

**METAL İYONLARINA DUYARLI YENİ TASARLANMIŞ
FERROSENİL TİYAZOL BENZİMİDAZOL SENSÖRÜN
TEORİK OLARAK İNCELENMESİ**

**THEORETICAL INVESTIGATION OF NEW DESIGNED
FERROCENYL THIOAZOLE BENZIMIDAZOLE SENSORS,
SENSIBLE TO METAL IONS**

MİNE ALŞAN

Prof. Dr. FATMA SEVİN DÜZ

Tez Danışmanı

Hacettepe Üniversitesi
Lisansüstü Eğitim- Öğretim ve Sınav Yönetmeliğinin
Kimya Anabilim Dalı için Öngördüğü
YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak hazırlanmıştır.

2018

MİNE ALŞAN'in hazırladığı “**Metal İyonlarına Duyarlı Yeni Tasarlanmış Ferrosenil Tiyazol Benzimidazol Sensörün Teorik Olarak İncelenmesi**” adlı bu çalışma aşağıdaki jüri tarafından **KİMYA ANABİLİM DALI**'nda **YÜKSEK LİSANS TEZİ** olarak kabul edilmiştir.

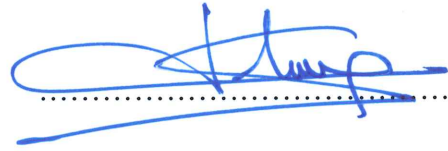
Prof. Dr. Mustafa GÜLLÜ
Başkan



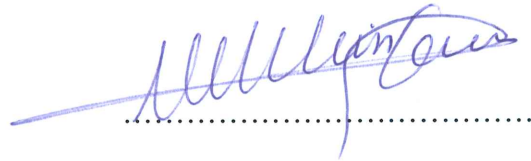
Prof. Dr. Fatma SEVİN DÜZ
Danışman



Prof. Dr. Ali SINAĞ
Üye



Prof. Dr. Vildan GÜRSOY
Üye



Doç. Dr. Uğur BOZKAYA
Üye



Bu tez Hacettepe Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tarafından **YÜKSEK LİSANS TEZİ** olarak onaylanmıştır.

Prof. Dr. Menemşe GÜMÜŞDERELİOĞLU

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

YAYINLAMA VE FİKRİ MÜLKİYET HAKLARI BEYANI

Enstitü tarafından onaylanan lisansüstü tezimin/raporumun tamamını veya herhangi bir kısmını, basılı (kağıt) ve elektronik formatta arşivleme ve aşağıda verilen koşullarla kullanıma açma iznini Hacettepe üniversitesine verdiğimi bildiririm. Bu izinle Üniversiteye verilen kullanım hakları dışındaki tüm fikri mülkiyet haklarım bende kalacak, tezimin tamamının ya da bir bölümünün gelecekteki çalışmalarda (makale, kitap, lisans ve patent vb.) kullanım hakları bana ait olacaktır.

Tezin kendi orijinal çalışmam olduğunu, başkalarının haklarını ihlal etmediğimi ve tezimin tek yetkili sahibi olduğumu beyan ve taahhüt ederim. Tezimde yer alan telif hakkı bulunan ve sahiplerinden yazılı izin alınarak kullanması zorunlu metinlerin yazılı izin alarak kullandığımı ve istenildiğinde suretlerini Üniversiteye teslim etmeyi taahhüt ederim.

Tezimin/Raporumun tamamı dünya çapında erişime açılabilir ve bir kısmı veya tamamının fotokopisi alınabilir.

(Bu seçenekle teziniz arama motorlarında indekslenebilecek, daha sonra tezinizin erişim statüsünün değiştirilmesini talep etmeniz ve kütüphane bu talebinizi yerine getirirse bile, tezinin arama motorlarının önbelleklerinde kalmaya devam edebilecektir.)

Tezimin/Raporumun 08/06/2021 tarihine kadar erişime açılmasını ve fotokopi alınmasını (İç Kapak, Özet, İçindekiler ve Kaynakça hariç) istemiyorum.

(Bu sürenin sonunda uzatma için başvuruda bulunmadığım takdirde, tezimin/raporumun tamamı her yerden erişime açılabilir, kaynak gösterilmek şartıyla bir kısmı ve ya tamamının fotokopisi alınabilir)

Tezimin/Raporumun tarihine kadar erişime açılmasını istemiyorum, ancak kaynak gösterilmek şartıyla bir kısmı veya tamamının fotokopisinin alınmasını onaylıyorum.

Serbest Seçenek/Yazarın Seçimi

08 / 06 / 2018

Mine ALŞAN

Babam Melih ALŞAN'a...



ETİK

Hacettepe Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, tez yazım kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmada,

- tez içindeki bütün bilgi ve belgeleri akademik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- görsel, işitsel ve yazılı tüm bilgi ve sonuçları bilimsel ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
- başkalarının eserlerinden yararlanılması durumunda ilgili eserlere bilimsel normlara uygun olarak atıfta bulunduğumu,
- atıfta bulunduğum eserlerin tümünü kaynak olarak gösterdiğimi,
- kullanılan verilerde herhangi bir tahrifat yapmadığımı,
- ve bu tezin herhangi bir bölümünü bu üniversite veya başka bir üniversitede başka bir tez çalışması olarak sunmadığımı

beyan ederim.

08/06/2018

MİNE ALŞAN

ÖZET

METAL İYONLARINA DUYARLI YENİ TASARLANMIŞ FERROSENİL TİYAZOL BENZİMİDAZOL SENSÖRÜN TEORİK OLARAK İNCELENMESİ

Mine ALŞAN

Yüksek Lisans, Kimya Bölümü

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Fatma SEVİN DÜZ

Haziran 2018, 93 sayfa

Ferrosenil benzimidazol temelli sensörler, biyolojik ve kimyasal alanlarda katyon, anyon ve nötr yapıların saptanmasında kullanılmaktadır. Yeni tasarlanan ferrosenil tiyazol benzimidazol sensörün, Mg^{2+} , Ca^{2+} , Zn^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} , Co^{2+} , Hg^{2+} , Pb^{2+} metal iyonları varlığında elektronik, elektrokimyasal ve fotokimyasal özellikleri DFT, B3LYP ve LanL2DZ temel setinde RHF olarak gaz ve su fazında hesaplanmıştır.

Tasarlanan sensörün, su fazında Cu-FcTBz ve Ni-FcTBz kompleksleşme tepkimelerinin daha istemli olduğu ve elektrokimyasal hesaplamalar sonucu Cu-FcTBz (1,029 eV) ve Ni-FcTBz (1,013 eV) indirgenme potansiyellerinin daha yüksek olduğu belirlenmiştir. UV-görünür bölge spektrumları incelendiğinde tüm metal iyonları kırmızıya kayma verirken, maksimum absorpsiyon dalga boyu su fazında Ni-FcTBz (666,1 nm) kompleksine aittir.

Hesaplanan redoks ve absorpsiyon özellikleri incelendiğinde, tasarlanan sensörün, diğer metal iyonları ile karşılaştırıldığında Ni^{2+} ve Cu^{2+} iyonlarına karşı daha duyarlı cevap verdiği bulunmuştur.

Anahtar Kelimeler: Sensör, Floresans, Ferrosen, Benzimidazol, Üç yönlü sensör, DFT

ABSTRACT

THEORETICAL INVESTIGATION OF NEW DESIGNED FERROCENYL THIOAZOLE BENZIMIDAZOLE SENSORS, SENSIBLE TO METAL IONS

Mine ALŞAN

Master of Science, Department of Chemistry

Supervisor: Prof. Dr. Fatma SEVİN DÜZ

June 2018, 93 pages

Ferrocenyl benzimidazole based sensors are used to detect cation, anion and neutral structures in biological and chemical fields. The newly designed ferrocenyl thiazole benzimidazole sensor's electronic, electrochemical and photochemical properties are investigated in the presence of Mg^{2+} , Ca^{2+} , Zn^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} , Co^{2+} , Hg^{2+} , Pb^{2+} ions by using DFT, B3LYP, and LanL2DZ basis set, calculated with RHF, in the gas phase and water phase.

The designed sensor showed that the Cu-FcTBz and Ni-FcTBz complexation reactions are more desirable and the results of the electrochemical calculations revealed higher Cu-FcTBz (1,029 eV) and Ni-FcTBz (1,013 eV) reduction potentials. When the UV-visible region was examined, all metal ions shift towards red and it was determined that Ni-FcTBz (666,1 nm) sensor gave maximum absorption in the water phase.

When the calculated redox and absorption properties are investigated, it is founded that the designed sensor, compared to other metal ions. responds more sensitive to Ni^{2+} and Cu^{2+} ions.

Key words: Sensor, Fluorescence, Ferrocene, Benzimidazole, Three-directional sensors, DFT.



TEŞEKKÜR

Tez çalışmam süresince değerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren, her konuda ilgi ve desteğini eksik etmeyen, güleryüzlülüğü ve sabrıyla hep motive eden saygıdeğer hocam Prof. Dr. Fatma SEVİN DÜZ'e,

Tez çalışmamın gelişmesine yardımcı olan Prof. Dr. Mustafa Güllü, Prof. Dr. Ali Sınağ, Prof. Dr. Vildan Gürsoy ve Doç Dr. Uğur Bozkaya hocalarıma,

Her konuda desteğini ve yardımını esirgemeyen, moleküler modelleme programlarını kullanırken karşılaştığım zorlukları çözmemde yardımlarını ve bilgilerini esirgemeyen sevgili arkadaşım Kübra SARIKAVAK'a,

Canım arkadaşım Funda ŞİMŞEK'e,

Bugünlere gelmemi sağlayan, hep yanımda olup bana güç, moral ve mutluluk veren canım ailem Gülnur ALŞAN, Melih ALŞAN ve Yasemin ALŞAN ALTINOK'a, çalışmalarım esnasında bana hep destek olup motive eden sevgili hayat arkadaşım Kerem KILIÇDAROĞLU ve ikinci aileme,

Sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	i
ABSTRACT	ii
TEŞEKKÜR	iii
İÇİNDEKİLER.....	iv
ŞEKİLLER	vi
SİMGELER VE KISALTMALAR	vii
1.GİRİŞ.....	1
2. GENEL BİLGİLER.....	2
2.1.Kimyasal Sensörler.....	2
2.1.1. Elektrokimyasal Sensörler.....	2
2.1.2. Optik Sensörler.....	3
2.2. Floresans.....	3
2.3. Elektron Transferi.....	5
2.3.1. Foton Kaynaklı Elektron Transferi (PET).....	5
2.3.2. Foton Kaynaklı Molekül İçi Yük Transferi (ICT).....	6
2.4. Ferrosen ve Türevleri	7
2.5. Hesapsal Yöntemler.....	10
2.5.1. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT).....	10
2.5.2 B3LYP Hibrit Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi	11
2.5.3. Lanl2dz Temel Seti.....	11
2.6. Elektronik Parametreler.....	12
2.6.1. Global Tanımlayıcıların Hesaplanması	12
2.6.2. Hesapsal İndirgenme Potansiyel Hesaplamaları	13
3.ÇALIŞMA PLANI	15
4.SONUÇLAR VE TARTIŞMA.....	17
4.1. Elektronik Özellikler	17
4.1.1. Yapısal Özellikler.....	17
4.1.2. Metal İyonları ile Kompleks Kararlılıkları.....	22
4.1.3. Moleküler Orbital Enerjileri	23
4.1.4.Global Tanımlayıcılar.....	27
4.2. Elektrokimyasal Özellikler.....	31

4.3. Fotokimyasal Özellikler	32
4.3.1. Hesapsal UV-Görünür Bölge Spektrumları.....	32
4.2.3.Elektron Transferi.....	35
5. SONUÇLAR.....	38
6. KAYNAKLAR.....	39
EKLER	40
ÖZGEÇMİŞ.....	94



ŞEKİLLER

Sayfa

Şekil 1. Metal iyonu ile koordine olan ferrosenil tiyazol benzimidazol sensör yapısı.....	1
Şekil 2. Perrin Jablonski diyagramı.....	4
Şekil 3. PET mekanizması.....	5
Şekil 4. ICT mekanizması	6
Şekil 5. Ferrosenin floresans söndürücü olarak mekanizması.....	8
Şekil 6. Ferrosen türevleri	8
Şekil 7. Ferrosenin deprotonlanma / reprotonlanma tepkimesi.....	9
Şekil 8. Ferrosen ve benzimidazol türevleri	9
Şekil 9. Mulliken yükleri ve bağ uzunlukları için seçilen atomlar	17
Şekil 10. Sensör ve metal iyonları ile oluşan komplekslerin dipol moment değerleri	21
Şekil 11. HOMO-LUMO bant aralıkları	23
Şekil 12. Gaz fazı için HOMO-LUMO moleküler orbitalleri ve enerji değerleri (eV).....	25
Şekil 13. Su fazı için HOMO-LUMO moleküler orbitalleri ve enerji değerleri (eV)	26
Şekil 14. Gaz ve su fazı kimyasal potansiyel değerleri	27
Şekil 15. Gaz ve su fazı elektronegatiflik değerleri.....	28
Şekil 16. Gaz ve su fazı elektrofilite değerleri.....	29
Şekil 17. Gaz ve su fazı kimyasal sertlik değerleri.....	30
Şekil 18. Gaz ve su fazı maksimum absorpsiyon dalgaboyu değerleri	32
Şekil 19. Sensör ve metal iyonları ile oluşturduğu komplekslerin maksimum absorpsiyon spektrumları.....	34
Şekil 20. Sensör ve metal iyonları ile oluşturduğu komplekslerin maksimum absorpsiyon spektrumları.....	34
Şekil 21. FcTBz sensörü ile Ni-FcTBz kompleksinin HOMO-LUMO orbitalleri ve bant aralıkları gösterimi.....	36
Şekil 22. FcTBz sensörü ile Cu-FcTBz kompleksinin HOMO-LUMO orbitalleri ve bant aralıkları gösterimi.....	37

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

μ	Kimyasal potansiyel
χ	Elektronegativite
w	Elektrofilisite
η	Sertlik
σ	Yumuşaklık
I	İyonizasyon potansiyeli
A	Elektron ilgisi
E	İndirgenme potansiyeli
ΔE	Toplam enerji değişimi
ΔG	Gibbs serbest enerji değişimi
ΔH	Entalpi değişimi
ΔS	Entropi değişimi

Kısaltmalar

PET	Fotokimyasal elektron transferi
ICT	Molekül içi yük transferi
HOMO	En yüksek enerjili dolu orbital
LUMO	En düşük enerjili boş orbital
DFT	Yoğunluk fonksiyonel teorisi
B3LYP	3 parametrelili Becke, Lee, Yang. Parr Fonksiyoneli
LanL2Dz	Los Alamos National Laboratory 2 double ζ
HF	Hartree-Fock metodu
SCF	Hartree-Fock Öz Uyumlu Atom Teorisi
TÜBİTAK	Türkiye Bilimsel ve Teknik Araştırma Kurumu
FcTBz	Ferrosenil tiyazol benzimidazol sensör
Mg-FcTBz	Ferrosenil tiyazol benzimidazol sensör ile magnezyum iyonu kompleksi
Ca-FcTBz	Ferrosenil tiyazol benzimidazol sensör ile kalsiyum iyonu kompleksi
Co-FcTBz	Ferrosenil tiyazol benzimidazol sensör ile kobalt iyonu kompleksi

Ni-FcTBz	Ferrosenil tiyazol benzimidazol sensör ile nikel iyonu kompleksi
Cu-FcTBz	Ferrosenil tiyazol benzimidazol sensör ile bakır iyonu kompleksi
Zn-FcTBz	Ferrosenil tiyazol benzimidazol sensör ile çinko iyonu kompleksi
Hg-FcTBz	Ferrosenil tiyazol benzimidazol sensör ile civa iyonu kompleksi
Pb-FcTBz	Ferrosenil tiyazol benzimidazol sensör ile kurşun iyonu kompleksi

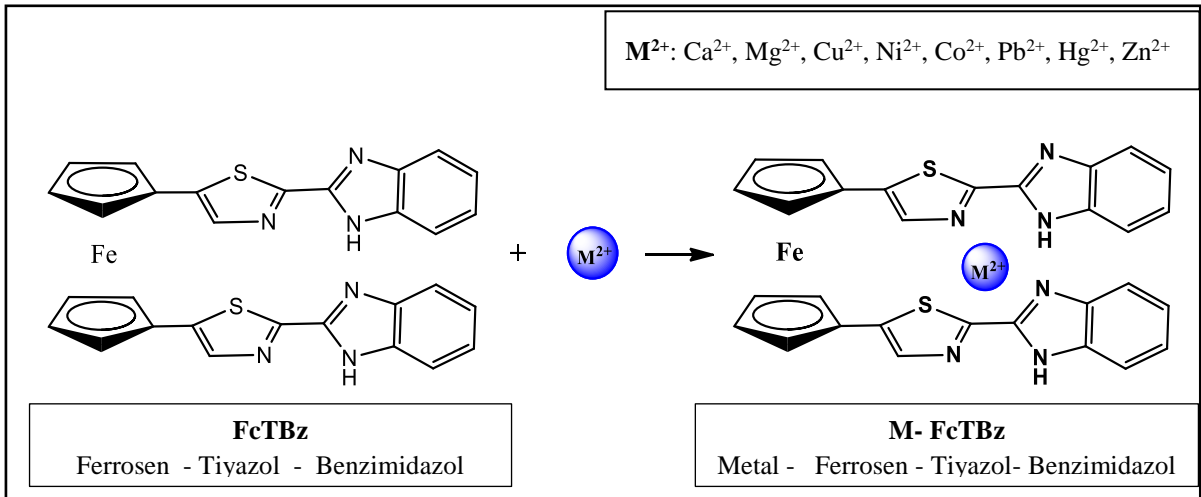


1. GİRİŞ

Son yıllarda biyolojik ve kimyasal alanlarda sensör özellik gösteren moleküllere ilgi oldukça artmıştır. Bu alanda yapılan çalışmalarda sensörün tek özellik yerine çoklu özellik göstermesi, çevresel değişimlere karşı tersinir ve değişebilen optik ve elektronik özellikler gösterebilmesi, kısa sürede yanıt verebilmesi daha avantajlıdır.

