H-A kovalent bağına ilişkin iyonik karakterin, A atomunun elektronegativitesindeki artışa koşut bir artış göstereceđini biliriz. Bu durumun hidrojenin bađlı olduđu atomun büyüklüğünde veya farklı bir ifade ile polarizabilite yatkinlığının artışından kaynaklandıđını belirtebiliriz. Hidrojenin bađlı olduđu atomun boyutları büyüdükçe (veya polarizabilitesi arttıkça) asitliđinin artması söz konusudur.

1.6.1. Asitliđi ve Bazlıđı Etkileyen Yapısal Etkenler

Temel yapıya bađlı olan gruptaki atomların konumları, özellikleri ve düzenlenmeleri asitliđi ve bazlıđı etkileyen temel etkenlerdir. Bu etkenler “yapısal etkenler olarak” bilinir. Asitliđi ve bazlıđı etkileyen temel yapısal etkenler beş ana sınıfta yer alırlar. Bunlar;

- Rezonans (veya delokalizasyon veya konjugasyon) etkisi,

- İndüktif etki,
- Hidrojen bağlanması etkisi,
- Hibritleşme etkilesi (Hibridizasyon),
- Sterik etkidir.

Gerçekte ise bu temel etkenler sadece asitlik ve bazlık için geçerli değildir. Yapısal etkenler diğer tüm bileşiklerin reaktivitelerini etkileyen faktörlerdir.

1.7. Susuz Çözücülerin Faydaları

Susuz çözücülerin çok sayıda yararı vardır. Bu yararlarından bazılarını maddeler halinde aşağıdaki şekilde sıralanabilir:

1) Su çok iyi bir çözücü olmasına karşın, her şeyi çözen bir çözücü değildir. Çünkü çok sayıda organik asit ve bazların çoğunluğunu çözemez. Bundan dolayı da böyle maddelerin titrasyonlarının su ortamında yapılması imkansız hale gelir; bundan dolayı da bu maddeler hakkında istenilen bilgilerin (asit, baz, çökme, kompleksleşme, redoks reaksiyonları gibi) elde edilmesi mümkün olmaz. Fakat suda çözünmeyen bu organik asit ve bazlar, susuz çözücülerde çözünürler ve asit, baz, çökme, kompleksleşme, redoks reaksiyonları gibi konulardaki bilgilere rahatlıkla ulaşılır.

2) Su polar özelliği yüksek olan amfiprotik bir çözücüdür. Su ortamında en kuvvetli asit H_3O^+ iyonu, en kuvvetli baz da OH^- iyonudur. Bunlardan H_3O^+ iyonu anilini, OH^- iyonu da fenolü titre edecek kadar kuvvetli değildir. Fakat susuz ortamlarda zayıf bazları ($pK_b > 11$) titre etmek için H_3O^+ iyonundan çok daha kuvvetli SH^+ , SH_2^+ , CH_3CO^+ gibi asitler bulunabilir. Zayıf asitleri titre etmek için de OH^- iyonundan daha kuvvetli S^- , RCH_2^- , R_4NOH gibi bazlar bulunabilir. Ayrıca su, asitlik ve bazlık özelliklerini dengeler. Bunu bir örnek ile açıklamak gerekirse, su ortamında kuvvetli asit olarak bildiğimiz HCl , HBr , HNO_3 , H_2SO_4 , $HClO_4$ gibi asitlerin hepsi de kuvvetli asitlerdir. Bu asitlerin kuvvetlilik bakımından aralarında herhangi bir fark yoktur. Bunun nedeni, su ortamında hepsi de H_3O^+ asidini veriyor olmasıdır. Aslında ise gerçek böyle değildir. Bu asitlerin kuvvetlilikleri arasında bir fark vardır. Bu fark asetik asit ortamında şöyledir:



- 3) Su ortamında sadece Bronsted asitleri titre edilebilmesine karşın, susuz ortamlarda hem Bronsted asitleri, hem de Lewis asitleri kolaylıkla titre edilebilmektedir. Böylece bir çok sayıda asidin titrasyonu yapılmakta ve özellikleri hakkında daha detaylı bilgiler elde etme imkanı doğmaktadır.
- 4) Su ortamında titrasyonları yapılamayan bazı metal asetatlar ve amonyum (kuvaterner) halojenürler susuz ortamlarda kolaylıkla titre edilebilirler.
- 5) Anhidritlerde ve açillerde serbest kalan asitleri su ortamında tayin etmek mümkün olmadığı halde susuz ortamlarda bu maddeleri tayin etmek mümkün olmaktadır.
- 6) Su ortamında çözünmeyen ve dolayısıyla titrasyonu mümkün olmayan ilaç aktif maddeleri de susuz ortamlarda tayin etmek mümkün olabilmektedir.
- 7) Susuz çözücülerin sayısı çok, ayrıca çeşitli oranlarda karıştırılmaları da mümkün olduğundan bir maddenin titrasyonu için dielektrik sabiti değişik çözücülerini deneme imkanı vardır.
- 8) Bir maddenin asitlik ve bazlık özelliği çözücüye bağlı olarak değişir. Diğer bir deyişle; seçimi iyi yapılan bazik bir çözücü, içinde çözölen zayıf asidi; seçimi iyi yapılan bir asidik çözücü de içinde çözölen zayıf bir bazı kuvvetlendirir ve onu titre edilebilecek bir hale getirir. Örneğin; su ortamında yeterince bazik olmayan üre, aset anhidridi ortamında perklorik asitle titre edilebilecek kuvvete yükselir.
- 9) İki asidin dissosiyasyon sabitleri arasında sulu ortamda 2 pK birimi kadar fark varsa, bu fark susuz ortamlarda 5 pK birimine kadar çıkabilir. Bu da yan yana titrasyonları kolaylaştırır. Kısaca ifade etmek gerekirse, susuz ortam reaksiyonlarının doğruluk derecesi yüksektir. Bu reaksiyonlar hızlıdır, basittir ve uygulama alanı geniştir (Gündüz vd., 1988).

1.8. Organik Çözücüler

Organik çözücüler, hidrojen bağı akseptörü veya donörü olmalarına, ortaklanmamış elektron çifti akseptörü veya donörü olmalarına, dipol momentlerine ve dielektrik sabitlerine göre çeşitli gruplara ayrılabilir. Ancak bunlar arasında kesin sınırlar yoktur. Şöyle ki, elektron çifti donörü veya akseptörü olan çözücüler, hidrojen bağı donörü veya akseptörü olan çözücülerden farklı yapı ve özelliklerde çözücüler değildirler (Kılıç ve Gündüz vd., 1988). Elektron çifti donörü olan dimetil sülfoksit, piridin, dioksan gibi çözücüler aynı zamanda hidrojen bağı akseptörüdürler. Elektron çifti akseptörü olan asetik asit, alkoller gibi çözücüler de hidrojen bağı donörü

çözücülerdir. Hatta elektron çifti donörü olan dimetil sülfoksit, dioksan, heksametil formamit gibi çözücüler, aynı zamanda elektron çifti akseptörleridir. Ancak, donörlük özellikleri daha fazladır. Bunun tersi de doğrudur. Bu nedenle bir çözücünün adı değişik özelliklere göre verilmiş çözücü çizelgelerinde görülebilir (Gündüz vd., 1986).

Hidrojen bağı söz konusu olunca çözücüler üç gruba ayrılır.

1) Hidrojen bağı akseptörü ve donörü olan çözücüler. Bu çözücülere amfiprotik çözücüler denir. En çok bu deyim kullanılır. Bunlar üçe ayrılır:

* Nötral çözücüler

* Protojenik çözücüler (asidik)

* Protofilik çözücüler (bazik)

2) Daha çok hidrojen bağı akseptörü olan çözücüler. Bu çözücülere dipolar aprotik çözücüler denir. Dipolar aprotik çözücüler de ikiye ayrılır:

* Protofilik çözücüler

* Protobik çözücüler

3) Hidrojen bağı donörü veya akseptörü olmayan çözücüler. Bunlara inert çözücüler denir. İnter çözücüler ayrıca alt gruplara ayrılmazlar.

Dipolar aprotik diye ifade edilen çözücüler içinde pKs değeri olanlar, hem asidik hem de bazik özellik gösterirler. Çözücüler arasında kesin sınırlar çizmek pek mümkün değildir (Gündüz vd., 1988).

1.9. Uygun Çözücünün Seçilmesi

Çok sayıda susuz çözücü olduğundan, yapılacak işe uygun bir çözücünün seçilmesi oldukça güçtür. En önemli nokta bir asit titre edilecekse bazik, bir baz titre edilecekse asidik bir çözücü seçilir. Bu çözücü seçimi işleminde yapılacak birinci işlemdir. Genelde bir titrasyon için uygun olan çözücü denenerek bulunur. Bu önemlidir çünkü, bir asidin titrasyonu için seçilecek çözücünün bazikliği gereğinden az veya gereğinden çok olmamalıdır. Aksi halde yapılacak olan titrasyon doğru sonucu vermez (Bahçeci vd., 2002). Fakat, denenerek seçilen bir çözücünün de yapılan iş için çok ideal olduğunu söylemek yanlış olur. Bu nedenle uygun bir çözücünün seçiminde aranan başlıca özelliklerden bazıları şöyledir:

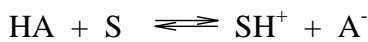
1) Çözücü titrasyonu yapılacak maddeyi, titrantı ve titrasyon esnasında ortamda meydana gelecek maddeleri (moleküler, iyonik) çözmeli

2) Çözücü ucuz olmalı ve kolaylıkla temin edilebilmeli

- 3) Çözücü oda sıcaklığının altında ve üstünde geniş bir sıcaklık aralığında sıvı halde bulunabilmeli
- 4) Titrasyon esnasında ortamda jelimsi veya kristalin madde oluşmamalı
- 5) Çözücünün dissosiyasyon sabiti (K_s) küçük, diğer bir deyişle çalışma aralığı potansiyeli (mV) olarak geniş olmalı
- 6) Asitlerin titrasyonu için seçilen çözücü yeterince bazik, bazların titrasyonu için seçilen çözücü de yeterince asidik olmalı
- 7) Çözücünün dipol momenti büyük, viskozitesi küçük olmalı (çözme ve iyonlaşma iyi, potansiyel okumaları kararlı olur)
- 8) Çözünen madde çözücü de bozunmamalı veya çözücüyle kalıcı bir reaksiyona girmemeli
- 9) Çözücünün dengeleme etkisi olmamalı, çözücü dipolar aprotik olmalı
- 10) Çözücüde asit titre edilecekse asidik, baz titre edilecekse bazik safsızlıkla olmamalı (Gündüz vd., 1988).

1.10. Çözücünün Yeterince Asidik veya Bazik Olması

Seçilecek olan çözücünün asidik veya bazik özelliği çok önemlidir. Çünkü, asidin titrasyonu için seçilen çözücü olması gereğinden fazla bazikse yarar yerine zarar verir. Çünkü böyle bir çözücünün molekülleri konsantrasyon avantajından dolayı özellikle titrasyonun sonlarına doğru bazik titrant molekülleriyle rekabete girer ve tuttuğu protonun titrantla reaksiyona girmesine engel olur. Bunun sonucu olarak asidin konsantrasyonu düşük bulunur (Bahçeci vd., 2002). Titrasyon sonlarına doğru ortamda hem asit, hem de baz eser orandadır. Buna karşılık çözücü moleküllerinin konsantrasyonu çok yüksektir. Asit konsantrasyonu ne kadar düşük olursa olsun onu yakalar ve reaksiyona sokar (kütlelerin tesiri kanunu). Buna karşılık çözücü yeterince bazik değilse, bu defa da titre edilmek istenen asidi yeterince kuvvetlendiremez ve dolayısıyla ortamda bazla titre edilecek oranda solvatlaştırılmış proton (SH⁺ gibi) bulunmaz (Berkem vd., 1994). Bilindiği gibi bir çözücüdeki en kuwetli asit SH⁺ asididir. Bazik çözücü çözdüğü HA asidiyle



dengeğini meydana getirmeli ve bu dengeyi hissedilir oranda sağa kaydırmalıdır. Kısacası, bazik bir çözücü çözdüğü asitten protonu koparıp yeterli konsantrasyonda SH⁺

iyonu verecek kadar kuvvetli bazik, titrant olarak kullanılan B bazıyla da rekabete giremeyecek kadar zayıf bazik olmalıdır (Yüksek vd., 2004). Diğer bir deyişle;



reaksiyonunu kolayca ve kantitatif olarak verecek kadar zayıf bazik olmalıdır. Bilindiği gibi zayıf baz üzerindeki protonu kolayca bırakan bazdır. Bir zayıf bazın titrasyonunda kullanılacak asidik bir çözücünün de titrasyonu yapılacak B bazıyla şu dengeyi vermeil



ve dengeyi yeterince sağa kaydırmalıdır. Ortamda yeterince S^- bazı bulunmalıdır. Ortamda bulunabilecek en kuvvetli baz S^- bazıdır (SH çözücü molekülü). Bazik çözücüde söylenene paralel bir şekilde, asidik çözücü de B bazıyla BH^+ iyonunu verecek kadar kuvvetli asidik, titrant olarak kullanılan HA asidiyle titrasyon sürecinde rekabete giremeyecek kadar da zayıf asidik olmalıdır. Bu söylenenler daha çok amfiprotik çözücüler içindir (Kılıç vd., 1994).

1.11. Çözücünün Dengeleme Etkisi

Dipolar aprotik çözücülerin dengeleme etkileri olmadığından, böyle çözücülere asit karışımları veya baz karışımları kademeli olarak titre edilebilir. Çünkü, böyle çözücülerin geniş bir çalışma potansiyel aralığı vardır. Örneğin, amfiprotik çözücüde 2 pK birimi kadar olan bir fark, dipolar aprotik çözücülerde 5 pK birimine kadar çıkabilir. Çalışma potansiyel aralığı veya pH aralığı çok geniş olduğundan (30 pH birimi gibi) bu büyük fark titrasyon kolaylığı sağlamış olur (Gündüz vd., 1988).

1.12. Çözücülerde Bulunan Safsızlıkların Tayini

Çözücülerin içermiş olduğu safsızlık miktarı deneysel olarak tespit edilebilir. Bu miktarın dikkate değer olup olmadığı ise çıkan sonuca göre yorumlanır. Bazik çözücüler asidik, asidik çözücüler de bazik safsızlık ihtiva etmemelidir.

Bir çözücüdeki asidik safsızlığı tespit etmek için, çözücünün 20 mL' sine bir damla timol mavisi ilave edilir ve sonra çözücünün rengi maviye dönünceye kadar 0,100 M tetrabutylamonyum hidroksitle titre edilir. Titrasyondaki sarfiyat 0,04 mL' yi geçmiyorsa, çözücünün dikkate değer safsızlık ihtiva etmediği sonucuna varılır. Titrant sarfiyatı 0,04 mL' yi geçiyorsa bu miktar esas titrasyondaki sarfiyattan düşülür. Bir çözücünün bazik safsızlığı da çözücünden alınan 20 mL' lik bir kısım üzerine bir damla

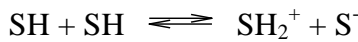
metiloranj konup renk kırmızıya dönünceye kadar 0,100 M perklorik asitle titre edilerek tespit edilir. Titrasyonda 0,04 mL' den az titrant sarfedilmişse çözücünün dikkate değer safsızlık ihtiva etmediği sonucuna varılır. Sarfiyat 0,04 mL' yi geçerse bu sarfiyat titrasyondaki esas sarfiyattan çıkarılır. Asetik asit, propiyonik asit gibi çözücülerdeki bazik safsızlık tespitinde kristal viyole indikatörü kullanılır. Çözücülerdeki asidik ve bazik safsızlık tespitinde kullanılan titrant sarfiyatı 0,04 mL' yi çok geçerse, çözücünün uygun bir metodla saflaştırılması gerekir (Gündüz vd., 1999).

1.13. Titrasyonun Doğruluğunu Etkileyen Faktörler

Bir titrasyonun doğruluğunu çeşitli faktörler etkiler. Bu faktörler, çözücünün solvatlaştırma gücü, çözücünün dielektrik sabiti ve iyonların yükü, çözücünün saflık yüzdesi, kullanılan titrantın kuvvetliliği, çalışmacının bilgisi, sabrı, deneyimi ve laboratuvar olanakları, kullanılan cihazın kalibrasyonunun standartlara uygun şekilde yapılmış olması faktörler titrasyonun doğruluğunu etkiler.

1.14. Susuz Çözücülerde Otoprotoliz ve pH

Susuz çözücülerdeki otoprotoliz olayı veya diğer adıyla otodissosyasyon daha çok amfiprotik çözücülerde gözlenen bir reaksiyondur. Bu reaksiyon dipolar aprotik çözücülerde ise çok sık görülmez, inert çözücülerdeyse hiç görülmez (Gündüz vd., 1999). Amfiprotik ve benzeri çözücüler SH ile gösterilecek olursa, otoprotoliz (otodissosyasyon) reaksiyonu şöyle gösterilebilir:



Bu dengedeki SH_2^+ iyonu liyonyum iyonu, S^- iyonu ise liyat iyonu olarak adlandırılır. Bu tip çözücülerde en kuvvetli asit liyonyum iyonu, en kuvvetli baz ise liyat iyonudur. (Bu tanıma uygun olarak saf sudaki hidroksonyum ve hidroksil iyonları verilebilir). Şayet ortama liyonyum iyonundan daha kuvvetli bir asit eklenirse, kendisine eşdeğer liyonyum iyonu oluşur. İlave edilen asitlerin hepsi liyonyum iyonuyla dengelenirler. Liyat iyonundan daha kuvvetli bazlar da asitlerdeki gibi liyat iyonunda dengelenirler (Gündüz vd., 1988).

Bir çözücüde meydana gelen liyonyum iyonu, bir başka çözücüde meydana gelen liyonyum iyonunundan kuvvet bakımından birbirinden çok farklıdır. Liyat iyonları için de aynı durum söz konusudur. Fakat, çözücünün otoprotoliz sabiti çok küçük ($pK_s = 30$

gibi) olursa yukarıda sözü edilen dengeleme olayına rastlanmaz. Böyle çözücüler asetonitril, dimetilsülfoksit gibi dipolar aprotik çözücülerdir.

Amfiprotik ve bazı dipolar aprotik çözücülerde gözlenen otoprotoliz reaksiyonunun derecesi otoprotoliz sabiti denen bir sabitle ifade edilir.

$pK_s = [\text{SH}_2^+] \cdot [\text{S}^-]$ Buradan da;

$pK_s = p[\text{SH}_2^+] + p[\text{S}^-]$ elde edilir.

Bir çözücünün pK_s değerinin yüksek olması, onun çalışma potansiyel aralığının geniş olması demektir (Yüksek vd., 2004). Bu özelliklerinden dolayı dipolar aprotik çözücüler çok uygun çözücüler olduğu söylenebilir. Böyle çözücülerde asit karışımları bile kademeli olarak titre edilebilir. Burada sözü edilen asit veya asitler protonik bronsted asitleridir. Lewis asitleri için ise önemli olan çözücünün elektron çifti donörlüğüdür. Benzer sözler bazlar için de söylenebilir.

Özellikle asit-baz reaksiyonlarında çözme zorluğu yoksa şayet, daha çok pK_s değeri büyük olan çözücü seçiminin yapılması doğru olur. Bir çözücünün iyi bir çözücü olması için reaksiyona girenlerden başka, reaksiyonda meydana gelenleri de çözmesi gerekliliği unutulmamalıdır.

pH değerleri susuz ortamlarda genel olarak pHs şeklinde gösterilir ve tanımı aynı su ortamındaki gibi yapılır. Buradan hareketle, susuz ortamdaki pHs solvatize olmuş proton aktivitesinin eksi logaritması olarak $pH_s = -\log a_{\text{H}^+}$ verilir.

Fakat, susuz ortamlarda daha çok seyreltik çözeltiler üzerinde çalışıldığından ve seyreltik çözeltilerde de asidin çok az bir kısmının solvatlaştığı dikkate alınır, solvatize olmuş proton konsantrasyonu, aktif proton konsantrasyonu gibi görülür ve

$pH_s = -\log [\text{SH}^+] = -\log [\text{SH}_2^+]$ şeklinde ifade edilir.

Fakat, kullanım kolaylığı yönünden çoğu zaman pHs yerine suda olduğu gibi sadece pH yazılır. Amfiprotik çözücülerde de solvatize olmuş protondan söz edilebilir. Ancak, çözücülerdeki proton pHs olarak değil, pK_s olarak ifade edilir. Bu ifadede saf çözücüde $[\text{SH}_2^+] = [\text{S}^-]$ kabul edilir. Buna göre K_s

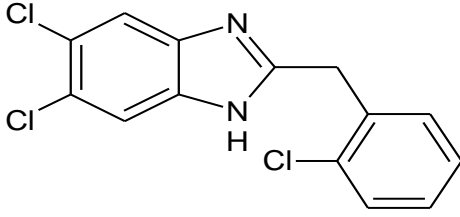
$K_s = [\text{SH}_2^+] [\text{S}^-]$ ve pK_s ise $-\log K_s$ şeklinde verilir.

2. YAPILAN ÇALIŞMALAR

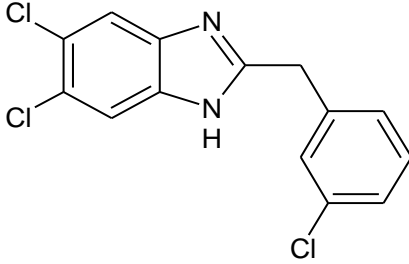
2.1. Deneyleerde Kullanılan Madde ve Cihazlar

2.1.1. Çalışılan Maddeler

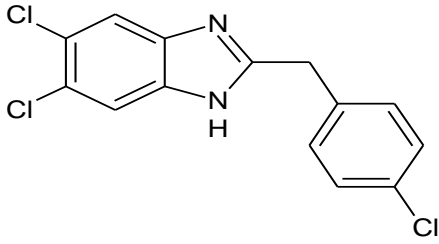
On adet yeni benzimidazol türevi bileşiği ilk kez sentezlenerek bunların potansiyometrik incelemesi yapıldı. Bu bileşiklerin biyolojik aktif oldukları tespit edilmiştir. Bu yüzden pek çok uygulamada önem kazanmışlardır. Sentezlenen bileşiklerin sudaki çözünürlükleri çok küçük olduğundan susuz ortam tercih edildi. Asitliklerine bakılan maddeler aşağıda verilmiştir.



