

T.C.
VAN YÜZÜNCÜ YIL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
KİMYA ANABİLİM DALI

**TETRAHİDRO PİRİMİDİN TÜREVİ BİLEŞİKLERİN ELEKTRONİK
ÖZELLİKLERİNİN BELİRLENMESİ VE KOROZYON ÖNLEYİCİ OLARAK
KULLANILABİLİRLİĞİNİN ARAŞTIRILMASI**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

HAZIRLAYAN: Murat OKAY
DANIŞMAN: Prof. Dr. Esvet AKBAŞ

VAN-2020

T.C.
VAN YÜZÜNCÜ YIL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
KİMYA ANABİLİM DALI

**TETRAHİDRO PİRİMİDİN TÜREVİ BİLEŞİKLERİN ELEKTRONİK
ÖZELLİKLERİNİN BELİRLENMESİ VE KOROZYON ÖNLEYİCİ OLARAK
KULLANILABİLİRLİĞİNİN ARAŞTIRILMASI**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

HAZIRLAYAN: Murat OKAY

Bu çalışma VYYÜ Bilimsel Araştırma Projeleri Başkanlığı tarafından **FYL-2019-8386 No**'lu proje olarak desteklenmiştir.

VAN-2020

KABUL VE ONAY SAYFASI

Kimya Anabilim Dalı'nda Prof. Dr. Esvet AKBAŞ danışmanlığında, Murat OKAY tarafından sunulan "TETRAHİDRO PİRİMİDİN TÜREVİ BİLEŞİKLERİN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİNİN BELİRLENMESİ VE KOROZYON ÖNLEYİCİ OLARAK KULLANILABİLİRLİĞİNİN ARAŞTIRILMASI" isimli bu çalışma Lisansüstü Eğitim-Öğretim Yönetmeliği'nin ilgili hükümleri gereğince 22/05/2020 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği ile başarılı bulunmuş ve Yüksek Lisans Tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan : Prof. Dr. Esvet AKBAŞ

İmza:

Üye : Doç. Dr. Fatih Çağlar ÇELİKEZEN

İmza:

Üye : Dr. Öğr. Üyesi Erdem ERGAN

İmza:

Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun/...../20 tarih ve sayılı kararı ile onaylanmıştır.



Prof. Dr. Suat ŞENSOY
Enstitü Müdürü

TEZ BİLDİRİMİ

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada bana ait olmayan her türlü ifade ve bilginin kaynağına eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

Murat OKAY

(İmza)



ÖZET

TETRAHİDRO PİRİMİDİN TÜREVİ BİLEŞİKLERİN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİNİN BELİRLENMESİ VE KOROZYON ÖNLEYİCİ OLARAK KULLANILABİLİRLİĞİNİN ARAŞTIRILMASI

OKAY, Murat

Yüksek Lisans Tezi, Kimya Anabilim Dalı

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Esvet AKBAŞ

Haziran 2020, 41 sayfa

Metalik yapıların korozyonu, dünya çapındaki endüstrilerin çoğunda ciddi bir problemdir. Bu problem, metal yüzey üzerine, adsorpsiyon kabiliyetine sahip kimyasalların ilavesiyle kontrol edilebilir. İlgili kimyasallar sayesinde metal, bulunduğu korozif ortamdan izole edilebilir. Bu kimyasallar çoğunlukla işlevsel grup açısından zengin, serbest elektron çiftleri ve/veya π elektronları içeren gruplardan seçilir. Bu çalışmada yapısında eşleşmemiş elektron çiftleri, π elektronları, N, O ve S gibi fonksiyonel gruplar bulunduran pirimidin türevi bileşiklerin elektronik yapıları (HOMO, LUMO, MEP, enerji gap (ΔE), iyonizasyon potansiyeli (I), elektron afinitesi (A), kimyasal sertlik ve yumuşaklığı (S), genel elektrofilik indeksi (ω), iletilen elektron fraksiyon indeksi (ΔN) ve geri kazanım ($\Delta E_{\text{back-donation}}$) özelliklerinin kuantum kimyasal hesaplama yöntemleri ile incelenmesi amaçlanmıştır ve bu doğrultuda seçilen bileşiklerin kuantum kimyasal hesaplama yöntemleri ile demir yüzeyine adsorbe olma yetenekleri ve korozyon önleyici etkileri çalışılmıştır. Bu çalışma ile sentezlenmiş bileşiklerin anti-korozyon malzeme olarak kullanım verimliliği tespit edilerek bu anlamda endüstriye yeni kazanımlar sağlanması hedeflenmiştir.

Anahtar kelimeler: DFT, Elektronik özellikler, Korozyon, Pirimidin.



ABSTRACT

DETERMINATION OF ELECTRONIC PROPERTIES OF TETRAHYDROPYRIMIDINE DERIVATIVES AND INVESTIGATION OF CORROSION PREVENTION

OKAY, Murat
M. Sc. Thesis, Chemistry Science
Supervisor: Prof. Dr. Esvet AKBAŞ
June 2020, 41 Pages

Corrosion of metallic structures is a serious problem in most industries worldwide. This problem can be controlled by the addition of chemicals capable of adsorption onto the metal surface. The metal can be isolated from the corrosive environment. These chemicals are often selected from groups containing free electron pairs and / or π electrons, which are rich in functional groups. In this study, electronic structures (HOMO, LUMO, MEP, energy gap (ΔE), ionization potential (I), electron affinity (A), chemical structure of pyrimidine derivative compounds containing unpaired electron pairs, π electrons, functional groups such as N, O and S hardness and softness (S), general electrophilic index (ω), transmitted electron fraction index (ΔN) and recovery (backEback-donation) properties of quantum chemical calculation methods to investigate the properties of the selected compounds in this direction and adsorbed to the surface with the quantum chemical calculation methods. The aim of this study is to determine the efficiency of synthesized compounds as anti-corrosion materials and to provide new gains to the industry in this sense.

Keywords: DFT, Corrosion, Electronic Features, Pyrimidine.



ÖN SÖZ

Pirimidin türevleri, hem canlı organizmada bulunmaları hemde yapılarındaki aktif hetero atomlardan dolayı sanayide üzerinde çokça çalışılan bileşikler grubu haline gelmiştir. Hem bilimsel hemde sektörel anlamda önem taşıyan bir konuyu bana yüksek lisans tez çalışması olarak öneren ve çalışmalarım esnasında bilgi ve tecrübeleriyle bana her türlü desteği sağlayan danışman hocam, sayın Prof. Dr. Esvet AKBAŞ'a sonsuz teşekkürleri bir borç bilirim.

Tez savunma jürimde yer alan çok değerli hocalarım; Doç. Dr. Fatih Çağlar ÇELİKEZEN ve Dr. Öğr. Üyesi Erdem ERGAN'a katkılarından dolayı çok teşekkür ederim.

Tez çalışmamızı FYL-2019-8386 no'lu proje olarak destekleyen Van Yüzüncü Yıl Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Koordinatörlüğüne (BAP) teşekkür ederim.

2020

Murat OKAY



İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	i
ABSTRACT	iii
ÖN SÖZ.....	v
İÇİNDEKİLER.....	vii
ÇİZELGELER LİSTESİ	xi
ŞEKİLLER LİSTESİ.....	xiii
SİMGELER VE KISALTMALAR	xivii
1. GİRİŞ.....	1
2. KAYNAK BİLDİRİŞLERİ	3
2.1. Genel Bilgiler.....	3
2.2. Pirimidin Bileşiklerinin Genel Sentez Metotları	8
2.2.1. Üre türevi bileşiklerin etilsiyanoasetat türevi bileşiklerle reaksiyonu ile sentezi.....	8
2.2.2. Üreit türevleri ve siyanoasetik asit reaksiyonu ile sentezi.....	9
2.2.3. Üre ve malonik asidin reaksiyonu ile sentezi.....	9
2.2.4. Tiyoüre ile propen-1-on'un reaksiyonu ile sentezi.....	10
2.2.5. 4,4-Dimetoksibutan-2-on bileşiği ile tiyoasetat türevi bileşiklerin reaksiyonu ile sentezi.....	10
2.2.6. Amidin hidroklorür ile etinilkarbonil bileşiklerin reaksiyonu ile sentezi.....	10
2.2.7. Benzamit bileşiklerinin sikloheksankarbonitril reaksiyonu ile sentezi.....	11
2.3. Moleküler Modelleme.....	11
2.3.1. Teorik hesaplama metotları.....	12
2.3.1.1. Hartree Fock (HF).....	13
2.3.1.2. Yoğunluk fonksiyon teorisi (DFT).....	13
2.3.2. Hesaplama Metotları.....	15
2.3.2.1. Gaussian09.....	15
2.3.2.2. Gaussview 5.0.8	16
3. MATERYAL VE YÖNTEM.....	17
3.1. Materyal	17

	Sayfa
3.1.1. Çalışmalarda kullanılan program	17
3.2. Yöntem.....	17
3.2.1. Etil 6-metil-4-(tiofen-2-il)-2-tiokso-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-karboksilat (1a).....	17
3.2.2. Etil 6-metil-4-(piridin-3-il)-2-tiokso-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-karboksilat (1b).....	17
3.2.3. 1-(6-Metil-4-(tiofen-2-il)-2-tiokso-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-il)etanon (1c).....	18
3.2.4. (2-İmino-6-metil-4-(piridin-3-il)-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-il)etanon (1d).....	18
3.2.5. 2-(Asetoksimetil)-6-((5-asetil-6-metil-4-(piridin-3-il)-1,4-dihidropirimidin-2-il)tiyo)-3,4,5-triasetil-β-D-glukopiranosit (2a).....	18
3.2.6. 2-(Asetoksimetil)-6-((5-benzoil-6-fenil-4-(tiofen-2-il)-1,4-dihidropirimidin-2-il)oksi)-3,4,5-triasetil-β-D-glukopiranosid (2b).....	19
3.2.7. 7,7-Dimetil-4-(tiofen-2-il)-2-tiokso-2,3,4,6,7,8-heksahidrokinazolin-5(1 <i>H</i>)-on (3a).....	19
3.2.8. 2-İmino-7,7-dimetil-4-(tiofen-2-il)-2,3,4,6,7,8-heksahidrokinazolin-5 (1 <i>H</i>)-on (3b).....	19
4. BULGULAR	21
4.1. Etil 6-metil-4- (tiofen-2-il) -2-tiokso-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-karboksilat (1a)	21
4.2. Etil 6-metil-4-(piridin-3-il)-2-tiokso-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-karboksilat (1b)	22
4.3. 1-(6-Metil-4-(tiofen-2-il)-2-tiokso-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-il)etanon (1c);.....	24
4.4. 1-(2-İmino-6-metil-4-(piridin-3-il)-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-il)etanon (1d);.....	24
4.5. 2-(Asetoksimetil)-6-((5-asetil-6-metil-4-(piridin-3-il)-1,4-dihidropirimidin-2-il)tiyo)-3,4,5-triasetil-β-D-glukopiranosit (2a);	27
4.6. 2-(Asetoksimetil)-6-((5-benzoil-6-fenil-4-(tiofen-2-il)-1,4-dihidropirimidin-2-il)oksi)-3,4,5-triasetil-β-D-glukopiranosit (2b);	29
4.7. 7,7-Dimetil-4-(tiofen-2-il)-2-tiokso-2,3,4,6,7,8-heksahidrokinazolin-5(1 <i>H</i>)-on (3a)	31
4.8. 2-İmino-7,7-dimetil-4-(tiofen-2-il)-2,3,4,6,7,8-heksahidrokinazolin-5(1 <i>H</i>)-on (3b).....	32
5. TARTIŞMA ve SONUÇ	35
5.1. Moleküler elektrostatik potansiyeller (MEP)	36

	Sayfa
KAYNAKLAR.....	39
ÖZ GEÇMİŞ.....	41



ÇİZELGELER LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.1. Etil 6-metil-4-(tiofen-2-il)-2-tiokso-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-karboksilat (1a); hesaplanan ilgili enerjileri	21
Çizelge 4.2. Etil 6-metil-4-(piridin-3-il)-2-tiokso-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-karboksilat (1b); hesaplanan ilgili enerjileri	23
Çizelge 4.3. 1-(6-Metil-4-(tiofen-2-il)-2-tiokso-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-il) etanon (1c); hesaplanan ilgili enerjileri.....	24
Çizelge 4.4. 1-(2-İmino-6-metil-4-(piridin-3-il)-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-il) etanon (1d); hesaplanan ilgili enerjileri	26
Çizelge 4.5. 2-(Asetoksimetil)-6-((5-asetil-6-metil-4-(piridin-3-il)-1,4-dihidro pirimidin-2-il)tiyo)-3,4,5-triasetil-β-D-glukopiranosit (2a); hesaplanan ilgili enerjileri.....	28
Çizelge 4.6. 2-(Asetoksimetil)-6-((5-benzoil-6-fenil-4-(tiofen-2-il)-1,4-dihidro pirimidin-2-il)oksi)-3,4,5-triasetil-β-D-glukopiranosit (2b); hesaplanan ilgili enerjileri.....	29
Çizelge 4.7. 7,7-Dimetil-4-(tiofen-2-il)-2-tiokso-2,3,4,6,7,8-heksahidrokinazolin-5 (1H)-on (3a); hesaplanan ilgili enerjileri.....	31
Çizelge 4.8. 2-İmino-7,7-dimetil-4-(tiofen-2-il)-2,3,4,6,7,8-heksahidrokinazolin-5 (1H)-on (3b); hesaplanan ilgili enerjileri.....	33



ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Anot reaksiyonu	4
Şekil 2.2. Metal su etkileşimi	4
Şekil 2.3. Katodik olay	4
Şekil 2.4. PİL hücresi	5
Şekil 2.5. Altılı halka sistemlerinden diazin bileşikleri	8
Şekil 2.6. DNA'nın yapısında bulunan pirimidin bileşikleri	8
Şekil 2.7. Üre ve etilsiyanoasetat türevi bileşiklerin kondenzasyon reaksiyonu	9
Şekil 2.8. Üreit türevleri ve siyanoasetik asit reaksiyonu	9
Şekil 2.9. Üre ve malonik asit'in reaksiyonu	9
Şekil 2.10. Tiyöüre ile propen-1-on'un reaksiyonu	10
Şekil 2.11. 4,4-Dimetoksibutan-2-on bileşiği ile tiyoasetat türevi bileşiklerin reaksiyonu	10
Şekil 2.12. Amidin hidroklorür ile etinilkarbonil bileşiklerin reaksiyonu ile sentezi	10
Şekil 2.13. Benzamit bileşiklerinin sikloheksankarbonitril reaksiyonu	11
Şekil 3.1. 1a bileşiğinin yapısı.....	17
Şekil 3.2. 1b bileşiğinin yapısı	17
Şekil 3.3. 1c bileşiğinin yapısı.....	18
Şekil 3.4. 1d bileşiğinin yapısı	18
Şekil 3.5. 2a bileşiğinin yapısı.....	18
Şekil 3.6. 2b bileşiğinin yapısı	19
Şekil 3.7. 3a bileşiğinin yapısı.....	19
Şekil 3.8. 3b bileşiğinin yapısı	19
Şekil 4.1. 1a bileşiğinin yapısı.....	21