Ferrosen, elektrokimyasal duyarlılık gösteren çok güçlü bir redoks sensörüdür [1]. Benzimidazol etkin koordinasyonu ile “akrep tipi” kompleksleri verebilen iyi bir florofordur [2]. Bu iki grup arasında ise bağlayıcı olarak tiyazol molekülü seçilmiştir. Tiyazol grubuna ait kükürt ve azot atomları, metal katyon bağlanma bölgeleri olarak düşünülmüştür.

Yeni tasarlanmış ferrosenil tiyazol benzimidazol sensör, Ca^{2+} , Mg^{2+} , Cu^{2+} , Ni^{2+} , Co^{2+} , Pb^{2+} , Hg^{2+} , Zn^{2+} iyonları ile kompleksleşmesi sonucunda, Fe(II)/Fe(III) redoks çifti gerilim değerlerinin değişmesi, kompleks kararlılık enerjilerinin değişmesi, moleküler orbital enerjileri ve global tanımlayıcı değerleri ile fotofiziksel özellikleri moleküler tanımayı sağlamaktadır. Tasarlanan sensör ve metal iyonları ile oluşturduğu kompleks yapıları Şekil 1’de gösterilmiştir.



Şekil 1. Metal iyonu ile koordine olan ferrosenil tiyazol benzimidazol sensör yapısı.

2. GENEL BİLGİLER

Bu bölüm iki başlık altında incelenmiştir. Birinci kısımda moleküler sensörler ve floresans hakkında kısaca bilgi verildikten sonra, ikinci kısımda teorik hesaplamalar ve kuantum kimyası anlatılmış ve tasarlanan sensöre benzer yapıdaki çalışmalar ile ilgili literatür bilgisi verilmiştir.

2.1. Kimyasal Sensörler

Moleküler sensörler farklı moleküller ile etkileştiğinde farkedilebilir değişiklik gösteren moleküllerdir. Kemosensör olarak da adlandırılan bu özel yapılar, moleküler tanıma olarak sağlar. Kemosensörlerin hedef yapı (analit) ile etkileşmesi; hidrojen bağı, elektrostatik etkileşme, kovalent veya koordine kovalent bağ ile olmaktadır. Sensör – analit etkileşmesi sonucu ortaya çıkan yapı kısa sürede saptanabilir özellikler gösterir. Bu özelliklere örnek olarak renk değişimi, fotoluminesans ve redoks potansiyeli değişimi verilebilir [3].

Sensörler (kemosensörler) için ayırt edici olan özellik organik veya inorganik yapıda olmasından ziyade geçiş metali katyonları ile koordinasyonu yapıp yapmamasıdır. Küçük organik moleküller sensör olarak kullanılabilirdiği gibi makromoleküllerden de sensör molekül oluşturulabilmektedir.

Kemosensörler; optik ve elektrokimyasal sensörler şeklinde verdikleri tepkiler ile sınıflandırılırlar [4].

2.1.1. Elektrokimyasal Sensörler

Elektrokimyasal sensörler, prob metal elektrot ve hedef analiti içeren elektrolit arasındaki etkileşme ile oluşan redoks potansiyelindeki değişimi ölçer. Redoks özellik gösterebilen bir yapı eklenmiş olan sensör molekül, hedef analit ile etkileştiğinde redoks tepkimesi gerçekleşir. Sistemin elektriksel potansiyelinde artma veya azalma görülür [5].

Elektrokimyasal sensörler çoğunlukla oksijen ve/veya toksik gazların saptanmasında kullanılırlar.

2.1.2. Optik Sensörler

Optik sensörlerin çalışması ışığın emisyon prensibine dayanmaktadır. Fotoelektrik sensör olarak da adlandırılabilen bu sensörler ışık kaynağı olacak bir verici ve bir alıcıdan oluşur. Kimyada ise bu durum moleküler absorpsiyon ile floresans yapan moleküllere karşılık gelmektedir.

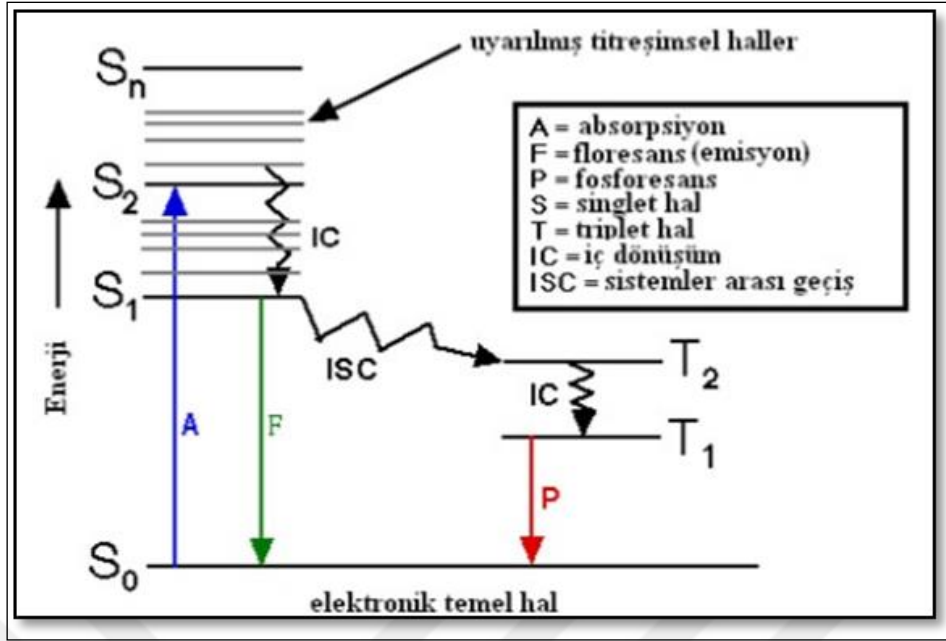
Analitik çalışmalarda oldukça yaygın hale gelen optik sensörler endüstri, biyoteknoloji, ilaç ve çevre alanlarında biyolojik ve kimyasal analitlerin teşhisinde kullanılır. Optik sensörler temel olarak sensör molekülün analit varlığında bir veya daha fazla optik özelliğinin değişimine dayanmaktadır. Bu optik özelliklere örnek olarak absorbans, luminesans ve refraktif indeks değişimi verilebilir. Değişimin nicel (kalitatif) ölçüsüyle analitin miktarı tayin edilmektedir. Optik sensörler; düşük analit konsantrasyonlarında dahi çalışması, hızlı cevap verme özelliği ve gerçekleştirdiği reaksiyonun tersinir olması açısından oldukça avantajlıdır [6].

Analitik kimyada oldukça önemli hale gelen optik sensörler sağladıkları kolaylık bakımından klinik analitik kimyanın gelişmesine olanak sağlamıştır. Pek çok ilaç etken maddesi, çözeltilerde analitik reaksiyona girerek floresans özellik gösteren seçici moleküller yardımı ile teşhis edilmiştir. Biyolojik olarak incelendiğinde ise DNA ve antibadiler de seçici olarak analitik reaksiyona giren böyle sensörlere örnek olarak verilebilir.

2.2.Floresans

Floresans olayı bir atomun elektron, foton veya ışıma ile uyarılması sonucu emisyon spektrumunda değişiklik olması ve ışıma yapması olayıdır. Yapılan ışımanın enerjisi uyarılmayı sağlayan fotonun enerjisinden daha küçüktür ve dolayısıyla daha yüksek dalga boyuna sahiptir. Uyarılma sonucu atomun emisyon spektrumunda değişiklik olmaması “*floresans*”, değişiklik oluşturması ise “*fosforesans*” olarak adlandırılır. Floresans olayında gözle göremeyecek hızda ışıma gerçekleşirken (10^{-10} - 10^{-8} sn), fosforesansta elektron spin değişikliği nedeniyle birkaç saniyelik gözle görülür bir ışıma gerçekleşir [7].

Şekil 2'de bulunan Perrin-Jablonski diyagramında floresans ve fosforesans gibi tüm geçişler gösterilmiştir. Singlet elektronik haller S_0 (temel elektronik hal), S_1 , S_2 olarak, triplet haller T_1 , T_2 olarak ifade edilirler. Burada floresans, S_1 seviyesinden S_2 seviyesine uyarılmış bir elektronun tekrar eski enerji değerine dönerken yaptığı ışımadır.



Şekil 2. Perrin- Jablonski diyagramı.

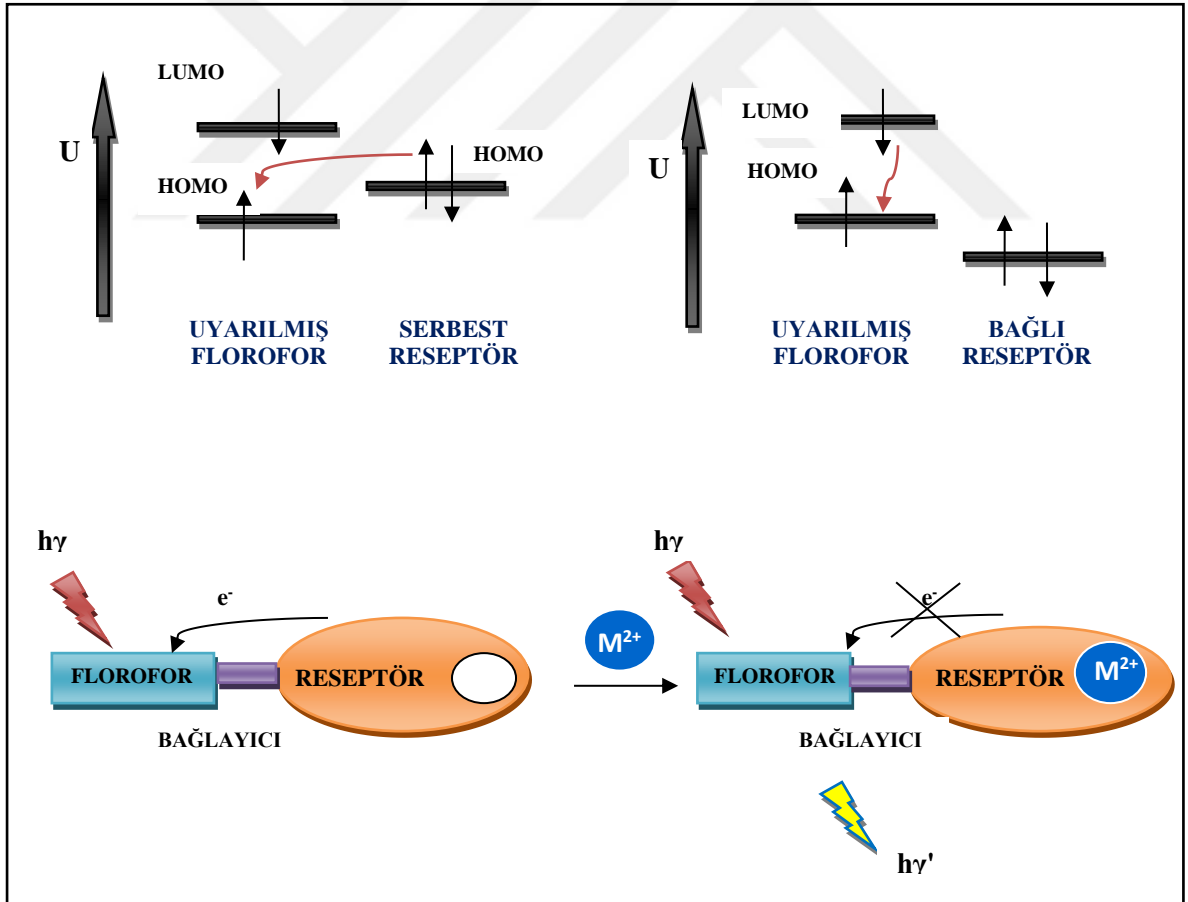
Günümüzde floresans ve fosforesans şiddetlerinin ölçümü ile pek çok inorganik ve organik türün kalitatif ve kantitatif tayini yapılmaktadır.

2.3. Elektron Transferi

Metal iyonları için sensör moleküllerin tasarımında esas olan gruplar; metal ile etkileşime girecek olan reseptör ve floresan özellik gösterecek olan florofor yapılarıdır. Metal iyonu yani analit ile reseptör arasında oluşan koordinasyon sonucu florofor grup tarafından floresans olayı gözlenir. Bu esnada gerçekleşen elektron transferini, foton kaynaklı elektron transferi, PET (Photoinduced electron transfer) ve foton kaynaklı molekül içi yük transferi, ICT (Photoinduced charge transfer) şeklinde sınıflandırabiliriz.

2.3.1. Fotokimyasal Elektron Transferi (PET)

Floresans özellik gösteren sensör moleküllerin tasarımında en fazla kullanılan mekanizmadır. Fotona bağlı elektron transferinde sensör molekül üç kısımdan oluşmaktadır; florofor, bağlayıcı ve reseptör. Reseptör birimi için genel olarak elektron verici gruplar seçilirken, florofor birimi için ise elektron alıcı gruplar seçilmektedir [8,9].