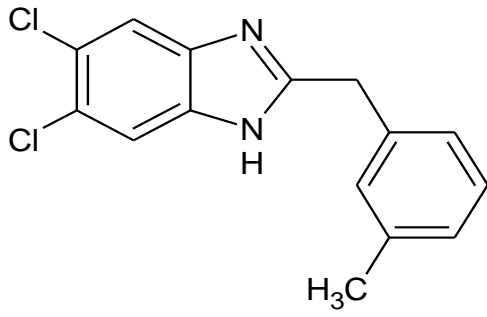
Şekil 3. 2-(2-Klorobenzil)-5,6-dikloro-1*H*-benzo[*d*]imidazol (1. Bileşik)



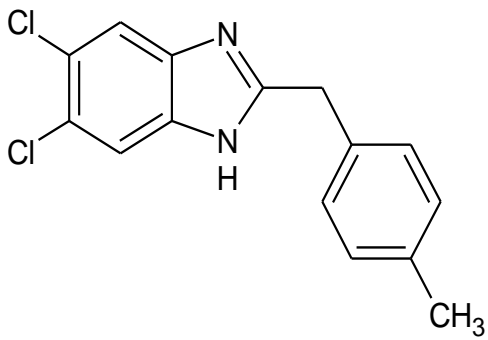
Şekil 4. 2-(3-Klorobenzil)-5,6-dikloro-1*H*-benzo[*d*]imidazol (2. Bileşik)



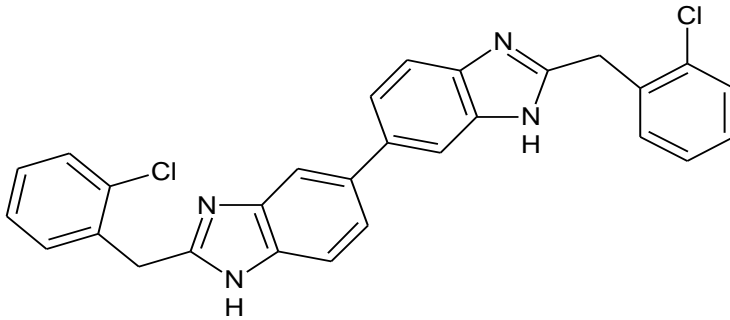
Şekil 5. 2-(4-Klorobenzil)-5,6-dikloro-1*H*-benzo[*d*]imidazol (3. Bileşik)



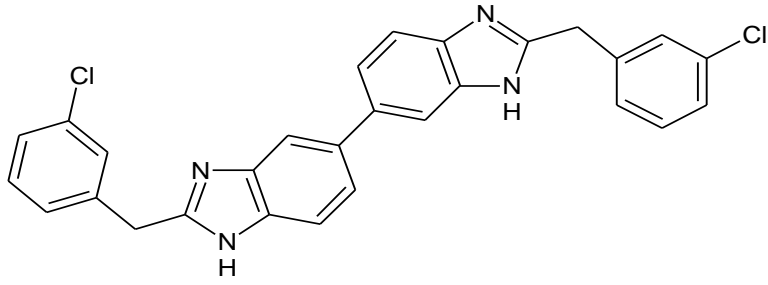
Şekil 6. 2-(3-Metilbenzil)-5,6-dikloro-1*H*-benzo[*d*]imidazol (4. Bileşik)



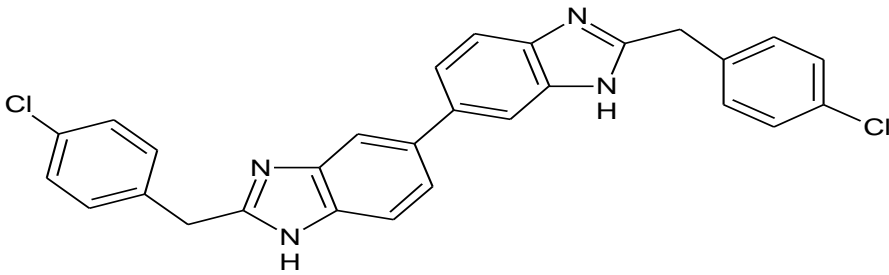
Şekil 7. 2-(4-Metilbenzil)-5,6-dikloro-1*H*-benzo[*d*]imidazol (5. Bileşik)



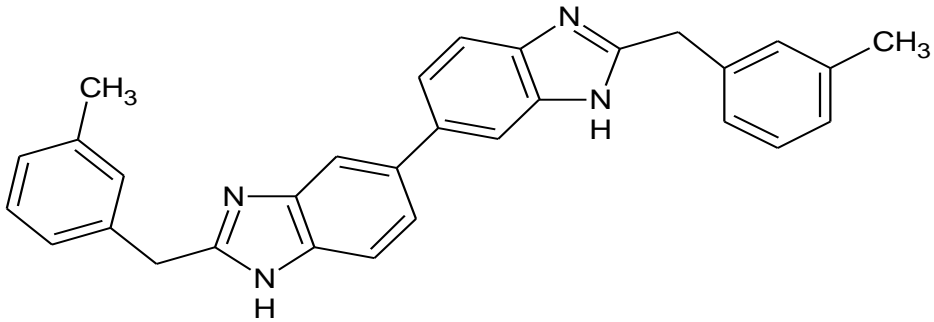
Şekil 8. 2,2'-Bis(2-Klorobenzil)-1*H*,1'*H*-5,5'-bibenzimidazol (6. Bileşik)



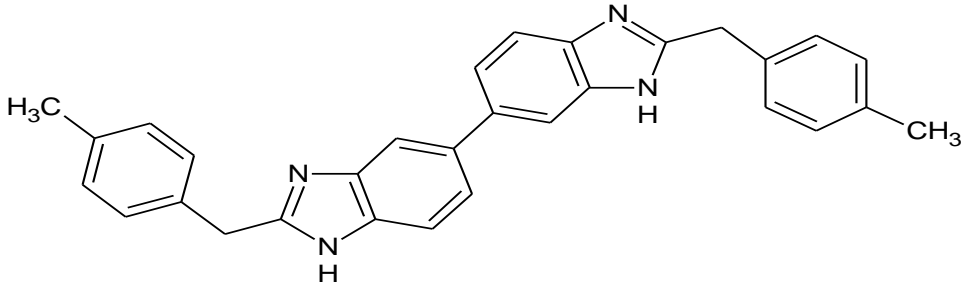
Şekil 9. 2,2'-Bis(3-Klorobenzil)-1*H*,1'*H*-5,5'-bibenzimidazol (7. Bileşik)



Şekil 10. 2,2'-Bis(4-Klorobenzil)-1*H*,1'*H*-5,5'-bibenzimidazol (8. Bileşik)



Şekil 11. 2,2'-Bis(3-Metilbenzil)-1*H*,1'*H*-5,5'-bibenzimidazol (9. Bileşik)



Şekil 12. 2,2'-Bis(4-Metilbenzil)-1H,1'H-5,5'-bibenzimidazol (10. Bileşik)

Yeni sentezlenen bu on madde, Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi Fen – Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü Organik Kimya Araştırma Laboratuvarında sentezlenmişlerdir.

2.1.2. Çözücüler

Bu çalışmada kullandığımız on adet yeni benzimidazol türevi bileşiğinin asitlik sabitlerinin tayininde susuz ortam çözücülerinden 2-propanol, *tert*-butanol, asetonitril ve *N,N*-dimetilformamid (DMF) kullanıldı. Yapılan tercihte titrant ve asitlerin çözücü içerisinde iyi çözünmeleri, çözücülerin sağladığı geniş potansiyel aralığı, atmosfer şartlarında çalışma imkânı göz önüne alınmıştır. Çözücüler 2-propanol, *N,N*-dimetilformamid, asetonitril ve *tert*-butanol Merck firmasından alındı.

2.1.3. Titrantlar

Asitlerin titrasyonunda titrant olarak tetrabutilamonyum hidroksit'in (TBAH) 2-propanoldeki standart 0,1 N'lik çözeltisi seyreltilerek 0,05 N'lik çözeltisi kullanıldı. Çözelti Merck firmasından alındı.

2.1.4. Cihazlar

Yapılan çalışmada Orion 420A Model pH Metre kullanıldı. Kullanılan pH metre hassasiyeti pH ölçümlerinde $\pm 0,01$ mV ölçümünde $\pm 0,1'$ dir. Elektrot olarak sağladığı büyük avantajlar nedeniyle kombine pH elektrodu tercih edildi. Titrasyonlarda 50 μ L lik mikropipet kullanıldı. Deney düzeneği Şekil 13.'de verildi.



Şekil 13. Potansiyometrik titrasyon deney düzeneği

2.2. Hazırlanan Çözeltiler

Benzimidazol türevlerinin 2-propanol, *tert*-butanol, asetonitril ve *N,N*-dimetilformamiddeki 10^{-3} M 100 mL'lik çözeltileri hazırlandı. Titrant olarak kullanılan TBAH'ın 2-propanoldeki 0,1 N'lik standart çözeltisinden seyreltilerek 0,05 N 250 mL'lik çözeltisi hazırlandı.

2.3. Deneyin Yapılışı

Potansiyometrik titrasyon için gerekli çalışma düzeneği kuruldu. pH metre tamponlar yardımıyla kalibre edildi. Bütün çalışmalar 25°C 'de yapıldı. Benzimidazol türevlerinin hazırlanan 10^{-3} M'lık çözeltisinden 17 mL beher içine alındı. Çözelti magnetik karıştırıcıyla karıştırılarak homojen hale getirildi. Mikropipetten karışmakta olan asit çözeltisine her defasında 0,05 mL 0,05 N'lik TBAH'ın 2-propanoldeki çözeltisi ilâve edildi. İlâveden sonra sabitleşen pH ve mV değerleri pH metreden okundu titrant hacmine (mL) karşı grafiğe geçirildi.

2.4. Asitlik Sabitlerinin Tayini

2.4.1. Yarı Nötralizasyon Metodu

Titrasyonlar sonucunda titrant hacmine karşılık olan pH ve mV değerleri okunarak bu değerlere göre titrasyon grafiği çizilmiştir. Dönüm noktaları ilâve edilen titrant hacmine (mL) karşılık mV değerindeki en büyük sıçramanın olduğu noktalar. Bu değerlerden de yarı nötralizasyon noktaları belirlenmiştir. Zayıf asit ve bazların yarı nötralizasyon noktalarındaki pK_a değerleri pH değerlerine eşit olduğu için pH değerleri

pK_a deęerleri olarak alınmıřtır. Zayıf asit ve onun tuzu bir tampon çözelti oluřturur. Tampon çözeltide:

$$\text{pH} = \text{pK}_a + \log \frac{[\text{A}^-]}{[\text{HA}]}$$

eřitlięinden yarı nötralizasyonda,

$$[\text{A}^-] = [\text{HA}]$$

olduęundan $\text{pH} = \text{pK}_a$ elde edilir (Bahçeci vd., 2002)

Üç deney için elde edilen pK_a ve HNP deęerleri için ortalama deęerleri hesaplandı, ortalama deęerler kullanılarak,

$$s = \sqrt{\frac{\sum (x - \bar{x})^2}{N - 1}}$$
 formülü ile standart sapma deęerleri hesaplandı.

2.5. Online Hesaplama Programları

Yeni bileřikleri sentezlemeden ve büyük ölçekli üretime geçmeden önce molekülün fiziksel ve biyokimyasal özelliklerini bilmek gerekir. Ortaya çıkacak malzemelerin fizikokimyasal özelliklerini ve çevresel etkilerini tahmin etmek için kantitatif yapı-etki iliřkileri (QSAR) yazılım araçları kullanılabilir. QSAR yazılım araçları, bileřiklerin çeřitli özelliklerinden oluřan çevresel etkilerini veritabanları kullanarak tahmin eder.

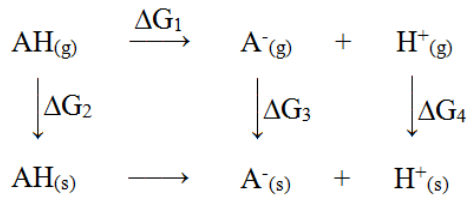
MarvinSketch, kimyasal yapıları ve reaksiyonları çizmek, hızlı bir şekilde hesaplamaları yapmak için kullanılan online hesaplama programıdır. ChemAxon yazılım firması tarafından geliştirilmiřtir. Yöntem olarak atom katkılarını temel alır. Kullanıcıya birçok dosya türünde destek sağlar (MOL, MOL2, SDF, RXN, RDF (V2000/V3000), SMILES, SMARTS/SMIRKS, MRV, InChi, CML, PDB vb.). Marvin 85 programıyla, element analizi yapılabilir ve molekülün IUPAC (international union of pure and applied chemistry; uluslararası temel ve uygulamalı kimya birlięi) isimlendirmesine bakılabilir. Molekülün pK_a s, izoelektrik noktası belirlenebilir. Molekülün 3 boyutlu yapıları ve konformerleri enerjileriyle beraber görüntülenebilir.

Atomlar üzerindeki yükler hesaplanabilir. Yapılar SMILES (simplified molecular input line entry system) kodlarına dönüştürülebilir.

SPARC adı verilen online hesaplama programının data girişi de SMILES ile yapılmaktadır ve yöntem olarak fragmentleri temel alır. Hesaplama butonları seçilerek molekülün birçok özelliği (sıvı ve gaz fazındaki pKa değerleri, oluşum ısısı, redüksiyon potansiyeli vb.) hesaplanabilir.

2.5.1. SPARC Online Teorik pKa Hesaplama Programı

Bu program, aşağıda verilen termodinamik döngü içerisinde yer alan reaksiyonların serbest enerji değişimleri üzerinden sıvı fazda ceryan eden iyonlaşma reaksiyonunun serbest enerji değişimini hesaplar. Çalışma prensibinin dayandığı termodinamik döngü ve pKa hesabının yapıldığı formül aşağıdaki gibidir (Fırat vd ., 2010)



Şekil 14. Termodinamik döngü

$$\Delta G = -2,303 \cdot R \cdot T \cdot \log K_a$$

Günümüzde çeşitli molekül orbital modellemeleri üzerinden daha ayrıntılı ve karmaşık bilgisayar programları ile teorik hesaplamalar yapılmaktadır. Bunlar içerisinde SPARC bilgisayar programı kullanım kolaylığı ve basitliği bakımından uygulanabilirliği çok kolay olan bir bilgisayar programıdır. Bu çalışmamızda elde ettiğimiz deneysel verileri teorik değerler ile karşılaştırma yapmak için SPARC bilgisayar programı tercih edildi.

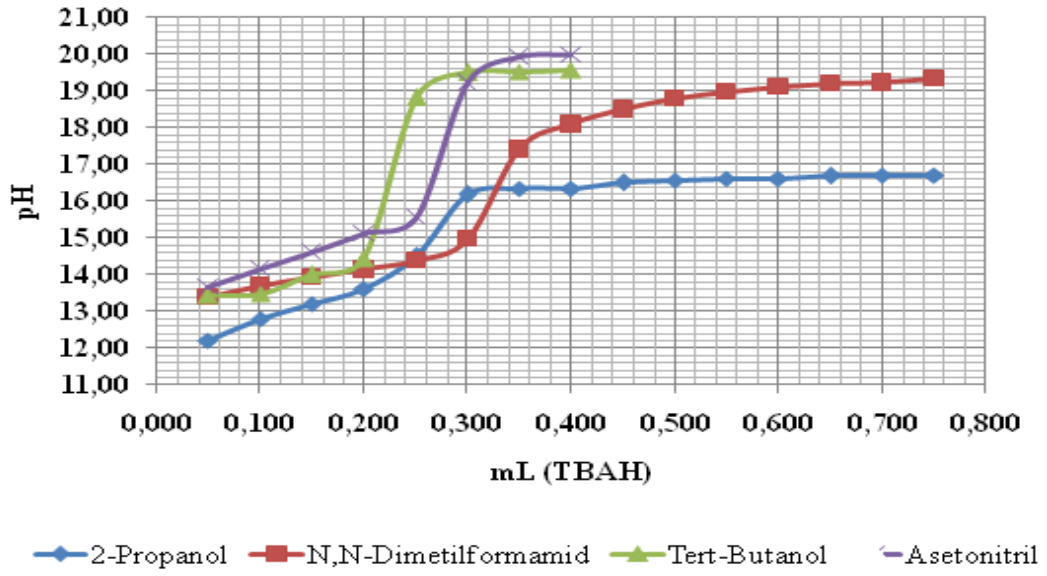
3. BULGULAR

Bu bölümde on adet yeni benzimidazol türevi bileşiğinin asetonitril, *N,N*-dimetilformamid, *tert*-butanol, 2-propanol çözücülerindeki 10^{-3} M'lık çözeltisinin 0,05 N TBAH ile titrasyonu sonucu elde edilen değerler titrant hacmine (TBAH) karşı mV olarak Tablo 1-10'da verilmiştir. Ayrıca asitlerin mL-mV titrasyon grafikleri de Şekil 15-54'de verilmiştir. Deneyler üçer kez tekrarlanmıştır. Bu grafikler Microsoft Office Excel 2007 programında, maddelerin formülleri ChemDraw Ultra 8,0 programında çizilmiştir. Okunan pH ve mV değerleri ve çizilen grafikler aşağıda verilmiştir. SPARC bilgisayar programı yardımıyla çalışılan çözücü ortamları için elde ettiğimiz serbest enerji değişimleri Tablo 11-20'de verilmiştir.

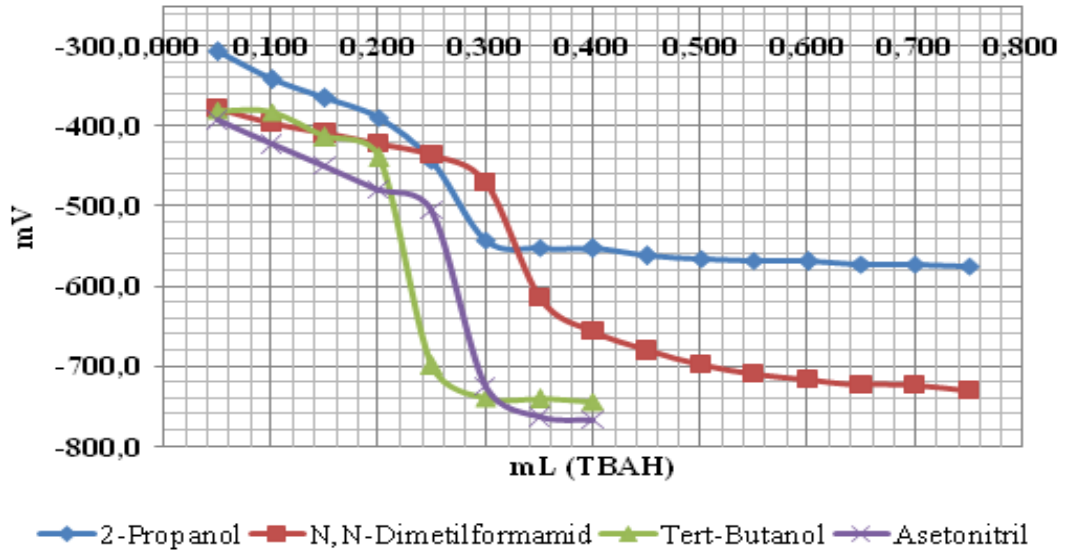
Birinci bileşik için yapılan titrasyon, her bir çözücü içinde üçer kez tekrarlandı. Daha sonra alınan ölçümlerin ortalaması tablo' ya geçirildi ve değerlerin ortalaması neticesinde pH- mL grafiği , mV-mL grafiği , $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiği, $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiği çizildi. Daha sonra bu çizilen grafikler yardımıyla bileşiğin her bir çözücüdeki pKa değerleri hesaplandı.

Tablo 1. 1. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen değerlerin ortalaması

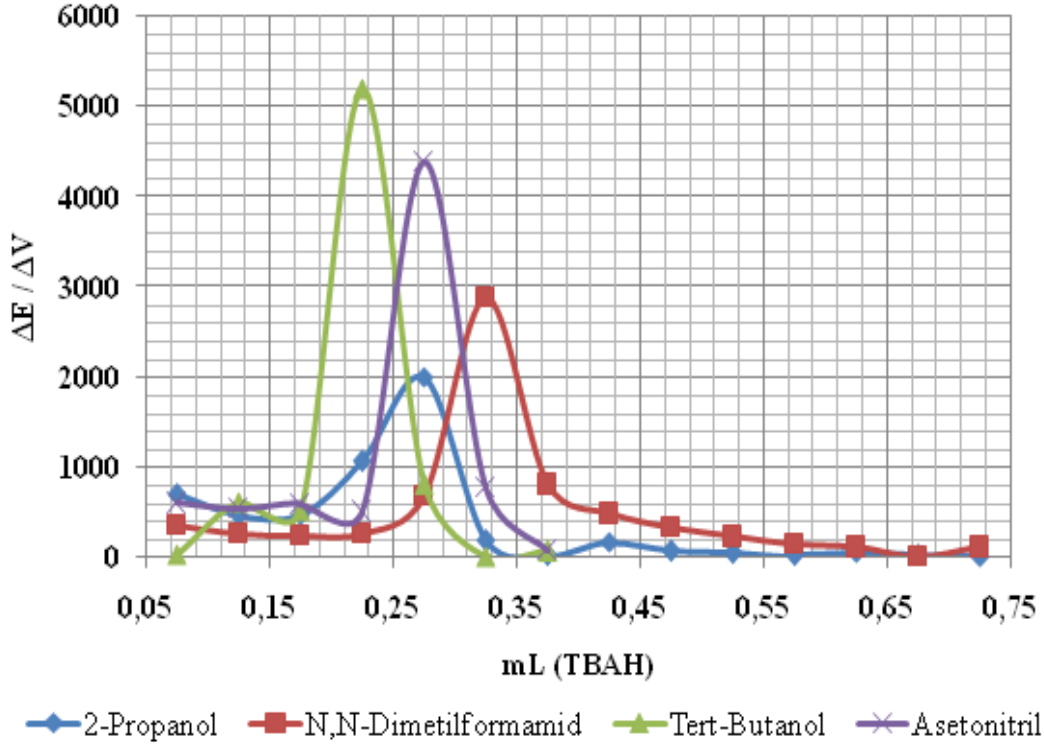
TİTRANT (TBAH, mL)	ÇALIŞILAN ÇÖZÜCÜLER							
	2-PROPANOL		DMF		TERT-BUTANOL		ASETONİTRİL	
	pH	mV	pH	mV	pH	mV	pH	mV
0,050	12,19	-307,2	13,37	-377,5	13,43	-380,8	13,64	-392,8
0,100	12,78	-341,9	13,69	-395,9	13,46	-382,5	14,14	-422,9
0,150	13,18	-365,5	13,92	-409,5	13,99	-413,6	14,61	-450,0
0,200	13,59	-389,6	14,13	-422,1	14,43	-439,5	15,11	-479,9
0,250	14,49	-442,9	14,37	-435,9	18,82	-699,4	15,55	-505,6
0,300	16,17	-542,9	14,96	-470,4	19,50	-740,0	19,22	-725,0
0,350	16,33	-552,3	17,41	-615,0	19,52	-740,8	19,93	-763,9
0,400	16,34	-553,4	18,08	-655,8	19,58	-744,4	19,99	-768,1
0,450	16,50	-562,0	18,49	-680,4				
0,500	16,56	-565,4	18,80	-697,4				
0,550	16,60	-567,9	18,98	-708,9				
0,600	16,61	-569,0	19,12	-716,8				
0,650	16,67	-572,2	19,20	-722,6				
0,700	16,69	-573,3	19,22	-723,6				
0,750	16,71	-574,3	19,33	-729,6				



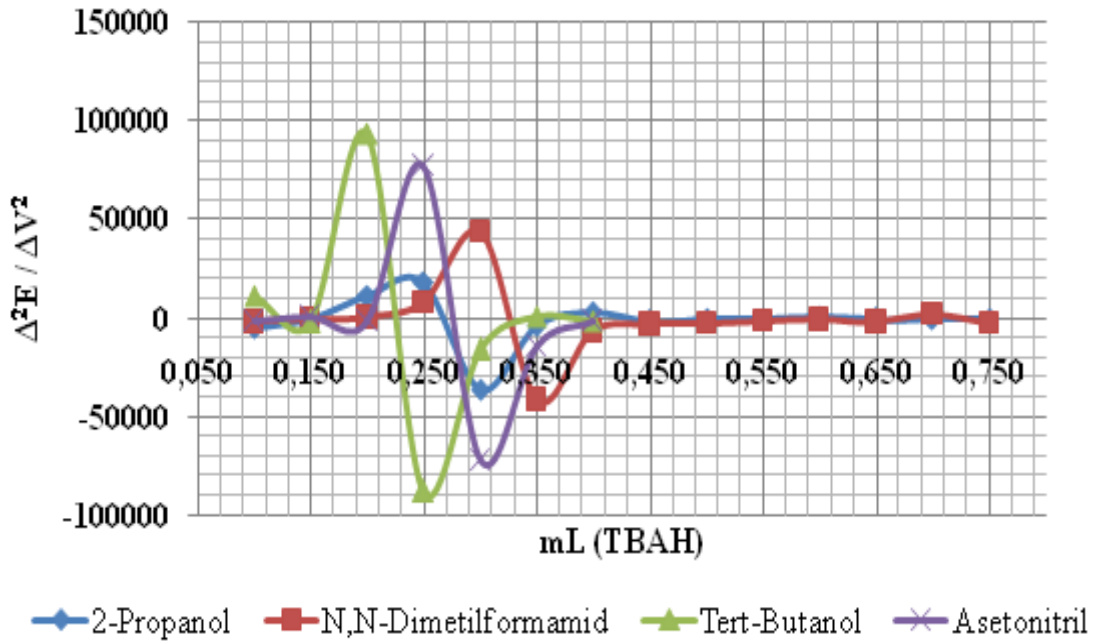
Şekil 15. 1. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen pH-mL grafiği



Şekil 16. 1. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen mV-mL grafiği



Şekil 17. 1. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiği

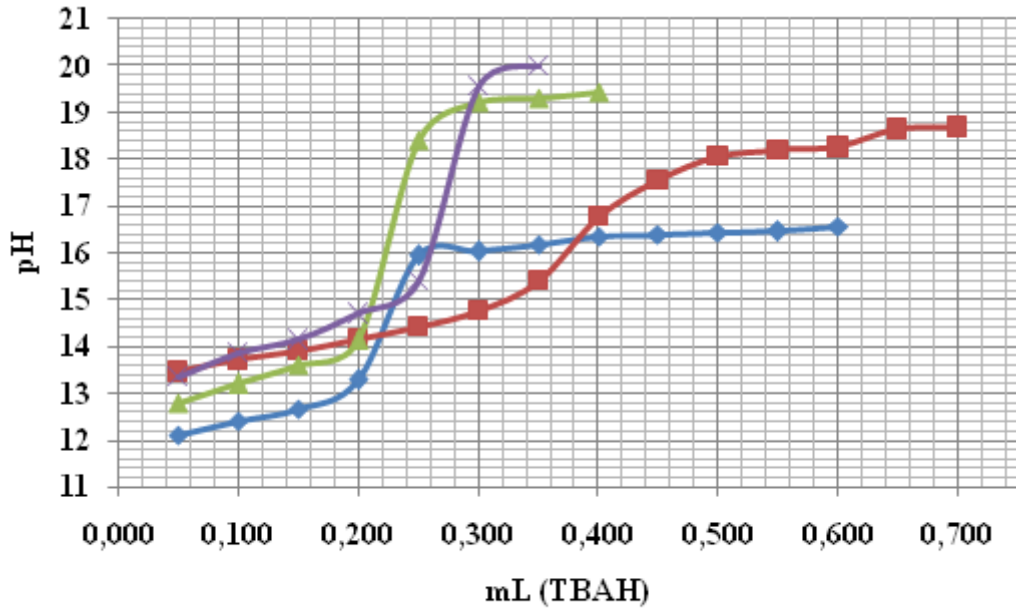


Şekil 18. 1. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiği

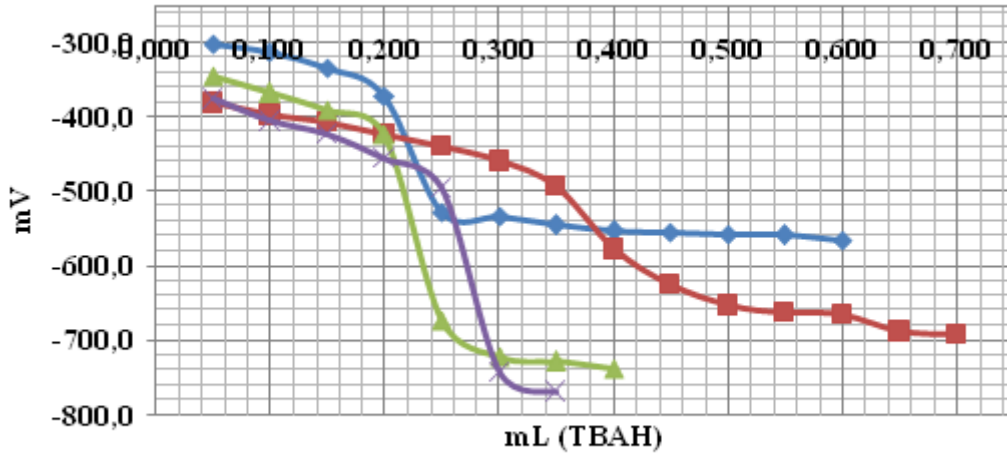
İkinci bileşik için yapılan titrasyon, her bir çözücü içinde üçer kez tekrarlandı. Daha sonra alınan ölçümlerin ortalaması tablo' ya geçirildi ve değerlerin ortalaması neticesinde pH- mL grafiği , mV-mL grafiği , $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiği, $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiği çizildi. Daha sonra bu çizilen grafikler yardımıyla bileşiğin her bir çözücüdeki pKa değerleri hesaplandı.