Şekil	Sayfa
Şekil 4.2. 1a bileşiğinin yapısı, optimize edilen geometrisi ve HOMO-LUMO gösterimi	21
Şekil 4.3. 1a bileşiğinin elektrostatik potansiyel haritası	22
Şekil 4.4. 1b bileşiğinin yapısı	22
Şekil 4.5. 1b bileşiğinin yapısı, optimize edilen geometrisi ve HOMO-LUMO gösterimi	23
Şekil 4.6. 1b bileşiğinin elektrostatik potansiyel haritası	24
Şekil 4.7. 1c bileşiğinin yapısı.....	24
Şekil 4.8. 1c bileşiğinin yapısı, optimize edilen geometrisi ve HOMO-LUMO gösterimi	25
Şekil 4.9. 1c bileşiğinin elektrostatik potansiyel haritası	25
Şekil 4.10. 1d bileşiğinin yapısı	26
Şekil 4.11. 1d bileşiğinin yapısı, optimize edilen geometrisi ve HOMO-LUMO gösterimi	26
Şekil 4.12. 1d bileşiğinin elektrostatik potansiyel haritası	27
Şekil 4.13. 2a bileşiğinin yapısı.....	27
Şekil 4.14. 2a bileşiğinin yapısı, optimize edilen geometrisi ve HOMO-LUMO gösterimi	28
Şekil 4.15. 2a bileşiğinin elektrostatik potansiyel haritası	29
Şekil 4.16. 2b bileşiğinin yapısı	29
Şekil 4.17. 2b bileşiğinin yapısı, optimize edilen geometrisi ve HOMO-LUMO gösterimi	30
Şekil 4.18. 2b bileşiğinin elektrostatik potansiyel haritası	30
Şekil 4.19. 3a bileşiğinin yapısı.....	31
Şekil 4.20. 3a bileşiğinin yapısı, optimize edilen geometrisi ve HOMO-LUMO gösterimi	31
Şekil 4.21. 3a bileşiğinin elektrostatik potansiyel haritası	32

Şekil	Sayfa
Şekil 4.22. 3b bileşiğinin yapısı	32
Şekil 4.23. 3b bileşiğinin yapısı, optimize edilen geometrisi ve HOMO-LUMO gösterimi	33
Şekil 4.24. 3b bileşiğinin elektrostatik potansiyel haritası	34





SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış bazı simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler

Açıklama

g	Gram
h	Saat
L	Litre
ml	Mililitre
V	Volt
°C	Santigrat Derece Sıcaklığı

Kısaltmalar

Açıklama

μ	Dipol Moment
$^{13}\text{C NMR}$	Karbon nükleer manyetik rezonans
A	Elektron Afinitesi
Ar	Aril
D	Debye
E_{HOMO}	En Yüksek Dolu Moleküler Orbitalin Enerjisi
E_{LUMO}	En Düşük Boş Moleküler Orbitalin Enerjisi
Et	Etil
eV	Elektronvolt
H_2SO_4	Sülfirik Asit
I	İyonizasyon Potansiyeli
MCR	Multikomponent Reaksiyon
MEP	Moleküler Elektrostatik Potansiyel
η	Kimyasal Sertlik
NMR	Nükleer Manyetik Rezonans

Kısaltmalar	Açıklama
Ph	Fenil grubu
S	Kimyasal Yumuşaklık
t	Triplet
TLC	İnce Tabaka Kromatografisi
ΔE	Enerji Farkı
$\Delta E_{\text{back-donation}}$	Geri Kazanım
ΔN	İletilen Elektron Fraksiyon İndeksi
ω	Genel Elektrofilik İndeksi



1. GİRİŞ

Bu tez çalışmasında pirimidin türevi bileşiklerin çeşitli fiziksel parametrelerinin hesaplanması, elektronik karakterlerinin belirlenmesi ve korozyon önleme kapasitelerinin tespit edilmesi hedeflenmiştir.

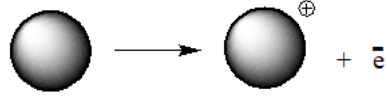
Metalik yapıların korozyonu, metal yüzey üzerine, adsorpsiyon karakteri yüksek kimyasal maddelerin metal yüzeyine tutturulmasıyla, metal bulunduğu korozif ortamdan izole edilerek metalin korozyona uğraması, kontrol altına alınabilir. Konu ile ilgili yapılan çalışmalarda, yapısında N, O ve S gibi fonksiyonel gruplar bulunduran ve serbest elektron çifti veya π elektronları içeren bileşiklerin korozyonu önlemede çok daha aktif oldukları tespit edilmiştir.

Bu lisanüstü tez çalışmasında; yapısında N, O, S eşleşmemiş çift bağlar ve π elektronları bulunduran pirimidin türevi bileşiklerin HOMO, LUMO, MEP, enerji gap " ΔE ", iyonizasyon potansiyeli " T ", elektron afinitesi " A ", kimyasal sertlik " η ", kimyasal yumuşaklığı " S ", elektronegativite (χ), dipolmoment (μ), genel elektrofilik indeksi " ω ", iletilen elektron fraksiyon indeksi " ΔN " ve geri kazanım " $\Delta E_{\text{back-donation}}$ ") gibi elektronik yapıları ve parametreleri kuantum kimyasal hesaplama yöntemleri kullanılarak incelenmiş ve bu değerler üzerinden bu bileşiklerin teorik olarak metal (demir) yüzeyine adsorbe olma yeteneklerinin ve buna bağlı korozyon önleyici etkilerinin araştırılması amaçlanmıştır. Bu çalışmadaki nihai hedef endüstriyel kullanıma uygun, ucuz ve kullanışlı anti-korozyon malzemeler tespit ederek, korozyona karşı mücadeleye katkı sağlamaktır.

2. KAYNAK BİLDİRİŞLERİ

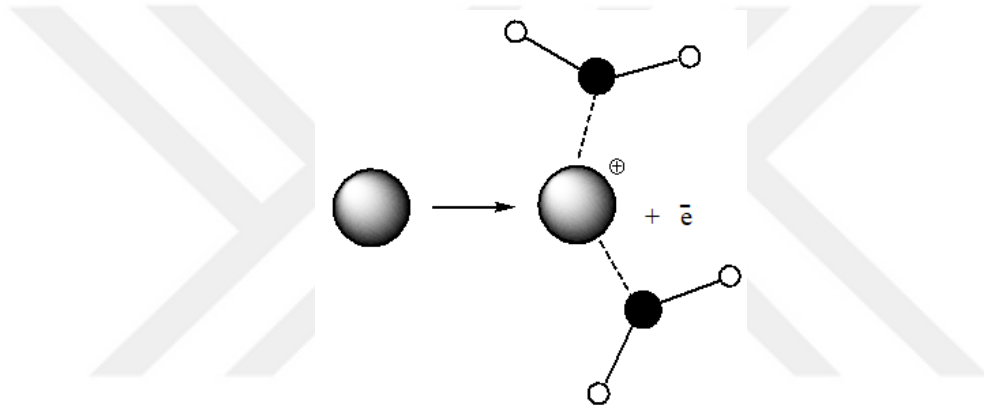
2.1. Genel Bilgiler

Korozyon; metallerin çevreleri ile girdikleri elektrokimyasal reaksiyon sonucu bozunmaya uğrayarak niteliklerini kaybetmesi olarak tanımlanabilir. Korozyonun sebebi, elektronegativitesi düşük olan kararsız haldeki metalin, serbest elektronlarını vererek pozitif iyon oluşturması, elektronları alan elektronegativitesi yüksek olan malzemenin ise negatif iyon oluşturması sonucunda, pozitif iyonlarla negatif iyonlar arasındaki çekim kuvveti ile iyonik bağlı kararlı bir metal bileşiğinin, metalin yüzeyinde bir korozyon ürününe, yani pasa dönüşerek metali tahrip etmesidir. Genel olarak, korozyon için hem oksijen hem de su veya nem gereklidir. Bunlardan birinin olmaması durumunda reaksiyon gerçekleşmez. Çeliğin pasif olmadığı bazı durumlarda oksijen yetersizliğinden dolayı, katodun polarizasyonu ile korozyon akımı sınırlandırılabilir. Anotta akım, katotta eş bir akım olduğu zaman akabilir. Bundan dolayı, anodik bölgede tuz içeriği veya başka bir sebepten dolayı korozyon potansiyeli olsa bile korozyon duracaktır. Bu durumda korozyonun katodik kontrol altında olduğu söylenebilir. Bu durum oksijen girişi olan birimler arasında hiçbir elektriksel bağlantının olmadığı tamamen doymuş hatta deniz suyu ile doymuş izole birimler arasında sıklıkla görülebilmektedir. Islak atmosferde, yeraltında, beton içinde ya da su altında metallerdeki korozyon; bir metalden diğerine, aynı metalin yüzeyinden bir noktadan diğer bir noktaya geçen galvanik akımlarından kaynaklanır. Bu elektrik akımlarının gerçekleşebilmesi için elektrik akımının geçişine izin veren ortamda ıslak bir iletken veya elektrolit olmak zorundadır. Korozyonun görülebilmesi için elektrolitin varlığı vazgeçilmez bir koşuldur. Sulu ortam özellikle de tuzlu su mükemmel bir elektrolittir. Korozyon reaksiyonları, anodik ve katodik reaksiyonların toplamıdır. Bu reaksiyonlarda yükseltgenme reaksiyonu (korozyon) anot yüzeyinde; hidrojen çıkışı ise (indirgenme) katot yüzeyinde meydana gelir. Anot reaksiyonu, sulu ortamdaki metalin elektron kaybederek katyona dönüşmesidir (Şekil 2.1).



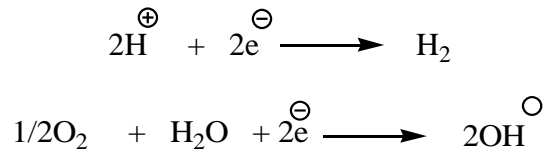
Şekil 2.1. Anot reaksiyonu.

Anodik olay elektron üretir. Bu elektronlar ortamdan uzaklaştırılmazsa veya bu işlem yeterli hızda gerçekleştirilemezse anodik olayın tamamen durması veya yavaşlaması gerekir. Reaksiyon ortamında elektron verebilen su gibi grupların olması durumunda, yüksek enerjiye sahip olan metal iyonları, bu moleküller ile bağ kurarak düşük enerji ve kararlı duruma geçer (Şekil 2.2).



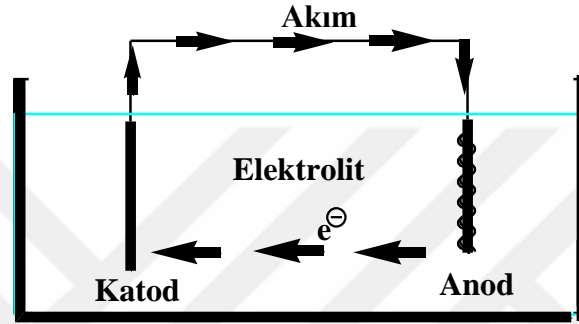
Şekil 2.2. Metal su etkileşimi.

Redüksiyon, yani indirgenme reaksiyonu katotta gerçekleşen bir reaksiyondur. Bu reaksiyon oksidasyonda açığa çıkan elektronların sarf edilerek birikmesini önleyen bir reaksiyondur. Katot reaksiyonları arasında en yaygın olanı, hidrojen gazının açığa çıkması ve oksijen gazının indirgenmesidir. Katodik olayın oluşabilmesi için elektron yüklenebilen iyon veya moleküllerin olması gerekir (Şekil 2.3).



Şekil 2.3. Katodik olay.

Anot reaksiyonunda oluşan metal iyonu, bulunduğu sulu ortam içinde çözülür, dağılır veya çökelen bir korozyon ürünü meydana getirir, böylece anot olan metalde malzeme kaybı oluşur. Korozyonun sürekliliği için katot ve anodun elektriksel akım geçişini sağlayan bir iletkenle bağlı olması ve anotta açığa çıkan elektronların katota iletilmesi gerekir. Elektrik akımının katı içindeki yönü, katottan anota doğrudur; yani elektronların akış yönünün tersidir. Korozyon hızı olarak tanımlanan anodun çözünüm hızı, hücreden geçen akım ile doğru orantılıdır (Şekil 2.4).



Şekil 2.4. Pil hücresi.

Elektrokimyasal işlem anot, katot, elektrolit ve metallik bağlantıdan oluşur. Bu bölümlerin olması durumunda elektrokimyasal korozyon meydana gelir.

a) Anot: Bu kısım korozyonun meydana geldiği bölgedir. Bu kimyasal reaksiyon, bir oksitlenme reaksiyonu olup metalden elektron kaybı sonucu metalin diğer elementle birleşmesidir. Bu metal çelik ise sonuçta malzemede demir pası oluşur.

b) Katot: Bu bölge korozyon hücresinin korunan bölümüdür. Buradaki kimyasal reaksiyon bir azaltma reaksiyonudur.

Anot/Katot ilişkisi; bir elektrokimyasal korozyon hücresinde meydana gelen potansiyele göre, bir elektrot diğer elektroda göre ya anottur veya katottur. Bu elektriksel potansiyel farkı anot ve katot arasındaki potansiyel farkıdır. Elektriksel olarak daha aktif veya daha negatif olan elektrot anot olarak belirlenir. Diğer elektrotta katottur. Katot da oksidasyon reaksiyonuna maruz kalmayıp korunan bölümdür.

c) Elektrolit: Korozyon hücresinin üçüncü bölümüdür. Bu bölümde iyon akışı vardır. Elektrolit hem anoda hemde katota temas eden bir materyaldir ve burada hem anota hemde katota iyon akışı vardır.

d) Metalik Bağlantı: Korozyon hücresinin dördüncü bölümü olup elektriksel devreyi tamamlar ve elektron akışını sağlar.

Metalik bağlantı hem anota hemde katota temas eden ve elektron akışını sağlayan bir metaldir. Bu elektron akışı elektrokimyasal reaksiyon oluştuğunda görülür.

Hemen hemen tüm korozyonlar elektrokimyasal reaksiyonlar olduğundan kimyasal reaksiyonun hızı veya akım akış değeri korozyonun miktarına etki edecektir. Korozyon miktarı üzerindeki etkenler aşağıda belirtilmiştir.

- ✓ Devreden akan akımın değerine etkili olabilecek herhangi bir faktör elektrokimyasal reaksiyon yani korozyon miktarı üzerinde etkilidir.
- ✓ Anotla katot arasındaki potansiyel farkı bir elektro motor kuvvet meydana getirir. Daha büyük miktarda potansiyel farkı veya gerilim daha büyük değerde korozyon potansiyelidir.
- ✓ Elektrolitin direnci normal olarak korozyon miktarının belirlenmesinde önemli bir faktördür. Elektrolit, içinde iyonların hareket ettiği bir malzeme olduğundan direncin değeri de iyonların hareketini belirlemektedir. Direnç akımla ters orantılı olup, bundan dolayı elektrokimyasal hücredeki korozyonla da ters orantılıdır. Eğer elektrolitteki direnç iki katına çıkarsa diğer faktörler aynı kalmak kaydıyla korozyon yarı yarıya azalır.
- ✓ Anot ve katotun elektrolite olan geçiş dirençlerinin etkisi elektrolitik direncinin etkisiyle aynıdır. Düşük dirençlerde yüksek akım yani yüksek miktarda korozyon oluşur.
- ✓ Yapılardaki polarizasyon, elektrot potansiyelinde sonuçta elektrokimyasal akım akışındaki değişmedir ve genellikle polarizasyon filmi adı verilen bir film tabakası oluşumudur. Bu polarizasyon tabakası ve buna bağlı diğer değişimler katot üzerinde faydalı etkiler yapar. Katot üzerindeki hidrojen yayılımı, ilave kaplama gibi etki yaparak, suyu katot yüzeyinden uzaklaştırır, elektrolitteki iyon konsantrasyonunu azaltır, elektrotla elektrolit arasındaki direnç artar.
- ✓ Genellikle sıcaklığın artmasıyla korozyon miktarı artar.
- ✓ Korozyon bir elemanın konsantrasyon etkisine yani, tuzun varlığı, çözünebilir oksijen miktarı, pH derecesi ve sıcaklık gibi çevresel değişikliklere bağlıdır.