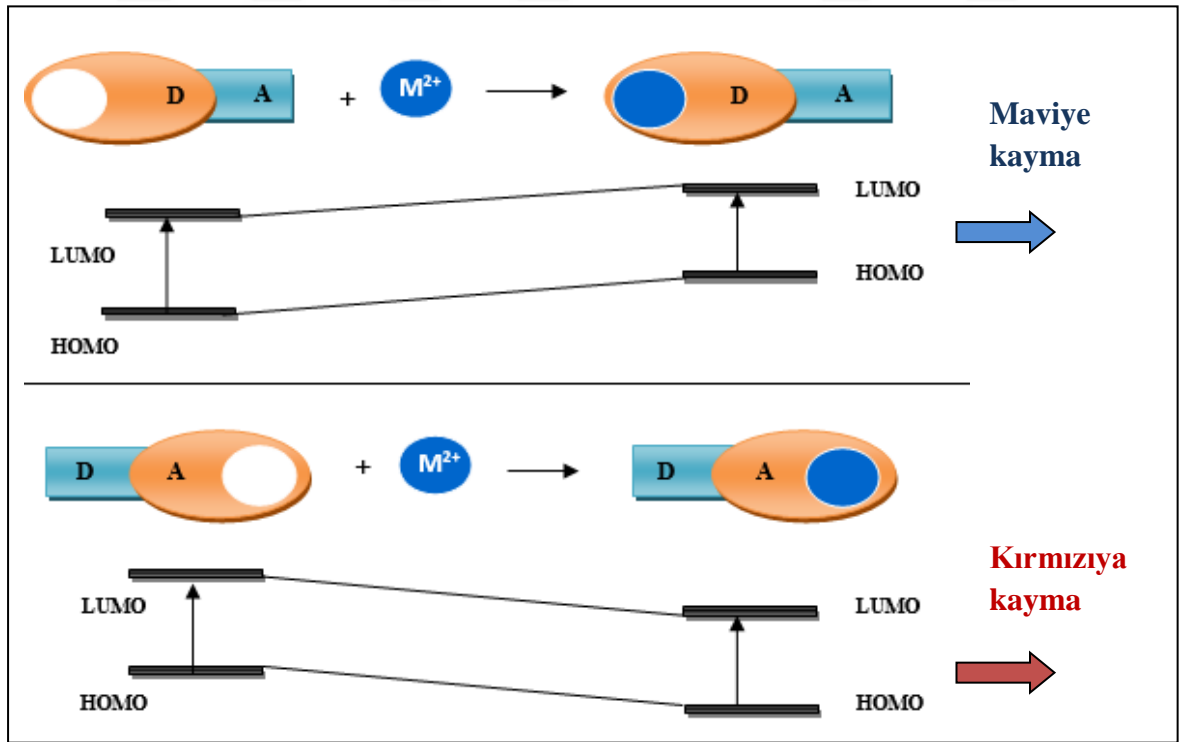
Şekil 3. PET mekanizması.

Moleküllerde uyarılma sonucu, florofor grubunda bulunan elektron, en yüksek dolu moleküler orbitalinden (HOMO), en düşük boş moleküler orbitaline (LUMO) aktarılır.

Uyarılmış molekülün temel haline dönebilmesi için iki seçeneği bulunmaktadır. Birincisi reseptör grubun HOMO enerji seviyesi, florofor grubunun HOMO enerji seviyesinden yüksekse uyarılma sonrasında elektron verici reseptör grubunun HOMO enerji seviyesinde bulunan elektron, elektron alıcı özellikli florofor grubunun HOMO seviyesine sensörde bulunan bağlayıcı üzerinden aktarılır. Bu durumda floroforda uyarılmış elektronun LUMO seviyesinden kendi HOMO seviyesine inmesi engellenir ve ışıma gerçekleşir. İkinci olarak ise metal katyonu varlığında ise metal- reseptör koordinasyonu ile reseptör kararlı hale gelir. HOMO enerji seviyesi düşer. Bu şekilde reseptör grubunun HOMO enerjisi, florofor grubun HOMO enerjisinden düşük olduğunda florofor grubunun LUMO orbitalinden HOMO orbitaline elektron transferi olur ve ışıma gerçekleşir. Bu şekilde gerçekleşen elektron transferine “Fotokimyasal elektron transferi (PET)”, sensöre ise “PET tipi kemosensör” denir. Mekanizma Şekil 3’te gösterilmektedir.

2.3.2. Molekül İçi Yük Transferi (ICT)

Molekül içi yük transferi mekanizması (ICT) için florofor ve reseptör kısımlarının bulunması yeterlidir. PET mekanizmasındaki gibi arada bağlayıcı bulunmasına gerek yoktur, reseptör doğrudan florofor grubuna bağlıdır. İçeriğinde elektron verici / elektron çekici grup bulunduran bu yapılarda molekül içinde yük transferi olmaktadır [8,9]



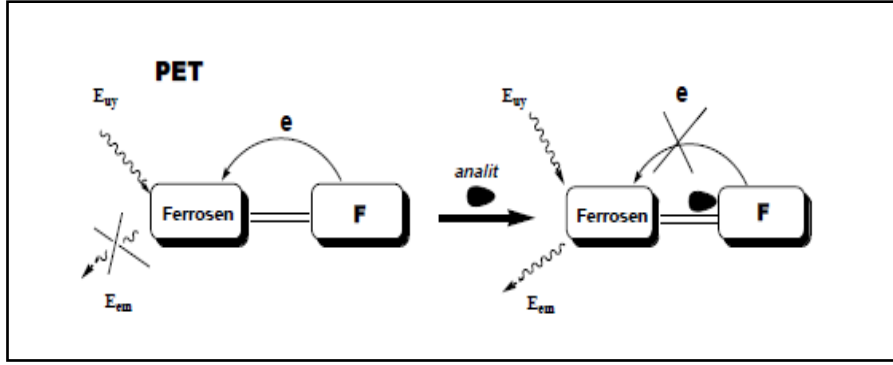
Şekil 4. ICT mekanizması.

Donör ve akseptörden oluşan yapının uyarılması sonucu dipol momentte değişim meydana gelir. Dipol momentte meydana gelen değişim, sistem içerisinde elektron transferine neden olur. Bu mekanizmaya “Molekül içi yük transferi (ICT)” denilmektedir. Dipol momentte meydana gelen değişim, floroforda kırmızıya kayma veya maviye kayma şeklinde bir Stokes kaymasına neden olur. Bu tür sensörlerde, florofor grubuna elektron verici grup bağlı olması durumunda katyon ile etkileşme sonucu yapının HOMO ve LUMO enerji seviyeleri artar. Şekil 4’te gösterildiği üzere, florofor grubunun absorpsiyon spektrumunda “maviye kayma” gözlenir. Öte yandan metal iyonunun, florofor grubuna bağlı elektron alıcı bir grup ile kompleksleşmesi sonucu HOMO ve LUMO enerji seviyeleri azalacak ve emisyon spektrumunda “kırmızıya kayma” gözlenecektir.

2.4. Ferrosen ve Türevleri

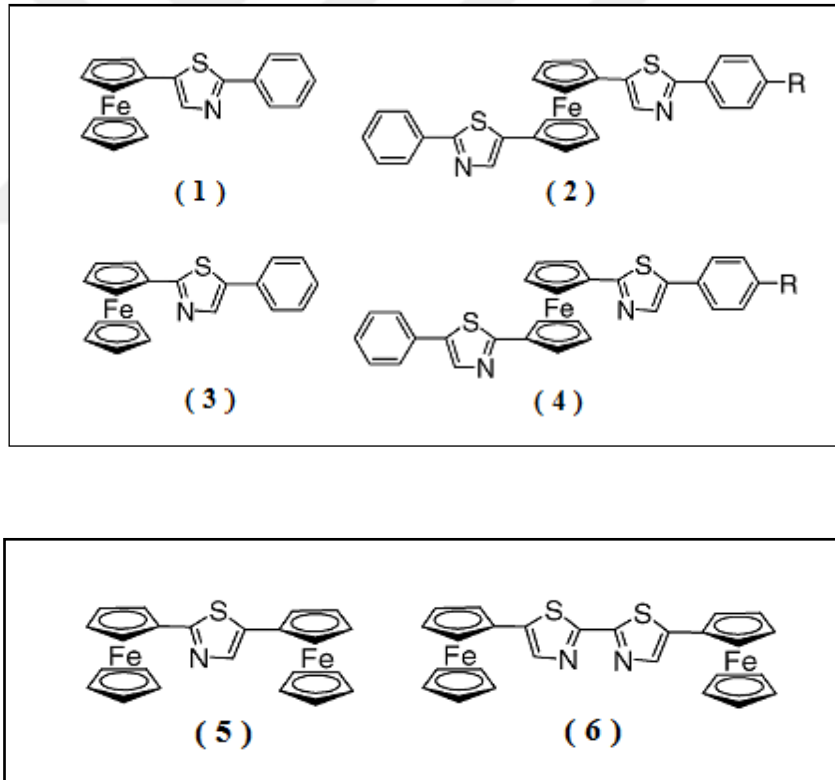
Çalışılan ferrosenil tiyazol benzimidazol sensörün birimlerinin en önemlilerinden biri ferrosendir. Ferrosen, anyon, katyon ve hatta nötr moleküllere duyarlı olan seçici bağlanma özelliğine sahip eşsiz bir moleküldür. Ferrosen molekülü içeren makrohalkasal yapılarda, komşu reseptör kısmına katyon bağlanması sonucu elektrostatik etkileşmeler yoluyla ferrosen/ ferrosenyum çiftinin redoks potansiyelinde kaymalar meydana gelir [10]. Ayrıca metal katyonun ferrosen biriminin hemen yanındaki birime bağlanması sonucu ferrosen biriminin UV/Görünür bölge spekturumu etkilenmektedir. Ferrosenin komşu molekülünün metal kompleksleşmesi veya protonlanması ile ferrosen spin-izinli absopsiyon bandında daha düşük enerjiye, yani kırmızıya kayma görülür (400-500 nm). Bu özelliklerinden dolayı ferrosen molekülü redoks ve renkölçer özellikleri hedeflenen sensör molekül olarak özellikle seçilmiştir.

Ferrosen türevlerinin floresans söndürücü özellikleri de bulunmaktadır. Molekül grubunda misafir ya da analit bulunmadığı durumlarda, ferrosen molekülü fotoindüklenmiş elektron transferi (PET) mekanizması ile floresan özelliğini söndürmektedir. Şekil 5’te görüldüğü üzere, analit varlığı bu durumu engellemekte ve floresans olayı gözlenebilmektedir.



Şekil 5. Ferrosenin floresans söndürücü olarak mekanizması.

Ferrosenil tiyazol benzimidazol türevleri özellikle iki değerlikli katyonlara karşı seçicidir. Şekil 7’de gösterilen 5-ferroseniltiyazol (1) optik ve redoks sensörü özellikleri ile Hg^{2+} ve Pb^{2+} katyonlarına duyarlıdır. 1,1’-bis(tiyazol)ferrosen (2) sadece optik özellik gösteren bir sensördür. Ferrosenil tiyazol (3), Hg^{2+} katyonuna duyarlıdır. Bis(tiyazolil)ferrosen (4) molekülü ise Zn^{2+} , Cd^{2+} , Hg^{2+} , Ni^{2+} ve Pb^{2+} katyonlarına karşı duyarlıdır [11].

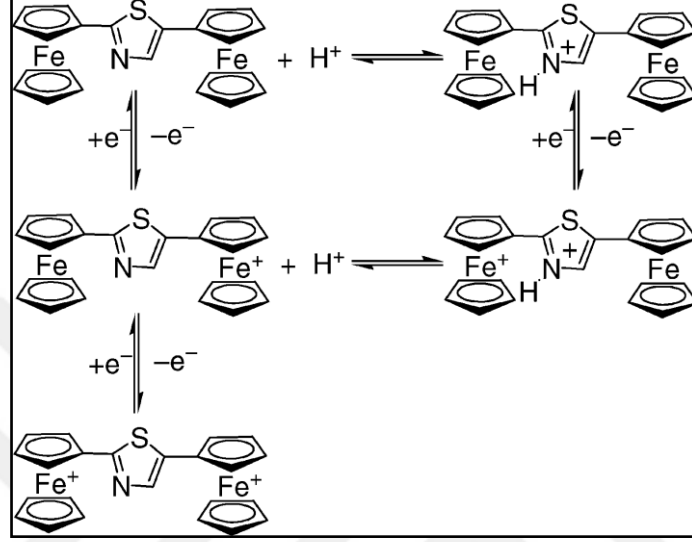


Şekil 6. Ferrosen türevleri.

Şekil 6’da gösterilen bis(ferrosenil)tiyazol (5) Zn^{2+} , Cd^{2+} , Hg^{2+} , Ni^{2+} ve Pb^{2+} katyonlarına karşı hem redoks hemde optik özellik gösterirken, bir tiyazol grubunun daha köprüye eklenmesi sonucu (6) durum daha farklılaşmıştır. (6) nolu molekül; Zn^{2+} , Cd^{2+} , Ni^{2+}

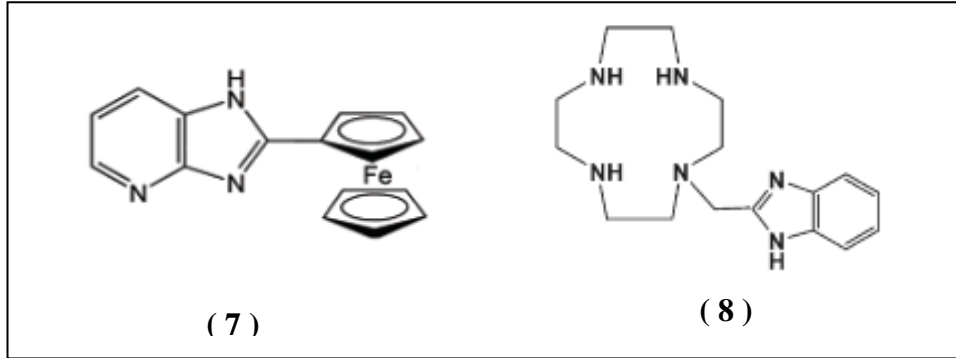
iyonları varlığında turuncudan maviye renk değişimi ile Hg^{2+} varlığında turuncudan yeşile renk değişimi gösteren kemosensör özellik göstermektedir.

(5) nolu birleşikte ferrosen/ ferrosenyum biriminin redoksuna ek olarak Şekil 7’de gösterilen deprotonlanma / reprotonlanma olayı görülmektedir. Bu nedenle bu bileşik birbirine yakın iki adet tersinir tek-elektron yükseltgenmesi göstermiştir.



Şekil 7. Ferrosenin deprotonlanma / reprotonlanma tepkimesi.

Şekil 8 ‘de gösterilen (7) numaralı molekül, Pb^{2+} iyonuna duyarlı olan, yeni bir redoks potansiyel kayması (0.15V) ve renk değişimi gösteren (renksizden turuncu renk) ve floresans verebilen bir kemosensördür [12].



Şekil 8. Ferrosen ve benzimidazol türevleri.

Cuhuburu grubu tarafından sentezlenen (8) nolu molekül, Cu^{2+} , Zn^{2+} ve Cd^{2+} iyonları varlığında sadece Zn^{2+} iyonuna karşı floresans özellik göstermiştir [13].

2.5. Hesapsal Yöntemler

Bilgisayar teknolojilerinin gelişmesi kimyasal hesaplamaların bilgisayar ile yapılması konusunu da beraberinde getirmiştir. Bugün gelişen teknoloji ile teorik hesaplamalar, deneysel çalışmadan önce yol gösterici olarak ve/veya deneysel çalışmalarını izlemek, test etmek ve doğrulamak amacıyla kullanılmaktadır.

Hesapsal yöntemler moleküler mekanik ve kuantum mekaniği olarak ikiye ayrılmaktadır. Moleküler mekanikte, molekülün atomlar arası etkileşimleri mekanik kurallar ile incelenmektedir. Molekül, birbirine bağlanmış atomlar olarak ele alınırken bağlı olmayan atomlar arasındaki etkileşim de incelenir.

Kuantum mekaniği ise 1925'te Heisenberg, Born, Jordon ve 1926'da Schrödinger tarafından klasik fizik ile açıklanamayan problemlere çözüm getirmek amacıyla geliştirilmiştir. Bu metot ile atomlar arası değil elektron ve çekirdekler arası etkileşimler incelenmektedir. Moleküller, moleküler orbital ve bu orbitallerin dalga fonksiyonu ile ifade edilir. Kuantum mekaniği Yarı Deneysel (Semi empirical), Ab-Initio ve Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi metotları olarak üç grupta incelenmektedir. Bu tez çalışmasında Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT) ile çalışıldığından bu yöntem hakkında bilgi verilecektir.

2.5.1. Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT)

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi (Density Functional Theory, DFT) 1927'de Fermi [14] ve Thomas'ın [15] çalışmalarını temel alan Hohenberg- Kohn teoremleri [16] ile daha sonra Kohn ve Sham [17] kuantum mekanik çalışmalarından elde edilen metotlara dayanmaktadır.