Tablo 2. 2. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen değerlerin ortalaması

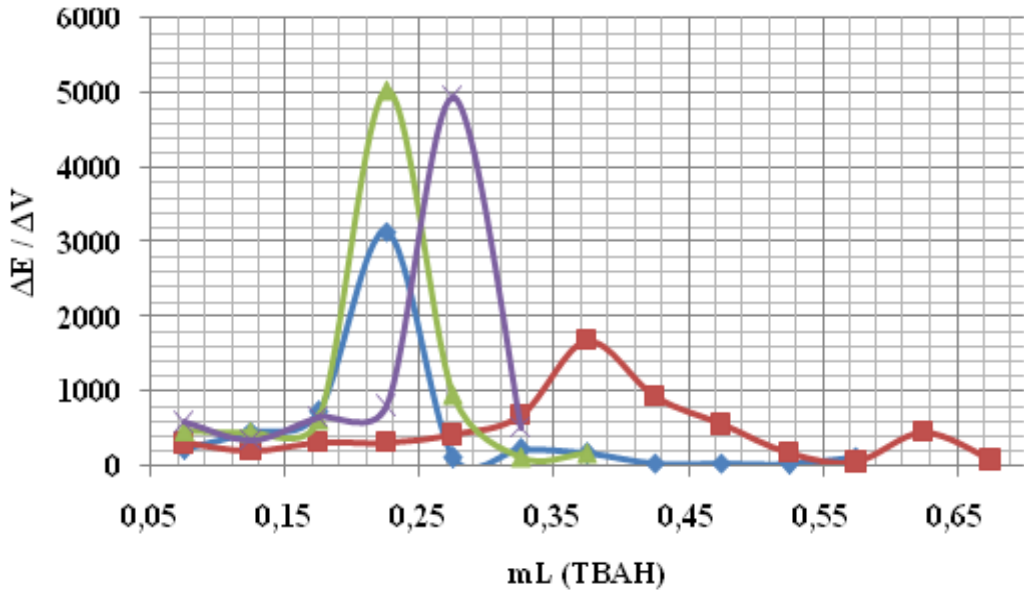
TİTRANT (TBAH, mL)	ÇALIŞILAN ÇÖZÜCÜLER							
	2-PROPANOL		DMF		TERT-BUTANOL		ASETONİTRİL	
	pH	mV	pH	mV	pH	mV	pH	mV
0,050	12,09	-301,0	13,45	-381,5	12,80	-344,1	13,35	-375,9
0,100	12,41	-312,1	13,71	-397,1	13,20	-368,0	13,85	-405,5
0,150	12,65	-334,8	13,89	-407,3	13,60	-391,0	14,14	-422,7
0,200	13,28	-371,2	14,15	-423,1	14,14	-422,4	14,70	-455,7
0,250	15,94	-528,2	14,41	-438,8	18,41	-674,0	15,39	-496,1
0,300	16,02	-534,1	14,76	-459,7	19,21	-722,5	19,56	-743,0
0,350	16,19	-545,3	15,39	-493,6	19,31	-728,8	19,99	-768,9
0,400	16,36	-553,8	16,78	-577,7	19,45	-737,7		
0,450	16,38	-555,6	17,56	-624,9	19,50	-738,5		
0,500	16,42	-557,6	18,05	-653,1				
0,550	16,45	-559,3	18,20	-661,9				
0,600	16,56	-565,5	18,25	-665,0				
0,650			18,64	-688,1				
0,700			18,69	-692,3				



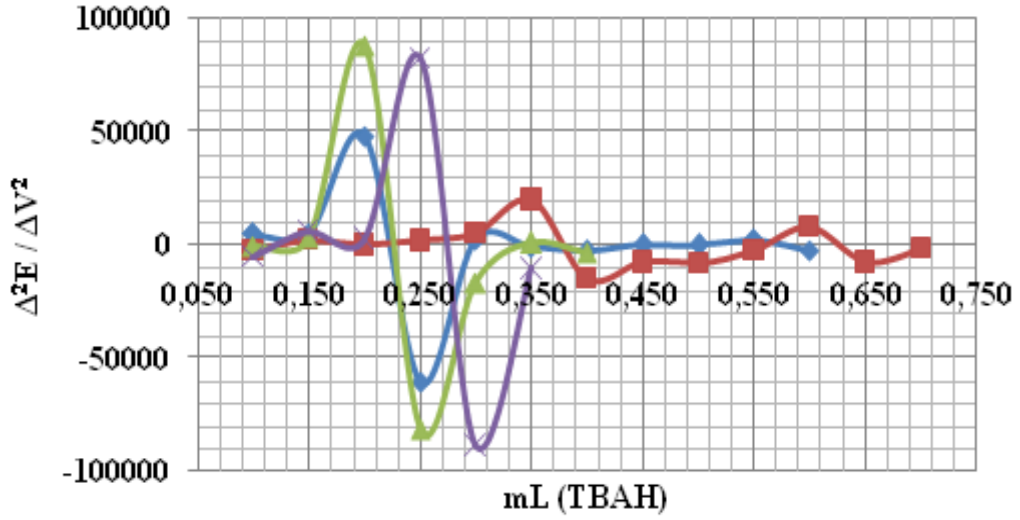
Şekil 19. 2. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen pH-mL grafiği



Şekil 20. 2. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen mV-mL grafiği



Şekil 21. 2. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiği

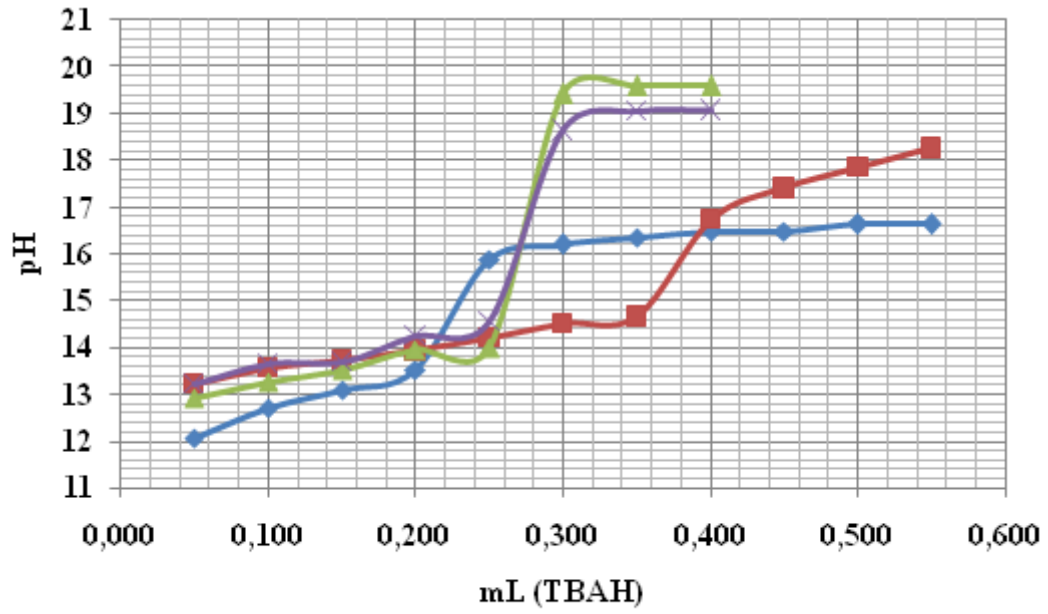


Şekil 22. 2. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiği

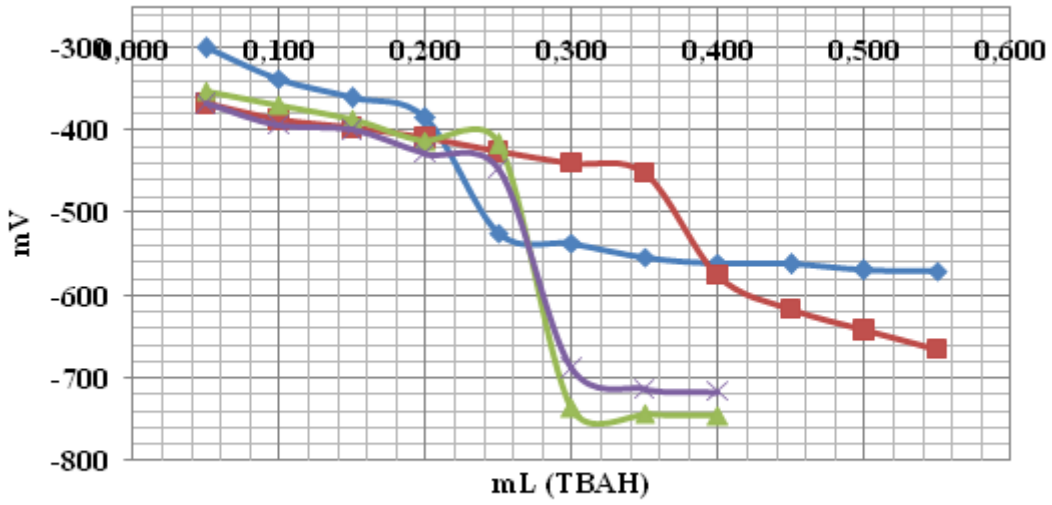
Üçüncü bileşik için yapılan titrasyon, her bir çözücü içinde üçer kez tekrarlandı. Daha sonra alınan ölçümlerin ortalaması tablo' ya geçirildi ve değerlerin ortalaması neticesinde pH- mL grafiği , mV-mL grafiği , $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiği, $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiği çizildi. Daha sonra bu çizilen grafikler yardımıyla bileşiğin her bir çözücüdeki pKa değerleri hesaplandı.

Tablo 3. 3. bileşiğin titrasyonundan elde edilen değerlerin ortalaması.

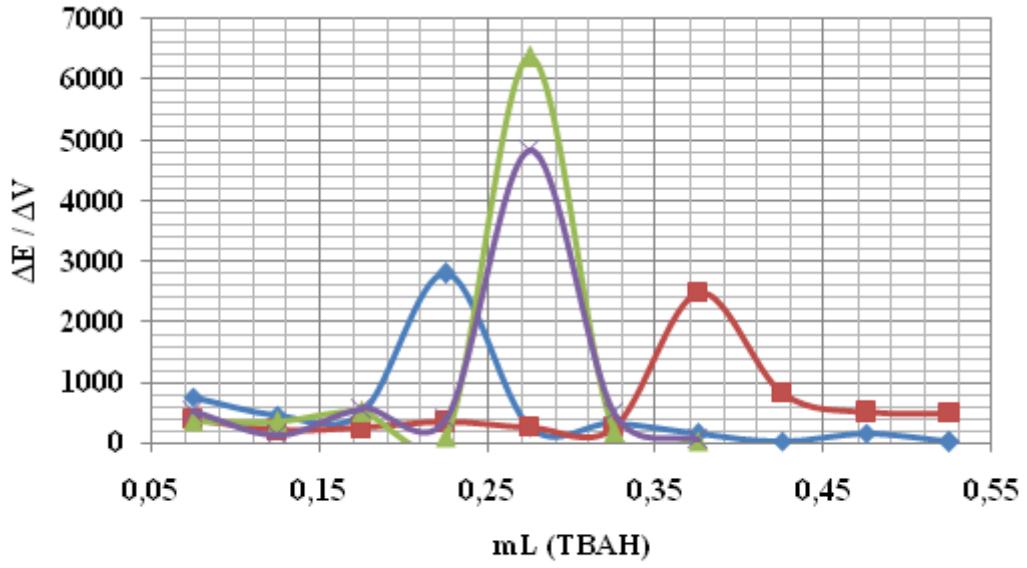
TİTRANT (TBAH, mL)	ÇALIŞILAN ÇÖZÜCÜLER							
	2-PROPANOL		DMF		TERT-BUTANOL		ASETONİTRİL	
	pH	mV	pH	mV	pH	mV	pH	mV
0,050	12,06	-299,9	13,21	-368,2	12,91	-352,5	13,22	-368,0
0,100	12,71	-337,7	13,55	-387,3	13,26	-370,1	13,65	-393,4
0,150	13,09	-360,5	13,71	-397,6	13,53	-387,0	13,69	-400,0
0,200	13,51	-385,1	13,92	-409,3	13,95	-412,4	14,24	-428,2
0,250	15,87	-524,6	14,20	-426,0	13,98	-416,6	14,55	-447,2
0,300	16,20	-537,2	14,50	-439,1	19,42	-735,0	18,64	-688,3
0,350	16,36	-553,7	14,65	-452,0	19,58	-743,4	19,05	-713,1
0,400	16,47	-560,5	16,74	-575,5	19,59	-744,5	19,07	-716,1
0,450	16,48	-562,1	17,40	-616,4			19,15	-719,2
0,500	16,62	-569,4	17,84	-641,8				
0,550	16,63	-570,0	18,25	-665,7				



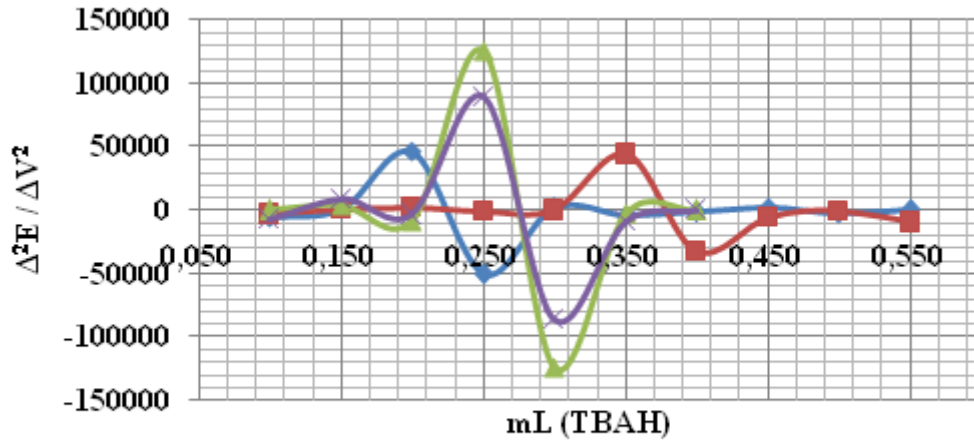
Şekil 23. 3. bileşin titrasyonundan elde edilen pH-mL grafiği



Şekil 24. 3. bileşin titrasyonundan elde edilen mV-mL grafiği



Şekil 25. 3. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta E / \Delta V$ -mL grafiği

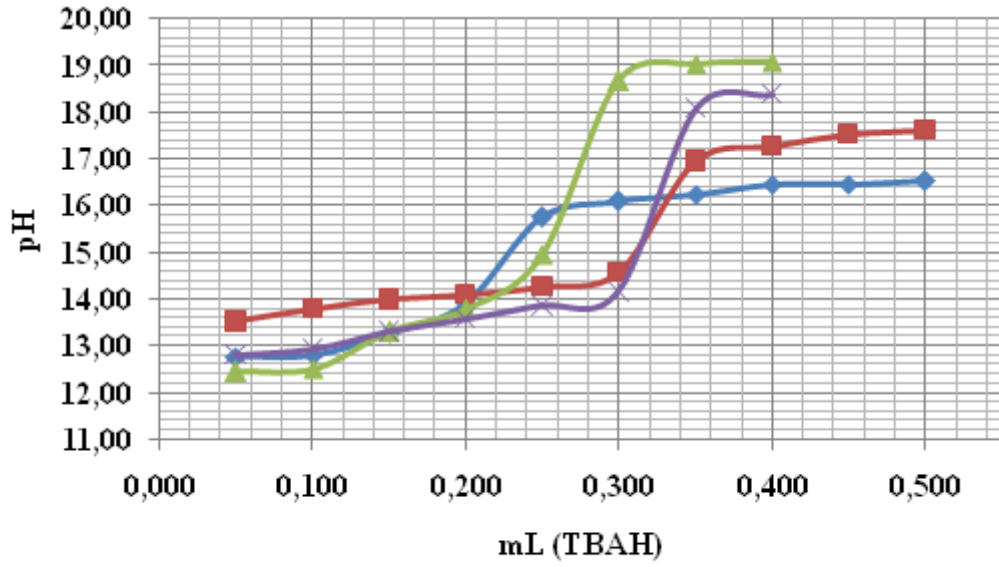


Şekil 26. 3. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta^2 E / \Delta V^2$ -mL grafiği

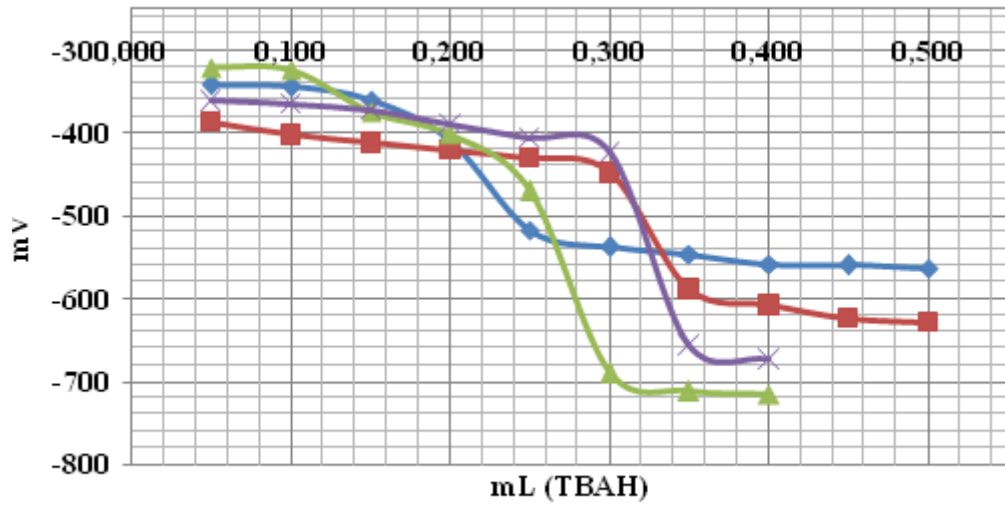
Dördüncü bileşik için yapılan titrasyon, her bir çözücü içinde üçer kez tekrarlandı. Daha sonra alınan ölçümlerin ortalaması tablo' ya geçirildi ve değerlerin ortalaması neticesinde pH- mL grafiği , mV-mL grafiği , $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiği, $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiği çizildi. Daha sonra bu çizilen grafikler yardımıyla bileşiğin her bir çözücüdeki pKa değerleri hesaplandı.

Tablo 4. 4. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen değerlerin ortalaması

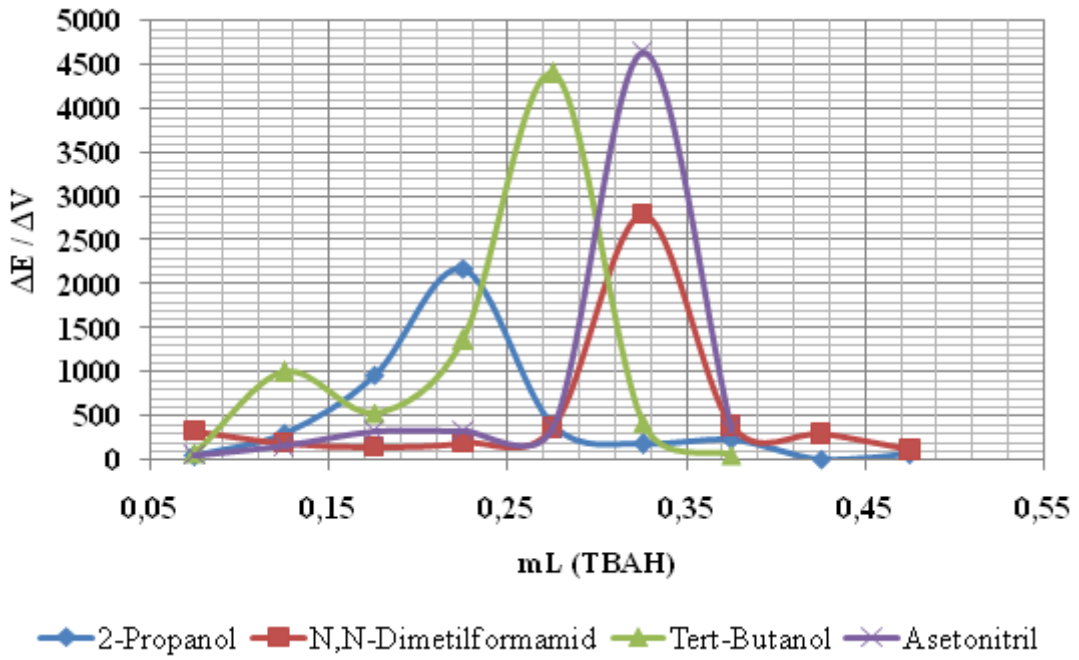
TİTRANT (TBAH, mL)	ÇALIŞILAN ÇÖZÜCÜLER							
	2-PROPANOL		DMF		TERT-BUTANOL		ASETONİTRİL	
	pH	mV	pH	mV	pH	mV	pH	mV
0,050	12,78	-342,1	13,52	-386,3	12,45	-321,0	12,82	-361,8
0,100	12,80	-344,5	13,81	-402,9	12,50	-324,9	12,95	-364,8
0,150	13,29	-359,9	13,99	-412,8	13,31	-375,2	13,30	-372,8
0,200	13,90	-408,3	14,11	-420,5	13,78	-402,2	13,59	-389,2
0,250	15,75	-517,6	14,27	-430,4	14,95	-470,6	13,86	-405,8
0,300	16,09	-537,9	14,58	-448,9	18,67	-690,8	14,16	-424,2
0,350	16,24	-547,3	16,96	-588,9	19,04	-712,1	18,08	-656,6
0,400	16,45	-559	17,28	-608,5	19,09	-715,3	18,38	-673,7
0,450	16,46	-560	17,53	-623,3	19,15	-719,7	18,40	-674,3
0,500	16,53	-563,7	17,63	-629,0				



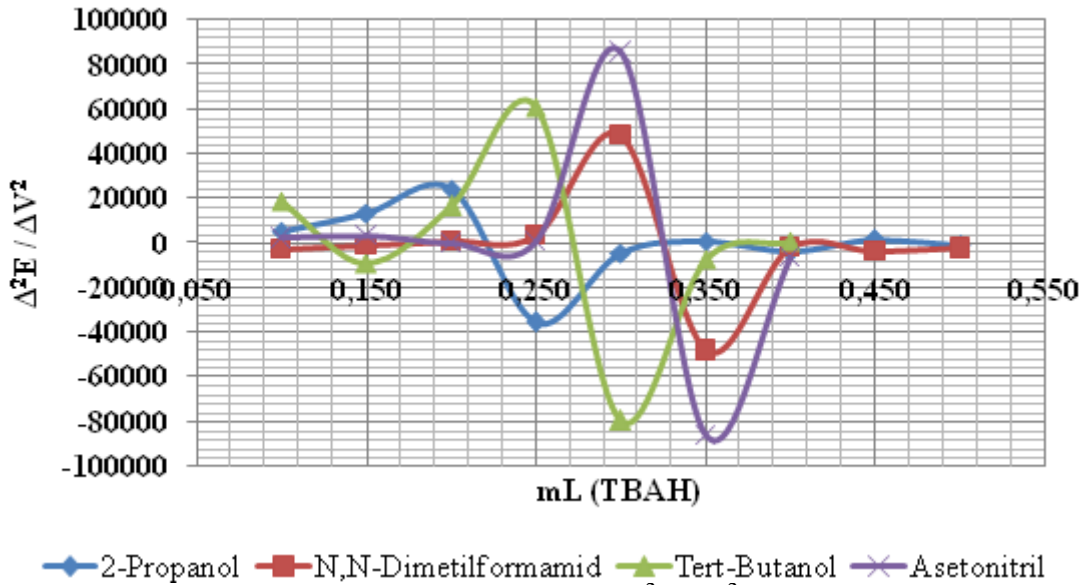
Şekil 27. 4. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen pH-mL grafiği