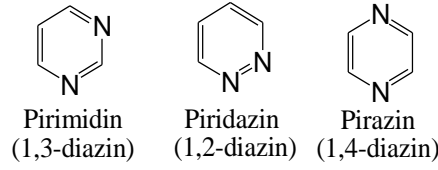
Metalik yapıların korozyon dayanımını arttırmak için çoğunlukla, yapısında heteroatom, serbest elektron çiftleri ve/veya π elektronları bulduran gruplar kullanılmaktadır. Bu bakımdan yapısında eşleşmemiş çift bağlar, π elektronları, N, O veya S heteroatomları bulduran pirimidin türevi bileşiklerin korozyon inhibisyonunda etkili olacağı düşünülmektedir.

Pirimidin halkası bulduran bileşiklerin büyük çoğunluğunun biyolojik aktif bileşikler olması sebebiyle, pirimidin türevleri son yıllarda dikkatle üzerinde durulan önemli heterosiklik bileşikler olmuşlardır. Bu bileşikler, antibakteriyal ve antifungal aktiviteleri sebebiyle önemli heterosiklik bileşikler grubu olarak bilinmektedir (Biginelli, 1893; Varma, 1999; Atwal ve ark., 1989; Rovnyak ve ark., 1992; Cho ve ark., 1989). Sentetik pirimidin türevleri, çok çeşitli farmakolojik özellikleri nedeniyle önemli bileşiklerdir. Pirimidin türevleri antitümör, antikanser, antibakteriyel, pestisit ve herbisit ajanları olarak kullanılmaktadır. Bu türevlerden 4-aril-1,4-dihidropiridinler organik kalsiyum kanal modulatörleri ve hipertansiyon, kalp romatizması gibi kardiyovasküler hastalıklardakullanılmaktadırlar (Foroughifar ve ark., 2003). Yine pirimidin türevi olan pirimido[4,5-*d*]pirimidin-2,5-dion türevleri de sentezlenmiş ve bu bileşikler ile yapılan çalışmalar sonucunda, hücre içi, antibakteriyel ve antifungal aktiviteleri gözlenmiştir. Üzerinde çalışılan pirimidin türevi bileşiklerin büyük çoğunluğu, potansiyel antimikrobiyal aktivite göstermiştir. Ayrıca pirolo[2,3-*d*]pirimidin türevlerinin sentezi ve kolon kanserine karşı aktivitelerinin tespit edilmesi üzerine çalışmalar yapılmıştır. Pirimidin türevi olan pirazolo[3,4-*d*]pirimidin bileşiğinin meme kanserinde antikanser etki gösterdiği gözlenmiştir.

Pirimidin türevi bileşiklere artan ilgi, alternatif katalizörlerin ve birçok sentetik yöntemin gelişmesine neden olmuştur. Bu yöntemlerin başında Biginelli siklokondenzasyon reaksiyonu gelmektedir. Bu reaksiyonda son yıllarda verimi arttıran ve reaksiyon süresini kısaltan, $Mn(OAc)_3 \cdot 2H_2O$, $Cu(OTf)_2$, VCl_3 , $Yb(OTf)_3$ ve $LaCl_3 \cdot 7H_2O$ gibi Lewis asit katalizörleri kullanılmaktadır. Ayrıca polimer destekli, resin-bağlı izotiyoüre, poli(4-vinilpiridin-*co*-divinilbenzen-Cu-II) kompleksi, cerialvinil-pirimidin polimer nanokompozit, *N*-butil-*N,N*-dimetil- α -fenil-etil amonyum bromür ve çeşitli diğer katalizörler de Biginelli reaksiyonunda başarılı bir şekilde kullanılmaktadır (Ergan, 2016).

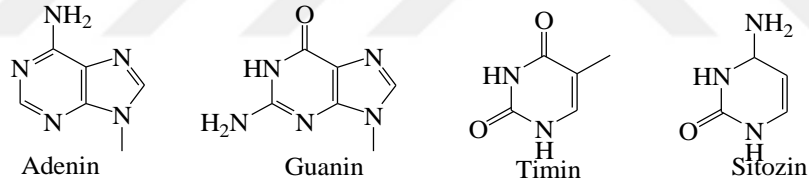
Pirimidinler, özellikle kondanse türevleri halinde doğada canlı organizmalarda yaygın bir şekilde bulunur. Genellikle pirimidin ve pirimidin türevleri 1,3 dikarbonil bileşikleriyle –NCN- yapısında bir bileşikten çıkılarak hazırlanır.

1,3-Konumunda azot bulunduran, altılı halka sistemine sahip diazin bileşiklerinden olan pirimidin, 1,3-diazin olarak da adlandırılır. Pirimidin, 1,2-diazin (piridazin) ve 1,4-diazin (pirazin) bileşikleri birbirlerinin yapı izomerleridir (Şekil 2.5.).



Şekil 2.5. Altılı halka sistemlerinden diazin bileşikleri.

Pirimidinler, özellikle kondanse türevleri halinde doğada canlı organizmalarda yaygın bir şekilde bulunur. Pirimidin bileşiklerinden olan adenin, timin, guanin ve sitozin DNA'nın yapısında bulunmaktadır (Şekil 2.6.).

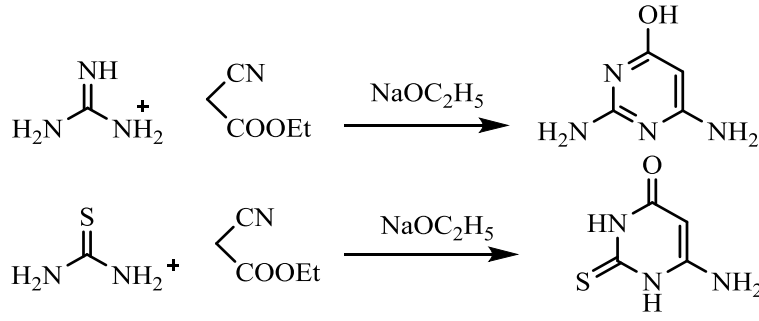


Şekil 2.6. DNA'nın yapısında bulunan pirimidin bileşikleri.

2.2. Pirimidin Bileşiklerinin Genel Sentez Metotları

2.2.1. Üre türevi bileşiklerin etilsiyanoasetat türevi bileşiklerle reaksiyonu ile sentezi

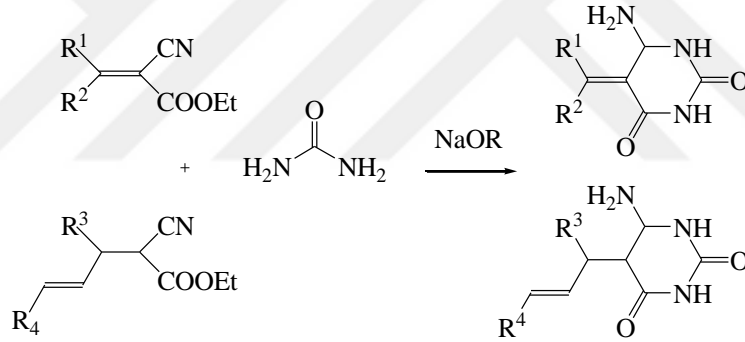
Üre türevleri ile etilsiyanoasetat türevi bileşiklerinkondenzasyon reaksiyonu sonucu pirimidin halkası içeren bileşikler sentezlenebilir (Şekil 2.7.), (West 1961).



Şekil 2.7. Üre ve etilsiyanoasetat türevi bileşiklerin kondenzasyon reaksiyonu.

2.2.2. Üreit türevleri ve siyanoasetik asit reaksiyonu ile sentezi

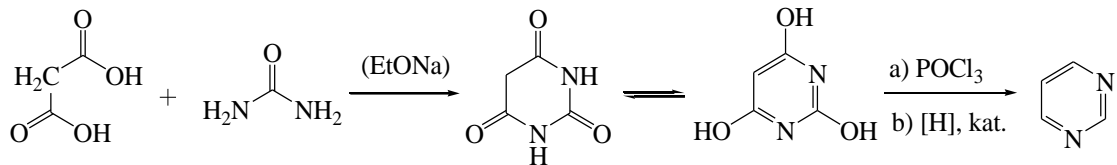
Bazık ortamda üreit türevi bileşiklerle siyanoasetik asit reaksiyona sokulduğunda pirimidin halkası içeren bileşikler elde edilebilir (Şekil 2.8.), (Blicke ve Godt, 1954).



Şekil 2.8. Üreit türevleri ve siyanoasetik asit reaksiyonu.

2.2.3. Üre ve malonik asidin reaksiyonu ile sentezi

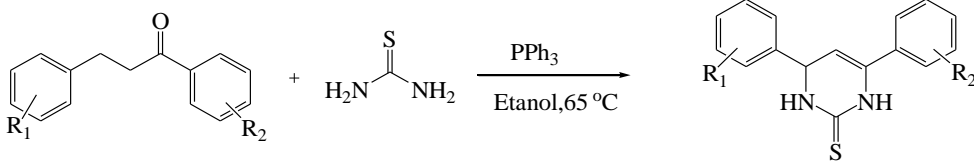
Üre ile malonik asit reaksiyona sokulduğunda pirimidin halkası elde edilebilir (Şekil 2.9.).



Şekil 2.9. Üre ve malonik asit'in reaksiyonu.

2.2.4. Tiyöre ile propen-1-on'un reaksiyonu ile sentezi

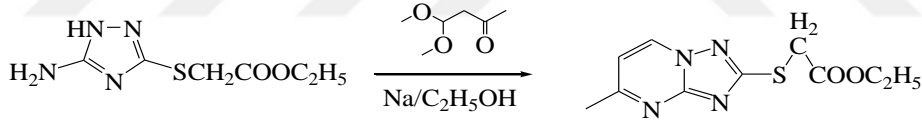
Bu yöntemde verimin yüksek olması nedeniyle fazlaca tercih edilmesine sebep olmaktadır (Şekil 2.10.), (Aswin ve ark., 2014).



Şekil 2.10. Tiyöre ile propen-1-on'un reaksiyonu.

2.2.5. 4,4-Dimetoksibutan-2-on bileşiği ile tiyoasetat türevi bileşiklerin reaksiyonu ile sentezi

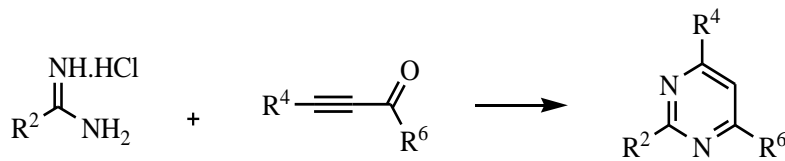
4,4-Dimetoksibütan-2-on bileşiğinin etanoldeki çözeltisi ile 4,4-dimetoksibutan-2-on oda sıcaklığında 24 saat reaksiyona tabi tutulduğunda pirimidin türevi bileşik elde edilir (Şekil 2.11.), (Chen ve ark., 2008).



Şekil 2.11. 4,4-Dimetoksibutan-2-on bileşiği ile tiyoasetat türevi bileşiklerin reaksiyonu.

2.2.6. Amidin hidroklorür ile etinilkarbonil bileşiklerin reaksiyonu ile sentezi

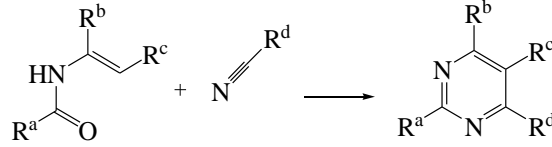
Etinilkarbonil bileşiği amidin hidroklorür tuzu ile reaksiyona sokulduğunda pirimidin türevi bileşiğe dönüşür (Şekil 2.12.), (Bagley ve ark., 2004).



Şekil 2.12. Amidin hidroklorür ile etinilkarbonil bileşiklerin reaksiyonu ile sentezi.

2.2.7. Benzamid bileşiklerinin sikloheksankarbonitril reaksiyonu ile sentezi

Pirimidin türevi bileşikleri direkt elde etmek için, son derece kullanışlı bir yöntemdir (Şekil 2.13.).



Şekil 2.13. Benzamid bileşiklerinin sikloheksankarbonitril reaksiyonu.

2.3. Moleküler Modelleme

Gelişen teknoloji ile birlikte bilgisayar programları kullanarak bileşiklerin üç boyutlu anlamlı moleküler resimlerini modelleyerek görselleştirmek fiziksel ve kimyasal özelliklerini hesaplamak olanaklı hale gelmiştir. Bu yöntem teorik ve/veya deneysel verilere dayanan bilgisayarlı teknik olarak da düşünülebilir. Bu yöntem birçok açıdan yüksek maliyetleri olan deneysel yöntemlere yardımcı ve deney yapmadan moleküllerin elektronik yapıları hakkında önemli bilgiler elde etmede kullanılmaktadır. Bu yöntemin avantajları şu şekilde sıralanabilir:

1. Laboratuvar ortamında yapılan deneylerle öğrenilemeyen moleküler yapılarının üretilmesi, manipülasyonu, hesaplanması ve bununla ilişkili fizikokimyasal ve biyokimyasal özelliklerinin bilgileri elde edilebilir.

2. Belirli bir molekül için deneysel gözlemlerin anlaşılması ve yorumlanmasına yardımcı olur.

3. Maddi olarak ciddi harcamalar gerektiren laboratuvar çalışmalarına başlamadan önce yapılacak deney hakkında çok gerekli bilgilerin elde edilmesini sağlar.

4. Özellikle sentezle ilgili yapılacak bir deneyin gerçekleşip gerçekleşmeyeceği konusunda bir ön bilgi oluşturur.

Moleküllerin davranışını modellemek veya taklit etmek için Schrödinger denkleminin farklı yaklaşımlarla çözülmesi sonucu farklı programlar ortaya çıkmıştır. Bu programlar modelleme için gerekli olan tüm teorik yöntem ve hesaplama tekniklerini kapsar.

Yüksek hızlı bilgisayarlarla çok karmaşık algoritmaları, kuantum mekaniği, moleküler mekanik ve moleküler dinamik simülasyonlarını hesaplamaya dayalı yoğun yöntemler kullanarak bir molekül için fiziksel ve yapısal simülasyonları oluşturmak mümkün hale gelmiştir. Moleküler modelleme; bilgisayar bilimi, organik kimya, fizikokimya, anorganik kimya, biyokimya ve biyofizikte dâhil olmak üzere birçok bilimsel disipline dayanmaktadır. Bu yönüyle moleküler modelleme deneysel araştırmaların vazgeçilmez bir tamamlayıcısı durumundadır. Moleküler modellemenin temel amacı; titreşim, büküm ve dönme hareketleri gibi atomların ve molekülün dinamik davranışlarını ve diğer moleküllerle etkileşimlerini keşfetmek ve rasyonel biyolojik ve klinik kullanımı olan molekülleri teorik olarak tasarlamak olarak tanımlanabilir.