Yoğunluk fonksiyoneli teorisinde Kohn ve Sham'ın teorisine göre elektronik enerjinin dört bölümde incelenmesi gerektiği kabul edilmektedir.

$$E = E^T + E^V + E^J + E^{XC}$$

E^T : Elektronların hareketinden kaynaklanan kinetik enerji terimi

E^V : Çekirdek-elektron arası çekim ve çekirdek çiftleri arasındaki itme potansiyel enerjisi terimi

E^J : Elektron – elektron arası itme terimi

E^{XC} : Elektronlar arası etkileşimi içeren terim (Değişim ve korelasyon terimleri)

Hartree Fock (HF) metodunda elektronların anlık pozisyonları dikkate alınarak hesaplama yapılmaktadır. HF metodunda elektron-elektron etkileşmelerinde korelasyon etkileri dikkate alınmamaktadır. Bu nedenle hesaplamalarda HF metodu istenilen doğrulukta sonuçlar verememektedir. Bu amaçla geliştirilen yoğunluk fonksiyoneli teoreminde ise elektron yoğunluğu, elektron yoğunluk fonksiyonu ile elektron korelasyon modeline dayanmaktadır [18,19]. Bu teorem temel seviye enerjisinin, elektron yoğunluğunun bir fonksiyonu olduğunu belirtir.

DFT metotları bir korelasyon fonksiyonu ile bir değişim fonksiyonunun birleşiminden oluşur. Özellikle son yıllarda, yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) teorik modellemede yaygın bir kullanıma sahiptir. Bunun nedeni, bu teoride hesaplamalara elektron korelasyonunu dahil etmesi ve buna karşın daha az bilgisayar zamanı gerektirmesidir. Bunun yanında yapılan çalışmalar yoğunluk fonksiyoneli teorisinin moleküler geometri, dipol moment, titreşim frekansları gibi birçok özelliğin hesaplanmasında deneysel değerlere oldukça yakın sonuçlar verdiği işaret etmektedir.

2.5.2. B3LYP Hibrit Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi

B3LYP hibrit metodu, Becke'nin üç parametrelili enerji fonksiyoneli hibrit yaklaşımı [20] ile Lee, Yang ve Parr'ın korelasyon fonksiyoneli [21] oluşur. B3LYP metodunun üstünlüğü dalga mekaniğine dayanan Hartree Fock (HF) yöntemi ve saf DFT modellerinin karma modellerinden üretilmesidir. Bu sayede her iki modelin negatif tarafları elimine edilmiş ve pozitif tarafları öne çıkartılarak hesapsal çalışmalar daha üst bir seviyeye çıkarmıştır. Bu karma modeller ile toplam enerji, bağ uzunluğu, iyonizasyon enerjisi, elektronegatiflik, sertlik gibi değerler saf modellerden daha iyi sonuçlar vermektedir. Biyomoleküler sistemler için yaygın olarak kullanılmaktadır.

2.5.3. LanL2DZ Temel Seti

LanL2DZ temel setinde "Etkin Çekirdek Potansiyeli (ECP)" ifadesi kullanılmaktadır. İlk kez Hellman tarafından 1935'te önerilen bu metot periyodik tablonun üçüncü sıra ötesi elementleri için kullanılır [22]. Büyük çekirdekli bu elementlerde çekirdeğe yakın olan elektronlar etkin çekirdek potansiyeli ile ifade edilir. Bu yaklaşımda, kimyasal olarak durağan olan çekirdek elektronlarının etkisi ifade edilir ve değerlik elektronlara odaklanılır. Metot, ağır elementlerde önemli olan relativistik etkiyi belirtir [23].

2.6. Elektronik Parametreler

Global tanımlayıcı parametreler olan kimyasal potansiyel (μ), elektronegativite (χ), elektrofilisite (w), sertlik (η) ve yumuşaklık (σ) gibi değerler ile sistemin kararlılığı ve reaktivitesi hakkında bilgi edinilebilir.

2.6.1. Global Tanımlayıcıların Hesaplanması

Elektronegatiflik, bir atomun bağlı olduğu diğer atomlardan elektron çekme yeteneğidir. Elektronegatiflik, iyonizasyon potansiyeli (I) ve elektron ilgisi (A) ile hesaplanmaktadır.

$$\chi = \frac{1}{2} (I + A)$$

Koopmans teoremine göre iyonizasyon potansiyeli (I) ve elektron ilgisi (A) değerleri, sınır orbital enerjileri olan HOMO ve LUMO değerleri ile de ifade edilebilir.

$$- \epsilon_{\text{HOMO}} = I \quad \text{ve} \quad - \epsilon_{\text{LUMO}} = A$$

Kimyasal potansiyel, belirli bir yapının sisteme eklenmesi ile Gibbs serbest enerjisindeki değişimdir. Kimyasal potansiyel, termodinamik kararlılık ile ters orantılıdır [24].

$$\mu = - \frac{1}{2} (I + A) = - \chi = \frac{1}{2} (\epsilon_{\text{HOMO}} + \epsilon_{\text{LUMO}})$$

Sertlik (η) ve yumuşaklık (σ) kavramları ise ilk kez Pearson ve Parr tarafından kullanılmıştır [25]. Global sertlik arttıkça yapının termodinamik kararlılığı artmaktadır. Sert moleküllerde sınır orbitalleri arasındaki fark yüksektir. Yumuşaklık, sertliğin tersi şeklinde hesaplanmaktadır.

$$\eta = \frac{1}{2} (\epsilon_{\text{LUMO}} - \epsilon_{\text{HOMO}})$$

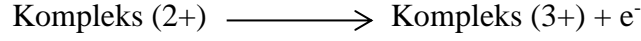
$$\sigma = 1/\eta$$

Elektrofilisite (w) yapının elektrofil alma isteğidir. Elektrofilik özelliğin yüksek olması yapının kararsız olduğunu göstermektedir.

$$w = \mu^2 / (2\eta)$$

2.6.2. Hesapsal İndirgenme Potansiyeli Hesaplamaları

Sensörün, metal iyonları ile kompleks oluşturma tepkimelerinin standart elektrot potansiyelleri hesaplanmıştır. Hesaplamalar Born- Haber termokimyasal çevrimine uygun olarak yapılmıştır. Redoks potansiyelini hesaplamak amacıyla gaz fazında ferrosenin +2 ve +3 yüklü kompleksler ile yapılan optimizasyon hesabı sonuçlarından molekülün Gibbs serbest enerji değerleri [$G^{+2}(g)$], [$G^{+3}(g)$] hesaplanmıştır.



+2 ve +3 yüklü moleküllerin serbest enerji değerleri arasındaki fark alınmıştır, bu değer gaz fazında gerçekleşen yükseltgenme reaksiyonunun serbest enerji değişimini verir. [$\Delta G_{\text{Yüks.}}(\text{gaz})$]

$$\Delta G_{\text{Yüks.}}(\text{gaz}) = \Delta G^{+3}(\text{gaz}) - \Delta G^{+2}(\text{gaz})$$

Çalışmanın devamında su fazında benzer hesaplamalar yapılarak serbest solvasyon enerji değerleri hesaplanmıştır. [$\Delta G_{\text{su.}}(\text{II})$ ve $\Delta G_{\text{su.}}(\text{III})$]

Su fazındaki yükseltgenme reaksiyonu Gibbs serbest enerji değişimi aşağıdaki tepkimeye göre hesaplanmıştır.

$$\Delta G_{\text{Yüks.}}(\text{su}) = \Delta G_{\text{Yüks.}}(\text{gaz}) + \Delta G_{\text{su.}}(\text{II}) + \Delta G_{\text{su.}}(\text{III})$$

$\Delta G_{\text{Yüks.}}(\text{su})$, Hartree Fock cinsinden hesaplandığından eV birimine çevrilir.

$$E = \Delta G / -nF$$

İndirgenme potansiyeli hesabı için, denklemde değerler yerine konularak E_0 hesaplanır. Denklemde n aktarılan elektron sayısıdır, burada tepkimeye dahil olan elektron sayısı 1 olduğundan, $n=1$ 'dir. F ise Faraday sabitidir (96500 C).

3. ÇALIŞMA PLANI

Bu tez çalışmasında redoks, renk değişimi ve floresans özellik göstermesi beklenen metal iyonlarına duyarlı ferrosenil tiyazol benzimidazol sensöre ait elektronik, elektrokimyasal ve fotofiziksel hesaplamalar, Gaussian09 Revision C.01 moleküler modelleme programı, yoğunluk fonksiyoneli kuramı (DFT), hibrit fonksiyoneli B3LYP ve LanL2DZ (Los Alamos National Laboratory 2 double ζ) temel seti kullanılarak gerçekleştirilmiştir.

Bu tez çalışması için seçilen DFT/ B3LYP/ LanL2DZ metodu ile temel seti TÜBİTAK 1001 programı 211T028 numaralı projesi referans alınarak belirlenmiştir [26]. Belirtilen TÜBİTAK projesinde, ferrosen-BODIPY molekülünün DFT metodu ve B3LYP, M06, PBE1PBE, B3P86 hibrit metotları ile hesaplamaları yapılmış ve sonuçlar literatürde bulunan deneysel verilerle karşılaştırılmıştır [27]. En uygun sonucu veren B3LYP/LanL2DZ temel seti ile çalışmalara devam edilmiştir. Ferrosenil tiyazol benzimidazol sensörünün hesaplamalarında da bu metodun kullanılması uygun bulunmuştur.

Metot belirleme aşamasından sonra tasarlanan sensörün metalsiz halinin (FcTBz) ve metal iyonları varlığında (M-FcTBz, M: Mg^{2+} , Ca^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} , Hg^{2+} , Pb^{2+}) optimizasyon hesaplamaları yapılmıştır. Optimize edilen yapıların minimum yapı olup olmadığını belirlemek amacıyla frekans hesaplamaları yapılmıştır. Optimizasyon ve frekans hesaplamalarında kullanılan anahtar kelimeler gaz fazı için, “# opt freq b3lyp/lanl2dz geom=connectivity scf=xqc”; su fazı için, “# opt freq b3lyp/lanl2dz scrf=(solvent=water) geom=connectivity # opt freq b3lyp/lanl2dz geom=connectivity scf=xqc” şeklindedir.

Tasarlanan sensör molekülünün, canlı sistemlerde uygulaması hedeflendiğinden hesaplamalar su fazında da yapılmıştır. Tüm hesaplarda anahtar kelime olarak “scf=xqc” kullanılmıştır. SCF (self-consistent field) metodunda orbitaller her döngüde geliştirilir ve hesaplama, sabit minimum bir enerji değerine ulaşılan kadar devam eder. Ulaşılan bu son duruma “Self Consistent Field”, yani kendi içerisinde tutarlı alan denilmektedir. Hesaplamalar “kısıtlanmış Hartree Fock (RHF)” olarak yapılmıştır.

Çalışma üç ana başlık altında yapılmıştır. İlk olarak elektronik özellikler incelenmiştir. Sırasıyla yapısal özellikler, metal iyonları ile kompleks kararlılık enerjileri, moleküler orbital enerjileri ve global tanımlayıcılar değerlendirilmiştir. İkinci bölümde elektrokimyasal özellikler ele alınmıştır. Son bölümde ise fotofiziksel özellikler verilmiştir.

Çalışmanın ilk bölümünde optimizasyon ve frekans hesapları tamamlanmış olan komplekslerin Mulliken yükü, bağ uzunluğu ve dipol moment gibi yapısal özellikleri incelenmiştir. Sensörün metal iyonları ile oluşturduğu komplekslerin kararlılığını görmek amacıyla yapılan hesaplamalarda tepkime toplam enerji değişimleri (ΔE), Gibbs serbest enerji değişimleri (ΔG), entalpi değişimleri (ΔH) ve entropi değişimleri (ΔS) yorumlanmıştır. Sensörün metal iyonları varlığında oluşturduğu komplekslere ait HOMO ve LUMO sınır orbitaller enerjileri ve HOMO-LUMO bant genişlikleri incelenmiştir. Metal iyonunun, sensör ile orbital etkileşimleri ve elektron transferi araştırılmıştır.

Çalışmanın devamında komplekslerin kimyasal ve biyokimyasal reaktivitelerini tespit etmek amacıyla global tanımlayıcı parametreler hesaplanmıştır. Global tanımlayıcı parametrelerden kimyasal potansiyel (μ), elektronegatiflik (χ) elektrofilisite (w) ve sertlik (η) değerleri incelenmiştir.

Çalışmanın ikinci bölümünde hesapsal indirgenme potansiyeli hesaplamaları yapılmıştır. Redoks indirgenme potansiyel değerlerinden, sensörün hangi metal iyonundan daha fazla etkilendiği bulunmuştur.

Çalışmanın son bölümünde ise sensörün ve metal iyonları ile oluşturduğu komplekslerin UV-görünür bölge spektrumlarından renk değişimi, absorbans ve floresans özellikleri incelenmiştir. Maksimum absorpsiyon ve emisyon dalgaboyları ile osilatör güç değerleri bulunmuştur. UV-Görünür bölge hesaplamaları için TD (time-dependent) yöntemi, gaz faz için kullanılan anahtar kelimeler “ # *td=(nstates=24) b3lyp/lanl2dz geom=connectivity scf=xqc* ” , su fazı için kullanılan anahtar kelimeler, “ # *td=(nstates=24) b3lyp/lanl2dz scrf=(solvent=water) geom=connectivity scf=xqc*” şeklindedir.

Yapılan çalışmalar sonucunda ferrosenil tiyazol benzimidazol sensörün hangi metal iyonu veya iyonlarına karşı seçici olduğu önerilmiştir.

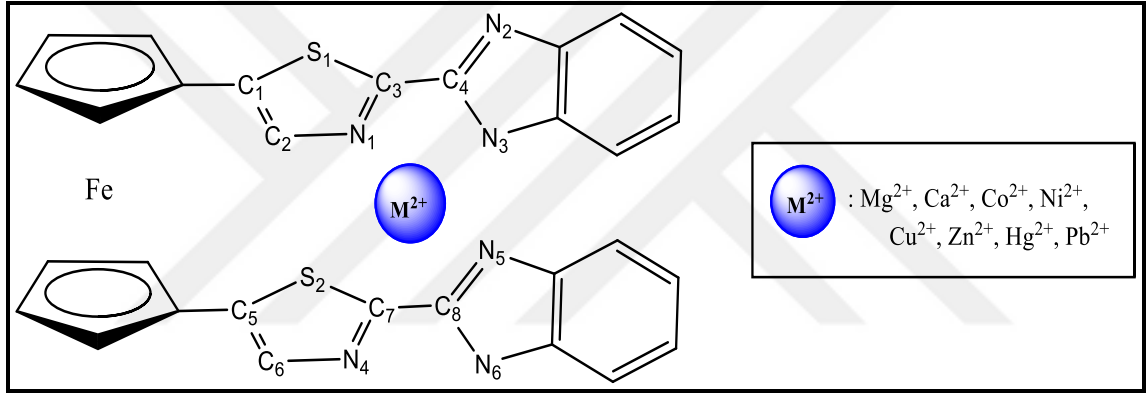
4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Tasarlanan sensörün, metal iyonları ile kompleks oluşturması sonucunda elde edilen elektronik özellikler, elektrokimyasal özellikler ve fotofiziksel özelliklere ait sonuçlar bu bölümde sunulmuştur.

4.1. Elektronik Özellikler

4.1.1. Yapısal Özellikler

Tasarlanan sensörün ve metal iyonları ile oluşturduğu komplekslerin optimizasyon ve frekans hesaplamaları tamamlandıktan sonra ilk olarak yapısal özellikleri incelenmiştir. Mulliken yükü, bağ uzunluğu ve dipol moment özellikleri yorumlanmıştır. Yükler ve bağ uzunlukları incelemesinde seçilen atomlar Şekil 10'da gösterilmiştir.



Şekil 9. Mulliken yükleri ve bağ uzunlukları için seçilen atomlar.

Metal iyonu ile oluşan komplekslerin yük dağılımı (Tablo 1 ve Tablo 2) incelendiğinde, gaz ve su fazında sensörün ferrosen birimine ait Fe²⁺ iyonunun Mulliken yükü, kompleksleşme sonucu azalmıştır. Fe²⁺ iyonu sensörden elektron almıştır. Sadece Cu²⁺ iyonu ile oluşan komplekste, su fazında ferrosen birimine ait Fe²⁺ iyonu elektron vermiştir.

Sensörün metal iyonları ile koordinasyonu sonucu her iki fazda da tiyazol ve benzimidazol birimine ait C₄, C₈, N₁, N₃ ve N₄ atomlarının yükleri daha pozitif değerlere dönüşmüştür. Özellikle N₁ atomunun yük değeri Ni²⁺ metal iyonu varlığında belirgin şekilde artmıştır. Sensörün Ni²⁺ metal iyonu ile kompleksleşmesi sonucu su fazında Ni²⁺ iyonunun yükü +2'den +0,2 değerine, Cu²⁺ metal iyonu ile kompleksleşme sonucu Cu²⁺ iyonunun yükü +2'den +0,4 değerine düşmüştür. Ni²⁺ ve Cu²⁺ iyonları ile oluşan komplekslerde sensör elektron alırken, metal iyonları elektron vermiştir.