Şekil 28. 4. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen mV-mL grafiği



Şekil 29. 4. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiği

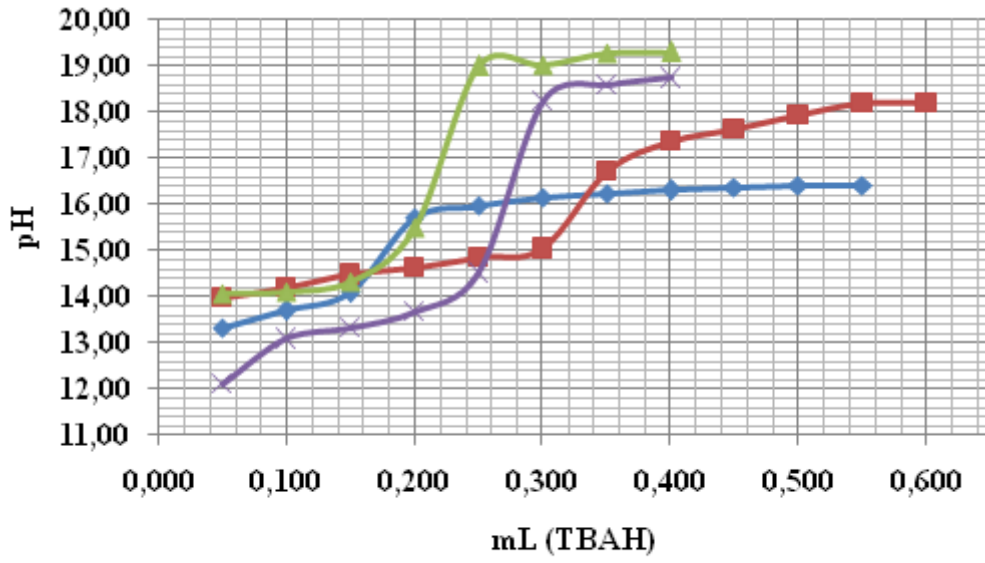


Şekil 30. 4. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiği

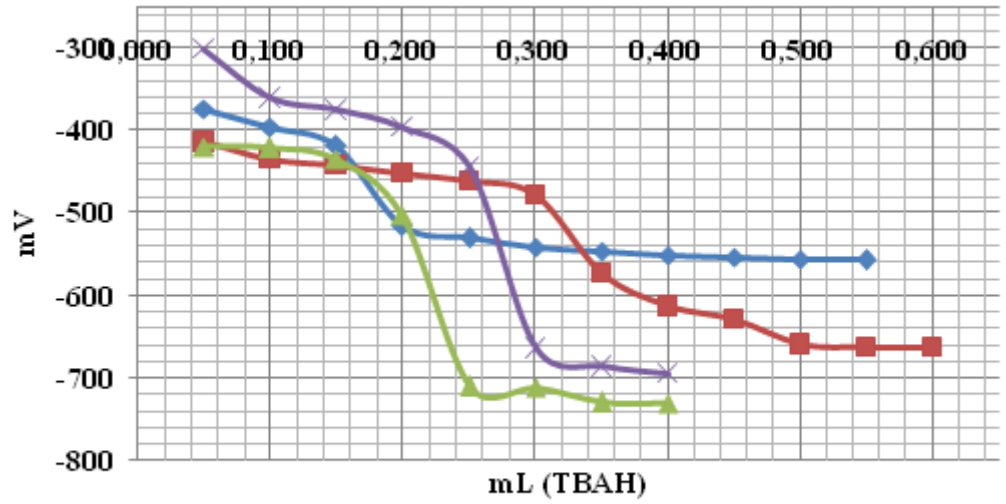
Beşinci bileşik için yapılan titrasyon, her bir çözücü içinde üçer kez tekrarlandı. Daha sonra alınan ölçümlerin ortalaması tablo' ya geçirildi ve değerlerin ortalaması neticesinde pH- mL grafiği , mV-mL grafiği , $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiği, $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiği çizildi. Daha sonra bu çizilen grafikler yardımıyla bileşiğin her bir çözücüdeki pKa değerleri hesaplandı.

Tablo 5. 5. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen değerlerin ortalaması

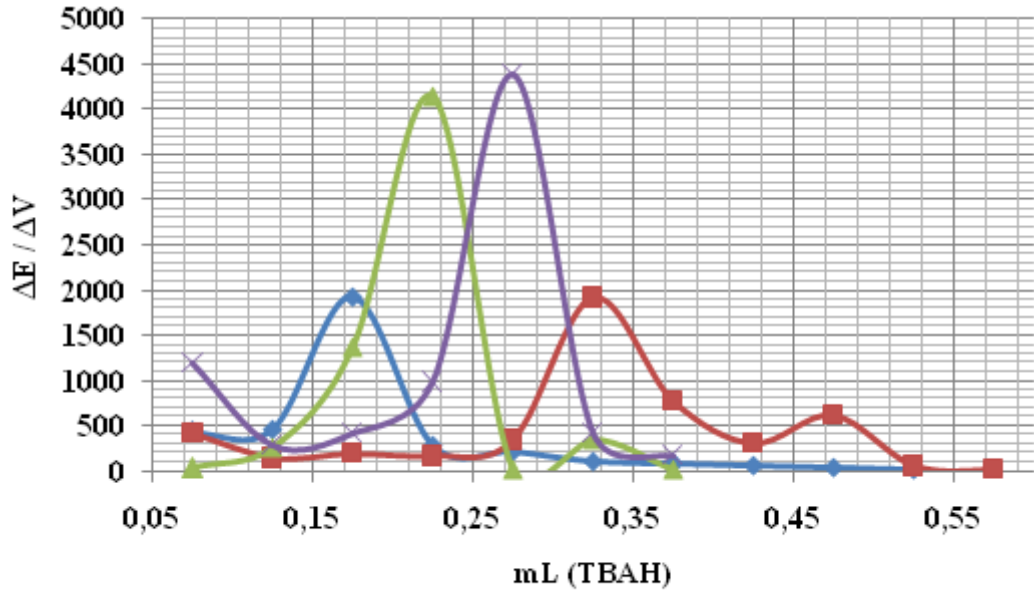
TİTRANT (TBAH, mL)	ÇALIŞILAN ÇÖZÜCÜLER							
	2-PROPANOL		DMF		TERT-BUTANOL		ASETONİTRİL	
	pH	mV	pH	mV	pH	mV	pH	mV
0,050	13,33	-374,3	13,98	-413,9	14,08	-419,8	12,10	-300,7
0,100	13,70	-395,8	14,20	-435,1	14,11	-421,4	13,09	-360,7
0,150	14,09	-419,4	14,48	-442,4	14,34	-434,6	13,34	-375,1
0,200	15,72	-516,1	14,64	-452,3	15,49	-503,0	13,68	-395,8
0,250	15,97	-530,4	14,86	-460,7	19,00	-710,1	14,52	-445,1
0,300	16,15	-541,3	15,04	-477,7	19,01	-711,2	18,23	-664,0
0,350	16,24	-546,9	16,72	-573,7	19,29	-729,1	18,59	-685,3
0,400	16,31	-550,8	17,36	-612,8	19,30	-730,0	18,74	-694,0
0,450	16,36	-553,8	17,62	-628,0			18,77	-696,6
0,500	16,40	-556,2	17,93	-659,1				
0,550	16,42	-557,2	18,19	-662,0				
0,600			18,20	-662,9				



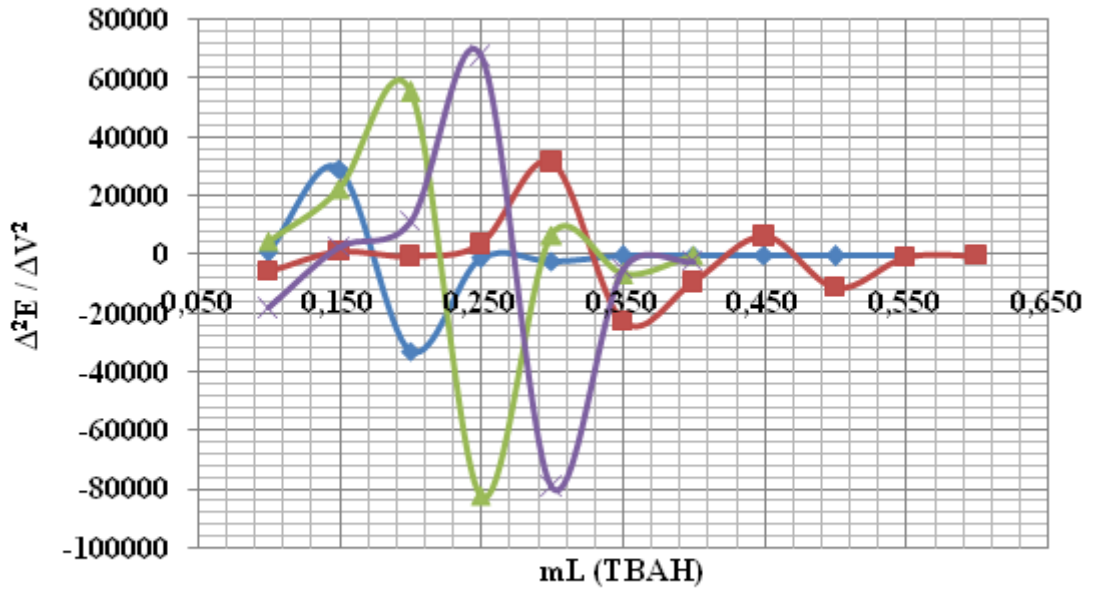
Şekil 31. 5. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen pH-mL grafiği



Şekil 32. 5. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen mV-mL grafiği



Şekil 33. 5. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiği

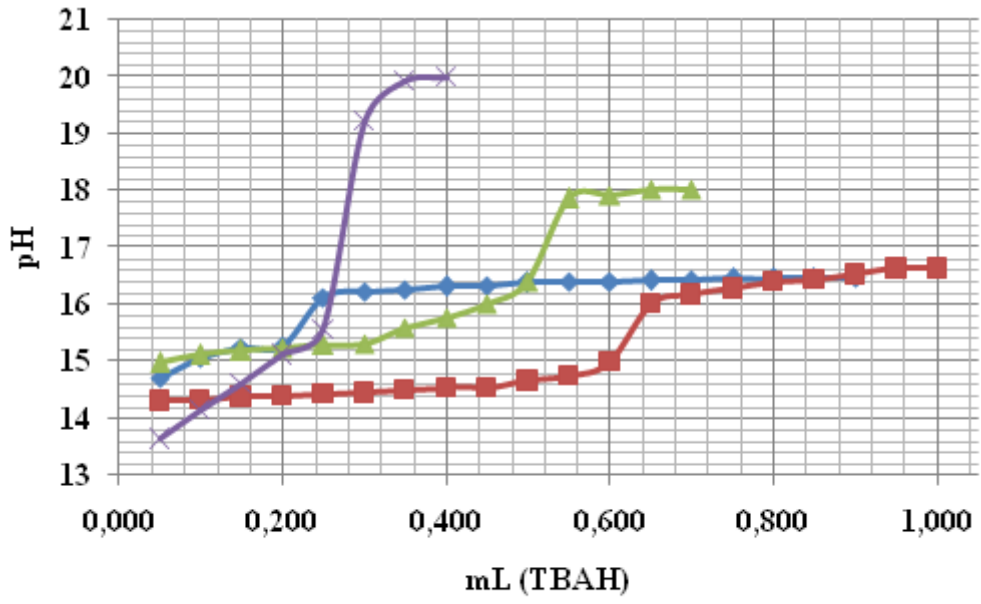


Şekil 34. 5. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiği

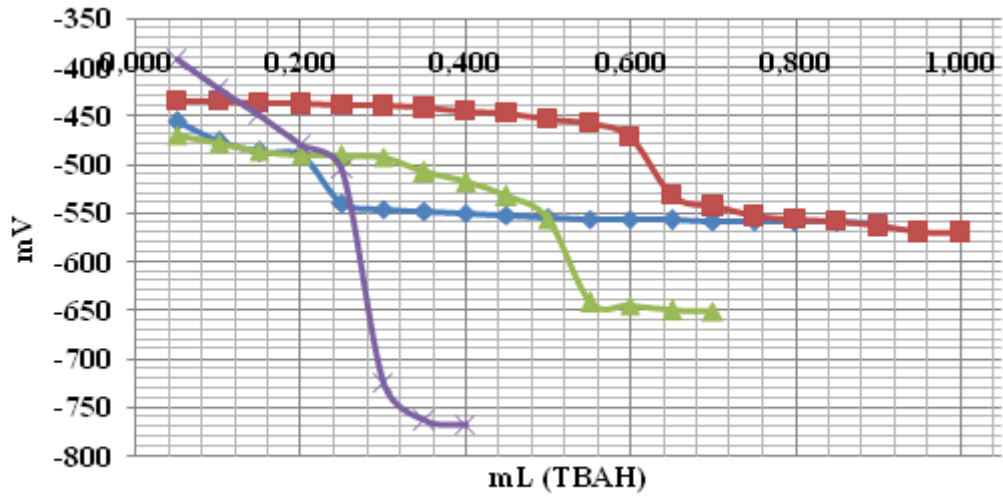
Altıncı bileşik için yapılan titrasyon, her bir çözücü içinde üçer kez tekrarlandı. Daha sonra alınan ölçümlerin ortalaması tablo'ya geçirildi ve değerlerin ortalaması neticesinde pH- mL grafiği, mV-mL grafiği, $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiği, $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiği çizildi. Daha sonra bu çizilen grafikler yardımıyla bileşiğin her bir çözücüdeki pKa değerleri hesaplandı.

Tablo 6. 6. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen değerlerin ortalaması

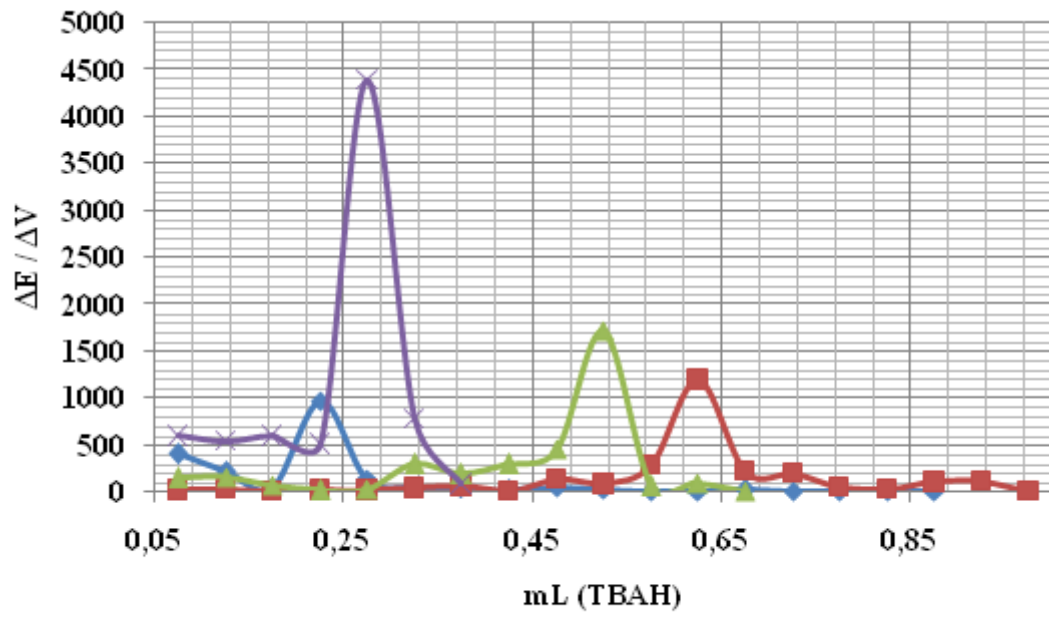
TİTRANT (TBAH, mL)	ÇALIŞILAN ÇÖZÜCÜLER							
	2-PROPANOL		DMF		TERT-BUTANOL		ASETONİTRİL	
	pH	mV	pH	mV	pH	mV	pH	mV
0,050	14,71	-456,7	14,31	-434,4	14,97	-470,4	13,64	-392,8
0,100	15,06	-477,1	14,32	-435,4	15,12	-477,8	14,14	-422,9
0,150	15,24	-487,7	14,38	-436,9	15,19	-486,0	14,61	-450,0
0,200	15,27	-490,5	14,40	-437,8	15,23	-490,0	15,11	-479,9
0,250	16,12	-539,5	14,42	-439,1	15,29	-491,3	15,55	-505,6
0,300	16,23	-546,2	14,44	-440,2	15,32	-493,2	19,22	-725,0
0,350	16,27	-548,7	14,50	-442,5	15,58	-508,3	19,93	-763,9
0,400	16,31	-551,0	14,54	-445,8	15,76	-518,1	19,99	-768,1
0,450	16,33	-552,0	14,54	-446,7	16,01	-533,0		
0,500	16,38	-554,7	14,66	-453,5	16,41	-556,2		
0,550	16,40	-556,3	14,74	-458,0	17,86	-642,2		
0,600	16,41	-556,7	14,98	-472,4	17,92	-645,5		
0,650	16,42	-557,3	16,01	-532,4	18,02	-650,4		
0,700	16,44	-558,4	16,17	-543,4	18,02	-650,9		
0,750	16,45	-558,9	16,28	-553,5				
0,800	16,45	-559,6	16,40	-556,6				
0,850	16,46	-559,9	16,44	-558,4				
0,900	16,47	-560,2	16,53	-564,0				
0,950			16,63	-569,7				
1,000			16,63	-570,1				



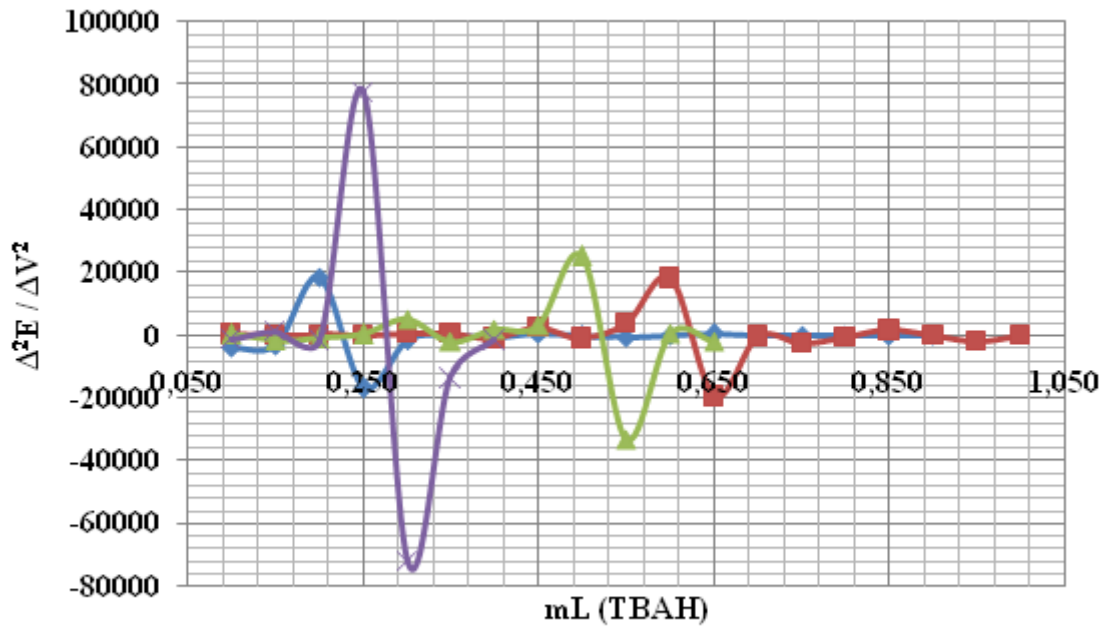
Şekil 35. 6. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen pH-mL grafiği



Şekil 36. 6. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen mV-mL grafiği



Şekil 37. 6. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiği

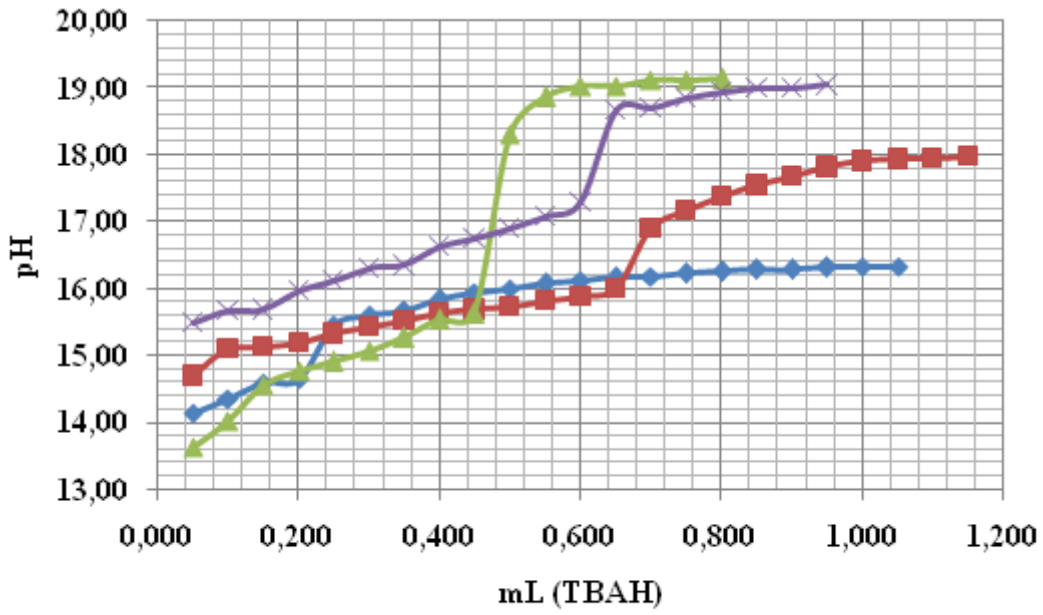


Şekil 38. 6. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiği

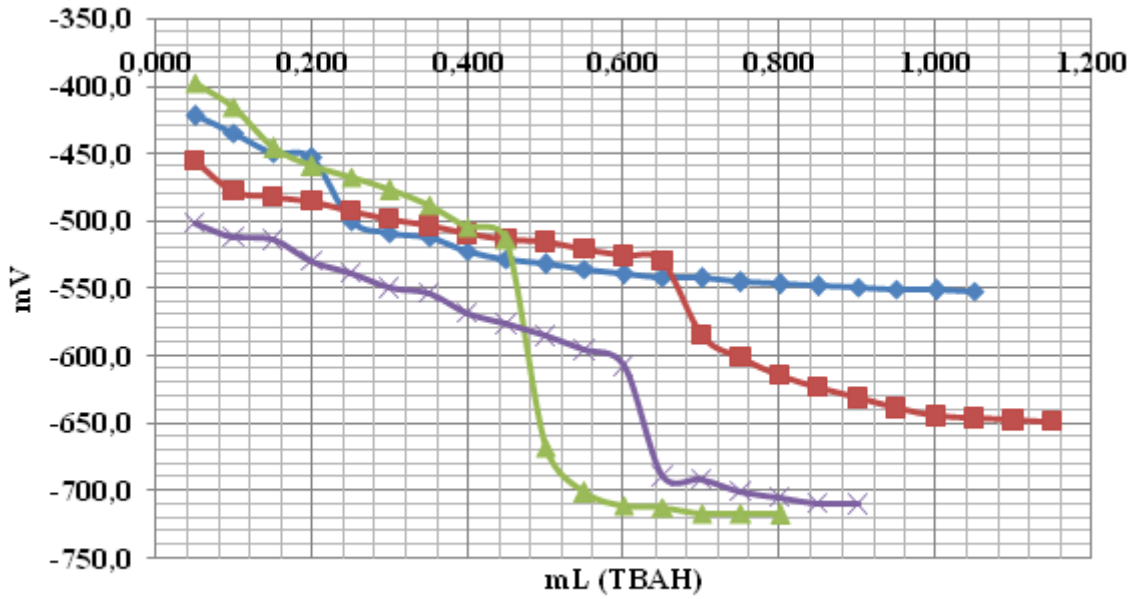
Yedinci bileşik için yapılan titrasyon, her bir çözücü içinde üçer kez tekrarlandı. Daha sonra alınan ölçümlerin ortalaması tablo' ya geçirildi ve değerlerin ortalaması neticesinde pH- mL grafiği , mV-mL grafiği , $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiği, $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiği çizildi. Daha sonra bu çizilen grafikler yardımıyla bileşiğin her bir çözücüdeki pKa değerleri hesaplandı.