2.3.1. Teorik hesaplama metotları

Molekülün üç boyutlu yapısını incelemek için moleküler modelleme teknikleri kullanılmaktadır. Hesaplama metotları, kullanılan matematiksel işlemlerin farklılığına ve moleküllerin yapılarına bağlı olarak kuantum mekanik ve moleküler mekanik hesaplama metodları olarak ikiye ayrılır.

a) Moleküler mekaniksel metot; bu metotta moleküllerin özellikleri, moleküllerin yapıları, atomlar arasındaki etkileşimler ve spektroskopik bilgileri elde edebilmek için temel klasik fizik yasaları kullanılır. Bazı bilgisayar programlarında kullanılan MM+, AMBER, BIO+, OPLS gibi birçok moleküler mekanik metodu mevcuttur.

b) Kuantum mekaniksel metot; bu metot, hesaplamaların kaynağı olarak temel kuantum mekaniği yasalarını kullanır. Kuantum mekaniği, molekülün enerjisinin ve diğer özelliklerinin Schrödinger Denkleminin çözülmesiyle elde edileceğini söyler. Aslında Schrödinger Denkleminin çok küçük sistemler için çözümü bile pratik değildir. Bu yüzden kuantum mekaniksel metodlarda çözüme matematiksel yaklaşımlarla ulaşılır. Bu metodlar: Yarı deneysel ve ab initio olmak üzere iki genel grup altında incelenir. Yarı deneysel (semi empirical) metodlar hesaplamayı kolaylaştırmak için deneysel verilerden türetilmiş parametreleri kullanır. Araştırılmak istenen moleküler sistem için elde edilebilir, Schrödinger Denkleminin yaklaşım formunu çözerler. Yarı

deneysel hesaplamalar moleküler sistemlerin yapıları ve enerjileriyle ilgili olarak nitel tahminler sağlar. AM1, MINDO/3 ve PM3 gibi bazı yarı deneysel metotlar vardır. Ab initio metod ile yapılan hesaplamalarda deneysel veri kullanılmaz. Bunun yerine bütün hesaplamalar tamamen kuantum mekanik yasaları ve çok az sayıda fiziksel sabit kullanılarak yapılır (ışık hızı, Planck sabiti, elektron yükü, çekirdek yükü). Ab initio hesaplamaları daha geniş bir moleküler sistem aralığı için yüksek kalitede nicel tahminler sağlar. Ab initio hesaplamalarında iki farklı matematiksel yaklaşım kullanılır; Hartree-Fock (HF) ve Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT).

2.3.1.1. Hartree fock (HF)

Enerjinin açık ifadesi moleküler dalga fonksiyonu ye bağlı ise bu model Hartree-Fock modeli olarak bilinir ve model korelasyon eğrisini dikkate almaz. HF modelinde, elektron-elektron etkileşimleri için ortalama bir potansiyel temel alınır. Bu metot, molekül frekanslarının hesaplanması ve molekül geometrisinin tayini için uygundur. Hartree-Fock hesaplamalarında molekülün dalga fonksiyonu, temel fonksiyonlarından yararlanarak oluşturulur. Schrödinger dalga denklemi çözülür ve enerji özdeğeri bulunur. Varyasyon yöntemi kullanılarak enerji minimize edilir ve en uygun enerji özdeğerleri ve frekansları saptanır. Bu hesaplamaları Hartree-Fock SCF (Self Consistent Field) teorisi yardımıyla gerçekleştirebiliriz. Hartree-Fock hesaplamalarında merkezi alan yaklaşıklığı kullanılır. Merkezi alan yaklaşıklığında Coulomb elektron-elektron itmesi ilk başta hesaplara dahil edilmez ve bu itmenin net etkisi daha sonra düzeltme olarak hesaba katılır. Bu metodun ardındaki varsayım şudur: Herhangi bir elektronun, kendisinin dışındaki tüm elektronların ve çekirdeğin oluşturacağı ortalama küresel potansiyel alanı içinde hareket edeceği kabul edilir.

2.3.1.2. Yoğunluk fonksiyon teorisi (DFT)

DFT modelinde ise enerjinin açık ifadesi molekül dalga fonksiyonları yerine, elektron yoğunluğuna bağlıdır. Bu metot, molekül özelliklerinin tayininde çok daha doğru sonuçlar verir. 1998 yılında kimya bilim alanında Nobel ödülünü kazanmış olan Walter Kohn, 1964 yılında P. Hohenberg ile yapmış olduğu bir çalışmada, çok cisimli

dalga fonksiyonunun varyasyonel bir yaklaşıklık içerisinde temel bir değişken olarak alınmasının problemi oldukça güçleştirdiğini öne sürerek onun yerine, yer ve zamanın bir fonksiyonu olan elektron yoğunluğunu temel bir değişken olarak almıştır. Böylece, çok cisimli sistemin Schrödinger denkleminin yaklaşık bir çözümünün elde edilmesinde yararlanılan bir yöntem olan Yoğunluk Fonksiyonel Teorisinin (DFT) 1950'li yıllarda Thomas-Fermi-Dirac'ın modeli ve Slater'ın kuantum kimyasındaki temel çalışmalarıyla üretilmiştir. 1970'lerde katı hal hesaplamaları için kullanılan popüler bir metottu. Kuantum kimyasında 1990'lara kadar yeteri derecede doğru bir metot olarak kabul edilmedi. Bugünlerde ise DFT hem katı halde hem de kuantum kimyası alanında yaygın bir şekilde kullanılan bir metottur. Ancak bu metot molekülün sadece temel hal özelliklerini hesaplamakta, uyarılmış hallerdeki özelliklerini hesaplamamaktadır. Bununla beraber, özellikle çok atomlu moleküller üzerinde geniş temel setli kesin hesaplamaları yapma zorluğu gibi sınırlamalara sahiptir. DFT'nin dayandığı temel düşünce molekülün enerjisinin dalga fonksiyonu yerine elektron yoğunluğu kullanılarak belirlenebileceğidir. Hohenberg ve Kohn' un bunun mümkün olduğunu ortaya koymasından sonra bu teori geliştirilmiştir. Orijinal teorem molekülün temel hal enerjisini bulmaya yöneliktir. Bu teoremin pratik uygulaması Hartree-Fock'a benzer bir yapıda metodu formüle eden Kohn ve Sham tarafından geliştirildi. Bu formülasyonda, matematiksel olarak HF orbitallerine benzer bir şekilde, elektron yoğunluğu taban fonksiyonlarının lineer kombinasyonları şeklinde ifade edildi. Bu fonksiyonlardan oluşan determinant Kohn-Sham orbitalleri olarak adlandırılır. Bu orbital determinantından elektron yoğunluğu elde edilir ve buradan da enerji hesaplanır. Yarım-spinli parçacıklardan oluşan sistemlerin antisimetrik dalga fonksiyonlarından kaynaklanan elektron yoğunluklarına sahiptirler. Bundan dolayı bu işlemin yapılması gereklidir. Kohn-Sham orbitallerinin fiziksel yorumlanması konusunda tartışma vardır. DFT metotlarının üstünlüğü elektron korelasyonlarının hesaplamalara katılması ve elde edilen sonuçların deney sonuçlarıyla daha iyi bir uyum içinde olmasıdır. Ayrıca daha az hesaplama gerektirmektedir. DFT varyasyonel bir metottur. DFT yöntemindeki fonksiyonlardan bazıları BP86 (Becke ve Perdew), BLYP (Becke, Lee, Yang ve Parr) ve BLYP nin modifikasyonu ile oluşan B3LYP dir.

2.3.2. Hesaplama metodları

2.3.2.1. Gaussian09

Bu çalışmada Gaussian 09 paket programı kullanılmıştır. Gaussian 09 programı Gauss serisinin ürünlerindedir. Gauss, teorik ve yoğunluk fonksiyoneli hesaplamaları için en yaygın kullanılan programdır ve yarı ampirik hesaplamalar da yapabilir. Gauss'un ilk sürümü 1970 yılında ortaya çıktı ve Gaussian 09, 2009 yılında ortaya çıktı. Gauss, John Pople ve arkadaşları tarafından geliştirildi ve kuantum-kimyasal hesaplamaların kimyacılar tarafından kullanımının artmasında önemli bir etkisi olmuştur. Hemen hemen mevcut her kuantum- mekanik yöntem ile yapılabilen birçok hesaplama için olanak sağlayan kullanımı kolay olan bir programdır.

Gaussian09, kuantum mekaniğinin temel yasalarından yola çıkarak, bileşiklerin ve reaksiyonların moleküler özelliklerini, moleküler yapılarını, titreşim frekanslarını çok çeşitli kimyasal ortamlarda önceden tahmin edebilmemize olanak sağlar.

Optimum geometriyi teorik olarak bulmak için minimum enerji dizilişini bulmak amacıyla bağ uzunluklarını, bağ açılarını ve dihedral açıları değiştirerek çekirdeklerin pek çok değişik dizilişi için moleküler dalga fonksiyonu ve elektronik enerji hesaplanır. Geometrik optimizasyon hesabı, bir enerji minimumunun bulunduğu gösteren gradyanın büyüklüğü sıfıra yakın olana kadar devam eder. Titreşim frekansı hesaplamasında program moleküler titreşim frekanslarını hesaplar. Titreşim frekansı hesabı, geometri optimizasyonunu izlemelidir. Çünkü enerji minimumda bulunmayan bir geometri için titreşim frekansı hesaplamak gereksizdir.

Büyük moleküllerin geometrik optimizasyon hesapları yüksek seviye yöntemlerle yapıldığından oldukça çok zaman alan işlemlerdir. Büyük moleküller, global minimumu ve enerjileri, oldukça büyük moleküllerin sahip olabileceği kadar düşük lokal minimumları bulmayı zorlaştıran, çok sayıda konformere sahip olabilir. Amacı düşük enerjili konformeri bulmak olan konformasyonel tarama için birçok özel yöntem vardır. Söz konusu konformerin sayısının çok büyük olması nedeniyle, büyük moleküllerle yapılan konformasyonel taramadaki enerji hesaplamaları genellikle moleküler mekanik yöntemiyle yapılır.

2.3.2.2.Gaussview 5.0.8

Gaussview 5.0.8 Gaussian paket programları için giriş (input) dosyaları hazırlamak ve gaussian çıktılarını görselleştirmek için hazırlanmış bir grafik ara yüzüdür. Gaussview molekülleri görsel hale getirir onları istediğimiz gibi döndürmemize, hareket ettirmemize ve moleküllerde değişiklik yapmamıza olanak sağlar. Ayrıca karmaşık hesaplamalar için dahi kolaylıkla giriş dosyaları hazırlamamızı sağlar. Gaussian programı tarafından hesaplanan sonuçları grafiksel olarak incelememizi sağlar. Bu sonuçlar; optimize edilmiş moleküler yapılar, moleküler orbitaller, elektrostatik potansiyel yüzeyi, atomik yükler, IR, Raman, NMR, VCD spektrumları, titreşim frekanslarına bağlı normal mod animasyonları gibi sıralanabilir.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1. Materyal

3.1.1. Çalışmalarda kullanılan program

Çalışmalarda kullanılan program aşağıda verilmiştir.

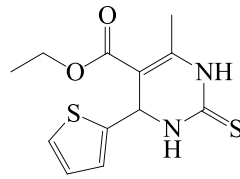
- Gaussian 9.0 paket program.

3.2. Yöntem

Tez çalışmalarındaki tüm Pirimidin türevlerinin 3D geometrileri ve elektronik yapıları Gaussian09W yazılım programında B3LYP/6-31G (d,p) seviyesinde Yoğunluk Fonksiyon Teorisi “Density Functional Theory”(DFT) kullanılarak optimize edildi.

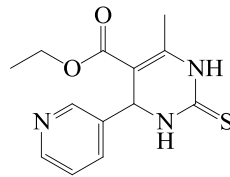
Aşağıda ismi ve formülü verilen bileşikler Salem ve ark., (2019) tarafından verilen prosedüre göre alındı.

3.2.1. Etil 6-metil-4-(tiofen-2-il)-2-tiokso-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-karboksilat (1a)



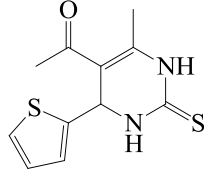
Şekil 3.1. 1a bileşiğinin yapısı.

3.2.2. Etil 6-metil-4-(piridin-3-il)-2-tiokso-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-karboksilat (1b)



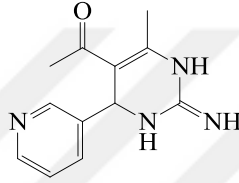
Şekil 3.2. 1b bileşiğinin yapısı.

3.2.3. 1-(6-Metil-4-(tiofen-2-il)-2-tiokso-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-il)etanon (1c)



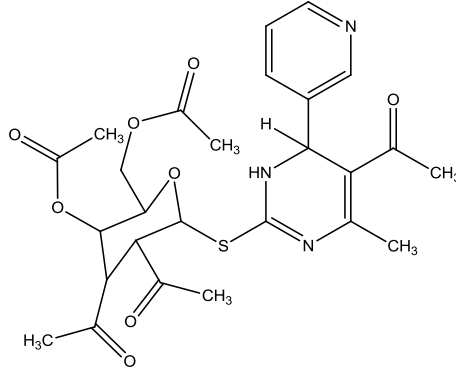
Şekil 3.3. 1c bileşiğinin yapısı.

3.2.4. (2-İmino-6-metil-4-(piridin-3-il)-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-il)etanon (1d)



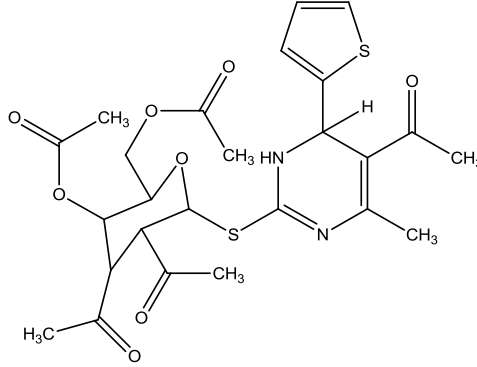
Şekil 3.4. 1d bileşiğinin yapısı.

3.2.5. 2-(Asetoksimetil)-6-((5-asetil-6-metil-4-(piridin-3-il)-1,4-dihidropirimidin-2-il)tiyo)-3,4,5-triasetil-β-D-glukopiranosit (2a)



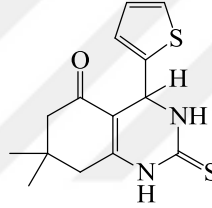
Şekil 3.5. 2a bileşiğinin yapısı.

3.2.6. 2-(Asetoksimetil)-6-((5-benzoil-6-fenil-4-(tiofen-2-il)-1,4-dihidropirimidin-2-il)oksi)-3,4,5-triasetil-β-D-glukopiranosid (2b)



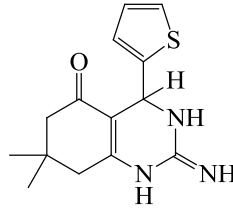
Şekil 3.6. 2b bileşiğinin yapısı.