Tablo 1. Gaz fazında moleküllerin yükleri.

GAZ FAZI									
İsim	FcTBz	Mg- FcTBz	Ca- FcTBz	Co- FcTBz	Ni- FcTBz	Cu- FcTBz	Zn- FcTBz	Hg- FcTBz	Pb- FcTBz
Metal	-	1,210	1,605	1,172	0,219	0,442	1,050	0,897	1,098
Fe	-0,078	-0,182	-0,163	-0,164	-0,151	-0,022	-0,145	-0,147	-0,173
C₁	-0,251	-0,337	-0,338	-0,315	-0,319	-0,333	-0,342	-0,308	-0,338
C₂	-0,392	-0,193	-0,211	-0,158	-0,318	0,254	-0,265	-0,181	-0,254
C₃	-0,356	-0,576	-0,581	-0,546	-0,465	-0,594	-0,662	-0,557	-0,607
C₄	0,286	0,400	0,393	0,402	0,361	0,400	0,436	0,380	0,386
N₁	-0,055	-0,270	-0,308	-0,387	0,073	-0,004	0,015	-0,275	-0,038
S₁	0,318	0,283	0,267	0,248	0,158	0,259	0,233	0,233	0,288
N₂	-0,182	-0,398	-0,409	-0,392	-0,384	-0,411	-0,377	-0,397	-0,418
N₃	-0,428	-0,434	-0,461	-0,479	-0,364	-0,362	-0,508	-0,360	-0,341
C₅	-0,292	-0,352	-0,358	-0,354	-0,332	-0,318	-0,312	-0,349	-0,347
C₆	-0,378	-0,148	-0,215	-0,253	-0,212	-0,270	-0,172	-0,258	-0,155
C₇	-0,356	-0,543	-0,577	-0,589	-0,612	-0,577	-0,605	-0,617	-0,535
C₈	0,235	0,368	0,381	0,413	0,406	0,376	0,420	0,425	0,395
N₄	-0,012	-0,342	-0,318	0,022	0,092	-0,002	-0,366	0,023	-0,404
S₂	0,280	0,400	0,257	0,117	0,318	0,220	0,313	0,185	0,229
N₅	-0,082	-0,402	-0,410	-0,374	-0,421	-0,399	-0,395	-0,381	-0,402
N₆	-0,475	-0,440	-0,457	0,528	-0,298	-0,373	-0,465	-0,403	-0,432

Tablo 2. Su fazında moleküllerin yükleri.

SU FAZI									
İsim	FcTBz	Mg- FcTBz	Ca- FcTBz	Co- FcTBz	Ni- FcTBz	Cu- FcTBz	Zn- FcTBz	Hg- FcTBz	Pb- FcTBz
Metal	-	1,747	1,775	1,507	0,228	0,449	1,425	1,758	1,192
Fe	-0,046	-0,085	-0,090	-0,088	-0,093	0,088	-0,084	-0,075	-0,104
C₁	-0,281	-0,340	-0,335	-0,339	-0,296	-0,298	-0,312	-0,364	-0,333
C₂	-0,391	-0,287	-0,224	-0,179	-0,290	-0,187	-0,282	-0,295	-0,173
C₃	-0,364	-0,652	-0,556	-0,533	-0,437	-0,580	-0,721	-0,622	-0,530
C₄	0,237	0,454	0,366	0,395	0,333	0,413	0,479	0,310	0,445
N₁	-0,066	-0,058	-0,262	-0,356	0,019	-0,065	-0,030	-0,039	-0,407
S₁	0,294	0,163	0,162	0,167	0,151	0,242	0,257	0,155	0,169
N₂	-0,134	-0,401	-0,405	-0,389	-0,376	-0,391	-0,393	-0,430	-0,389
N₃	-0,414	-0,484	-0,354	-0,420	0,248	-0,353	-0,463	-0,120	-0,407
C₅	-0,296	-0,384	-0,364	-0,334	-0,306	-0,318	-0,316	-0,364	-0,315
C₆	-0,385	-0,287	-0,273	-0,265	-0,203	-0,258	-0,306	-0,294	-0,252
C₇	-0,366	-0,604	-0,653	-0,673	-0,605	-0,574	-0,709	-0,621	-0,687
C₈	0,239	0,290	0,401	0,435	0,408	0,401	0,286	0,310	0,424
N₄	-0,071	-0,034	-0,029	-0,012	0,058	-0,029	-0,036	-0,038	0,015
S₂	0,294	0,156	0,188	0,231	0,354	0,241	0,217	0,155	0,274
N₅	-0,133	-0,425	-0,421	-0,405	-0,394	-0,390	-0,427	-0,431	-0,427
N₆	-0,416	-0,130	-0,335	-0,437	-0,301	-0,354	-0,112	-0,121	-0,305

Tablo 3. Gaz fazı sensör ve metal iyonları ile komplekslerin bağ uzunlukları (Å).

GAZ FAZI									
İncelenen Bağ	FcTBz	Mg-FcTBz	Ca-FcTBz	Co-FcTBz	Ni-FcTBz	Cu-FcTBz	Zn-FcTBz	Hg-FcTBz	Pb-FcTBz
C ₁ -C ₂	1,388	1,429	1,425	1,404	1,487	1,457	1,459	1,401	1,462
C ₁ -S ₁	1,813	1,815	1,822	1,385	1,757	1,795	1,847	1,840	1,793
C ₂ -N ₁	1,384	1,336	1,339	1,354	1,296	1,311	1,306	1,358	1,308
N ₁ -C ₃	1,326	1,474	1,470	1,476	1,429	1,450	1,480	1,467	1,449
S ₁ -C ₃	1,811	1,965	1,975	1,961	2,071	2,001	1,810	1,968	1,987
C ₃ -C ₄	1,447	1,489	1,490	1,498	1,481	1,490	1,509	1,497	1,491
C ₄ -N ₂	1,343	1,365	1,373	1,365	1,383	1,374	1,363	1,369	1,374
C ₄ -N ₃	1,391	1,347	1,346	1,353	1,344	1,344	1,349	1,344	1,349
S ₁ -M*	-	4,476	4,767	4,351	4,605	4,610	2,847	4,528	5,364
N ₁ -M*	-	2,193	2,536	2,039	3,133	2,570	4,406	2,315	3,148
N ₂ -M*	-	4,177	4,536	4,079	4,169	4,074	4,169	4,349	4,639
N ₃ -M*	-	2,092	2,448	2,028	1,965	1,912	1,992	2,299	2,489
C ₅ -C ₆	1,383	1,404	1,418	1,458	1,474	1,450	1,401	1,460	1,386
C ₅ -S ₂	1,812	1,839	1,839	1,852	1,667	1,809	1,837	1,845	1,871
C ₆ -N ₄	1,388	1,358	1,345	1,306	1,306	1,312	1,357	1,305	1,380
N ₄ -C ₇	1,320	1,458	1,466	1,451	1,441	1,455	1,496	1,458	1,464
S ₂ -C ₇	1,823	2,023	1,993	1,977	2,330	1,965	1,810	1,966	1,969
C ₇ -C ₈	1,447	1,487	1,491	1,509	1,483	1,506	1,531	1,508	1,485
C ₈ -N ₅	1,342	1,368	1,374	1,351	1,348	1,344	1,364	1,348	1,366
C ₈ -N ₆	1,390	1,350	1,348	1,363	1,364	1,370	1,350	1,367	1,350
S ₂ -M*	-	4,095	4,466	2,793	2,018	3,199	4,262	3,174	4,512
N ₄ -M*	-	2,193	2,508	4,316	2,960	4,839	2,029	4,497	2,250
N ₅ -M*	-	4,107	4,492	2,021	1,624	1,191	4,061	2,238	4,414
N ₆ -M*	-	2,071	2,438	4,204	3,358	4,118	2,018	4,418	2,339

M*: Mg²⁺, Ca²⁺, Co²⁺, Ni²⁺, Cu²⁺, Zn²⁺, Hg²⁺, Pb²⁺

Metal iyonları ile oluşan bağ uzunlukları gaz fazı için Tablo 3 ve su fazı için Tablo 4'te sunulmaktadır. Sensöre metal iyonu bağlanması sonucunda, tiyazol biriminin atomları dışındaki bağ uzunluklarında önemli bir değişiklik bulunmamaktadır. Su fazındaki önemli değişiklik, metal iyonları varlığında N₁-C₃'ün 1,324 Å'dan 1,450-1,476 Å bağ uzunluğuna, S₁-C₃'ün 1,817 Å'dan 1,870-2,480 Å uzunluğuna, N₄-C₇'nin 1,324 Å'dan 1,450-1,810 Å uzunluğuna ve S₂-C₇'nin 1,816 Å'dan 1,985-2,018 Å uzunluğuna artmasıdır.

Su fazında Cu²⁺, Ca²⁺, Co²⁺, Pb²⁺ metal iyonları daha çok tiyazol ve benzimidazolün azot atomlarına bağlanmaktadır. Ni²⁺ iyonu ise yapıdaki azot atomlarının yanında kükürt atomlarına da bağlanmıştır. Bu durum Ni²⁺ iyonunun sensör ile daha iyi koordine olduğu şeklinde yorumlanabilir. Su fazında Ni²⁺ iyonu S₁, N₁, N₂ ve N₅ atomları, gaz fazında ise N₃, S₂, N₄ ve N₅ atomları ile koordine olmuştur.

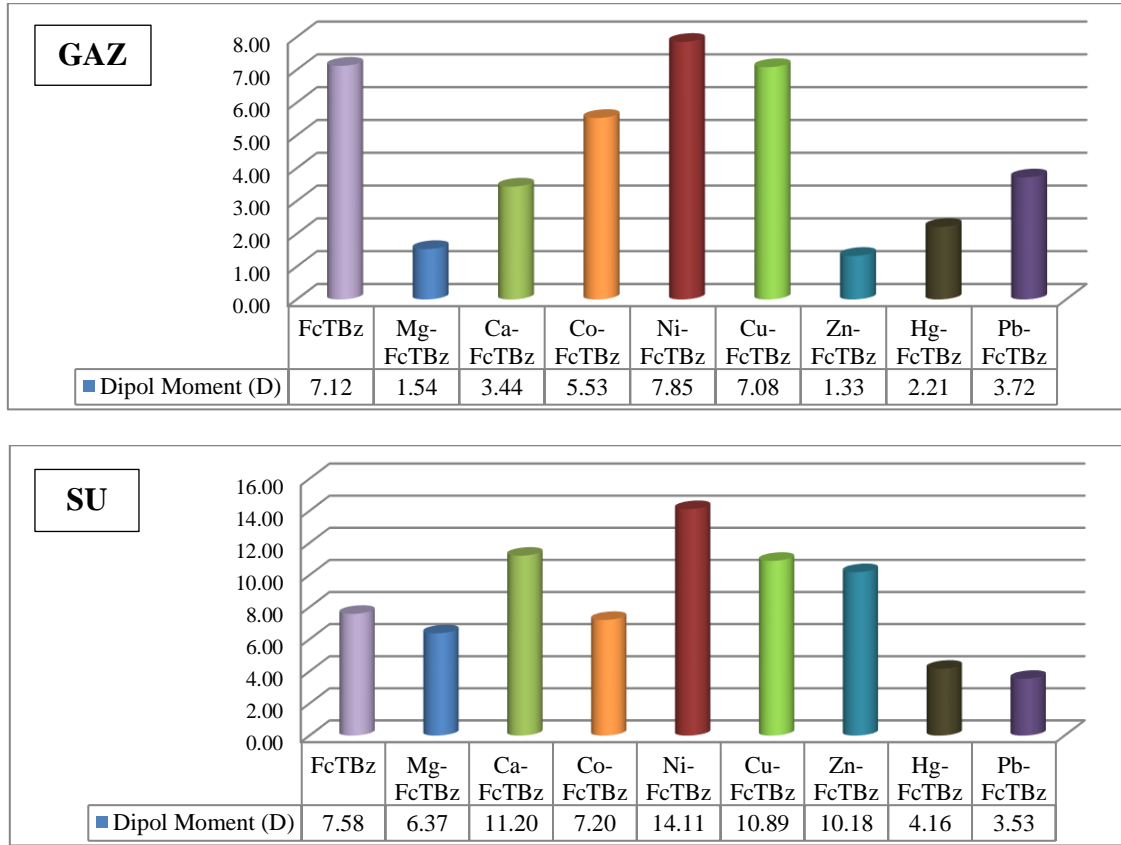
Tablo 4. Su fazı sensör ve metal iyonları ile komplekslerin bağ uzunlukları (Å).

SU FAZI									
İncelenen Bağ	FcTBz	Mg-FcTBz	Ca-FcTBz	Co-FcTBz	Ni-FcTBz	Cu-FcTBz	Zn-FcTBz	Hg-FcTBz	Pb-FcTBz
C ₁ -C ₂	1,387	1,442	1,423	1,407	1,483	1,470	1,453	1,450	1,390
C ₁ -S ₁	1,815	1,834	1,834	1,845	1,676	1,792	1,820	1,836	1,861
C ₂ -N ₁	1,388	1,317	1,332	1,346	1,301	1,301	1,311	1,313	1,363
N ₁ -C ₃	1,324	1,461	1,463	1,473	1,440	1,457	1,476	1,457	1,476
S ₁ -C ₃	1,817	1,971	1,973	1,953	2,480	1,953	1,870	1,987	1,983
C ₃ -C ₄	1,445	1,498	1,495	1,497	1,477	1,506	1,497	1,494	1,492
C ₄ -N ₂	1,344	1,369	1,378	1,368	1,353	1,342	1,367	1,389	1,361
C ₄ -N ₃	1,389	1,349	1,341	1,345	1,366	1,371	1,347	1,337	1,350
S ₁ -M*	-	3,887	4,963	4,525	2,063	3,165	3,684	3,667	4,840
N ₁ -M*	-	3,570	2,591	2,114	2,986	4,823	3,554	3,783	2,259
N ₂ -M*	-	4,294	4,644	4,170	1,725	1,919	4,212	5,228	4,418
N ₃ -M*	-	2,094	2,544	2,099	3,401	4,125	2,021	3,328	2,351
C ₅ -C ₆	1,386	1,452	1,453	1,459	1,485	1,433	1,440	1,450	1,469
C ₅ -S ₂	1,816	1,833	1,826	1,815	1,755	1,816	1,847	1,835	1,799
C ₆ -N ₄	1,388	1,311	1,311	1,307	1,298	1,312	1,314	1,313	1,303
N ₄ -C ₇	1,324	1,454	1,457	1,460	1,437	1,461	1,810	1,457	1,454
S ₂ -C ₇	1,816	1,992	1,984	1,969	2,018	1,975	1,468	1,987	1,977
C ₇ -C ₈	1,445	1,491	1,494	1,498	1,489	1,494	1,485	1,494	1,494
C ₈ -N ₅	1,344	1,336	1,343	1,348	1,377	1,371	1,339	1,337	1,348
C ₈ -N ₆	1,389	1,390	1,381	1,372	1,344	1,345	1,391	1,390	1,377
S ₂ -M*	-	4,123	4,363	3,860	4,564	4,523	2,616	3,665	4,892
N ₄ -M*	-	3,847	3,879	3,975	3,189	2,417	4,204	3,784	4,389
N ₅ -M*	-	5,298	2,561	2,109	4,174	4,061	3,376	3,327	2,541
N ₆ -M*	-	3,506	4,752	4,312	1,967	1,921	4,372	5,215	4,771

M*: Mg²⁺, Ca²⁺, Co²⁺, Ni²⁺, Cu²⁺, Zn²⁺, Hg²⁺, Pb²⁺

Su fazında Zn²⁺ metal iyonu benzimidazol S₂ ve N₃ atomlarından, Cu²⁺ iyonları N₂, N₄ ve N₆ atomlarından, Ni²⁺ iyonu S₁, N₁, N₂ ve N₆ atomlarından Ca²⁺, Co²⁺ ve Pb²⁺ iyonları N₁, N₃ ve N₅ atomlarından daha kısa bağ yapmaktadır.