Tablo 7. 7. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen değerlerin ortalaması

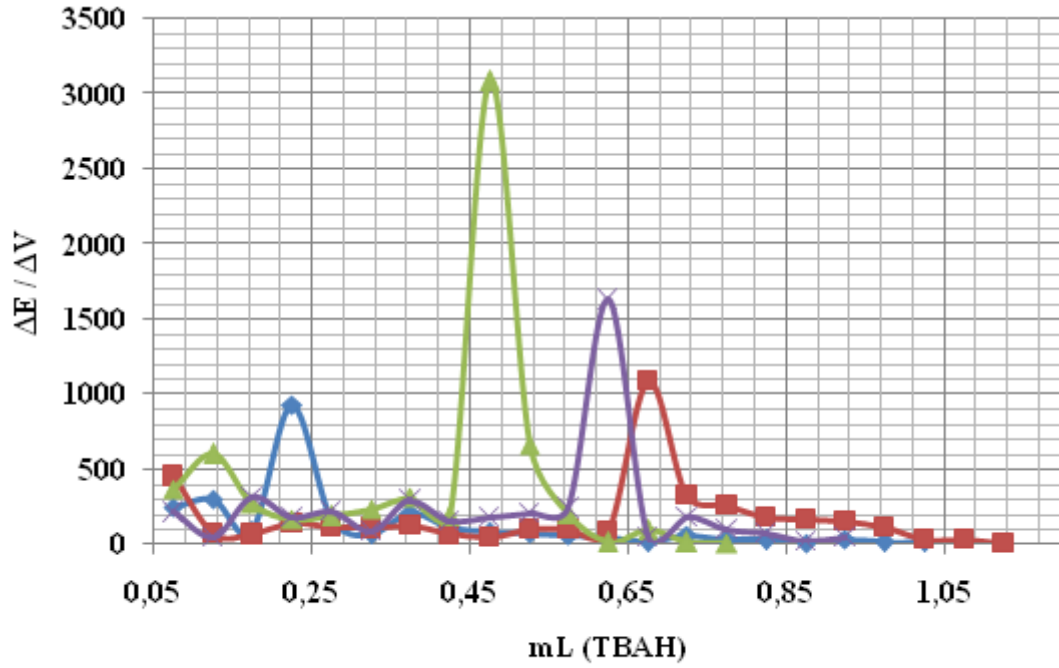
TİTRANT (TBAH, mL)	ÇALIŞILAN ÇÖZÜCÜLER							
	2-PROPANOL		DMF		TERT-BUTANOL		ASETONİTRİL	
	pH	mV	pH	mV	pH	mV	pH	mV
0,050	14,14	-422,3	14,70	-455,7	13,64	-397,5	15,48	-501,4
0,100	14,35	-434,6	15,09	-478,5	14,02	-416,0	15,66	-512,1
0,150	14,60	-449,7	15,12	-482,2	14,56	-446,0	15,68	-514,5
0,200	14,65	-453,8	15,19	-485,7	14,77	-459,7	15,96	-530,1
0,250	15,46	-500,4	15,32	-492,6	14,90	-467,9	16,11	-539,1
0,300	15,60	-508,9	15,43	-498,5	15,07	-477,2	16,30	-550,1
0,350	15,65	-512,2	15,52	-503,9	15,26	-488,9	16,34	-554,3
0,400	15,83	-522,7	15,62	-510,1	15,53	-504,5	16,62	-569,0
0,450	15,93	-528,3	15,68	-513,4	15,62	-514,0	16,74	-576,8
0,500	16,00	-532,5	15,72	-516,0	18,30	-668,4	16,90	-585,7
0,550	16,07	-536,4	15,81	-521,1	18,86	-701,4	17,08	-596,1
0,600	16,12	-539,5	15,88	-526,2	19,03	-711,5	17,28	-608,1
0,650	16,16	-542,1	16,00	-530,4	19,03	-712,3	18,66	-689,6
0,700	16,17	-542,9	16,89	-585,0	19,12	-717,0	18,70	-691,9
0,750	16,22	-545,8	17,17	-601,4	19,12	-717,7	18,85	-700,8
0,800	16,25	-547,4	17,38	-614,3	19,13	-717,9	18,93	-705,7
0,850	16,28	-548,7	17,54	-623,4			18,99	-709,4
0,900	16,28	-549,2	17,68	-631,8			19,00	-710,4
0,950	16,31	-551,0	17,81	-639,4			19,04	-712,6
1,000	16,32	-551,7	17,90	-645,2				
1,050	16,33	-552,5	17,93	-646,8				
1,100			17,95	-648,4				
1,150			17,97	-649,0				



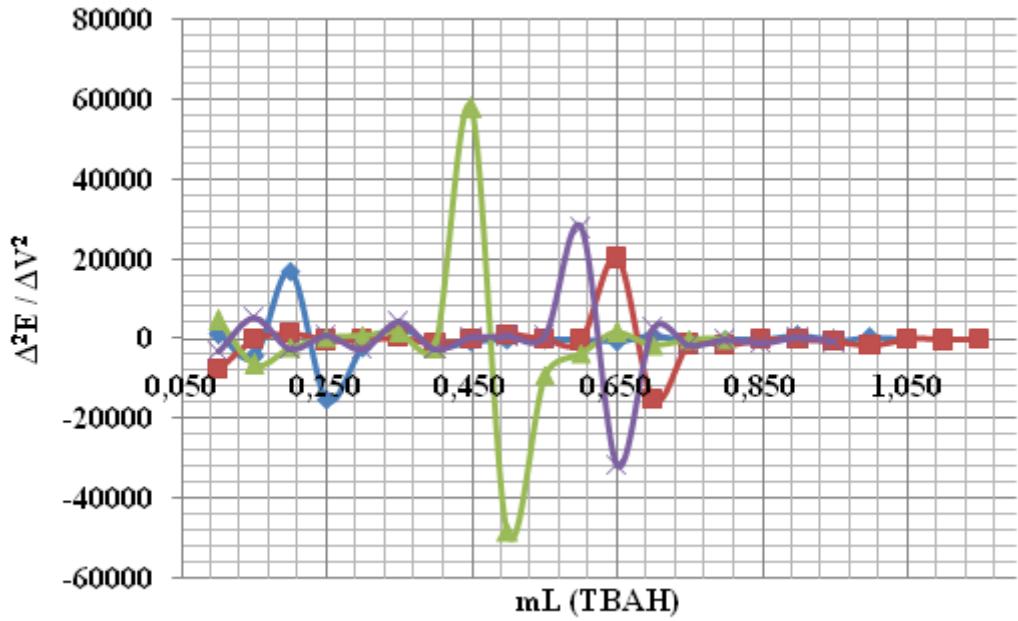
Şekil 39. 7. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen pH-mL grafiği



Şekil 40. 7. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen mV-mL grafiği



—●— 2-Propanol —■— N,N-Dimetilformamid —▲— Tert-Butanol —×— Asetonitril
 Şekil 41. 7. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiği

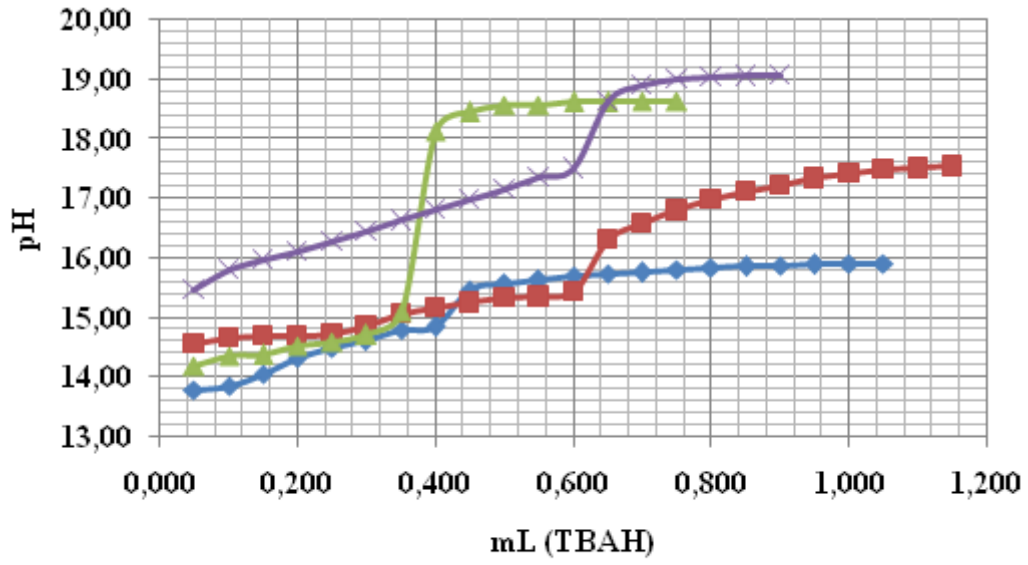


—●— 2-Propanol —■— N,N-Dimetilformamid —▲— Tert-Butanol —×— Asetonitril
 Şekil 42. 7. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiği

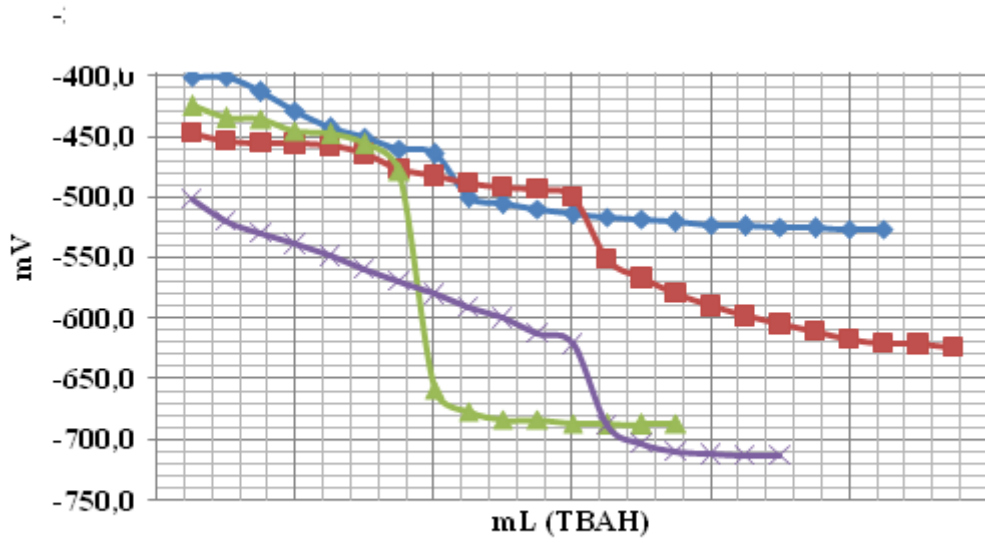
Sekizinci bileşik için yapılan titrasyon, her bir çözücü içinde üçer kez tekrarlandı. Daha sonra alınan ölçümlerin ortalaması tablo' ya geçirildi ve değerlerin ortalaması neticesinde pH- mL grafiği , mV-mL grafiği , $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiği, $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiği çizildi. Daha sonra bu çizilen grafikler yardımıyla bileşiğin her bir çözücüdeki pKa değerleri hesaplandı.

Tablo 8. 8. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen değerlerin ortalaması

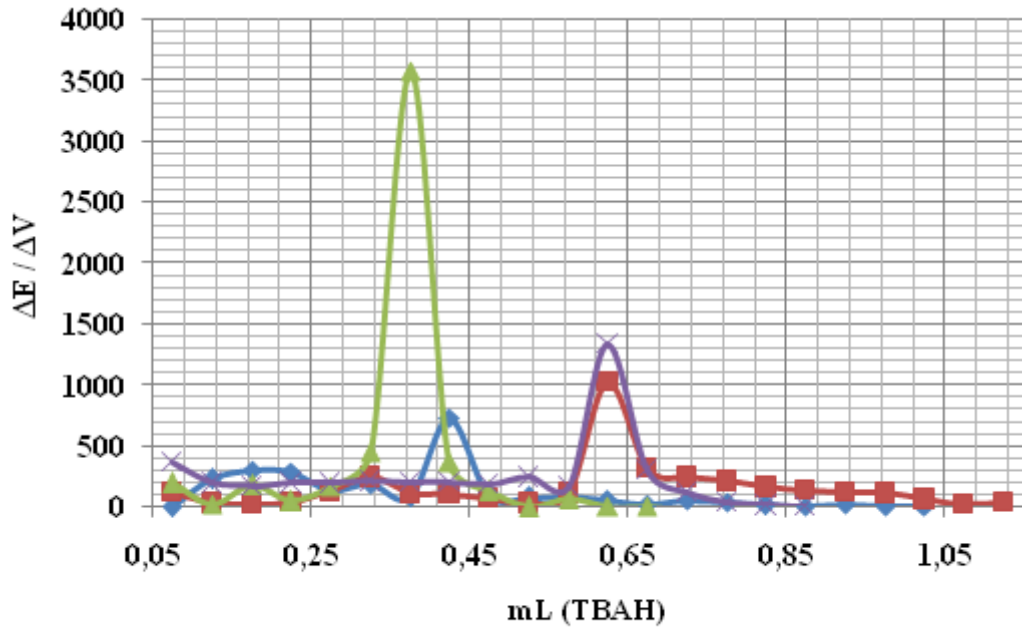
TİTRANT (TBAH, mL)	ÇALIŞILAN ÇÖZÜCÜLER							
	2-PROPANOL		DMF		TERT-BUTANOL		ASETONİTRİL	
	pH	mV	pH	mV	pH	mV	pH	mV
0,050	13,79	-401,9	14,57	-447,9	14,19	-425,6	15,48	-502,0
0,100	13,85	-402,1	14,67	-453,9	14,37	-435,5	15,80	-520,7
0,150	14,05	-413,8	14,70	-455,7	14,38	-436,6	15,97	-530,6
0,200	14,32	-429,1	14,71	-456,8	14,54	-445,8	16,12	-539,5
0,250	14,50	-443,8	14,74	-458,7	14,59	-448,4	16,29	-549,5
0,300	14,62	-451,1	14,87	-465,4	14,72	-456,9	16,46	-559,5
0,350	14,79	-460,6	15,08	-477,8	15,10	-479,6	16,64	-570,2
0,400	14,85	-464,9	15,18	-483,5	18,14	-658,8	16,82	-580,7
0,450	15,47	-501,4	15,26	-488,9	18,45	-677,3	16,99	-591,2
0,500	15,56	-506,2	15,33	-492,8	18,57	-684,0	17,15	-600,7
0,550	15,63	-510,3	15,36	-494,4	18,57	-684,1	17,36	-613,0
0,600	15,70	-514,6	15,45	-500,2	18,62	-687,5	17,51	-621,7
0,650	15,74	-517,2	16,32	-551,5	18,62	-687,8	18,64	-688,6
0,700	15,76	-518,6	16,59	-567,4	18,63	-688,2	18,90	-703,7
0,750	15,81	-521,4	16,80	-579,7	18,63	-686,8	19,01	-710,2
0,800	15,85	-523,4	16,98	-590,5			19,05	-712,5
0,850	15,86	-524,4	17,12	-598,7			19,06	-713,5
0,900	15,87	-525,0	17,23	-605,7			19,07	-713,9
0,950	15,90	-526,4	17,34	-611,7				
1,000	15,91	-526,8	17,43	-617,5				
1,050	15,91	-527,1	17,49	-620,8				
1,100			17,51	-622,2				
1,150			17,54	-624,4				



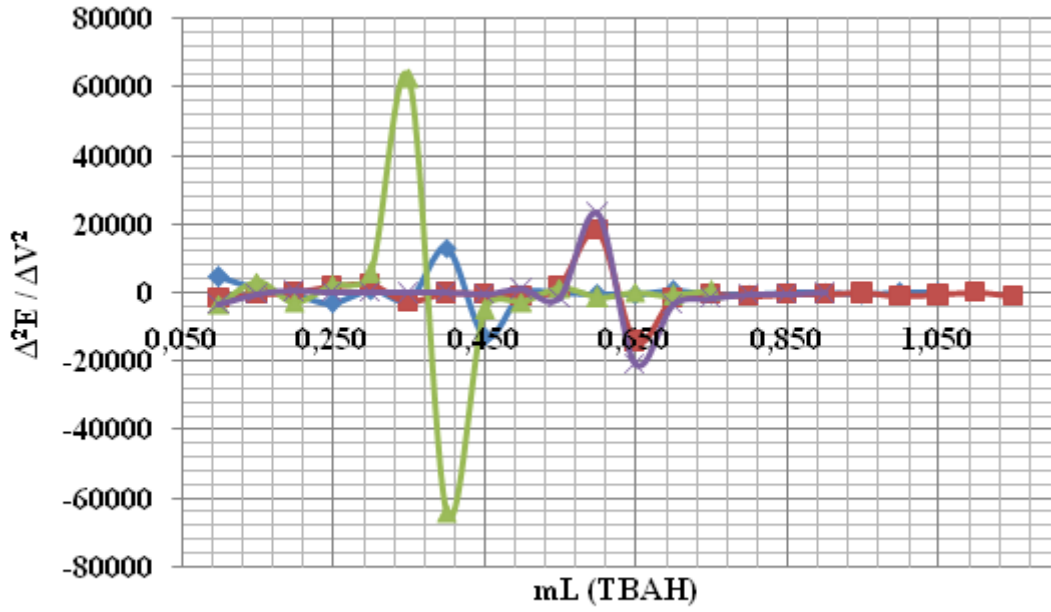
Şekil 43. 8. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen pH-mL grafiđi



Şekil 44. 8. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen mV-mL grafiđi



Şekil 45. 8. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta E / \Delta V$ -mL grafiği

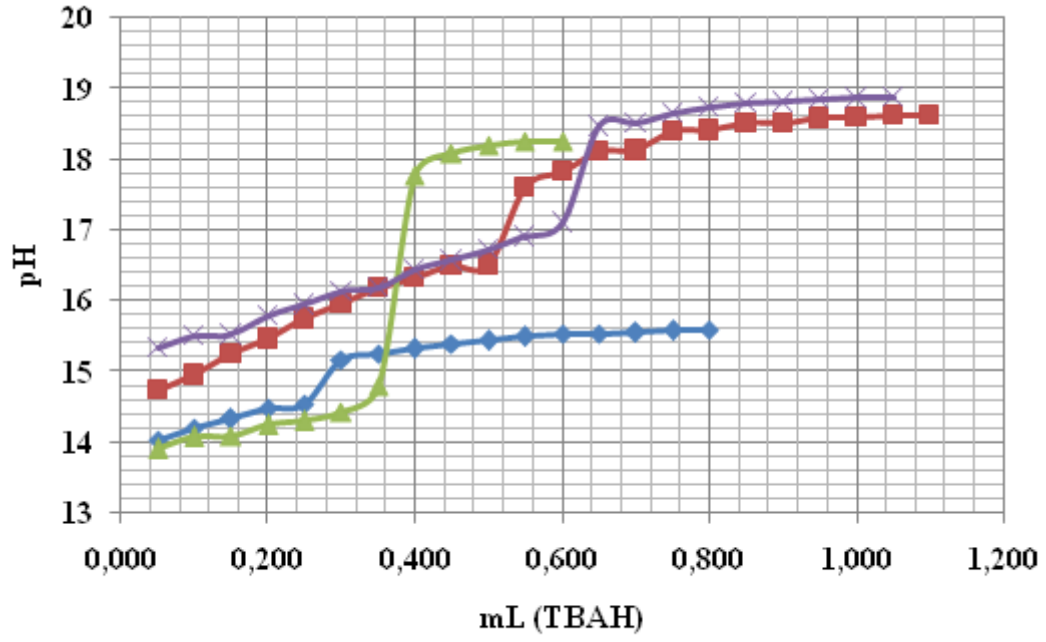


Şekil 46. 8. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta^2 E / \Delta V^2$ -mL grafiği

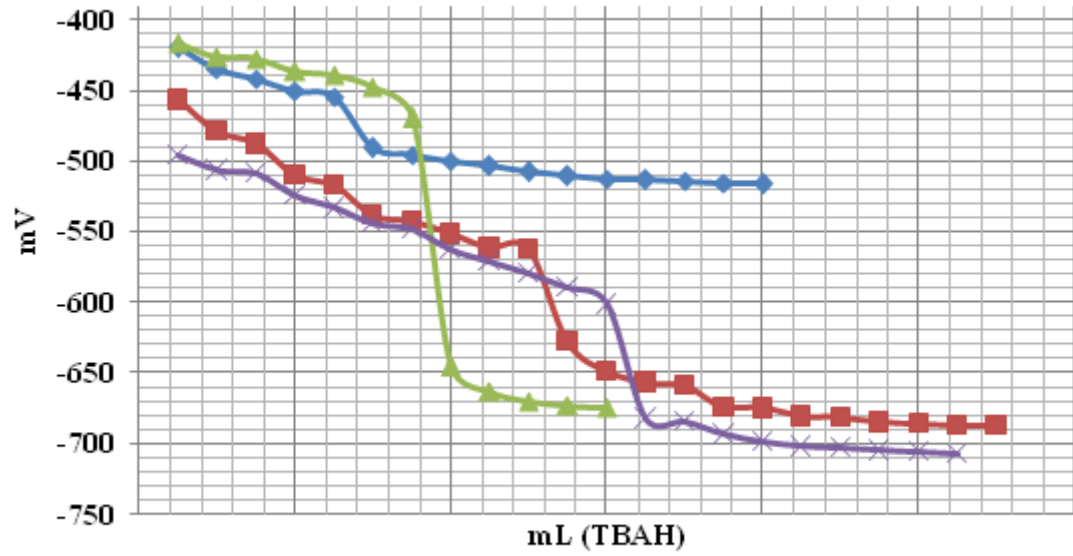
Dokuzuncu bileşik için yapılan titrasyon, her bir çözücü içinde üçer kez tekrarlandı. Daha sonra alınan ölçümlerin ortalaması tablo'ya geçirildi ve değerlerin ortalaması neticesinde pH- mL grafiği , mV-mL grafiği , $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiği, $\Delta^2 E/\Delta V^2$ - mL grafiği çizildi. Daha sonra bu çizilen grafikler yardımıyla bileşiğin her bir çözücüdeki pKa değerleri hesaplandı.