3.2.7. 7,7-Dimetil-4-(tiofen-2-il)-2-tiokso-2,3,4,6,7,8-heksahidrokinazolin-5(1H)-on (3a)



Şekil 3.7. 3a bileşiğinin yapısı.

3.2.8. 2-İmino-7,7-dimetil-4-(tiofen-2-il)-2,3,4,6,7,8-heksahidrokinazolin-5 (1H)-on (3b)



Şekil 3.8. 3b bileşiğinin yapısı.

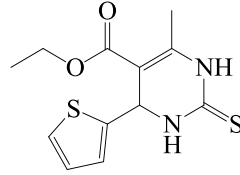
Tüm bu bileşikler, DFT yöntemi kullanılarak B3LYP/6-31G (d, p) seviyesinde, optimize edildi ve tüm enerji hesaplamaları yapıldı. Bu hesaplamalar ile bileşikler hakkında bazı yapısal ve fizikokimyasal bilgiler elde edildi. Hesaplamalar sonucunda en yüksek dolu moleküler orbital (E_{HOMO}), en düşük boş moleküler orbital (E_{LUMO}) ve bu

orbitaller arasındaki enerji farkları (ΔE) hesaplandı. Diğer taraftan bileşiklerin MEP, enerji farkı (ΔE), iyonizasyon potansiyeli (I), elektron afinitesi (A), kimyasal sertlik ve yumuşaklığı (S), genel elektrofilik indeksi (ω), iletilen elektron fraksiyon indeksi (ΔN) ve geri kazanım ($\Delta E_{\text{back-donation}}$) özelliklerinin kuantum kimyasal hesaplama yöntemleri ile incelendi. Bu doğrultuda seçilen bileşiklerin kuantum kimyasal hesaplama yöntemleri ile demir yüzeyine adsorbe olma yetenekleri ve korozyon önleyici etkileri çalışıldı.



4. BULGULAR

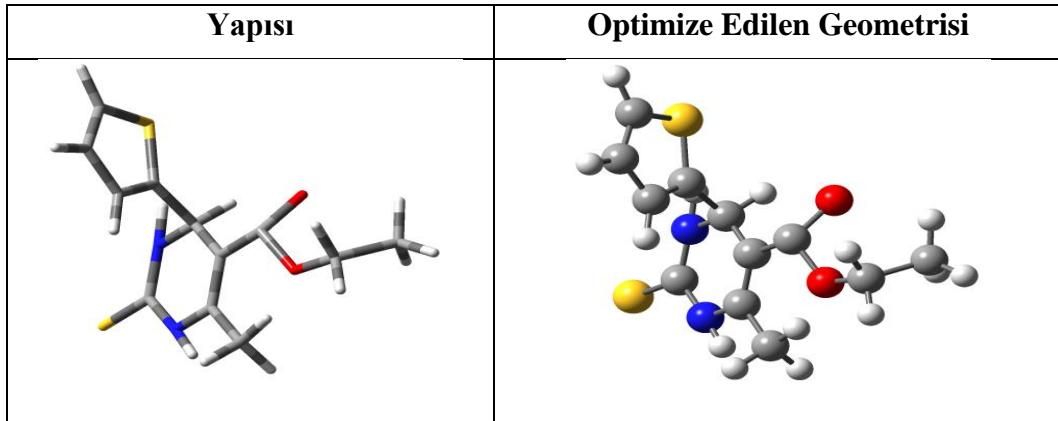
4.1. Etil 6-metil-4-(tiofen-2-il)-2-tiokso-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-karboksilat (1a)



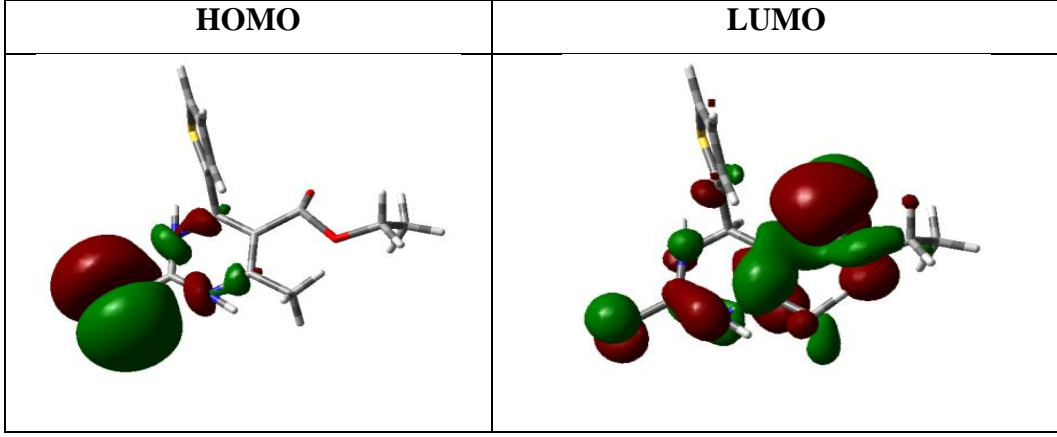
Şekil 4.1. 1a bileşiğinin yapısı.

Çizelge 4.1. Etil 6-metil-4-(tiofen-2-il)-2-tiokso-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-karboksilat (1a); hesaplanan ilgili enerjileri

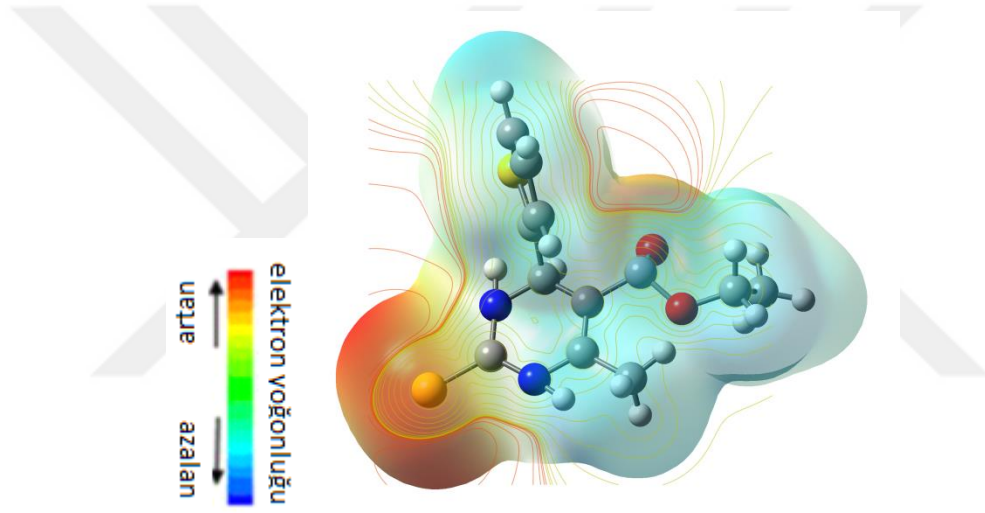
Parametreler	1a
$E_{\text{HOMO}}(\text{Ev})$	-5.2995
$E_{\text{LUMO}}(\text{Ev})$	-3.2518
$\Delta E(\text{Ev})$	2.0477
İyonizasyon potansiyeli (I)	5.2995
Elektron afinitesi (A)	3.2518
Kimyasal sertlik (η)	2.0477
Kimyasal yumuşaklık (S)	0.4884
Elektronegativite (χ)	6.9254
Dipolmoment (μ)	7.7544
Genel elektrofilik indeksi (ω)	14.6825
İletilen elektron fraksiyon indeksi (ΔN)	0.0182
Geri kazanım ($\Delta E_{\text{back-donation}}$)	-0.5119



Şekil 4.2. 1a bileşiğinin yapısı, optimize edilen geometrisi ve HOMO-LUMO gösterimi

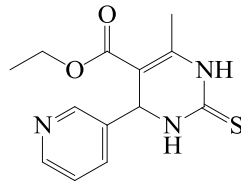


Şekil 4.2. 1a bileşiğinin yapısı, optimize edilen geometrisi ve HOMO-LUMO gösterimi (devam).



Şekil 4.3. 1a bileşiğinin elektrostatik potansiyel haritası.

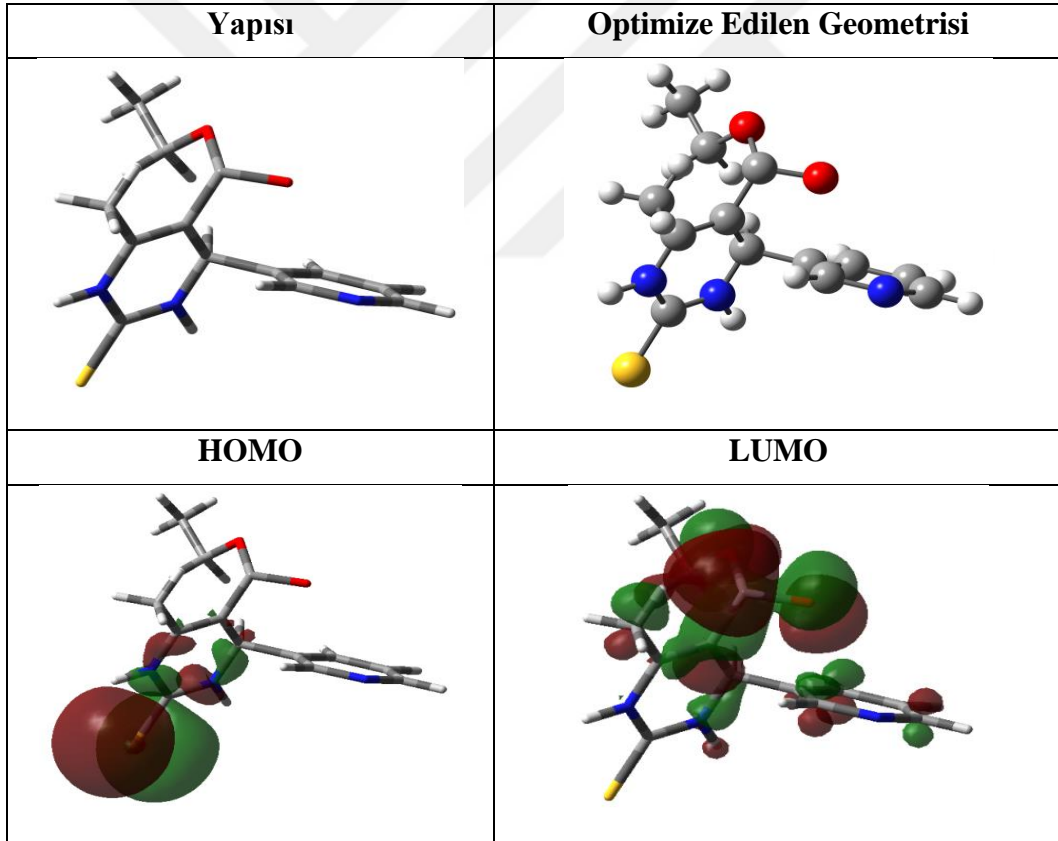
4.2. Etil 6-metil-4-(piridin-3-il)-2-tiokso-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-karboksilat (1b)



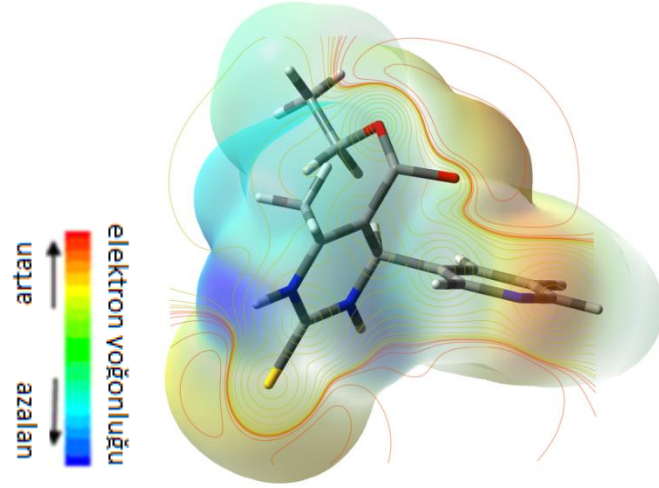
Şekil 4.4. 1b bileşiğinin yapısı.

Çizelge 4.2. Etil 6-metil-4-(piridin-3-il)-2-tiokso-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-karboksilat (1b); hesaplanan ilgili enerjileri

Parametreler	1b
$E_{\text{HOMO}}(\text{eV})$	-5.8046
$E_{\text{LUMO}}(\text{eV})$	-3.4603
$\Delta E(\text{eV})$	2.3443
İyonizasyon potansiyeli (I)	5.8046
Elektron afinitesi (A)	3.4603
Kimyasal sertlik (η)	2.3443
Kimyasal yumuşaklık (S)	0.4266
Elektronegativite (χ)	7.5347
Dipolmoment (μ)	4.4066
Genel elektrofilik indeksi (ω)	4.1416
İletilen elektron fraksiyon indeksi (ΔN)	-0.1140
Geri kazanım ($\Delta E_{\text{back-donation}}$)	-0,5860

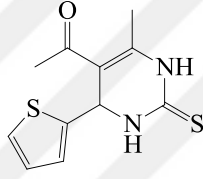


Şekil 4.5. 1b bileşiğinin yapısı, optimize edilen geometrisi ve HOMO-LUMO gösterimi



Şekil 4.6. 1b bileşiğinin elektrostatik potansiyel haritası.