Zn²⁺ iyonu hariç diğer metal iyonları, her iki benzimidazolde bulunan azot atomları ile sıkı bir etkileşime girmektedir.



Şekil 10. Sensör ve metal iyonları ile oluşan komplekslerin dipol moment değerleri.

Moleküllerin dipol momentini, yapıyı oluşturan atomların elektronegatiflik farklarından kaynaklanmaktadır. Dipol momentin yüksek olması biyolojik aktivitenin yüksek olduğu anlamına gelmektedir. Sensörün polaritesini incelemek ve elektron transferini aydınlatmak amacıyla dipol moment değerleri incelenmiştir.

Tasarlanan sensörün metal iyonları ile oluşturduğu komplekslerin dipol momentleri Şekil 11’de verilmiştir. Her iki fazda da sensörün Ni^{2+} iyonu varlığında dipol momentini artmıştır. Tüm kompleksler arasında en yüksek dipol momente sahip olan **Ni-FcTBz** kompleksinin gaz fazında dipol momentini 7,85 D iken, su fazında 14,11 D şeklindedir. Gaz fazında **Cu-FcTBz** kompleksinin dipol momentini 7,08 D’dir.

Gaz fazı dipol moment sıralaması; $\text{Ni-FcTBz} > \text{FcTBz} > \text{Cu-FcTBz} > \text{Co-FcTBz} > \text{Pb-FcTBz} > \text{Ca-FcTBz} > \text{Hg-FcTBz} > \text{Mg-FcTBz} > \text{Zn-FcTBz}$ şeklindedir.

Su fazı dipol moment değerleri; $\text{Ni-FcTBz} > \text{Ca-FcTBz} > \text{Cu-FcTBz} > \text{Zn-FcTBz} > \text{FcTBz} > \text{Co-FcTBz} > \text{Mg-FcTBz} > \text{Hg-FcTBz} > \text{Pb-FcTBz}$ şeklinde bulunmuştur.

4.1.2. Metal İyonları ile Kompleks Kararlılıkları

Ferrosenil tiyazol benzimidazol sensörünün ve Mg^{2+} , Ca^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} , Hg^{2+} , Pb^{2+} metal iyonları varlığında oluşan komplekslerinin gaz ve su fazı enerji değişimi (ΔE), tepkime Gibbs serbest enerjisi (ΔG), entalpi (ΔH) ve entropi değişimleri (ΔS) hesaplanmıştır ve değerler Tablo 5'te sunulmuştur.

Tablo 5. Enerji (ΔE), Gibbs serbest enerji (ΔG), entalpi (ΔH) ve entropi değişimleri (ΔS)

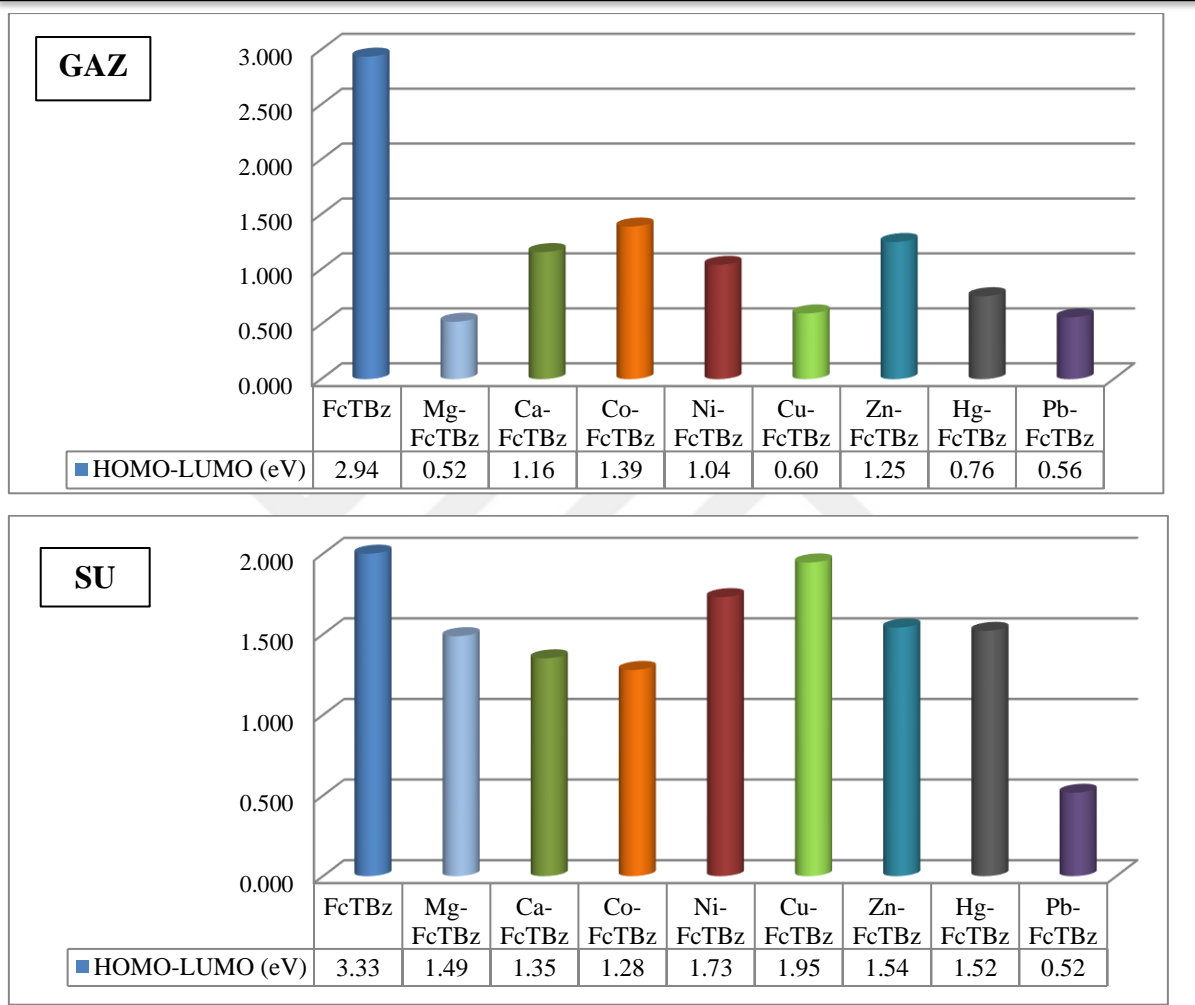
Sensörün Adı	GAZ FAZI				SU FAZI			
	ΔE (kcal/mol)	ΔG (kcal/mol)	ΔH (kcal/mol .K)	ΔS (kcal/mol)	ΔE (kcal/mol)	ΔG (kcal/mol)	ΔH (kcal/mol .K)	ΔS (kcal/mol)
Mg-FcTBz	-1001,93	-993,04	-1002,44	-0,881	-711,69	-701,76	-712,07	-0,966
Ca-FcTBz	-913,35	-904,71	-913,48	-0,822	-713,02	-702,48	-713,25	-1,009
Co-FcTBz	-893,50	-893,59	-893,49	0,009	-896,37	-896,49	-896,36	0,012
Ni-FcTBz	-1138,37	-1129,54	-1138,39	-0,829	-826,56	-814,92	-827,11	-1,142
Cu-FcTBz	-1133,28	-1125,70	-1132,94	-0,678	-900,41	-889,53	-901,06	-1,080
Zn-FcTBz	-1032,57	-1022,32	-1033,71	-1,067	-714,33	-699,79	-716,86	-1,599
Hg-FcTBz	-1000,56	-992,86	-1000,23	-0,690	-694,37	-683,17	-694,47	-1,059
Pb-FcTBz	-957,85	-949,16	-957,66	-0,796	-788,56	-777,35	-788,08	-1,005

Tablo 5'te bulunan Gibbs serbest enerji değişimi değerleri incelendiğinde gaz fazında **Zn-FcTBz**, **Ni-FcTBz** ile **Cu-FcTBz** kompleksleşmeleri en istemli iken, su fazında en istemli kompleks oluşumları **Cu-FcTBz**, **Co-FcTBz** ve **Ni-FcTBz** yapılarına aittir.

Gibbs serbest enerji değişimleri gaz fazı için $Ni^{2+} > Cu^{2+} > Zn^{2+} > Mg^{2+} > Hg^{2+} > Pb^{2+} > Ca^{2+} > Co^{2+}$, su fazı için ise $Co^{2+} > Cu^{2+} > Ni^{2+} > Pb^{2+} > Ca^{2+} > Mg^{2+} > Zn^{2+} > Hg^{2+}$ sırasıyla azalmaktadır.

4.1.3. Moleküler Orbital Enerjileri

Sensörün metal iyonları varlığında oluşturduğu komplekslere ait HOMO-LUMO sınır orbitalleri bant aralığı değerleri Şekil 12’de, HOMO-LUMO enerji değerleri ve molekül orbital görüntüleri Şekil 13 ve Şekil 14’te verilmiştir.



Şekil 11. HOMO- LUMO bant aralıkları (eV).

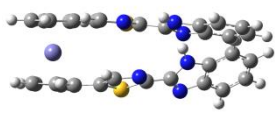
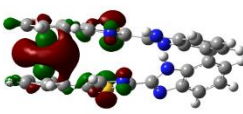
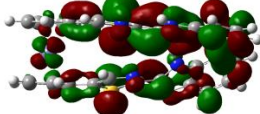
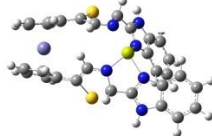

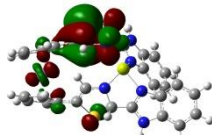
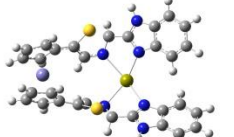
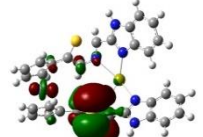
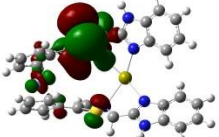
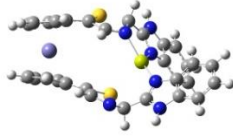
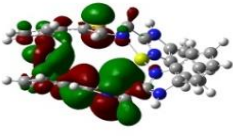

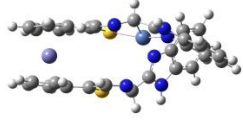
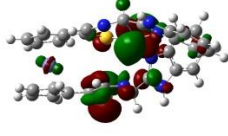
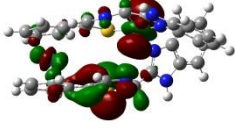

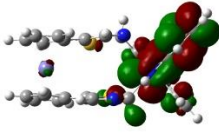
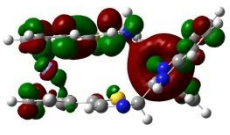
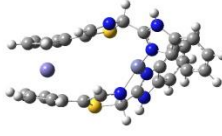



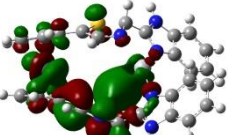
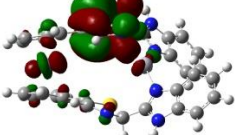

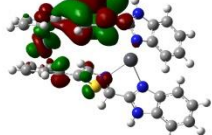
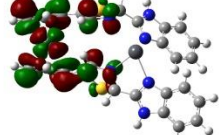
HOMO- LUMO moleküler orbitallerine ait enerji farkının (bant aralığı) yüksek olması yapının kararlılığını göstermektedir. Su fazında sınır orbital bant aralığı **Cu-FcTBz** (1,95 eV) ve **Ni-FcTBz** (1,73 eV) komplekslerinde belirgin şekilde daha fazladır, bu kompleksler daha kararlıdır. Su fazı ile gaz fazındaki değerler karşılaştırıldığında solvasyon etkisinden ötürü su fazında HOMO- LUMO enerji farkı daha fazladır.

Su fazında HOMO-LUMO bant aralığı Cu-FcTBz > Ni-FcTBz > Zn-FcTBz > Hg-FcTBz > Mg-FcTBz > Ca-FcTBz > Co-FcTBz > Pb-FcTBz sırasıyla azalmaktadır.

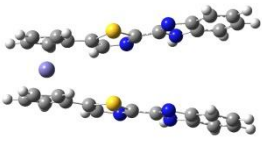
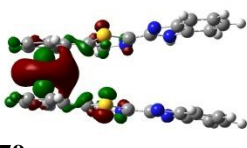
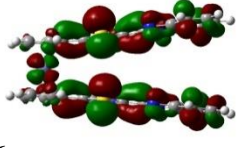
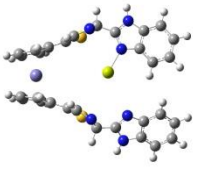
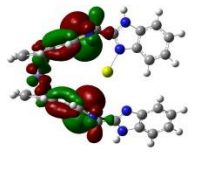
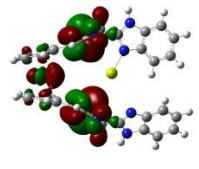

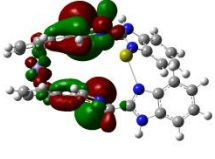
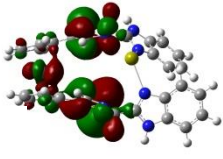
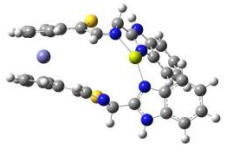
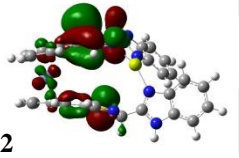
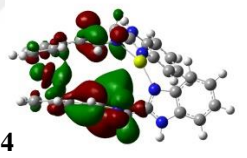
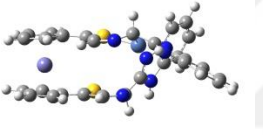
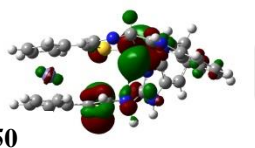
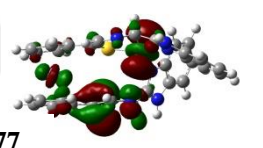
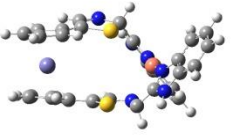
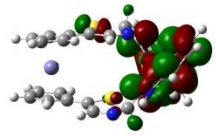
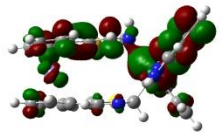
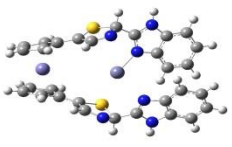
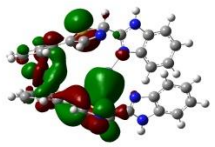
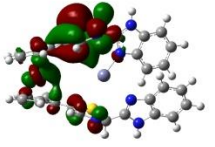

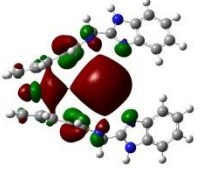
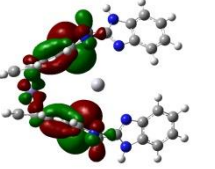

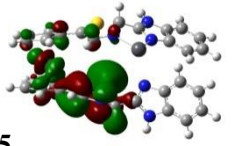
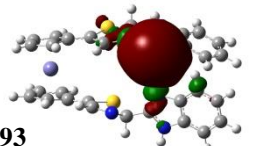
Bu sıra gaz fazında, Co-FcTBz > Zn-FcTBz > Ca-FcTBz > Ni-FcTBz > Hg-FcTBz > Cu-FcTBz > Pb-FcTBz > Mg-FcTBz şeklinde azalmaktadır.

HOMO-LUMO orbital görüntüleri Şekil 13 ve 14'te sunulmuştur. Tasarlanan sensörde elektron yoğunluğu her iki fazda da HOMO moleküler orbitalinde ferrosen biriminde iken, LUMO orbitalinde elektron yoğunluğu yapı üzerine dağılmıştır. Metal iyonları ile komplekslerde elektron yoğunluğu, gaz fazında Mg²⁺, Ca²⁺, Ni²⁺ iyonları varlığında bağlayıcı grup tiyazol biriminde iken, Co²⁺, Zn²⁺, Hg²⁺ ve Pb²⁺ iyonları varlığında ise sensörün ferrosen ve benzimidazol birimlerine dağılmıştır. Su fazında ise Ni²⁺ iyonu varlığında bağlayıcı grup tiyazol biriminde iken, Mg²⁺, Ca²⁺, Co²⁺, Zn²⁺, Hg²⁺ ve Pb²⁺ iyonları varlığında sensörün ferrosen ve benzimidazol birimlerine dağılmıştır.