Tablo 9. 9. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen değerlerin ortalaması

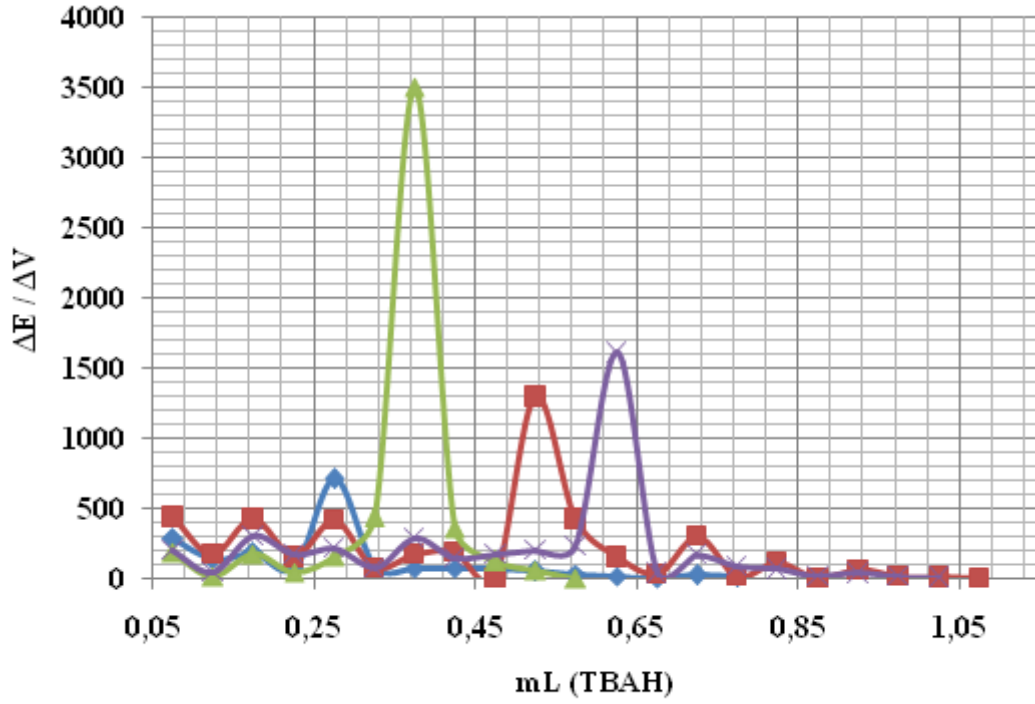
TİTRANT (TBAH, mL)	ÇALIŞILAN ÇÖZÜCÜLER							
	2-PROPANOL		DMF		TERT-BUTANOL		ASETONİTRİL	
	pH	mV	pH	mV	pH	mV	pH	mV
0,050	14,03	-420,5	14,74	-457,3	13,91	-417,1	15,33	-496,4
0,100	14,21	-434,9	14,96	-479,5	14,08	-426,8	15,50	-507,0
0,150	14,33	-442,1	15,26	-488,5	14,09	-427,9	15,52	-509,4
0,200	14,49	-451,4	15,47	-510,0	14,25	-436,9	15,80	-524,8
0,250	14,55	-455,6	15,75	-518,0	14,30	-439,4	15,95	-533,7
0,300	15,16	-491,4	15,96	-538,9	14,43	-447,8	16,14	-544,6
0,350	15,25	-496,1	16,18	-543,1	14,80	-470,0	16,18	-548,8
0,400	15,32	-500,1	16,33	-552,2	17,78	-645,6	16,45	-563,3
0,450	15,39	-504,3	16,50	-562,1	18,08	-663,8	16,57	-571,0
0,500	15,44	-508,2	16,51	-562,7	18,20	-670,3	16,73	-579,8
0,550	15,49	-511,0	17,61	-627,8	18,25	-673,8	16,91	-590,1
0,600	15,53	-512,9	17,83	-649,3	18,26	-674,4	17,11	-602,0
0,650	15,54	-513,9	18,11	-657,2			18,47	-682,7
0,700	15,55	-514,5	18,13	-659,2			18,51	-685,0
0,750	15,58	-515,9	18,40	-674,4			18,66	-693,8
0,800	15,59	-516,6	18,41	-675,5			18,74	-698,6
0,850			18,52	-681,4			18,80	-702,3
0,900			18,52	-681,8			18,81	-703,3
0,950			18,58	-685,3			18,85	-705,5
1,000			18,60	-686,3			18,87	-706,4
1,050			18,62	-687,1			18,88	-707,1
1,100			18,63	-687,6				



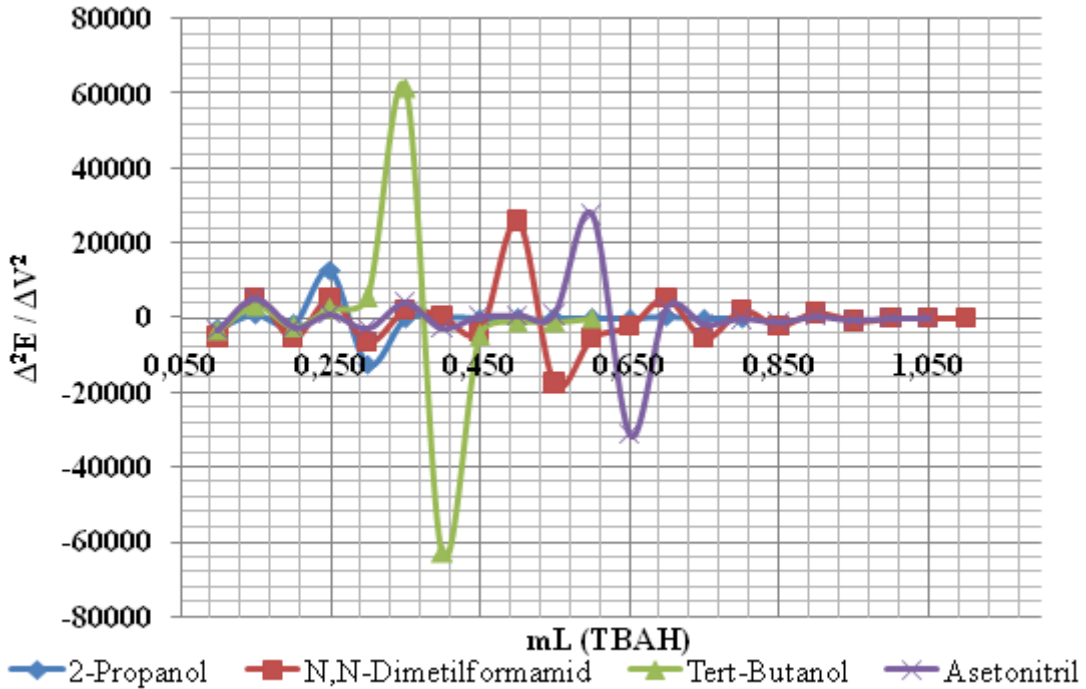
Şekil 47. 9. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen pH-mL grafiđi



Şekil 48. 9. Bileşiğın titrasyonundan elde edilen mV-mL grafiđi



Şekil 49. 9. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta E / \Delta V$ -mL grafiği

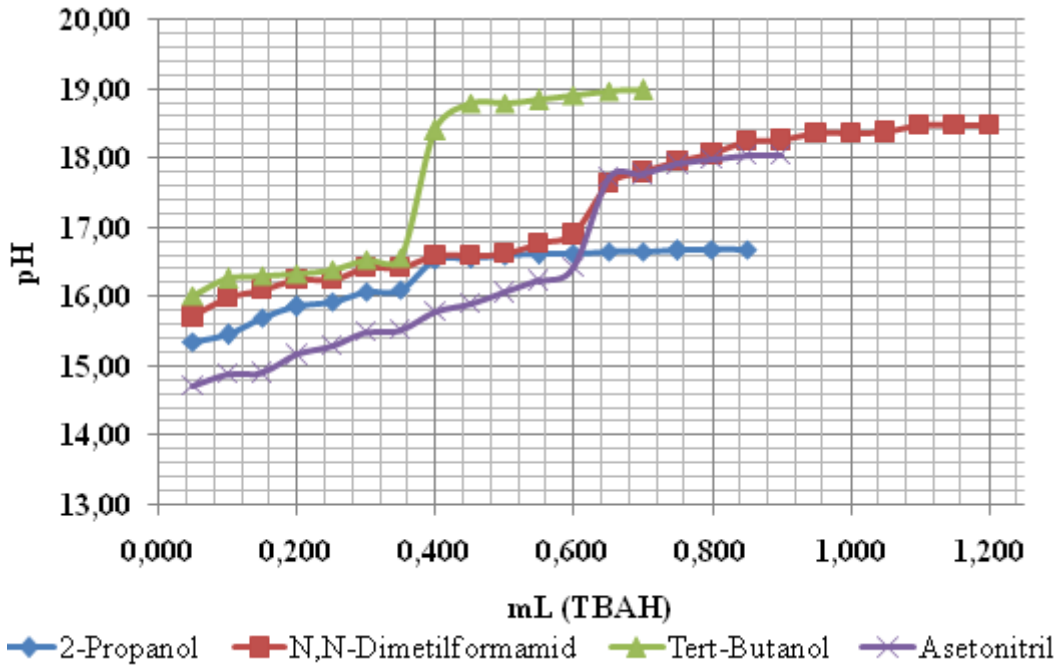


Şekil 50. 9. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta^2 E / \Delta V^2$ -mL grafiği

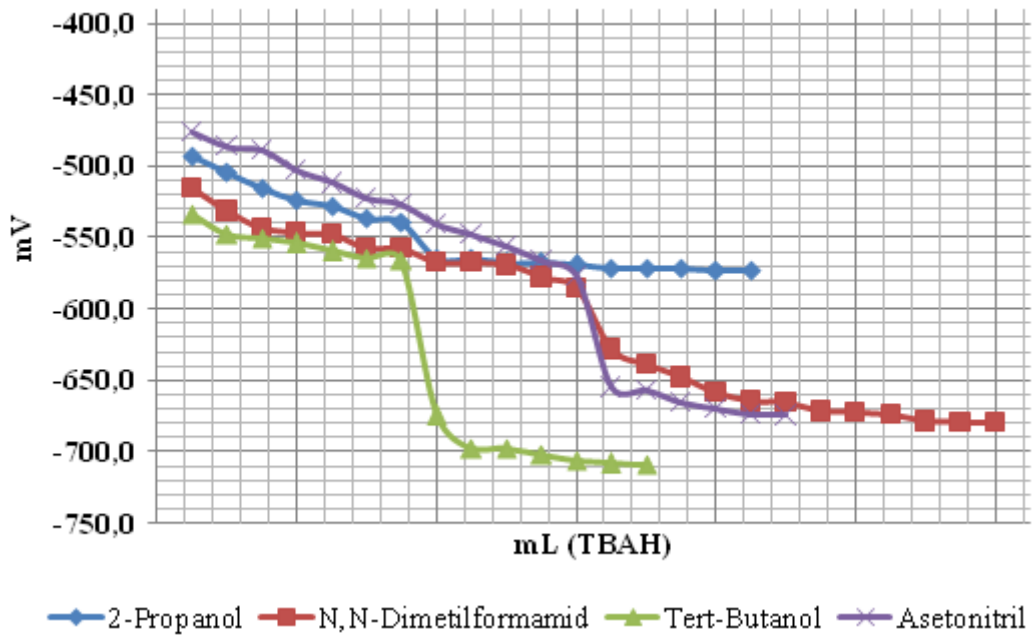
Onuncu bileşik için yapılan titrasyon, her bir çözücü içinde üçer kez tekrarlandı. Daha sonra alınan ölçümlerin ortalaması tablo' ya geçirildi ve değerlerin ortalaması neticesinde pH- mL grafiği , mV-mL grafiği , $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiği, $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiği çizildi. Daha sonra bu çizilen grafikler yardımıyla bileşiğin her bir çözücüdeki pKa değerleri hesaplandı.

Tablo 10. 10. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen değerlerin ortalaması

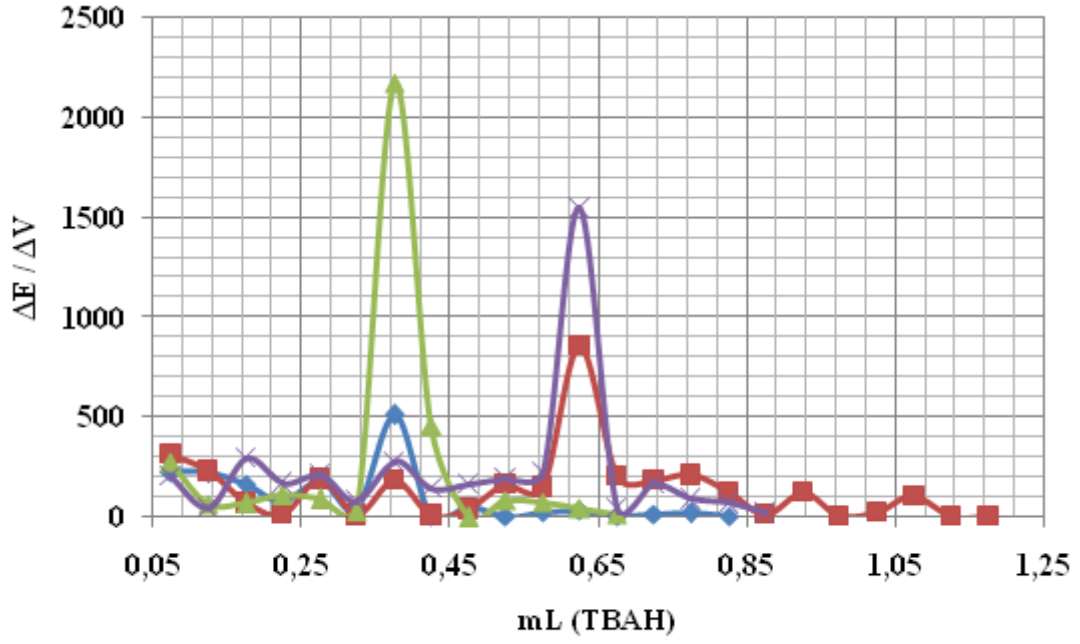
TİTRANT (TBAH, mL)	ÇALIŞILAN ÇÖZÜCÜLER							
	2-PROPANOL		DMF		TERT-BUTANOL		ASETONİTRİL	
	pH	mV	pH	mV	pH	mV	pH	mV
0,050	15,34	-493,4	15,71	-516,0	16,02	-534,0	14,71	-476,3
0,100	15,45	-504,8	15,99	-532,0	16,26	-547,7	14,88	-486,5
0,150	15,70	-515,9	16,10	-543,6	16,30	-550,9	14,90	-488,8
0,200	15,86	-524,1	16,25	-547,1	16,34	-554,5	15,16	-503,6
0,250	15,93	-528,1	16,25	-547,9	16,40	-560,0	15,30	-512,1
0,300	16,08	-537,1	16,42	-557,4	16,54	-564,6	15,49	-522,6
0,350	16,10	-539,2	16,42	-557,9	16,57	-566,2	15,52	-526,6
0,400	16,54	-564,9	16,59	-567,2	18,41	-675,0	15,79	-540,6
0,450	16,55	-565,3	16,59	-567,7	18,80	-697,8	15,90	-548,0
0,500	16,60	-568,2	16,62	-569,7	18,80	-697,9	16,06	-556,4
0,550	16,61	-568,4	16,77	-578,0	18,84	-702,1	16,23	-566,3
0,600	16,62	-569,7	16,90	-585,5	18,91	-706,0	16,42	-577,7
0,650	16,66	-571,4	17,63	-628,5	18,98	-708,4	17,73	-655,1
0,700	16,66	-571,6	17,80	-638,9	18,99	-709,1	17,77	-657,3
0,750	16,67	-572,3	17,95	-648,2			17,91	-665,8
0,800	16,69	-573,4	18,06	-658,8			17,98	-670,4
0,850	16,69	-573,6	18,25	-665,1			18,04	-673,9
0,900			18,26	-666,0			18,05	-674,9
0,950			18,36	-672,2				
1,000			18,36	-672,5				
1,050			18,38	-673,9				
1,100			18,48	-679,2				
1,150			18,48	-679,4				
1,200			18,48	-679,6				



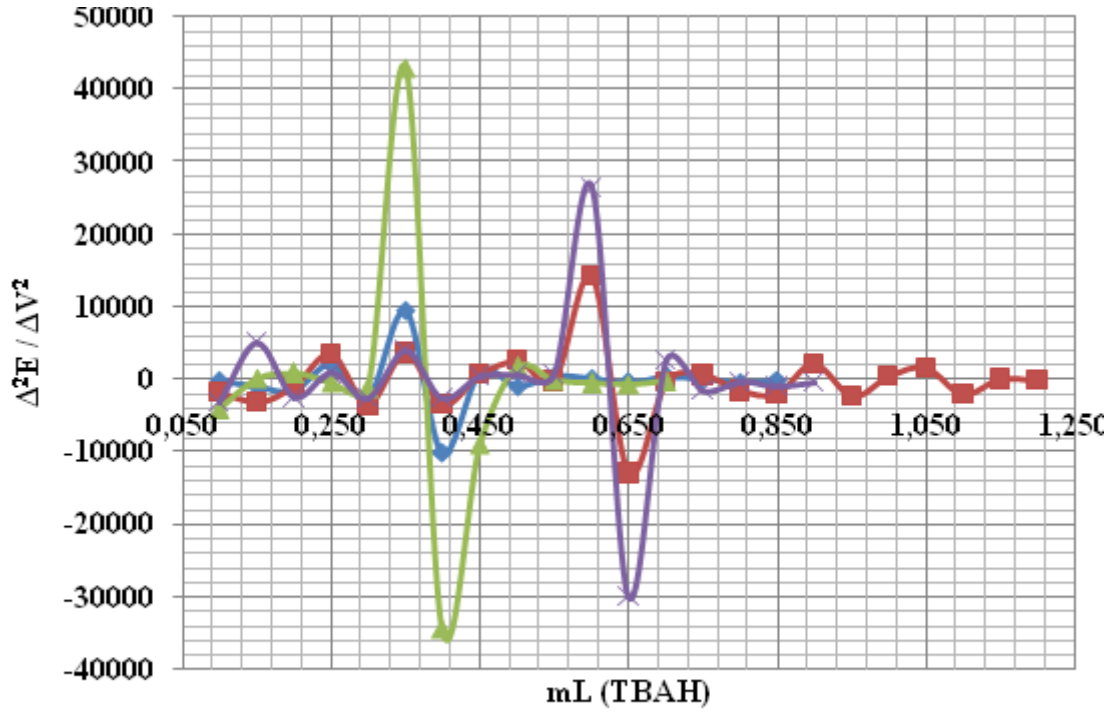
Şekil 51. 10. bileşiğin titrasyonundan elde edilen pH-mL grafiği



Şekil 52. 10. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen mV-mL grafiği



Şekil 53. 10. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta E/\Delta V$ -mL grafiği



Şekil 54. 10. Bileşiğin titrasyonundan elde edilen $\Delta^2 E/\Delta V^2$ -mL grafiği

Tablo 11. 1.Bileşik için bilgisayar programı ile hesaplanan serbest enerji değişimleri

Bileşik	Çözücü	ΔG_1 (Kcal)	ΔG_2 (Kcal)	ΔG_3 (Kcal)	ΔG_4 (Kcal)	ΔG (Kcal)
1	2-Propanol	346,55	-17,66	-74,56	-256,88	16,39
	DMF	346,55	-19,96	-80,45	-241,69	22,19
	<i>Tert</i> -Butanol	346,55	-18,48	-74,69	-253,15	18,60
	Asetonitril	346,55	-20,18	-83,25	-241,98	20,75

Tablo 12. 2. Bileşik için bilgisayar programı ile hesaplanan serbest enerji değişimleri

Bileşik	Çözücü	ΔG_1 (Kcal)	ΔG_2 (Kcal)	ΔG_3 (Kcal)	ΔG_4 (Kcal)	ΔG (Kcal)
2	2-Propanol	346,98	-18,01	-75,27	-256,88	16,42
	DMF	346,98	-20,34	-81,20	-241,69	22,22
	<i>Tert</i> -Butanol	346,98	-18,82	-75,40	-253,15	18,63
	Asetonitril	346,98	-20,63	-84,07	-241,98	20,79

Tablo 13. 3. Bileşik için bilgisayar programı ile hesaplanan serbest enerji değişimleri

Bileşik	Çözücü	ΔG_1 (Kcal)	ΔG_2 (Kcal)	ΔG_3 (Kcal)	ΔG_4 (Kcal)	ΔG (Kcal)
3	2-Propanol	347,00	-18,07	-75,34	-256,88	16,43
	DMF	347,00	-20,41	-81,27	-241,69	22,23
	<i>Tert</i> -Butanol	347,00	-18,89	-75,47	-253,15	18,64
	Asetonitril	347,00	-20,71	-84,14	-241,98	20,79

Tablo 14. 4. Bileşik için bilgisayar programı ile hesaplanan serbest enerji değişimleri

Bileşik	Çözücü	ΔG_1 (Kcal)	ΔG_2 (Kcal)	ΔG_3 (Kcal)	ΔG_4 (Kcal)	ΔG (Kcal)
4	2-Propanol	347,60	-17,49	-74,88	-256,88	16,67
	DMF	347,60	-19,73	-80,72	-241,69	22,46
	<i>Tert</i> -Butanol	347,60	-18,30	-75,00	-253,15	18,87
	Asetonitril	347,60	-19,91	-83,47	-241,98	21,03

Tablo 15. 5. Bileşik için bilgisayar programı ile hesaplanan serbest enerji değişimleri

Bileşik	Çözücü	ΔG_1	ΔG_2	ΔG_3	ΔG_4	ΔG
		(Kcal)	(Kcal)	(Kcal)	(Kcal)	(Kcal)
5	2-Propanol	347,63	-17,55	-74,94	-256,88	16,68
	DMF	347,63	-19,80	-80,78	-241,69	22,48
	<i>Tert</i> -Butanol	347,63	-18,36	-75,07	-253,15	18,89
	Asetonitril	347,63	-19,96	-83,53	-241,98	21,05

Tablo 16. 6. Bileşik için bilgisayar programı ile hesaplanan serbest enerji değişimleri

Bileşik	Çözücü	ΔG_1	ΔG_2	ΔG_3	ΔG_4	ΔG
		(Kcal)	(Kcal)	(Kcal)	(Kcal)	(Kcal)
6	2-Propanol	351,11	-31,72	-89,99	256,88	17,99
		350,96	-31,72	-89,96	-256,88	17,92
	DMF	351,11	-36,11	-97,99	-241,69	23,77
		350,96	-36,11	-97,96	-241,69	23,71
	<i>Tert</i> -Butanol	351,11	-33,13	-90,71	-253,15	20,19
		350,96	-33,13	-90,69	-253,15	20,13
	Asetonitril	351,11	-36,86	-101,28	-241,98	22,36
		350,96	-36,86	-101,25	-241,98	22,29

Tablo 17. 7. Bileşik için bilgisayar programı ile hesaplanan serbest enerji değişimleri

Bileşik	Çözücü	ΔG_1	ΔG_2	ΔG_3	ΔG_4	ΔG
		(Kcal)	(Kcal)	(Kcal)	(Kcal)	(Kcal)
7	2-Propanol	351,55	-32,41	-91,05	-256,88	18,02
		351,39	-32,41	-91,02	-256,88	17,95
	DMF	351,55	-36,86	-99,11	-241,69	23,81
		351,39	-36,86	-99,08	-241,69	23,74
	<i>Tert</i> -Butanol	351,55	-33,81	-91,76	-253,15	20,23
		351,39	-33,81	-91,73	-253,15	20,16
	Asetonitril	351,55	-37,76	-102,55	-241,98	22,39
		351,39	-37,76	-102,52	-241,98	22,33

Tablo 18. 8. Bileşik için bilgisayar programı ile hesaplanan serbest enerji değişimleri

Bileşik	Çözücü	ΔG_1 (Kcal)	ΔG_2 (Kcal)	ΔG_3 (Kcal)	ΔG_4 (Kcal)	ΔG (Kcal)
8	2-Propanol	351,57	-32,53	-91,17	-256,88	18,03
		351,41	-32,53	-91,15	-256,88	17,96
	DMF	351,57	-37,00	-99,25	-241,69	23,81
		351,41	-37,00	-99,22	-241,69	23,75
	<i>Tert</i> -Butanol	351,57	-33,93	-91,89	-253,15	20,23
		351,41	-33,93	-91,86	-253,15	20,17
	Asetonitril	351,57	-37,90	-102,70	-241,98	22,40
		351,41	-37,90	-102,67	-241,98	22,34

Tablo 19. 9. Bileşik için bilgisayar programı ile hesaplanan serbest enerji değişimleri

Bileşik	Çözücü	ΔG_1 (Kcal)	ΔG_2 (Kcal)	ΔG_3 (Kcal)	ΔG_4 (Kcal)	ΔG (Kcal)
9	2-Propanol	352,18	-31,39	-90,15	-256,88	18,27
		352,02	-31,39	-90,13	-256,88	18,20
	DMF	352,18	-35,66	-98,04	-241,69	24,06
		352,02	-35,66	-98,01	-241,69	23,99
	<i>Tert</i> -Butanol	352,18	-32,78	-90,86	-253,15	20,48
		352,02	-32,78	-90,83	-253,15	20,41
	Asetonitril	352,18	-36,32	-101,24	-241,98	22,64
		352,02	-36,32	-101,21	-241,98	22,58

Tablo 20. 10.Bileşik için bilgisayar programı ile hesaplanan serbest enerji değişimleri

Bileşik	Çözücü	ΔG_1 (Kcal)	ΔG_2 (Kcal)	ΔG_3 (Kcal)	ΔG_4 (Kcal)	ΔG (Kcal)
10	2-Propanol	352,21	-31,50	-90,27	-256,88	18,28
		352,05	-31,50	-90,24	-256,88	18,22
	DMF	352,21	-35,79	-98,17	-241,69	24,07
		352,05	-35,79	-98,14	-241,69	24,01
	<i>Tert</i> -Butanol	352,21	-32,90	-90,98	-253,15	20,49
		352,05	-32,90	-90,95	-253,15	20,43
	Asetonitril	352,21	-36,44	-101,36	-241,98	22,66
		352,05	-36,44	-101,33	-241,98	22,59

4. TARTIŞMA VE SONUÇ

Yapılan bu çalışmada bazı yeni benzimidazol türevi bileşiklerin asitlik sabitleri ve yarı nötralizasyon değerleri tayin edildi. Çalışma potansiyometrik metod kullanılarak 25°C'de susuz ortamda gerçekleştirildi. Çözücü olarak amfiprotik ve dipolar aprotik çözücüler olan 2-propanol, *N,N*-dimetilformamid, *tert*-butanol ve asetonitril tercih edildi.

Kullanılan çözücülerdeki elde edilen pKa değerlerine ait sonuçlar Tablo 21-30 arasında verildi. Elde edilen verilerden pK_a değerleri yarı nötralizasyon metoduna göre hesaplandı.

SPARC bilgisayar programı yardımıyla çalışılan çözücü ortamları için elde ettiğimiz serbest enerji değişimleri yardımıyla teorik olarak hesaplanan pKa değerleri Tablo 31-40 arasında verildi.

Sonuç olarak deneysel veriler ile SPARC bilgisayar programı ile elde edilen pKa değerlerinin birlikte karşılaştırılması Şekil 55-64'te yapıldı.