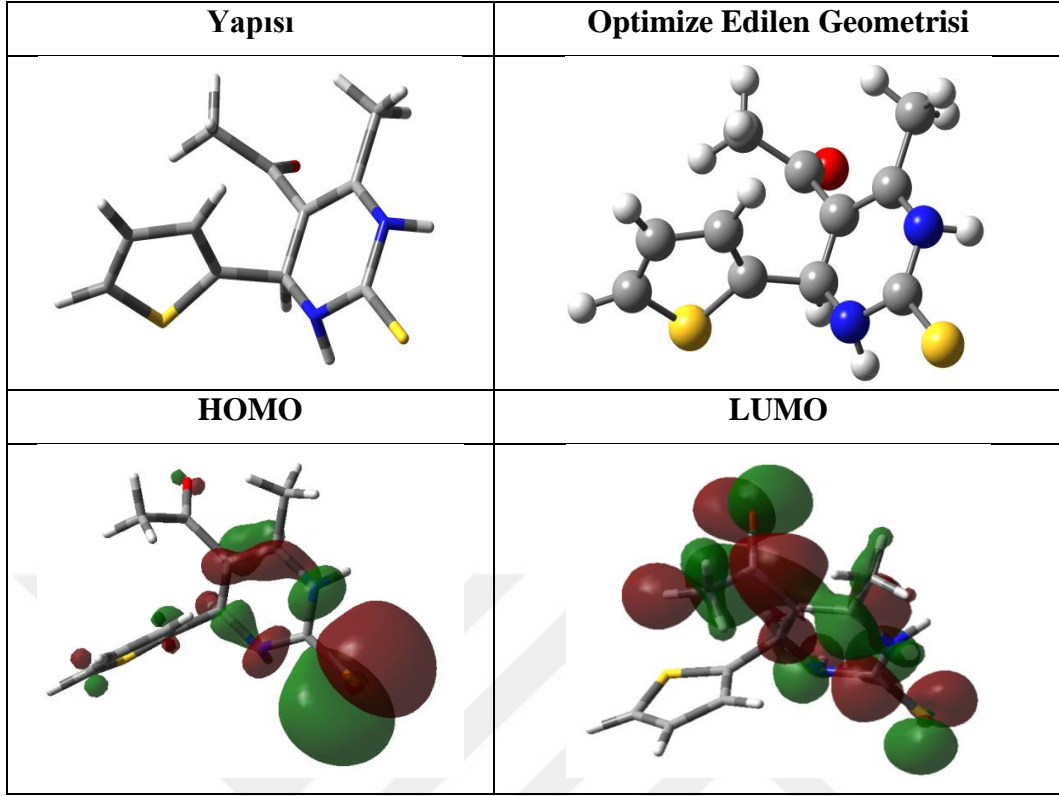
4.3. 1-(6-Metil-4-(tiofen-2-il)-2-tiokso-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-il)etanon (1c)



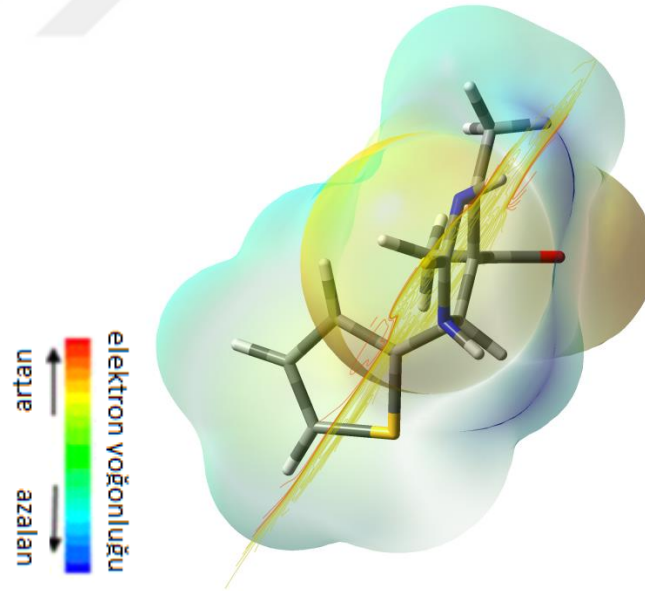
Şekil 4.7. 1c bileşiğinin yapısı.

Çizelge 4.3. 1-(6-Metil-4-(tiofen-2-il)-2-tiokso-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-il) etanon (1c); hesaplanan ilgili enerjileri

Parametreler	1c
$E_{\text{HOMO}}(\text{eV})$	-5.8174
$E_{\text{LUMO}}(\text{eV})$	-2.2074
$\Delta E(\text{eV})$	3.6099
İyonizasyon potansiyeli (I)	5.8174
Elektron afinitesi (A)	2.2074
Kimyasal sertlik (η)	3.6100
Kimyasal yumuşaklık (S)	0.2770
Elektronegativite (χ)	6.9211
Dipolmoment (μ)	3.6135
Genel elektrofilik indeksi (ω)	1.8085
İletilen elektron fraksiyon indeksi (ΔN)	0.0109
Geri kazanım ($\Delta E_{\text{back-donation}}$)	-0,9025

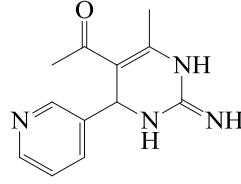


Şekil 4.8. 1c bileşiğinin yapısı, optimize edilen geometrisi ve HOMO-LUMO gösterimi.



Şekil 4.9. 1c bileşiğinin elektrostatik potansiyel haritası.

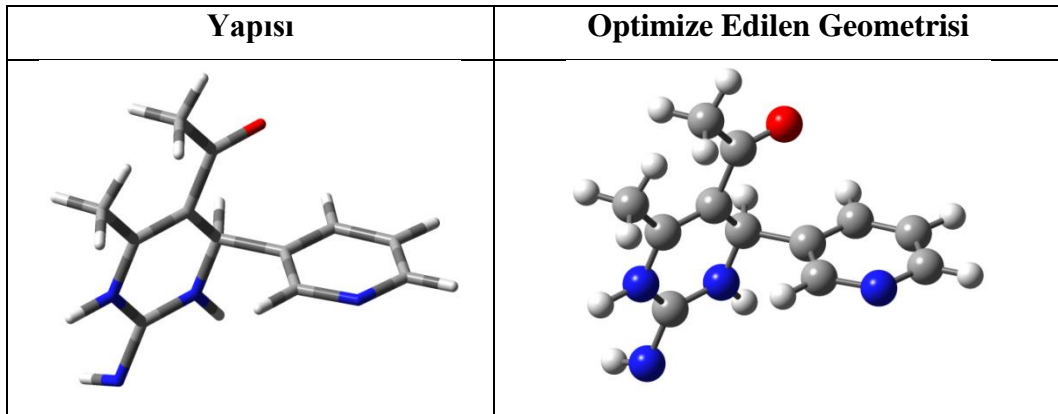
4.4. 1-(2-İmino-6-metil-4-(piridin-3-il)-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-il)etanon (1d)



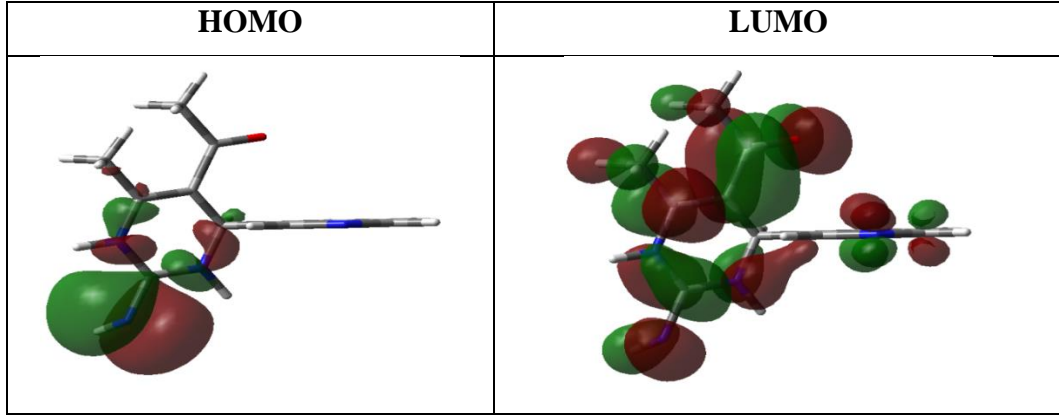
Şekil 4.10. 1d bileşiğinin yapısı.

Çizelge 4.4. 1-(2-İmino-6-metil-4-(piridin-3-il)-1,2,3,4-tetrahidropirimidin-5-il) etanon (1d); hesaplanan ilgili enerjileri

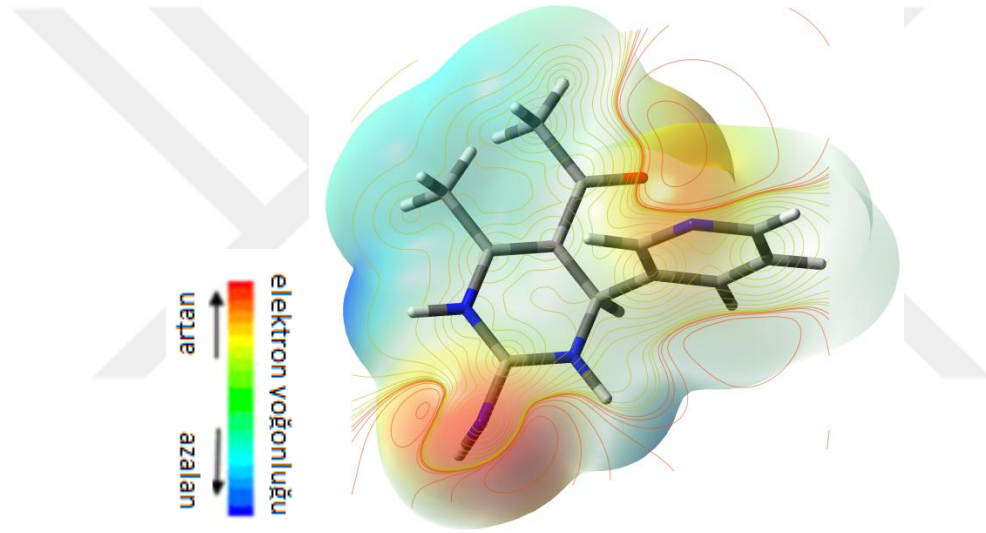
Parametreler	1d
$E_{\text{HOMO}}(\text{eV})$	-4.5629
$E_{\text{LUMO}}(\text{eV})$	-1.7851
$\Delta E(\text{eV})$	2.7478
İyonizasyon potansiyeli (I)	4.5629
Elektron afinitesi (A)	1.7851
Kimyasal sertlik (η)	2.7778
Kimyasal yumuşaklık (S)	0.3599
Elektronegativite (χ)	6.4555
Dipolmoment (μ)	4.6522
Genel elektrofilik indeksi (ω)	3.8957
İletilen elektron fraksiyon indeksi (ΔN)	0.0980
Geri kazanım ($\Delta E_{\text{back-donation}}$)	-0,6944



Şekil 4.11. 1d bileşiğinin yapısı, optimize edilen geometrisi ve HOMO-LUMO gösterimi.

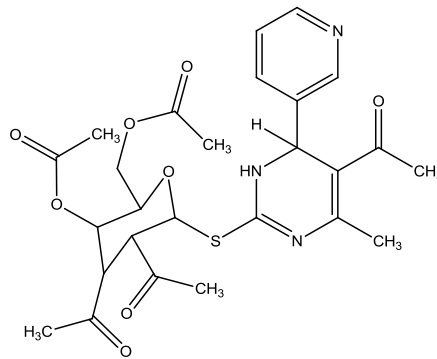


Şekil 4.11. 1d bileşiğinin yapısı, optimize edilen geometrisi ve HOMO-LUMO Gösterimi (devam).



Şekil 4.12. 1d bileşiğinin elektrostatik potansiyel haritası.

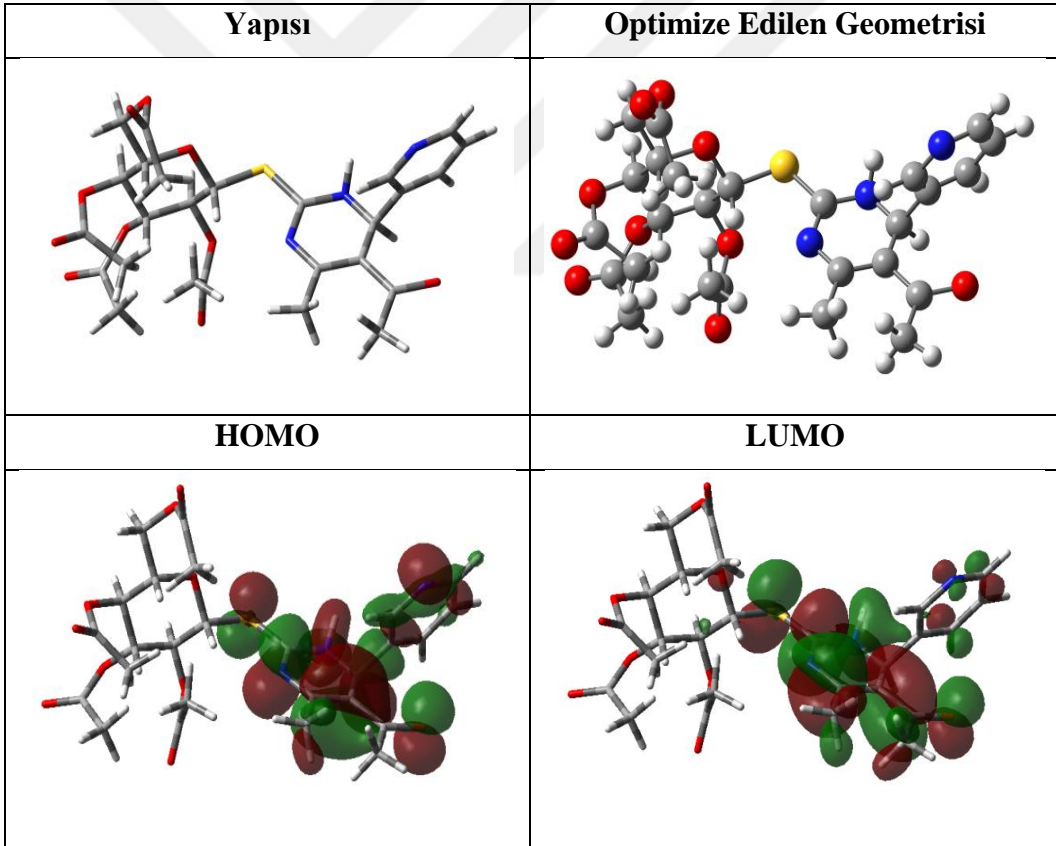
4.5. 2-(Asetoksimetil)-6-((5-asetil-6-metil-4-(piridin-3-il)-1,4-dihidropirimidin-2-il)tiyo)-3,4,5-triasetil-β-D-glukopiranosit (2a)



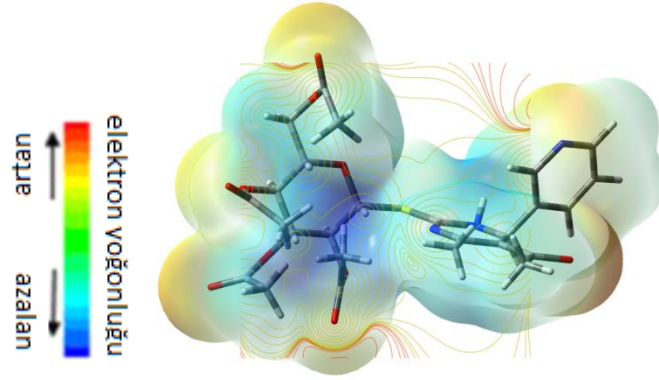
Şekil 4.13. 2a bileşiğinin yapısı.

Çizelge 4.5. 2-(Asetoksimetil)-6-((5-asetil-6-metil-4-(piridin-3-il)-1,4-dihidro pirimidin-2-il)tiyo)-3,4,5-triasetil- β -D-glukopiranosit (2a); hesaplanan ilgili enerjileri

Parametreler	2a
$E_{\text{HOMO}}(\text{eV})$	-6.1366
$E_{\text{LUMO}}(\text{eV})$	-2.8254
$\Delta E(\text{eV})$	3.3112
İyonizasyon potansiyeli (I)	6.1366
Elektron afinitesi (A)	2.8254
Kimyasal sertlik(η)	3.3112
Kimyasal yumuşaklık (S)	0.3020
Elektronegativite (χ)	7.5493
Dipolmoment (μ)	3.1698
Genel elektrofilik indeksi (ω)	1,5172
İletilen elektron fraksiyon indeksi (ΔN)	-0,0829
Geri kazanım ($\Delta E_{\text{back-donation}}$)	-0,8278

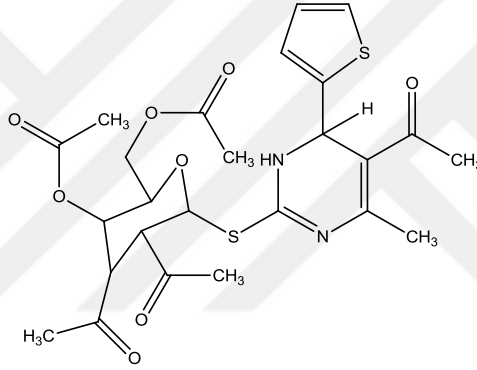


Şekil 4.14. 2a bileşiğinin yapısı, optimize edilen geometrisi ve HOMO-LUMO gösterimi.