Farklı olarak, her iki fazda da Cu²⁺ iyonu varlığında HOMO orbitalleri benzimidazol biriminde bulunurken, LUMO orbitalinde tüm atomların üzerinde bulunmaktadır.

İsim	Molekül Görüntüsü	HOMO	LUMO
FcTBz		 -5,57	 -2,63
Mg-FcTBz		 -10,70	 -10,18
Ca-FcTBz		 -10,41	 -9,26
Co-FcTBz		 -10,22	 -8,83
Ni-FcTBz		 -10,99	 -9,95
Cu-FcTBz		 -10,72	 -10,12
Zn-FcTBz		 -10,47	 -9,22
Hg-FcTBz		 -10,83	 -10,07
Pb-FcTBz		 -10,73	 -10,17

Şekil 12. Gaz fazı için HOMO- LUMO moleküler orbitalleri ve enerji değerleri (eV).

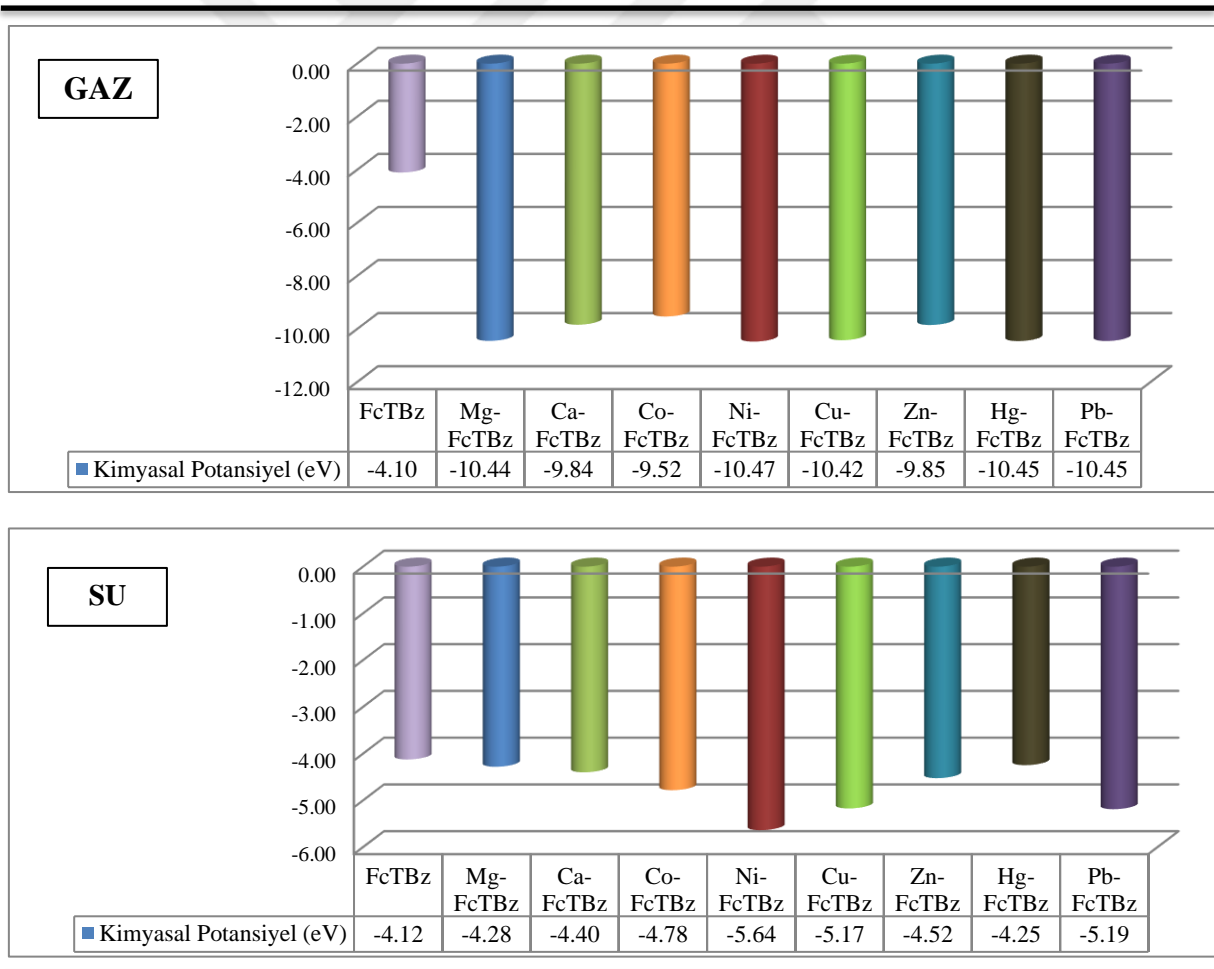
İsim	Molekül Görüntüsü	HOMO	LUMO
FcTBz		 -5,79	 -2,46
Mg-FcTBz		 -5,02	 -3,53
Ca-FcTBz		 -5,07	 -3,72
Co-FcTBz		 -5,42	 -4,14
Ni-FcTBz		 -6,50	 -4,77
Cu-FcTBz		 -6,14	 -4,20
Zn-FcTBz		 -5,29	 -3,75
Hg-FcTBz		 -5,01	 -3,48
Pb-FcTBz		 -5,45	 -4,93

Şekil 13. Su fazı için HOMO- LUMO moleküler orbitalleri ve enerji değerleri (eV).

4.1.4. Global Tanımlayıcılar

Global tanımlayıcı parametrelerden kimyasal potansiyel (μ), elektronegatiflik (χ), elektrofilisite (w) ve kimyasal sertlik (η) değerleri incelenmiştir. Bu parametreler kimyasal ve biyolojik sistemlerde moleküllerin reaktivitesini göstermektedir.

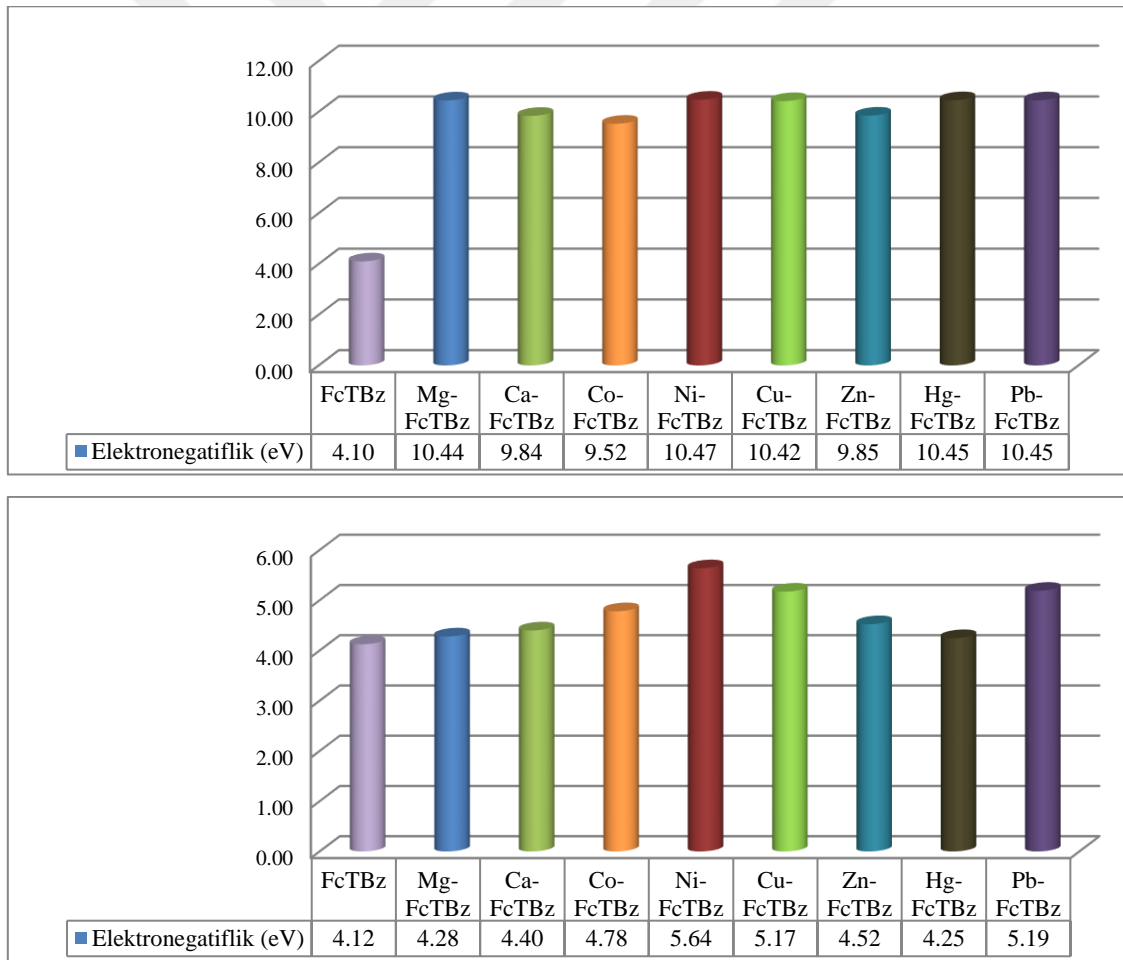
Kimyasal potansiyelin düşük olması kararlılığı göstermektedir. Kimyasal potansiyel (μ) değerleri incelendiğinde (Şekil 15) sensörün, her iki fazda da Ni^{2+} iyonu ile etkileşim durumunda kimyasal potansiyel değeri belirgin şekilde azalmıştır. Su fazında sensörün kimyasal potansiyeli -4,123 eV iken, **Ni-FcTBz** değeri -5,635 eV, gaz fazında ise sensörün kimyasal potansiyeli -4,099 eV iken, **Ni-FcTBz** değeri -10,472 eV değerine düşmüştür. Gaz fazında metal iyonlu komplekslerin değerleri birbirine daha yakınken, su fazında **Ni-FcTBz**, **Cu-FcTBz** (-5,171 eV) ve **Pb-FcTBz** (-5,187 eV) belirgin şekilde daha düşük bulunmuştur.



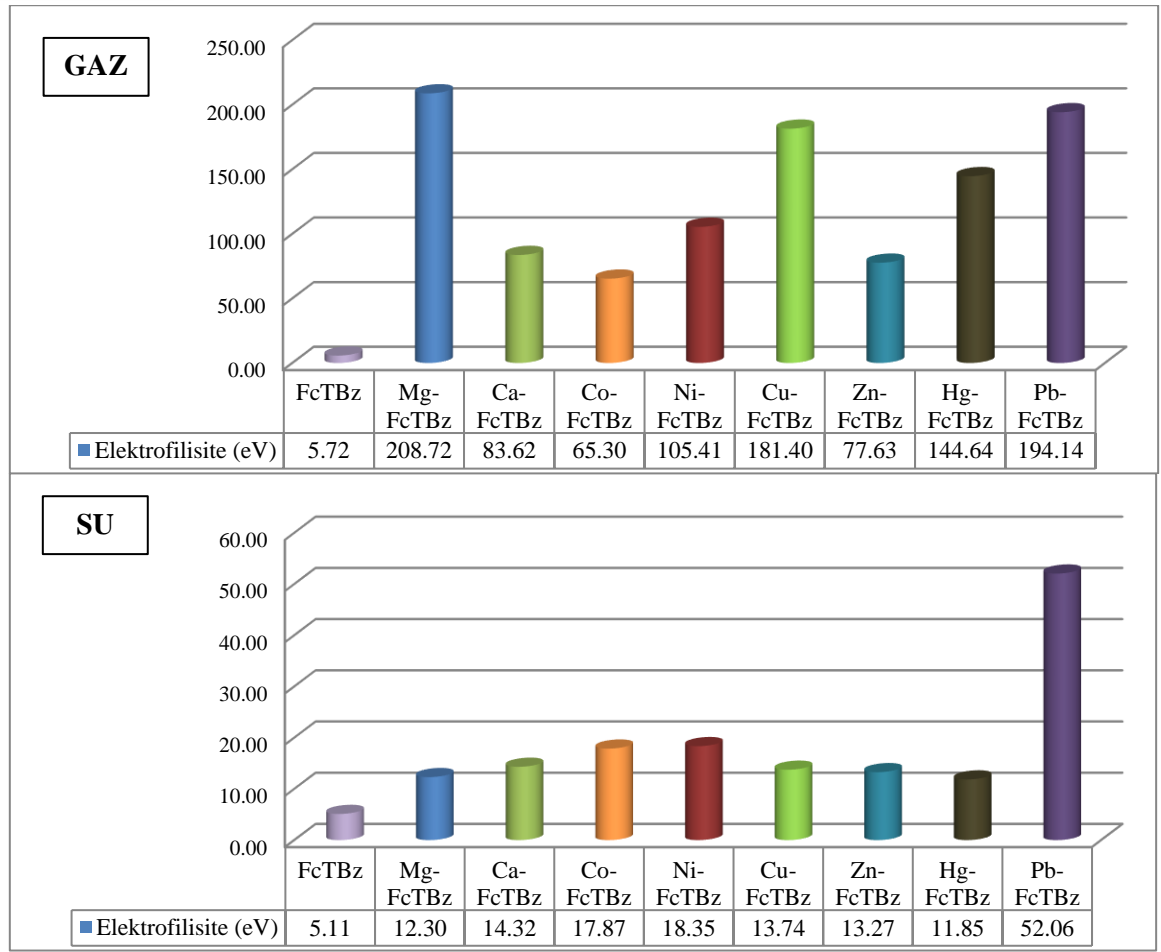
Şekil 14. Gazı ve su fazı kimyasal potansiyel (μ) değerleri (eV).

Reaktifliğin bir diğer ölçütü olan elektronegatiflik (χ) incelendiğinde (Şekil 16) gaz fazında **FcTBz** sensörünün elektronegatifliği 4,10 eV değerinde iken metal iyonları varlığında bu değer, 9.50-10.50 eV aralığına yükselmiştir. Gaz fazında metal iyonları arasında önemli bir fark bulunmamaktadır. Su fazında ise çözücü etkisinden ötürü metal iyonu komplekslerinin elektronegatiflikleri yarı yarıya düşmüştür. En yüksek değer 5,64 eV ile **Ni-FcTBz** kompleksine aittir. Her iki fazda da sensörün elektronegatifliği Ni^{2+} iyonu varlığında yüksek bulunmuştur.

Gaz fazında elektronegatiflik sıralaması $\text{Ni-FcTBz} > \text{Pb-FcTBz} = \text{Hg-FcTBz} > \text{Mg-FcTBz} > \text{Cu-FcTBz} > \text{Zn-FcTBz} > \text{Ca-FcTBz} > \text{Co-FcTBz} \gg \text{FcTBz}$ şeklindedir. Su fazında ise $\text{Ni-FcTBz} > \text{Pb-FcTBz} > \text{Cu-FcTBz} > \text{Co-FcTBz} > \text{Zn-FcTBz} > \text{Ca-FcTBz} > \text{Mg-FcTBz} > \text{Hg-FcTBz} > \text{FcTBz}$ şeklinde azalmaktadır.



Şekil 15. Gaz ve su fazı elektronegatiflik (χ) değerleri (eV).



Şekil 16. Gaz ve su fazı elektrofilisite (w) değerleri (eV).