Tablo 21. 1. Bileşik için hesaplanan pKa ve HNP (mV) değerleri

Bileşik	Çözücü	pKa	HNP (mV)
1	2-Propanol	13,03 ± 0,04	-357,4 ± 0,8
	<i>N,N</i> -dimetilformamid	14,03 ± 0,06	-415,8 ± 2,9
	<i>Tert</i> -Butanol	13,63 ± 0,03	-394,8 ± 5,5
	Asetonitril	14,44 ± 0,02	-439,9 ± 1,3

Tablo 22. 2. Bileşik için hesaplanan pKa ve HNP (mV) değerleri

Bileşik	Çözücü	pKa	HNP (mV)
2	2-Propanol	12,44 ± 0,06	-318,8 ± 1,3
	<i>N,N</i> -dimetilformamid	14,05 ± 0,04	-416,3 ± 2,3
	<i>Tert</i> -Butanol	13,37 ± 0,07	-378,2 ± 4,5
	Asetonitril	14,04 ± 0,09	-416,5 ± 6,1

Tablo 23. 3. Bileşik için hesaplanan pKa ve HNP (mV) değerleri

Bileşik	Çözücü	pKa	HNP (mV)
3	2-Propanol	12,91 ± 0,08	-348,5 ± 3,6
	<i>N,N</i> -dimetilformamid	13,82 ± 0,04	-403,6 ± 2,3
	<i>Tert</i> -Butanol	13,32 ± 0,06	-373,7 ± 4,9
	Asetonitril	13,65 ± 0,07	-397,0 ± 5,8

Tablo 24. 4. Bileşik için hesaplanan pKa ve HNP (mV) değerleri

Bileşik	Çözücü	pKa	HNP (mV)
4	2-Propanol	12,92 ± 0,05	-347,3 ± 6,5
	<i>N,N</i> -dimetilformamid	14,09 ± 0,08	-419,4 ± 5,8
	<i>Tert</i> -Butanol	12,98 ± 0,10	-354,2 ± 7,6
	Asetonitril	13,39 ± 0,02	-378,0 ± 0,8

Tablo 25. 5. Bileşik için hesaplanan pKa ve HNP (mV) değerleri

Bileşik	Çözücü	pKa	HNP (mV)
5	2-Propanol	13,57 ± 0,06	-388,1 ± 5,2
	<i>N,N</i> -dimetilformamid	14,54 ± 0,04	-445,4 ± 7,3
	<i>Tert</i> -Butanol	14,14 ± 0,07	-422,8 ± 4,9
	Asetonitril	13,28 ± 0,05	-371,6 ± 6,8

Tablo 26. 6. Bileşik için hesaplanan pKa ve HNP (mV) değerleri

Bileşik	Çözücü	pKa	HNP (mV)
6	2-Propanol	15,19 ± 0,08	-485,6 ± 6,0
	<i>N,N</i> -dimetilformamid	15,40 ± 0,08	-502,1 ± 9,2
	<i>Tert</i> -Butanol	15,30 ± 0,02	-492,3 ± 1,3
	Asetonitril	15,30 ± 0,04	-491,0 ± 5,8

Tablo 27. 7. Bileşik için hesaplanan pKa ve HNP (mV) değerleri

Bileşik	Çözücü	pKa	HNP (mV)
7	2-Propanol	14,59 ± 0,08	-450,6 ± 1,6
	<i>N,N</i> -dimetilformamid	15,47 ± 0,03	-500,9 ± 1,8
	<i>Tert</i> -Butanol	14,73 ± 0,11	-461,1 ± 6,0
	Asetonitril	16,32 ± 0,09	-551,6 ± 5,5

Tablo 28. 8. Bileşik için hesaplanan pKa ve HNP (mV) değerleri

Bileşik	Çözücü	pKa	HNP (mV)
8	2-Propanol	14,39 ± 0,06	-434,0 ± 7,2
	<i>N,N</i> -dimetilformamid	14,93 ± 0,05	-469,1 ± 4,9
	<i>Tert</i> -Butanol	14,49 ± 0,08	-443,1 ± 6,8
	Asetonitril	16,52 ± 0,04	-562,9 ± 5,3

Tablo 29. 9. Bileşik için hesaplanan pKa ve HNP (mV) değerleri

Bileşik	Çözücü	pKa	HNP (mV)
9	2-Propanol	14,29 ± 0,07	-439,9 ± 5,9
	<i>N,N</i> -dimetilformamid	15,77 ± 0,07	-521,2 ± 4,2
	<i>Tert</i> -Butanol	14,20 ± 0,09	-434,3 ± 7,3
	Asetonitril	16,16 ± 0,08	-546,1 ± 6,4

Tablo 30. 10. Bileşik için hesaplanan pKa ve HNP (mV) değerleri

Bileşik	Çözücü	pKa	HNP (mV)
10	2-Propanol	15,82 ± 0,05	-521,8 ± 6,6
	<i>N,N</i> -dimetilformamid	16,42 ± 0,02	-557,1 ± 2,2
	<i>Tert</i> -Butanol	16,31 ± 0,04	-551,2 ± 2,9
	Asetonitril	15,50 ± 0,06	-524,0 ± 7,3

Tablo 31. Bilgisayar programı ile 1. Bileşik için hesaplanan teorik pKa değerleri

Bileşik	Çözücü	pKa
1	2-Propanol	12,08
	<i>N,N</i> -dimetilformamid	16,35
	<i>Tert</i> -Butanol	13,70
	Asetonitril	15,29

Tablo 32. Bilgisayar programı ile 2. Bileşik için hesaplanan teorik pKa değerleri

Bileşik	Çözücü	pKa
2	2-Propanol	12,10
	<i>N,N</i> -dimetilformamid	16,37
	<i>Tert</i> -Butanol	13,72
	Asetonitril	15,32

Tablo 33. Bilgisayar programı ile 3. Bileşik için hesaplanan teorik pKa değerleri

Bileşik	Çözücü	pKa
3	2-Propanol	12,10
	<i>N,N</i> -dimetilformamid	16,38
	<i>Tert</i> -Butanol	13,73
	Asetonitril	15,32

Tablo 34. Bilgisayar programı ile 4. Bileşik için hesaplanan teorik pKa değerleri

Bileşik	Çözücü	pKa
4	2-Propanol	12,28
	<i>N,N</i> -dimetilformamid	16,55
	<i>Tert</i> -Butanol	13,90
	Asetonitril	15,50

Tablo 35. Bilgisayar programı ile 5. Bileşik için hesaplanan teorik pKa değerleri

Bileşik	Çözücü	pKa
5	2-Propanol	12,29
	<i>N,N</i> -dimetilformamid	16,56
	<i>Tert</i> -Butanol	13,92
	Asetonitril	15,51

Tablo 36. Bilgisayar programı ile 6. Bileşik için hesaplanan teorik pKa değerleri

Bileşik	Çözücü	pKa	pKa (Ortalama)
6	2-Propanol	13,26 / 13,20	13,23
	<i>N,N</i> -dimetilformamid	17,52 / 17,47	17,50
	<i>Tert</i> -Butanol	14,88 / 14,83	14,86
	Asetonitril	16,48 / 16,42	16,45

Tablo 37. Bilgisayar programı ile 7. Bileşik için hesaplanan teorik pKa değerleri

Bileşik	Çözücü	pKa	pKa (Ortalama)
7	2-Propanol	13,28 / 13,24	13,26
	<i>N,N</i> -dimetilformamid	17,54 / 17,50	17,52
	<i>Tert</i> -Butanol	14,91 / 14,86	14,88
	Asetonitril	16,50 / 16,46	16,48

Tablo 38. Bilgisayar programı ile 8. Bileşik için hesaplanan teorik pKa değerleri

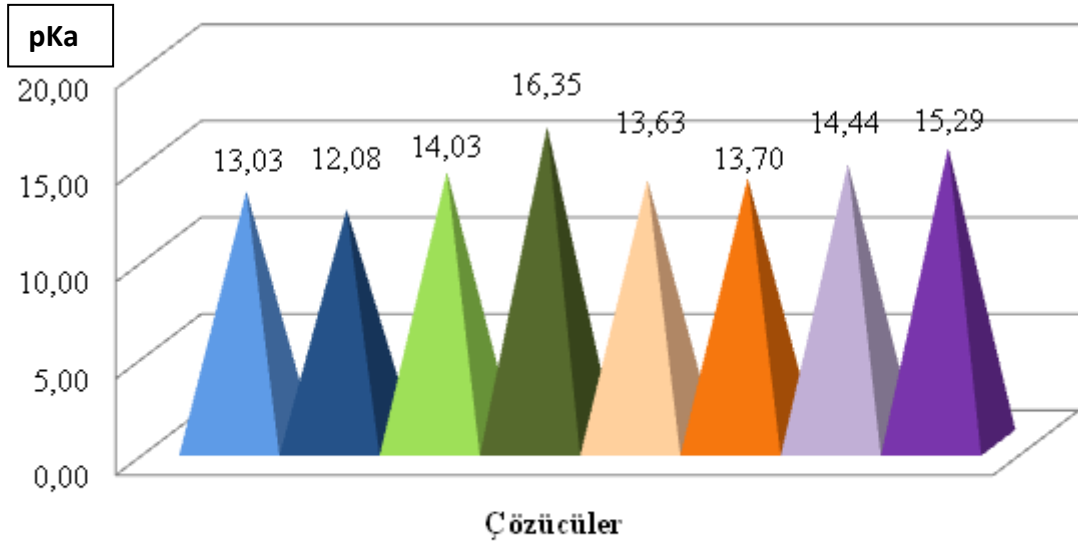
Bileşik	Çözücü	pKa	pKa (Ortalama)
8	2-Propanol	13,28 / 13,24	13,26
	<i>N,N</i> -dimetilformamid	17,54 / 17,50	17,52
	<i>Tert</i> -Butanol	14,91 / 14,86	14,88
	Asetonitril	16,50 / 16,46	16,48

Tablo 39. Bilgisayar programı ile 9. Bileşik için hesaplanan teorik pKa değerleri

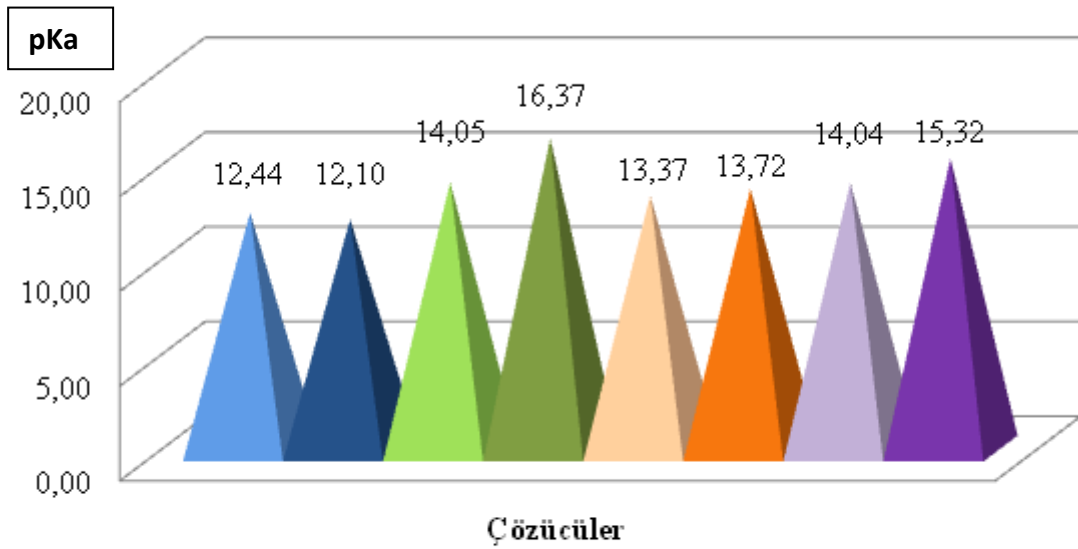
Bileşik	Çözücü	pKa	pKa (Ortalama)
9	2-Propanol	13,46 / 13,41	13,44
	<i>N,N</i> -dimetilformamid	17,72 / 17,68	17,70
	<i>Tert</i> -Butanol	15,09 / 15,04	15,06
	Asetonitril	16,68 / 16,64	16,66

Tablo 40. Bilgisayar programı ile 10. Bileşik için hesaplanan teorik pKa değerleri

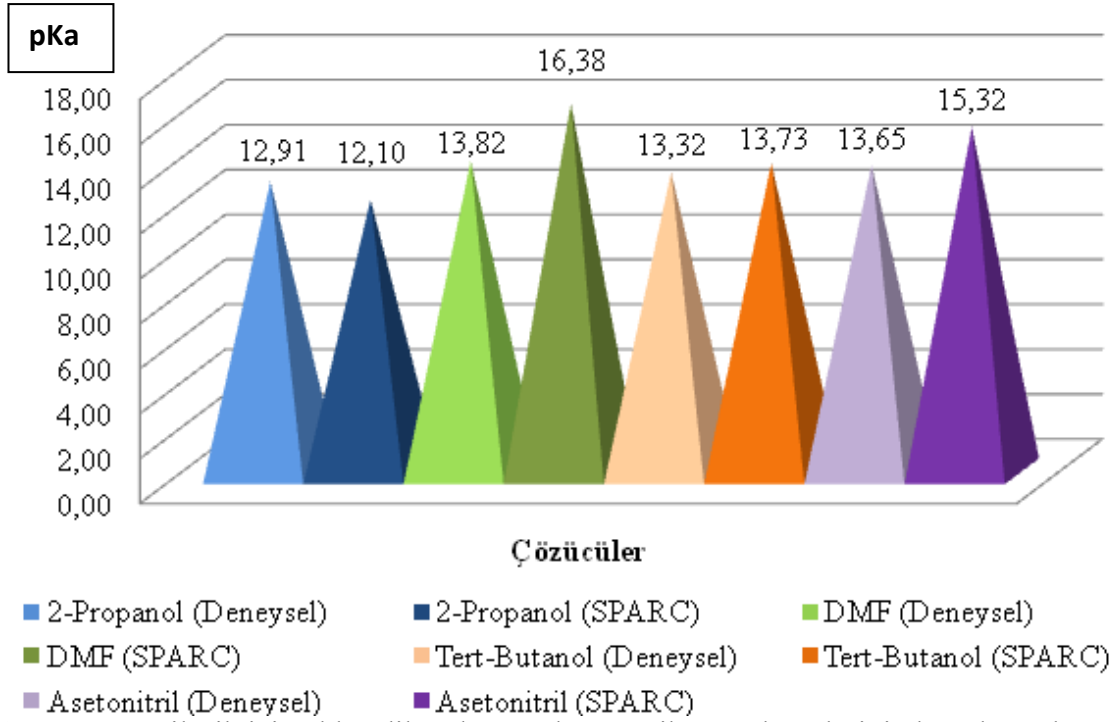
Bileşik	Çözücü	pKa	pKa (Ortalama)
10	2-Propanol	13,47 / 13,42	13,44
	DMF	17,74 / 17,69	17,72
	<i>Tert</i> -Butanol	15,10 / 15,05	15,08
	Asetonitril	16,70 / 16,64	16,67



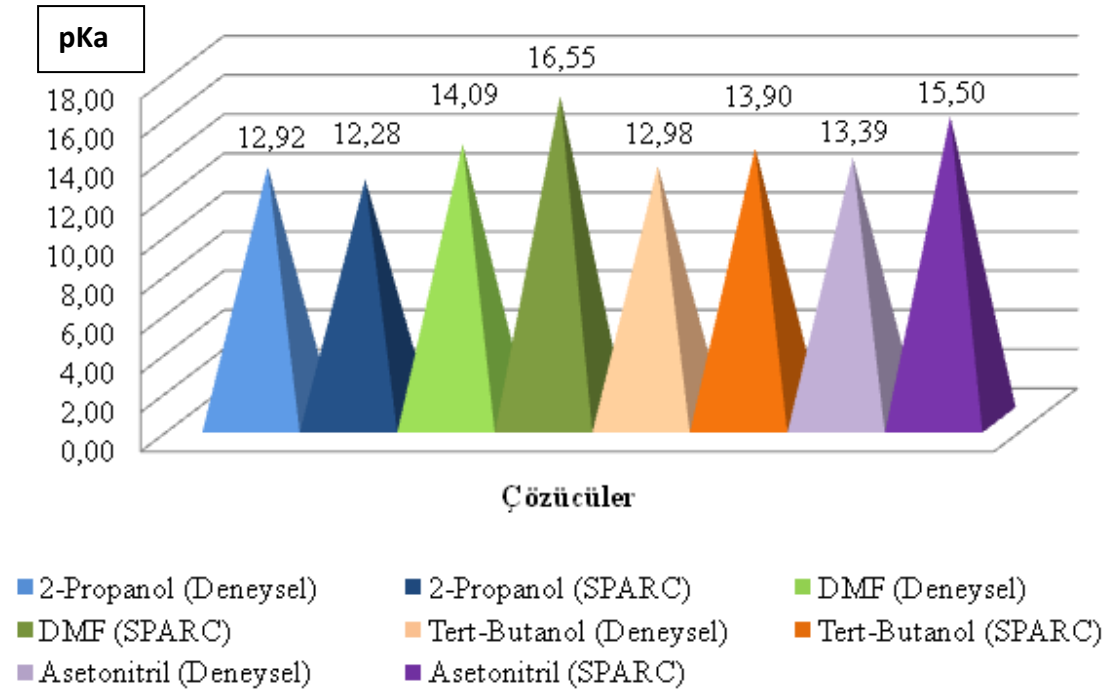
Şekil 55. 1. Bileşik için elde edilen deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması



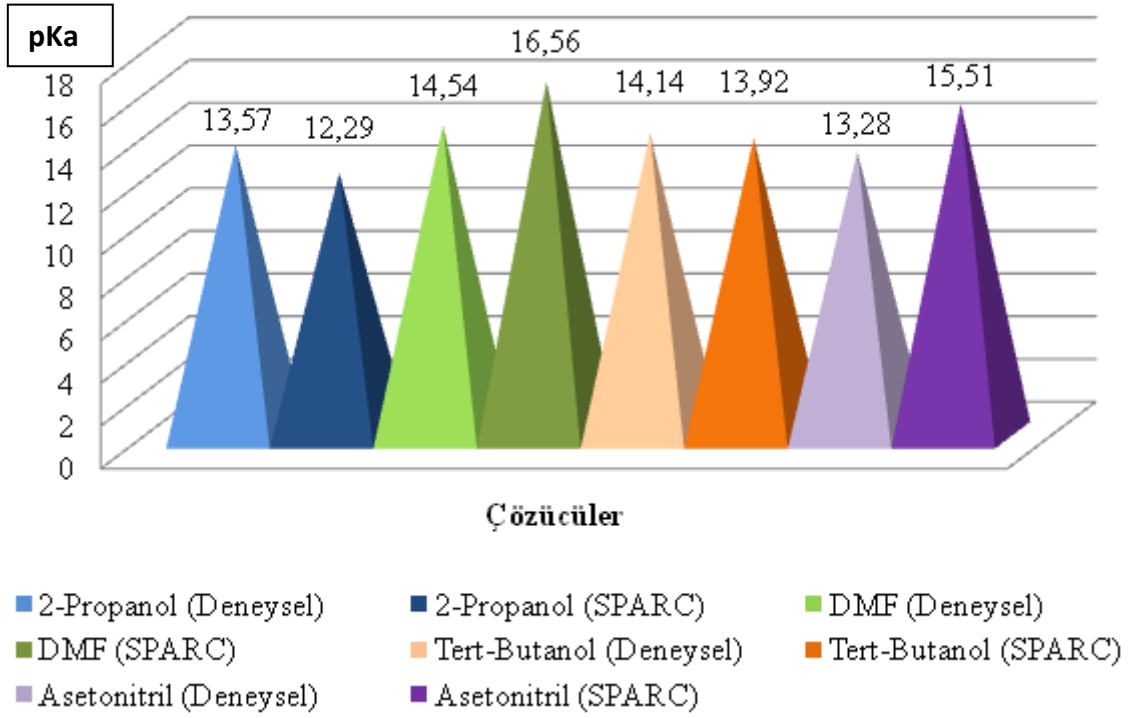
Şekil 56. 2. Bileşik için elde edilen deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması



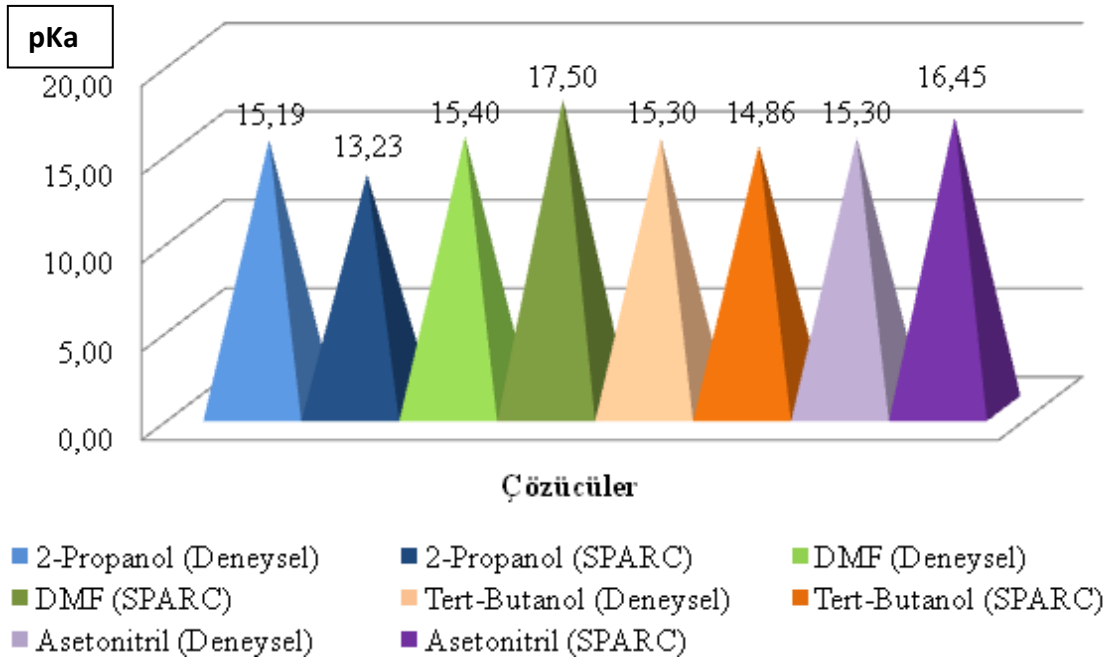
Şekil 57. 3. Bileşik için elde edilen deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması



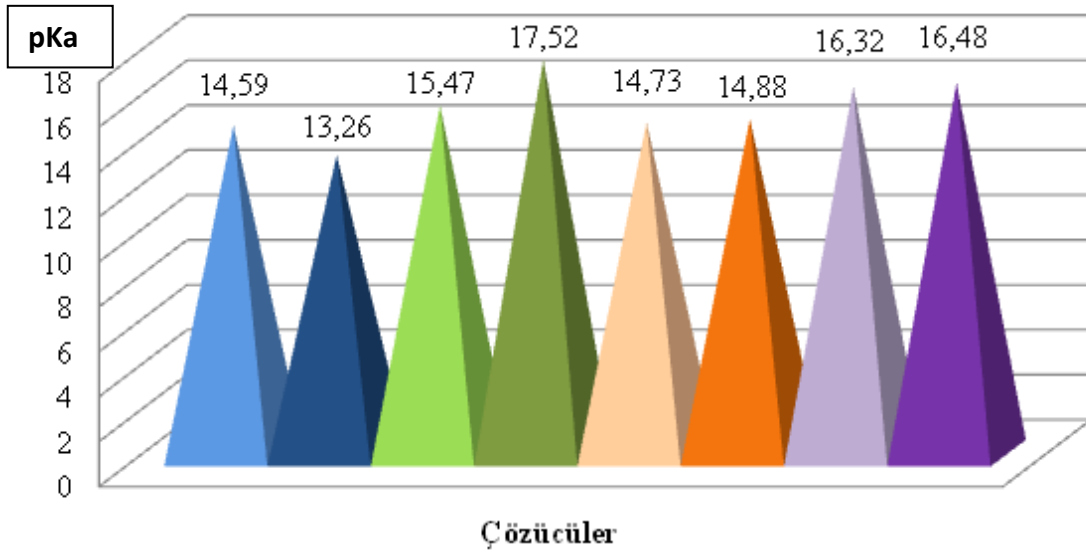
Şekil 58. 4. Bileşik için elde edilen deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması



Şekil 59. 5. Bileşik için elde edilen deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması

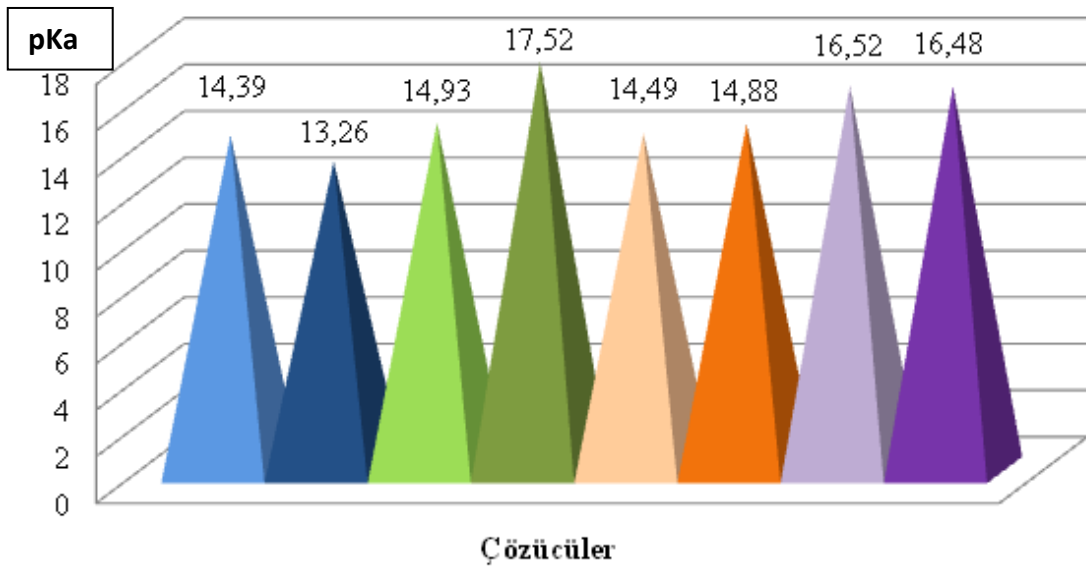


Şekil 60. 6. Bileşik için elde edilen deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması



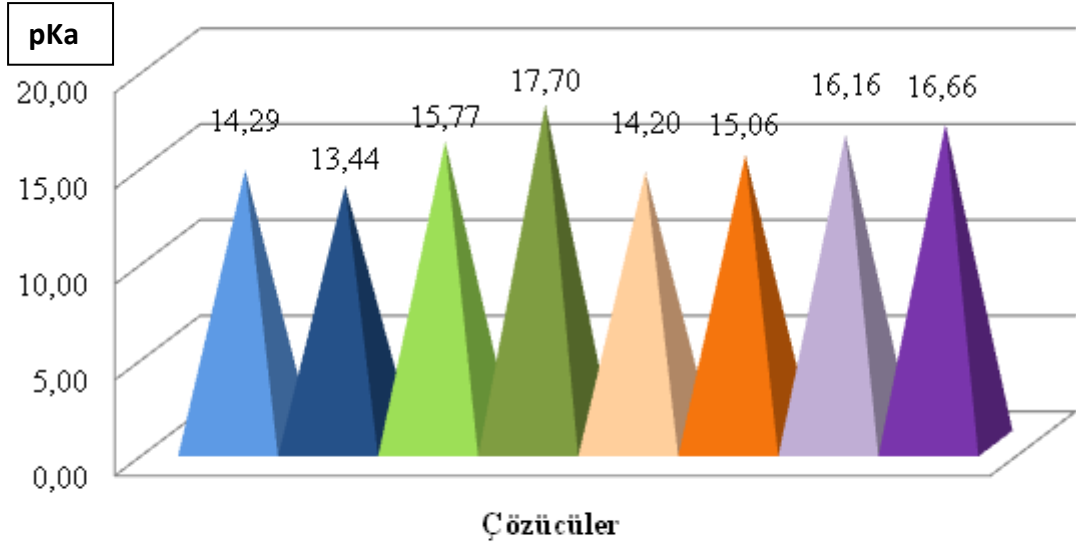
- 2-Propanol (Deneysel) ■ 2-Propanol (SPARC) ■ DMF (Deneysel)
- DMF (SPARC) ■ Tert-Butanol (Deneysel) ■ Tert-Butanol (SPARC)
- Asetonitril (Deneysel) ■ Asetonitril (SPARC)

Şekil 61. 7. Bileşik için elde edilen deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması



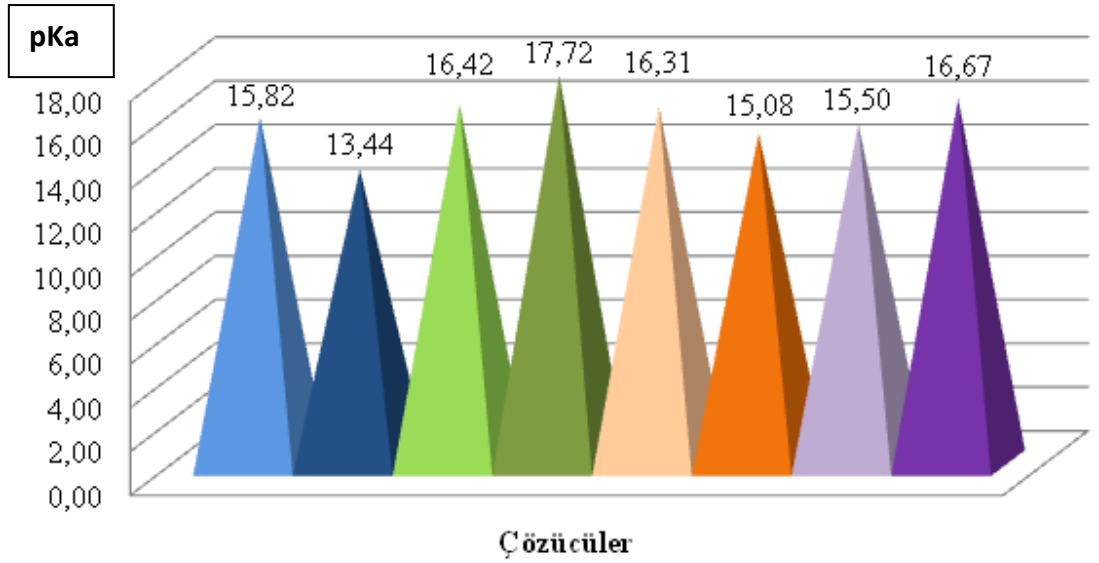
- 2-Propanol (Deneysel) ■ 2-Propanol (SPARC) ■ DMF (Deneysel)
- DMF (SPARC) ■ Tert-Butanol (Deneysel) ■ Tert-Butanol (SPARC)
- Asetonitril (Deneysel) ■ Asetonitril (SPARC)

Şekil 62. 8. Bileşik için elde edilen deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması



- 2-Propanol (DeneySEL)
- 2-Propanol (SPARC)
- DMF (DeneySEL)
- DMF (SPARC)
- Tert-Butanol (DeneySEL)
- Tert-Butanol (SPARC)
- Asetonitril (DeneySEL)
- Asetonitril (SPARC)

Şekil 63. 9. Bileşik için elde edilen deneySEL ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması



- 2-Propanol (DeneySEL)
- 2-Propanol (SPARC)
- DMF (DeneySEL)
- DMF (SPARC)
- Tert-Butanol (DeneySEL)
- Tert-Butanol (SPARC)
- Asetonitril (DeneySEL)
- Asetonitril (SPARC)

Şekil 64. 10. Bileşik için elde edilen deneySEL ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması

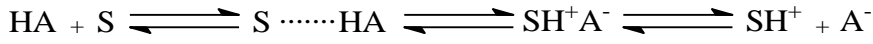
On adet yeni benzimidazol türevi bileşiğindeki halka sisteminde N-H protonunun zayıf asidik özellik gösterdiği bilinir. Yapılan çalışmalarda 10 farklı benzimidazol türevi bileşiğinin pK_a ve HNP değerleri tayin edildi. Benzimidazol türevi bileşiklerinin sulu ortamdaki çözünürlüğü çok az olduğundan susuz ortam çözücüleri tercih edildi. Çözücü olarak amfiprotik ve dipolar aprotik çözücülerden 2-propanol, *N,N*-dimetilformamid, *tert*-butanol, ve asetonytril kullanıldı. Titrasyonda titrant olarak yaygın kullanılan tetrabutyl amonyum hidroksidin (TBAH) 2-propanoldeki çözeltisi kullanıldı.

Sonuçlar çözücülerin dielektrik sabitine göre incelendiğinde, teorik olarak asitlik sıralaması dielektrik sabitinin artmasıyla asitlik sabiti artar. Bu sonuca göre asitlik sabiti artışı ; *N,N*-dimetil formamid (D : 37) > asetonytril (D : 36) > 2-propanol (D : 19,4) > *tert*-butanol (D : 12) şeklindedir. Elde edilen sonuçlar pK_a değerindeki artışa göre (veya asitlikteki azalmaya göre sıralandığında) incelendiğinde; 2., 3. ve 4. bileşiklerde; 2-propanol > *tert*-butanol > asetonytril > *N,N*-dimetil formamid, 1., 7. ve 8. bileşiklerde; 2-propanol > *tert*-butanol > *N,N*-dimetil formamid > asetonytril, 5. ve 10. bileşiklerde; asetonytril > 2-propanol > *tert*-butanol > *N,N*-dimetil formamid, 6. bileşik; 2-propanol > *tert*-butanol = asetonytril > *N,N*-dimetil formamid, 9. bileşik; *tert*-butanol > 2-propanol > *N,N*-dimetil formamid > asetonytril, sıralaması elde edildi. Literatürdeki çalışmalar ile bazı noktalarda paralellik gözlemlendi (Menteşe vd., 2013) .

Dielektrik sabitine göre asitlik kuvvetleri irdelendiğinde amfiprotik çözücülerden 2-propanol ve *tert*-butanol'ün dielektrik sabitleri sırasıyla 19,4 ve 12,0 olan çözücülerdeki benzimidazol türevi bileşiğindeki bileşiklerin asitliklerinin dielektrik sabiti büyük olan çözücüde (2-propanolde) daha fazla olması beklenir. Yapılan çalışmalar sonucunda elde edilen veriler incelendiğinde 1., 2., 3., 4., 6., 7. ve 8. bileşiklerde bu sıralamaya uygun olduğu, 5., 9. ve 10. bileşiklerde ise bu sıralamanın uygun olmadığı görüldü. Daha önceki çalışmalarımızdaki sonuçlar paralelinde sıralanmalar tespit edildi (Menteşe vd., 2012) .

Dipolar aprotik çözücüler incelendiğinde asitlik kuvvetindeki artış *N,N*-dimetil formamid > asetonytril sıralamasında olması beklenirken 1., 7., 8. ve 9. bileşiğin dışındaki bileşiklerin bu sıralamaya uymadığı görüldü.

Bilindiği gibi dipolar aprotik çözücüler liyonyum iyonu verdikleri halde l iyonu vermezler. Moleküler asit HA ve çözücü S olduğunda protofilik (Δ dimetilformamid gibi) çözücülerde denge,



şeklinde dir. Bu dengede protofilik çözücülerde birinci ve ikinci dengeler büyük oranda gerçekleşirken üçüncü denge çok düşük oranda sağa kayar. Üçüncü dengedeki serbest SH^+ ortamda bulunabilecek en kuvvetli asittir ve titrantla doğrudan reaksiyona girebilir. Ancak çözücü protofobik (asetonitril gibi) ise dengesi çok daha düşük oranda sağa kayar. Üçüncü denge ise eser oranda meydana gelir. Böyle protofobik çözücüde meydana gelen SH^+ iyonu, protofilik çözücüde meydana gelenden çok daha kuvvetli asittir. Bu teorik açıklamaya dayanarak çalışılan asitlerin çoğunluğunda (2., 3., 4., 5., 6. ve 10. bileşikler) asetonitril ortamında *N,N*-dimetilformamiddekenden daha asidik olması açıklanabilir. Literatürdeki çalışmalardaki sonuçlar ile bu noktada benzerlik gözlemlendi (İslamoğlu vd., 2011) .

Otoprotoliz sabitine göre incelendiğinde 2-propanol (pKs : 20,6) ortamında, *N,N*-dimetilformamid (pKs : 18,0) ortamında ve *tert*-butanol (pKs : 22,0) ortamında tüm bileşikler zayıf asidik özellik göstermektedir. Asetonitril (pKs : 33,0) ortamında ise 8. bileşik dışındaki tüm bileşikler zayıf asidik özellik göstermektedir.

Farklı çözücülerdeki benzimidazol türevi bileşiklerinin asitlikleri incelendiğinde 1., 2., 3., 4., 6., 7., ve 8. bileşiklerin 2-propanol ortamında, 5. ve 10. bileşiğin asetonitril ortamında, 9. bileşiğin *tert*-butanol ortamında daha asidik özellik göstermişlerdir. 1., 7., 8. ve 9. bileşiklerin asetonitril ortamında, 2., 3., 4., 5., 6., ve 10. bileşiklerin *N,N*-dimetilformamid ortamında zayıf asidik özellik göstermişlerdir.

Fonksiyonel gruplara göre incelendiğinde: R fonksiyonel gruplarının asidik protona olan uzaklığı nedeniyle etkisi çok azdır.

Her bir çözücüye göre bileşikler incelendiğinde asitlik kuvvetinin azalışı 2-propanol ortamında; $2 > 3 > 4 > 1 > 5 > 9 > 8 > 7 > 6 > 10$, *N,N*-dimetilformamid ortamında; $3 > 1 > 2 > 4 > 5 > 8 > 6 > 7 > 9 > 10$, *tert*-butanol ortamında, $4 > 3 > 2 > 1 > 5 > 9 > 8 > 7 > 6 > 10$, asetonitril ortamında, $5 > 4 > 3 > 2 > 1 > 6 > 10 > 9 > 8 > 7$ şeklinde belirlendi. 2-propanol ortamında 2., *N,N*-dimetilformamid ortamında 3., *tert*-butanol ortamında 4. ve asetonitril ortamında 5. bileşik daha asidik özellik gösterirken, 2-propanol, *N,N*-dimetilformamid ve *tert*-butanol ortamında 10. bileşik, asetonitril ortamında ise 7. bileşik daha zayıf asidik özellik gösterdi. Benzer şekilde maddelerin asitliğinin değerlendirilmesi literatürde görülmektedir (İslamoğlu vd., 2011) .

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

Yarı nötralizasyon metoduna göre potansiyometrik yöntemle elde edilen deneysel sonuçları teorik sonuçlar ile karşılaştırdığımızda aşağıdaki tabloda verilen % hata değerleri elde edildi.

Tablo 41. Çalışılan on adet yeni benzimidazol türevi bileşiğinin deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması ve % hata değerleri

Bileşik	Çözücü	pKa (Deneysel)	pKa (Teorik)	% Hata
1	2-Propanol	13,03	12,08	7,29
	<i>N,N</i> -Dimetilformamid	14,03	16,35	-16,54
	<i>Tert</i> -Butanol	13,63	13,70	-0,51
	Asetonitril	14,44	15,29	-5,89
2	2-Propanol	12,44	12,10	2,73
	<i>N,N</i> -Dimetilformamid	14,05	16,37	-16,51
	<i>Tert</i> -Butanol	13,37	13,72	-2,62
	Asetonitril	14,04	15,32	-9,12
3	2-Propanol	12,91	12,10	6,27
	<i>N,N</i> -Dimetilformamid	13,82	16,38	-18,52
	<i>Tert</i> -Butanol	13,32	13,73	-3,08
	Asetonitril	13,65	15,32	-12,23
4	2-Propanol	12,92	12,28	4,95
	<i>N,N</i> -Dimetilformamid	14,09	16,55	-17,46
	<i>Tert</i> -Butanol	12,98	13,90	-7,09
	Asetonitril	13,39	15,50	-15,76
5	2-Propanol	13,57	12,29	9,43
	<i>N,N</i> -Dimetilformamid	14,54	16,56	-13,89
	<i>Tert</i> -Butanol	14,14	13,92	1,56
	Asetonitril	13,28	15,51	-16,79

Bileşik	Çözücü	pKa (Deneysel)	pKa (Teorik)	% Hata
6	2-Propanol	15,19	13,23	12,90
	<i>N,N</i> -Dimetilformamid	15,40	17,50	-13,64
	<i>Tert</i> -Butanol	15,30	14,86	2,88
	Asetonitril	15,30	16,45	-7,52
7	2-Propanol	14,59	13,26	9,12
	<i>N,N</i> -Dimetilformamid	15,47	17,52	-13,25
	<i>Tert</i> -Butanol	14,73	14,88	-1,02
	Asetonitril	16,32	16,48	-0,98
8	2-Propanol	14,39	13,26	7,85
	<i>N,N</i> -Dimetilformamid	14,93	17,52	-17,35
	<i>Tert</i> -Butanol	14,49	14,88	-2,69
	Asetonitril	16,52	16,48	0,24
9	2-Propanol	14,29	13,44	5,95
	<i>N,N</i> -Dimetilformamid	15,77	17,70	-12,24
	<i>Tert</i> -Butanol	14,20	15,06	-6,06
	Asetonitril	16,16	16,66	-3,09
10	2-Propanol	15,82	13,44	15,04
	<i>N,N</i> -Dimetilformamid	16,42	17,72	-7,92
	<i>Tert</i> -Butanol	16,31	15,08	7,54
	Asetonitril	15,50	16,67	-7,55

Yukarıda ki tablodan da görüldüğü gibi, deneysel sonuçlar ile teorik değerler arasında çok büyük farklar elde edilmemiştir. En düşük hata yüzdesi asetonitril ortamında 8. bileşikte % 0,24 iken en büyük hata yüzdesi *N,N*-dimetilformamid ortamında 3. bileşikte -% 18,52 olarak hesaplanmıştır. Hesaplanan % hata değerlerinin % 30' u % 5' in altında, % 35' i % 10' un altında, % 15' i % 15' in altında ve % 20'si % 20' nin altında olduğu belirlenmiştir.

5. ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında on adet yeni benzimidazol türevi bileşiğinin asitlik sabitleri incelendi. Önerilen bu çalışmaların yanında farklı susuz ortam çözücülerinde ve çözücü karışımlarında asitlik özellikleri incelenebilir. Ayrıca çalışmalar sırasında bazı bileşiklerde görülen indikatör özellikleri incelenebilir ve bu bileşiklerin kompleks kararlılık sabitleri belirlenebilir.

6. KAYNAKLAR

- Albert, A. and Serjant, E.P., 1984.** The Determination of Ionization Constants. Champan and Hall, Third Edition.
- Bahçeci, Ş., Yüksek, H., Ocak, Z., Azaklı, İ., Alkan, M. and Özdemir, M., 2002.** Synthesis and Potentiometric Titrations of Some New 4-(benzylideneamino)-4,5-Dihydro-1H-1,2,4-Triazol-5-On Derivates in Non-Aqueous Media, Collection of Czechoslovak Chemical Communications, 67 (8) (2002) 1215-1222.
- Bahçeci, Ş., Yüksek, H., Ocak, Z., Köksal, C. and Özdemir, M., 2002.** Synthesis Non-Aqueous Medium Titrations of Some New 4,5- Dihydro- 1H-1,2,4-Triazol On Derivates, Acta Chimica Slovenica, 49 (2002) 783-784.
- Berkem, A.R., Baykut, S. and Berkem, M., 1994.** Fizikokimya. İst. Üniv. Yayınları,. No:3628, Cilt 2s.673.
- E, Berçin. and Uysal, M.G., 1996.** The Products of Michael type Addition 2 Mercaptomethylbenzimidazole on the Derivatives of Nitrostyrenes and Their Structure Elucidation. J. Fac. Pharm, Gazi 13(1), 33-44 .
- Fırat, Z ., 2010.** “Bazı süstitüe 1-metilimidazol türevlerinin asitlik-bazlık davranışları üzerine teorik çalışmalar”. Yüksek Lisans Tezi. Eskişehir Osmangazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalı Analitik Kimya Bilim Dalı, Eskişehir, Türkiye, 97 sayfa.
- Gülmez, Ç., 2008.** “Antimikrobiyal etkili s-(1-fenil-2-metil-2-nitroetil)-l-sistein türevlerinin asitlik sabitlerinin deneysel yöntemlerle belirlenmesi ve teorik değerler ile karşılaştırılması“. Yüksek Lisans Tezi. Erciyes Üniversitesi, Sağlık Bilimleri Enstitüsü, Eczacılık Bölümü, Kayseri, Türkiye.
- Gündüz, N., Gündüz, T. and Havyalı, M., 1999.** Titrations in Non-Aqueous Media: Potentiometric Investigation of Symmetrical and Unsymmetrical Tetra-Aryl Porphyrins With 4-Nitrophenyl and 4-Aminophenyl Substituents in Nitrobenzene Solvent, Talanta, 48 (1999) 71-79.
- Gündüz, T., 1988.** Susuz Ortam Reaksiyonları. Gazi Büro Kitabevi Tic. Ltd. Şti. Birinci Baskı.
- Gündüz, T., Gündüz, N., Kılıç, E. and Kenar, A., 1986.** Part IV. Solvent Effects On Basicity Of Aliphatic Amines, Analyst, 111 (1986) 1345-1347.
- Gündüz, T., Gündüz, N., Kılıç, E., Köseoğlu, F. and Öztaş, S,G ., 1988.** Part X. Potentiometric And Conductometric Titrations of Amino Acids With Tetrabutylammonium Hydroxide In Pyridine And Acetonitrile Solvents, Analyst, 113 (1988) 715-719.

- Gündüz, T., Kılıç, E., Köseoğlu, F. and Öztaş, S.G., 1988.** Part XIII. Potentiometric and Conductometric Titrations of α - Amino Acids with Perchloric Acid in Acetic Acid and Acetonitrile–Acetic Acid Solvents, Analyst, 113 (1988) 1313-1316.
- Gündüz, T. and Yılmaz, S., 1994.** Potentiometric Determination of Urea With Perchloric Acid In Acetic Anhydride, Talanta, 41 (1994) 1471-1474.
- İslamoğlu, F. and Kahveci, B., 2011.** Determination of the pKa of Some Triazole Derivatives by the Potentiometric Method in Dioxan-Water Mixtures, Oriental Journal of Chemistry, 27(4), 1451-1456.
- İslamoğlu, F., Yüksek, H. and Özdemir, M., 2011.** “Acidic Properties of Some 1,2,4-Triazole Derivatives in Non-aqueous Media”, Der Chemica Sinica, 2(3), 117-124.
- Keskin, H., 1983.** Analitik Kimya ve Kimya Problemleri. Okan Dağıtımçılık-Yayıncılık Ltd. Sti., İstanbul.
- Kılıç, E. and Gündüz, T., 1986.** Part I. Determination of Factors Influencing The Basicity of Schiff Bases in Nitrobenzene Solvent, Analyst, 111-949-952.
- Kılıç, E., Köseoğlu, F. and Başgut, Ö., 1994.** Protonation Constants of Some Pyridine Derivates in Ethanol-Water Mixtures, Analytica Chimica Acta, 294 (1994) 215-220.
- Menteşe, E., İslamoğlu, F., Bal, E. and Kahveci, B., 2010.** Microwave Assisted Synthesize of New Some Benzimidazole Derivatives and Determination of Protonation Constant of These Compounds in Non-Aqueous Media, European Journal of Chemistry, 4(1), 25-28 .
- Menteşe, E., İslamoğlu, F. and Kahveci, B., 2012.** Microwave-Assisted Synthesis of Some New Benzylidenamino Compounds and Potentiometric Determination of Their pKa , Revue Roumaine De Chimie, 57(11), 907-913.
- Perrin, D.D., Dempsey, B. and Serjeant, E.P., 1981.** pKa Prediction for Organic Acids and Bases . Champan and Hall.
- Savcı, H. ve Sahin, M., 1998.** Genel Kimya. Marmara Üniversitesi Yayınlan, Yayın No: 568, s. 351.
- Yüksek, H., Alkan, M., Ocak, Z., Bahçeci, Ş., Ocak, M. and Özdemir, M., 2004.** “Synthesis and Acidic Properties of Some New Potential Biologically active 4-Acylamino-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one Derivatives” . Indian J. of Chem., 43B, 1527- 1531 .

Yüksek, H., Bahçeci, Ş., Ocak, Z., Köksal, C. and Özdemir, M., 2002. Synthesis and Potentiometric Titration of New 4,5-Dihydro-1H-1,2,4-Triazol-5-one Derivates in Non-Aqueous Media, Mustafa Kemal University International Organic Chemistry Meeting, Hatay. 25-28 Mart 2002, Book of Abstracts, 66.

Yüksek, H., Ocak, Z., Alkan, M., Bahçeci, Ş., Özdemir, M., 2004. "Synthesis and Determination of pK_a Values of Some New 3,4-Disubstituted-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-5-one Derivatives in Non-aqueous solvents" Molecules, 9, 232-240 .

ÖZGEÇMİŞ

13.10.1984 tarihinde RİZE’ de doğdu. İlköğretimini İstanbul Beyoğlu Kaptanpaşa İlköğretim Okulunda, ortaöğretimini İstanbul Beyoğlu Orbay Orta Okulunda, liseyi İstanbul Beyoğlu Hasköy Güner Akın Yabancı Dil Programlı Lisesinde tamamladı. 2004 yılında Karadeniz Teknik Üniversitesi Rize Fen Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümüne yerleşti. 2006 yılında İstanbul Beyoğlu Kızılay’ da Biyokimya Labaratuvarında stajyer öğrenci olarak görev aldı. 2008 yılında lisans eğitimini tamamladı. 2008 yılında İstanbul Beyoğlu Özel Hazerfen Dershanesinde Fen Bilgisi ve Teknolojisi dersinde öğretmenlik yaptı. 2011 yılında TC. Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalında Tezli Yüksek Lisans eğitimine başladı.