Şekil 4.15. 2a bileşiğinin elektrostatik potansiyel haritası.

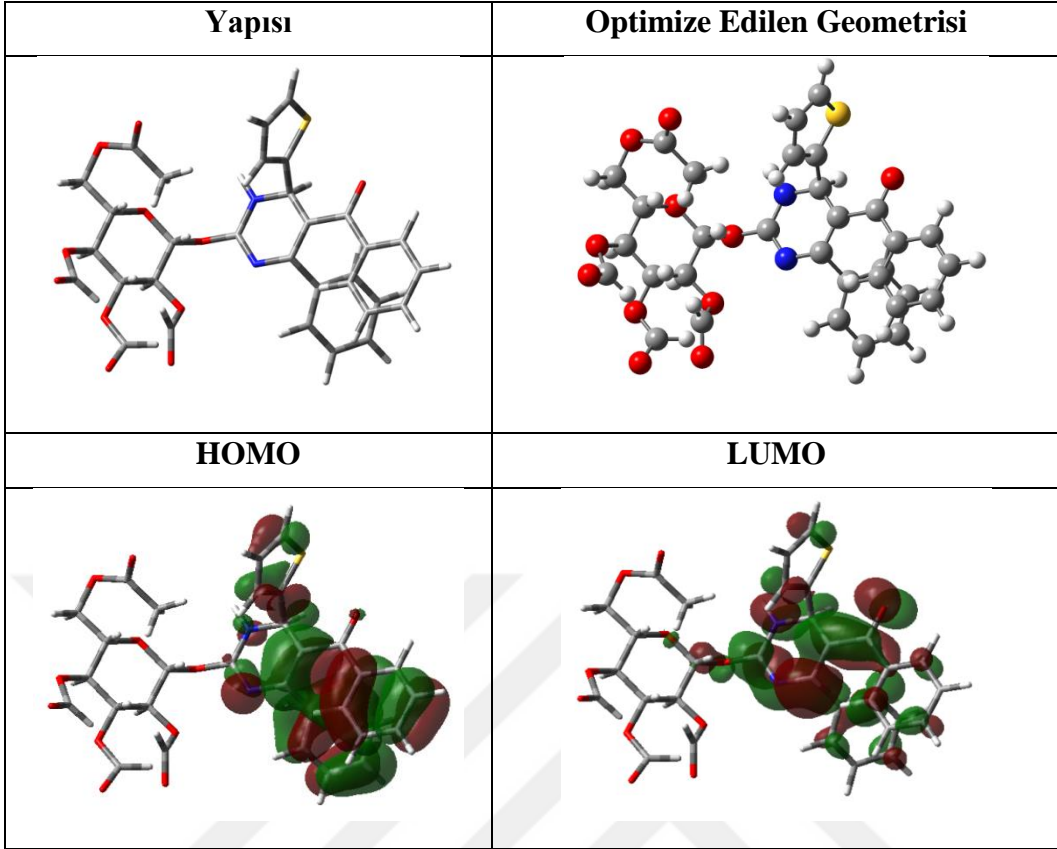
4.6. 2-(Asetoksümetil)-6-((5-benzoil-6-fenil-4-(tiofen-2-il)-1,4-dihidropirimidin-2-il)oksi)-3,4,5-triasetil-β-D-glukopiranosit (2b)



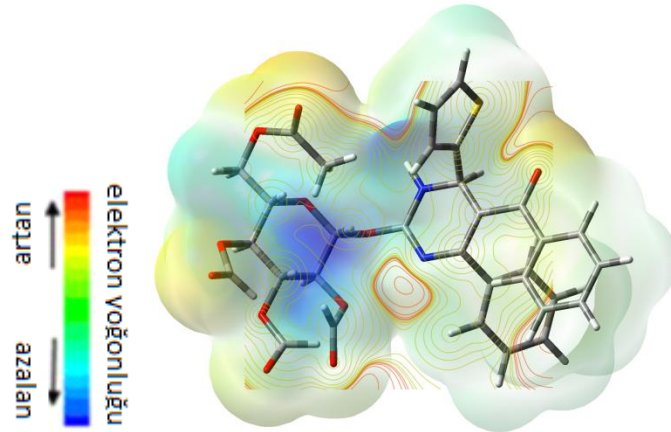
Şekil 4.16. 2b bileşiğinin yapısı.

Çizelge 4.6. 2-(Asetoksümetil)-6-((5-benzoil-6-fenil-4-(tiofen-2-il)-1,4-dihidropirimidin-2-il)oksi)-3,4,5-triasetil-β-D-glukopiranosit (2b); hesaplanan ilgili enerjileri

Parametreler	2b
$E_{\text{HOMO}}(\text{eV})$	-5.7711
$E_{\text{LUMO}}(\text{eV})$	-2.9677
$\Delta E(\text{eV})$	2.8034
İyonizasyon potansiyeli (I)	5.7711
Elektron afinitesi (A)	2.9677
Kimyasal sertlik(η)	2.8034
Kimyasal yumuşaklık (S)	0.3567
Elektronegativite (χ)	7.2549
Dipolmoment (μ)	4.9994
Genel elektrofilik indeksi (ω)	4,4578
İletilen elektron fraksiyon indeksi (ΔN)	-0,0454
Geri kazanım ($\Delta E_{\text{back-donation}}$)	-0,7008

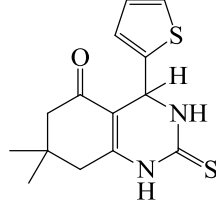


Şekil 4.17. 2b bileşiğinin yapısı, optimize edilen geometrisi ve HOMO-LUMO gösterimi.



Şekil 4.18. 2b bileşiğinin elektrostatik potansiyel haritası.

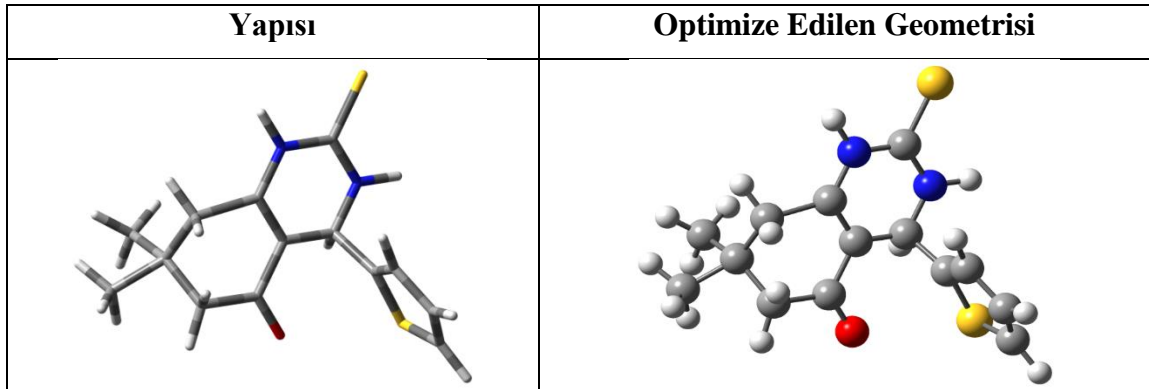
4.7. 7,7-Dimetil-4-(tiofen-2-il)-2-tiokso-2,3,4,6,7,8-heksahidrokinazolin-5-(1H)-on (3a)



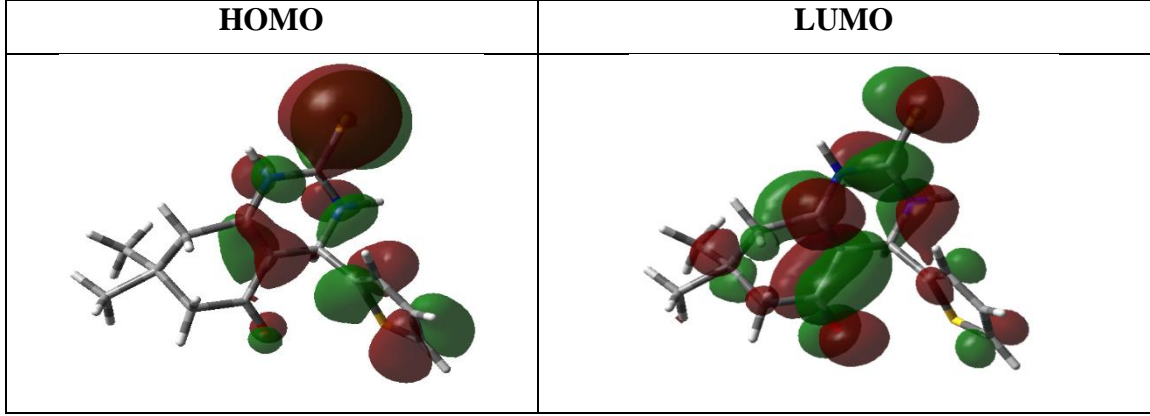
Şekil 4.19. 3a bileşiğinin yapısı.

Çizelge 4.7. 7,7-Dimetil-4-(tiofen-2-il)-2-tiokso-2,3,4,6,7,8-heksahidrokinazolin-5 (1H)-on (3a); hesaplanan ilgili enerjileri

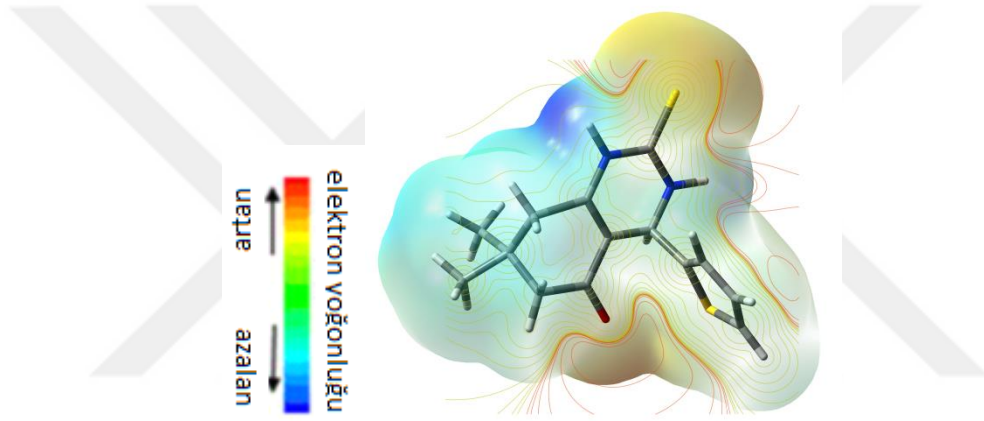
Parametreler	3a
$E_{HOMO}(eV)$	-5.6549
$E_{LUMO}(eV)$	-1.8795
$\Delta E(eV)$	3.7754
İyonizasyon potansiyeli (I)	5.6549
Elektron afinitesi (A)	1.8795
Kimyasal sertlik(η)	3.7754
Kimyasal yumuşaklık (S)	0.2648
Elektronegativite (χ)	6.5946
Dipolmoment (μ)	5.3217
Genel elektrofilik indeksi (ω)	3,7506
İletilen elektron fraksiyon indeksi (ΔN)	0,0536
Geri kazanım ($\Delta E_{back-donation}$)	-0,94385



Şekil 4.20. 3a bileşiğinin yapısı, optimize edilen geometrisi ve HOMO-LUMO gösterimi.

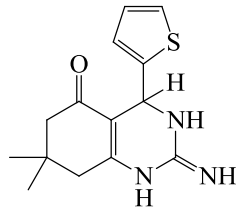


Şekil 4.20. 3a bileşiğinin yapısı, optimize edilen geometrisi ve HOMO-LUMO gösterimi (devam).



Şekil 4.21. 3a bileşiğinin elektrostatik potansiyel haritası.

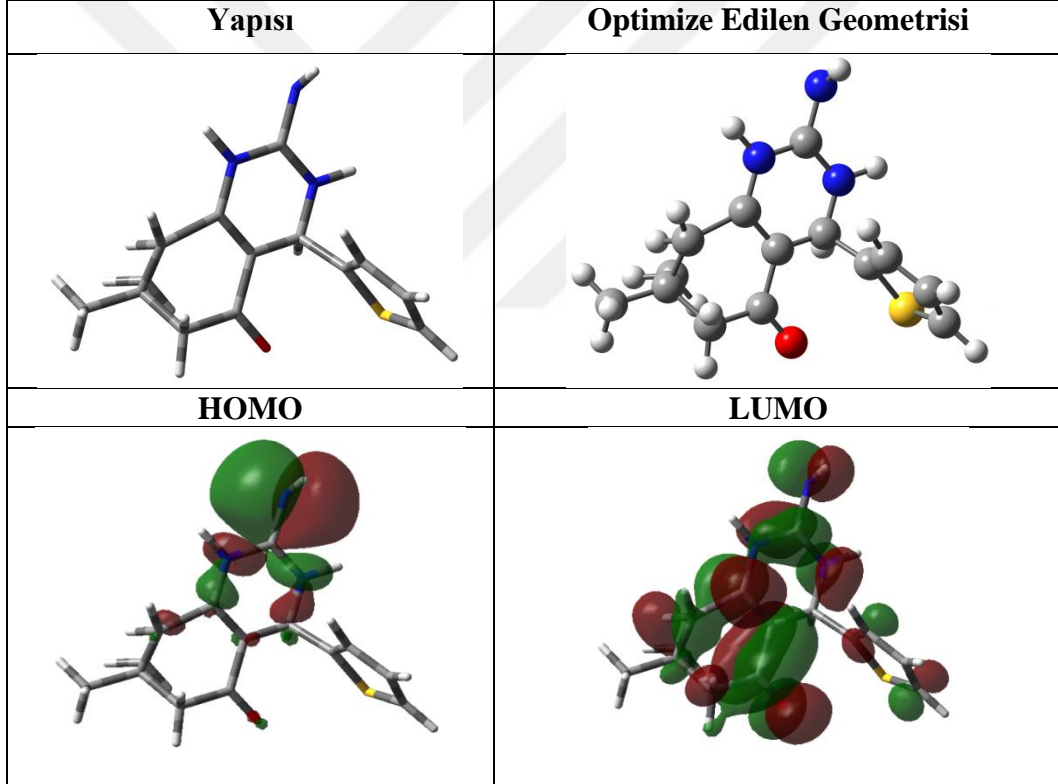
4.8. 2-İmino-7,7-dimetil-4-(tiofen-2-il)-2,3,4,6,7,8-heksahidrokinazolin-5(1H)-on (3b)



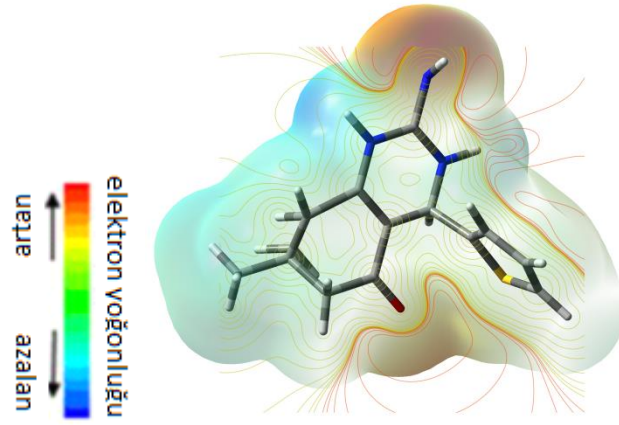
Şekil 4.22. 3b bileşiğinin yapısı.

Çizelge 4.8. 2-İmino-7,7-dimetil-4-(tiofen-2-il)-2,3,4,6,7,8-heksahidrokinazolin-5 (1*H*)-on (3b); hesaplanan ilgili enerjileri

Parametreler	3b
E_{HOMO} (eV)	-4.3874
E_{LUMO} (eV)	-1.6131
ΔE (eV)	2.7743
İyonizasyon potansiyeli (I)	4.3874
Elektron afinitesi (A)	1.6131
Kimyasal sertlik (η)	2.7743
Kimyasal yumuşaklık (S)	0.3605
Elektronegativite (χ)	5.1939
Dipolmoment (μ)	5.0076
Genel elektrofilik indeksi (ω)	4,5193
İtilen elektron fraksiyon indeksi (ΔN)	0,3255
Geri kazanım ($\Delta E_{back-donation}$)	-0,6935



Şekil 4.23. 3b bileşiğinin yapısı, optimize edilen geometrisi ve HOMO-LUMO gösterimi.



Şekil 4.24. 3b bileşiğinin elektrostatik potansiyel haritası.



5. TARTIŞMA VE SONUÇ

Tüm bileşiklerin tam geometrik optimizasyonları ve kuantum kimyasal parametreleri DFT yöntemi kullanılarak B3LYP ve 6-31G (d, p) bazları seçilerek Gaussian09 programı kullanılarak yapıldı. Bu tür kimyasal hesaplama yöntemleri kullanılarak, organik bileşiklerin korozyon önleyici etkilerini önceden tahmin etmek mümkündür. Bileşiklerin korozyon önleme potansiyellerinin tesbit edilmesinde kullanılacak olan iyonizasyon potansiyeli “I”, elektron afinitesi “A”, kimyasal sertlik “ η ”, kimyasal yumuşaklığı “S”, elektronegativite (χ), dipol moment (μ), genel elektrofilik indeksi “ ω ”, iletilen elektron fraksiyon indeksi “ ΔN ”, geri kazanım “ $\Delta E_{back-donation}$ ” gibi parametreler Karzazi ve ark. (2014) tarafından önerilen denklemler kullanılarak hesaplandı.

Organik yapıdaki moleküllerin metal yüzeyine tutunabilme yetenekleri onların aynı zamanda antikorozyf özelliklerini gösterir. Bu adsorpsiyon fiziksel veya kimyasal olarak meydana gelebilir. Kimyasal adsorpsiyon, genellikle elektron donör ve elektron akseptör ilişkisi içerisinde gerçekleşir.

Organik bileşiklerin temel haldeki geometrisi ve highest occupied molecular orbital (HOMO) ve lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) enerji düzeyleri molekülün aktivasyonu hakkında önemli bilgilere ulaşmamızı sağlar. Çalışmaya konu olan moleküllerin HOMO seviyesinde bulunan elektronlar, genellikle delokalize karaktere sahip atomlar üzerinde dağılarak adsorpsiyon alanı açarlar. Elektronların yoğunlaştıkları bölgelerin hesaplanmasıyla üzerinde çalışılan bileşiklerde delokalizasyonun heteroatomlar ve halka sistemi üzerinde olduğunu düşündürmektedir.

Korozyon önlemede inhibitör, metal elektron verirken aynı zamanda metalden gelen elektronları da kabul edebilir. ΔE_{LUMO} , bileşiklerin elektron akseptör yeteneği ile ilgili bilgiler içerir. ΔE_{HOMO} 'daki artış ve ΔE_{LUMO} enerji seviyelerindeki azalma, inhibitörün metal yüzeye yapışabilme yeteneğinin artmasına neden olur. Bu nedenle, düşük ΔE_{LUMO} değeri elektronları kabul etme olasılığı daha yüksektir.

Bu bağlamda, bileşik 1b'nin ($\Delta E_{LUMO}=-3.4403eV$) iyi önleyici etkiye sahip olacağını ortaya koymaktadır.

E_{LUMO} ile E_{HOMO} enerjileri arasındaki matematiksel fark ΔE_{gap} olarak tanımlanır. Bu değer organik bileşiğin metal yüzeyde adsorpsiyonu ile ilgili göstereceği aktivitesinin önemli bir parametresidir. Bu parametrenin düşük değeri molekülün metal yüzeyine adsorpsiyonunu kolaylaştıracaktır. ΔE_{gap} matematiksel ifadesi değer olarak küçük olması o molekülün polarize olmasını sağlar ve çoğunlukla yüksek kimyasal aktivite ve düşük kinetik stabilite ile ilişkilendirilir. Bu moleküller reaktivite anlamında yumuşak olarak adlandırılır. Çalıştığımız bileşiklerin ΔE_{gap} değerleri arasında $3a > 1c > 2a > 2b > 3b > 1d > 1b > 1a$ şeklinde bir ilişki bulundu. Bu değerlerden 1b ve 1a bileşiklerinin korozyon inhibisyonu açısından iyi performans gösterebilecekleri sonucuna ulaşmak mümkündür.

Korozyon önleyici olarak değerlendirilecek moleküller için dipol momenti (μ Debye) in de hesaplanması oldukça önemlidir. Dipol moment değerinin yüksek olması kimyasal bileşik ile metal arasındaki tutunmayı kolaylaştırır. 7.7544 Debye değerine sahip 1a bileşiğinin iyi performans gösteren inhibitör sınıfından olacağı görülmektedir.

Bileşiklerin stabilite ve reaktivitesi hakkında çok önemli bilgiler elde etmemizi kolaylaştıran parametrelerden biride mutlak sertlik (η) ve yumuşaklık (S) değerleridir. Kimyasal sertliği $2.0477 eV$ ile en düşük ve kimyasal yumuşaklığı $0.4884 eV$ ile en yüksek değere sahip olan 1a bileşiği yüksek inhibisyon etkisini gösterecektir.

Bir bileşik için aktarılan elektronlar (ΔN) 3.6'dan küçük olduğunda, genel olarak inhibisyon etkinliği artar. Bileşiklerin ΔN değerleri karşılaştırıldığında tüm bileşiklerin bu parametreye uyduğu görülmektedir. Dolayısıyla bu parametreden tam ve doğru bir sonuç çıkarmak mümkün gözükmemektedir.

Organik bileşiğin elektronları kabul etme yeteneğinin en önemli göstergelerinden biri de global elektrofiliklik indeksi (ω) dir. Çalışılan bileşikler arasında en yüksek elektrofiliklik indeks değerine (14.6825) 1a bileşiğinin sahip olduğu tespit edildi. Buna göre 1a bileşiği güçlü nükleofilik karektare sahiptir ve iyi bir antikorozyon madde olarak değerlendirilebilir sonucu çıkartmak mümkündür.

5.1. Moleküler Elektrostatik Potansiyel Haritaları (MEPs)

Çalışılan bileşikler için moleküler elektrostatik potansiyel haritaları B3LYP / 6-31G (d, p) seviyesinde çalışıldı. Moleküler elektrostatik potansiyel haritası, bileşiğin

elektrofilik ve n kleofilik etkileşim iin reaksiyona aık b lgeleri ve hidrojen etkileşimleri hakkında bilgi saėlar. Bu haritalarda molek l y zeyindeki elektrostatik potansiyel farkları renklerle temsil edilir. Kırmızı-negatif, mavi-pozitif ve yeşil-sıfır elektrostatik potansiyel b lgelerini temsil eder. Negatif b lgeler (kırmızı) elektrofilik reaktivite ve pozitif b lgeler (mavi) ise n kleofilik reaktivite ile ilişkilendirilir.





KAYNAKLAR

- Aswin, K., Sheik Mansoor, S., Logaiya, K., Sudhan, P.N., 2014. Triphenylphosphine: an efficient catalyst for the synthesis of 4,6-diphenyl-3,4-dihydropyrimidin-2(1*H*)-thione under thermal conditions, *Science*, **26**: 141-148.
- Atwal, K. S., 1989. Substituted 1,4-dihydropyrimidines. 3. Synthesis of selectively functionalized 2-hetero-1,4-dihydropyrimidines. *The Journal of Organic Chemistry*, **54**: 5898-5907.
- Bagley, M.C., Hughes, D.D., Lubinu, M.C., Merritt, E.A., Taylor, P.H., Tomkinson, N.C.O., 2004. Microwave-assisted synthesis of pyrimidine libraries, *QSAR & Combinatorial Science*, **23**: 859-867.
- Becke, A. D., 1992. Density-functional thermochemistry. I. The Effect of the exchange-only gradient correction. *J. Chem. Phys.*, **96**: 2155–2160.
- Becke, A. D., 1993. Density functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. *J. Chem. Phys.*, **98**: 5648–5652.
- Biginelli, P., 1893. Aldehyde-urea derivatives of aceto and oxaloacetic acids. *Gazzetta Chimica Italiana*, **23**: 360-416.
- Blicke, F.F., Godt, H.C., 1954. Reactions of 1,3-dimethyl-5,6-diaminouracil, *Journal of the American Chemical Society*, **76**: 2798-2800.
- Chen, Q., Zhu, X.L., Jiang, L.L., Liu, Z.M., Yang, G.F., 2008. Synthesis, antifungal activity and CoMFA analysis of novel 1,2,4-triazolo[1,5-*a*]pyrimidine derivatives, *European Journal of Medicinal Chemistry*, **43**: 595-603.
- Cho, H., Ueda, M., Shima, K., 1989. Dihydropyrimidines: novel calcium antagonists with potent and long-lasting vasodilative and antihypertensive activity. *J. Med. Chem.*, **32**: 2399.
- Ergan, E., 2016. *Stereomerkeze Sahip Çeşitli Pirimidin Bileşiklerinin Multikomponent Reaksiyon Yöntemi ile Sentezi ve İleri Kademe Reaksiyonlarının Araştırılması* (doktora tezi). VYYÜ, Fen Bilimleri Enstitüsü, Van.
- Foroughifar, N., Mobinikhaledi, A., Fathinejad Jirandehi. H., 2003. Synthesis of some biginelli compounds in solvent medium using a photochemistry method. *Phosphorus, Sulfur, and Silicon*, **178(3)**: 495-500.
- Gaussian 09, Revision D.01, 2009. Frisch, M. J., vd. *Gaussian, Inc.*, Wallingford CT.
- Karzazi, Y., Belghiti M.E., Dafali, A., Hammouti, B. A., 2014. Theoretical investigation on the corrosion inhibition of mild steel by piperidine derivatives in hydrochloric acid solution. *J. Chem. Pharm. Res.*, **6**: 689–696.
- Lee, C., Yang, W., Parr, R. G., 1988. Development of the colle-salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Phys. Rev. B.*, **37**: 785–789.
- Rovnyak, C. G., Atwal, K. S., Hedberg, A., 1992. Dihydropyrimidine calcium channel blockers. 4. Basic 3-substituted-4-aryl-1,4-dihydropyrimidine-5-carboxylic acid esters. Potent antihypertensive agents. *J. Med. Chem.*, **35(17)**: 3254-3263.
- Salem, M.A., Behalo, M.S., Elrazaz, E., 2019. Green synthesis and 3D pharmacophore study of pyrimidine and glucoside derivatives with in vitro potential anticancer and antioxidant activities, *Medicinal Chemistry Research*, **28**:1223–1234.

- Varma, R. S., 1999. Solvent-free organic syntheses using supported reagents and microwave irradiation. *Green. Chem.*, **1**: 43-55.
- West, R.A., Beauchamp, L., 1961. 2-Alkyl(aryl)- and 2,7-dimethyl-4-substituted aminopyrrolo[2,3-*d*]pyrimidines, *Journal of Organic Chemistry*, **26(10)**: 3809-3812.



ÖZ GEÇMİŞ

8 Temmuz 1991 tarihinde Siirt'te doğdu. İlköğretimini Siirt'te tamamladı. Lise öğrenimini tamamlamak için 2006 yılında Manisa'ya gitti ve orada tamamladı. 2010 yılında Celal Bayar Üniversitesi, Eğitim Fakültesi, Fen Bilgisi Öğretmenliği Bölümü'nü kazandı. 2017 yılında MEB'e bağlı Siirt'in Kurtalan ilçesine öğretmen olarak atandı ve halen görevine devam etmektedir. 2017 yılında Van Yüzüncü Yıl Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kimya ABD Organik Kimya Bilim Dalında yüksek lisans eğitimine başladı. Evli ve bir çocuk babasıdır.



T.C
VAN YÜZÜNCÜ YIL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
LİSANSÜSTÜ TEZ ORJİNALLİK RAPORU

Tarih: 02/06/2020

Tez Başlığı/Konusu: TETRAHİDRO PİRİMİDİN TÜREVİ BİLEŞİKLERİN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİNİN BELİRLENMESİ VE KOROZYON ÖNLEYİCİ OLARAK KULLANILABİLİRLİĞİNİN ARAŞTIRILMASI

Yukarıda başlığı/konusu belirlenen tez çalışmamın Bulgular ve Tartışma-Sonuç bölümlerinden oluşan toplam 41 sayfalık kısmına ilişkin, 01/06/2020 tarihinde tez danışmanım tarafından turnitin intihal tespit programından aşağıda belirtilen filtreleme uygulanarak alınmış olan orijinallik raporuna göre, tezin benzerlik oranı % 4 (dört) dür.

Uygulanan filtreler aşağıda verilmiştir:

- Kabul ve onay sayfası hariç,
- Teşekkür hariç,
- İçindekiler hariç,
- Simge ve kısaltmalar hariç,
- Gereç ve yöntemler hariç,
- Kaynakça hariç,
- Alıntılar hariç,
- Tezden çıkan yayınlar hariç,
- 7 kelimedenden daha az örtüşme içeren metin kısımları hariç (Limit inatch size to 7 words)

Van Yüzüncü Yıl Üniversitesi Lisansüstü Tez Orijinallik Raporu Alınması ve Kullanılmasına İlişkin Yönergeyi inceledim ve bu yönergede belirtilen azami benzerlik oranlarına göre tez çalışmamın herhangi bir intihal içermediğini; aksinin tespit edileceği muhtemel durumda doğabilecek her türlü hukuki sorumluluğu kabul ettiğimi ve yukarıda vermiş olduğum bilgilerin doğru olduğunu beyan ederim.

Gereğini bilgilerinize arz ederim.

Tarih ve İmza

Adı Soyadı: Murat OKAY

Öğrenci No: 17910002082

Anabilim Dalı: Kimya

Statüsü: Y. Lisans

Doktora

DANIŞMAN ONAYI
UYGUNDUR

Prof. Dr. Esvet AKBAS