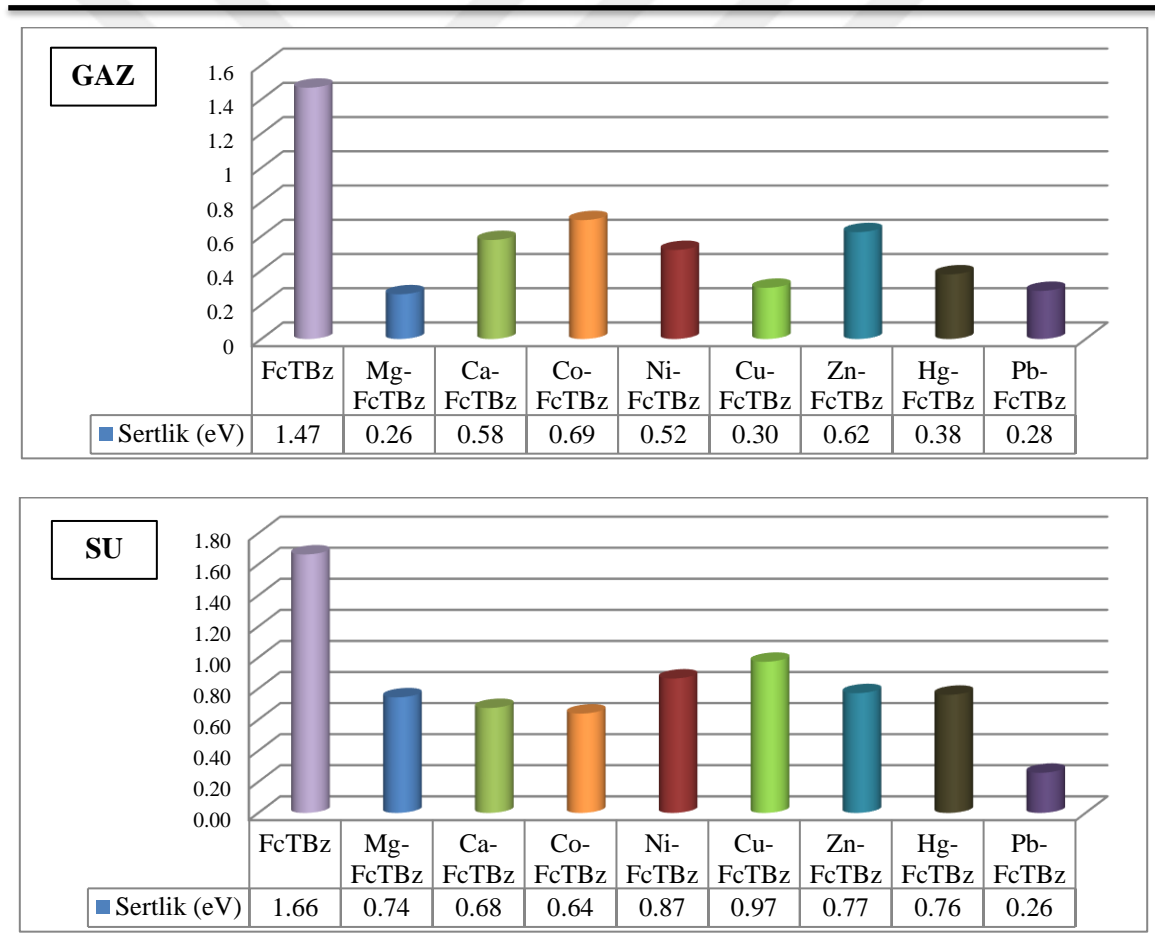
Global tanımlayıcı parametrelerden elektrofilisite (w) indeksinin artması sistem reaktivitesinin arttığını göstermektedir. Beklenildiği üzere **FcTBz** en düşük elektrofilisite değerlerine sahiptir. (Gaz fazında 5,72 eV, su fazında 5,11 eV) Metal iyonları ile kompleksleştğinde sensördeki elektron sayısı arttığından elektrofilisite değerleri artmıştır. Su fazında en reaktif kompleks **Pb-FcTBz**, gaz fazında ise **Mg-FcTBz** şeklindedir.

Elektrofilisite değerleri gaz fazı için $Mg-FcTBz > Pb-FcTBz > Cu-FcTBz > Hg-FcTBz > Ni-FcTBz > Ca-FcTBz > Zn-FcTBz > Co-FcTBz >> FcTBz$ şeklindedir. Su fazında ise $Pb-FcTBz > Ni-FcTBz > Co-FcTBz > Ca-FcTBz > Cu-FcTBz > Zn-FcTBz > Mg-FcTBz > Hg-FcTBz > FcTBz$ şeklinde azalmaktadır.

Global tanımlayıcılardan kimyasal sertlik (η) parametresi Şekil 18’de sunulmuştur. Her iki fazda da en yüksek sertlik değeri **FcTBz** ‘e aittir. (1,47 eV ve 1,66 eV) Metal iyonu varlığında en yüksek sertlik değeri su fazında Cu²⁺ ve Ni²⁺ iyonları varlığında görülmüştür. Sertlik değerleri **Cu-FcTBz** için 0,97 eV, **Ni-FcTBz** için 0,87 eV şeklindedir. Sertliğin yüksek olması kararlılığın yüksek olduğunu göstermektedir. Yumuşaklık değerleri kimyasal sertliğin tersi olduğundan sadece Ek-7’de gösterilmiştir.

Kimyasal sertlik gaz fazı için FcTBz > Co-FcTBz > Zn-FcTBz > Ca-FcTBz > Ni-FcTBz > Hg-FcTBz > Cu-FcTBz > Pb-FcTBz > Mg-FcTBz şeklindedir.

Su fazı için sıralama FcTBz > Cu-FcTBz > Ni-FcTBz > Zn-FcTBz > Hg-FcTBz > Mg-FcTBz > Ca-FcTBz > Co-FcTBz > Pb-FcTBz şeklindedir.



Şekil 17. Gazı ve su fazı kimyasal sertlik (η) değerleri (eV).

4.2. Elektrokimyasal Özellikler

Tasarlanan sensörün metal iyonları ile kompleksleşme tepkimelerine ait indirgenme potansiyel değerleri Tablo 6'da verilmiştir. En yüksek indirgenme potansiyeli 1,029 eV ile **Cu-FcTBz** kompleksine aittir. Bu kompleksi 1,013 eV ile **Ni-FcTBz** izlemektedir. Sensörün diğer metal iyonları ile komplekslerinin indirgenme potansiyellerinde büyük bir değişiklik yoktur. Redoks sensörü olarak tasarlanan bu sensör, Cu^{2+} ve Ni^{2+} iyonlarına karşı daha belirgin cevap vermektedir.

Tablo 6. Tepkime indirgenme potansiyeli değerleri (eV)

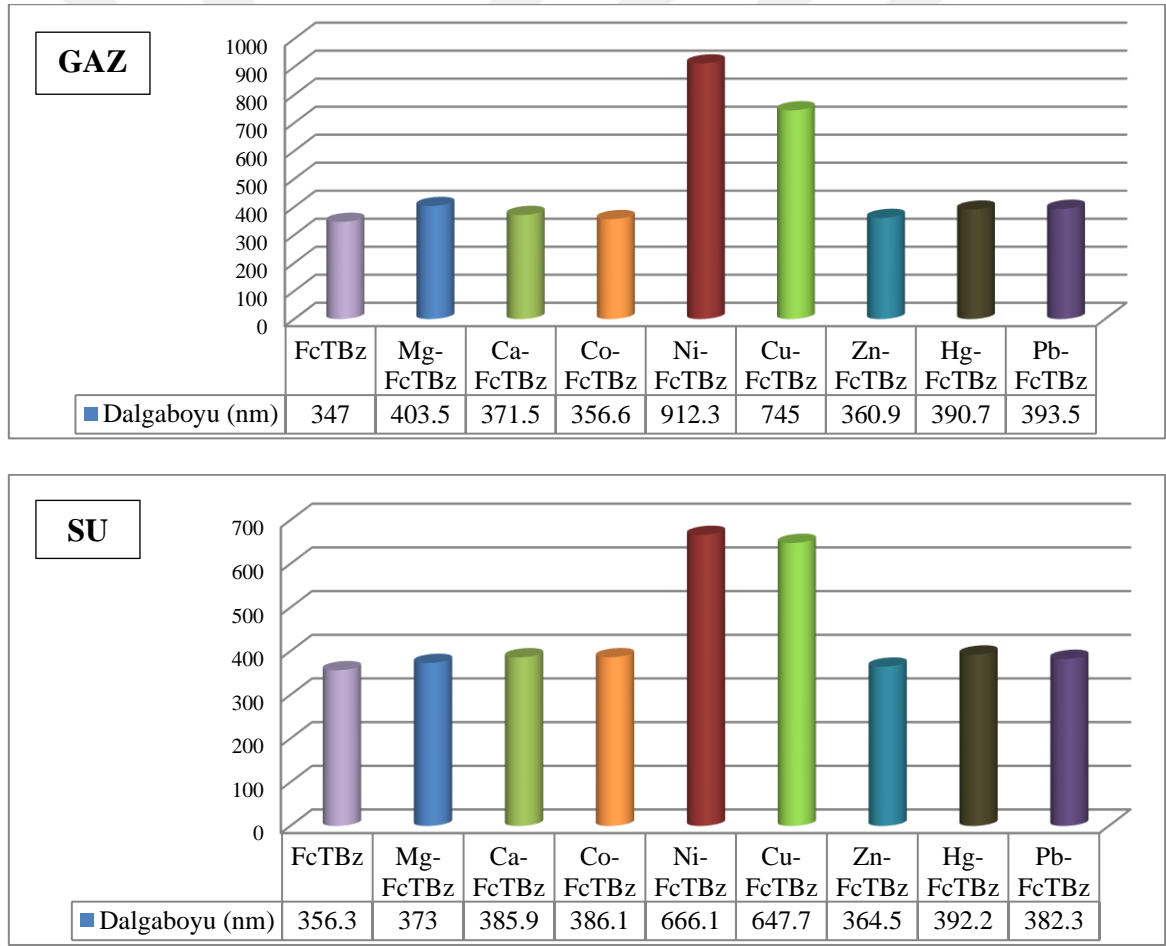
Sensör Adı	$G_{+2}(\text{g})$ (HF)	$G_{+3}(\text{g})$ (HF)	$\Delta G_{\text{Yüks.}}(\text{g})$ (HF)	$\Delta G_{\text{solv.}(+2)}$ (HF)	$\Delta G_{\text{solv.}(+3)}$ (HF)	$\Delta G_{\text{Yüks.}}(\text{s})$ (HF)	$\Delta G_{\text{Yüks.}}(\text{s})$ (eV)	E_0 (V)
Mg-FcTBz	-1628,34	-1627,95	0,397	-1628,94	-1628,81	-3257,35	-88637,12	0,919
Ca-FcTBz	-1664,09	-1663,67	0,418	-1664,75	-1664,58	-3328,91	-90584,30	0,939
Co-FcTBz	-1628,35	-1627,95	0,401	-1628,99	-1628,81	-3257,40	-88638,44	0,919
Ni-FcTBz	-1796,72	-1796,35	0,379	-1797,33	-1797,13	-3594,08	-97800,01	1,013
Cu-FcTBz	-1823,62	-1823,22	0,398	-1824,22	-1824,10	-3647,92	-99264,96	1,029
Zn-FcTBz	-1693,04	-1692,64	0,397	-1693,66	-1693,52	-3386,79	-92159,15	0,955
Hg-FcTBz	-1670,14	-1669,73	0,408	-1670,80	-1670,62	-3341,01	-90913,41	0,942
Pb-FcTBz	-1630,93	-1630,50	0,432	-1631,53	-1630,91	-3262,00	-88763,61	0,920

4.3. Fotokimyasal Özellikler

Tasarlanan ferrosenil tiyazol benzimidazol sensörünün ve metal iyonlarıyla oluşturduğu yapıların UV-Görünür bölge spektrumları, absorpsiyon ve emisyon hesaplamaları ile elektron transferi sonuçları bu bölümde sunulmaktadır.

4.3.1. Hesapsal UV- Görünür Bölge Spektrumları

Sensör ve metal iyonları ile oluşturduğu komplekslerin gaz ve su fazına ait maksimum absorpsiyon dalgaboyu değerleri Şekil 19’da verilmiştir. Ayrıca UV grafikleri karşılaştırmalı olarak gaz fazı için Şekil 20 ve su fazı için Şekil 21’de sunulmuştur. Tüm yapıların metal iyonsuz halleri ile karşılaştırmalı grafikleri ise Ek- 10’da verilmiştir.



Şekil 18. Gaz ve su fazı maksimum absorpsiyon dalgaboyu değerleri (nm).

Şekil 19 incelendiğinde her iki fazda da Ni²⁺ ve Cu²⁺ varlığında oluşan komplekslerin maksimum absorpsiyon dalga boylarının diğer metal iyonları ile karşılaştırıldığında belirgin şekilde arttığı görülmektedir. Gaz fazında **FcTBz** yapısının maksimum absorpsiyon dalga boyu 347 nm iken, **Ni-FcTBz** yapısı 912,3 nm, **Cu-FcTBz** yapısı ise 745,0 nm değerlerinde, daha uzun dalga boylarında absorplanmaktadır. Su fazına geçildiğinde **FcTBz** 356,3 nm iken, **Ni-FcTBz** ile 666,1 nm, **Cu-FcTBz** ile 647,7 nm şeklinde daha uzun dalga boylarına kaymıştır. Bu komplekslerde her iki fazda da kırmızıya kayma görülmüştür. **Ni-FcTBz** için gaz fazından su fazına geçişte maksimum absorpsiyon dalga boyu 912,3 nm'den 666,1 nm'ye, **Cu-FcTBz** için 745,0 nm'den 647,7 nm'ye azalmaktadır. Su fazına ait maksimum absorpsiyon dalga boyu değerleri gaz fazına göre daha kısadır.

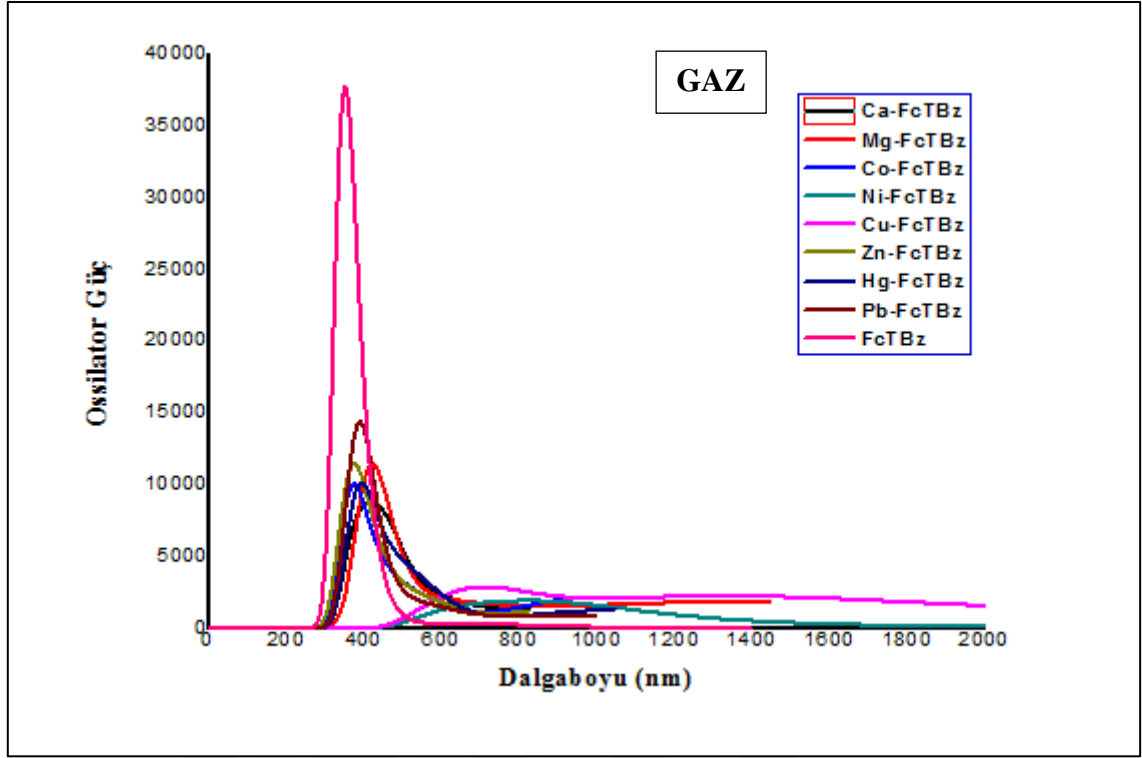
Mg²⁺, Ca²⁺, Co²⁺, Zn²⁺, Hg²⁺, Pb²⁺ metal iyonlarının komplekslerine ait maksimum absorpsiyon dalga boyları gaz ve su fazında önemli bir değişiklik göstermediği gibi, kendi aralarında incelendiğinde önemli bir farklılık görülmemiştir.

Absorpsiyon sonuçları, tasarlanan sensörün Ni²⁺ ve Cu²⁺ iyonlarına karşı daha seçici olduğunu vurgulamaktadır.

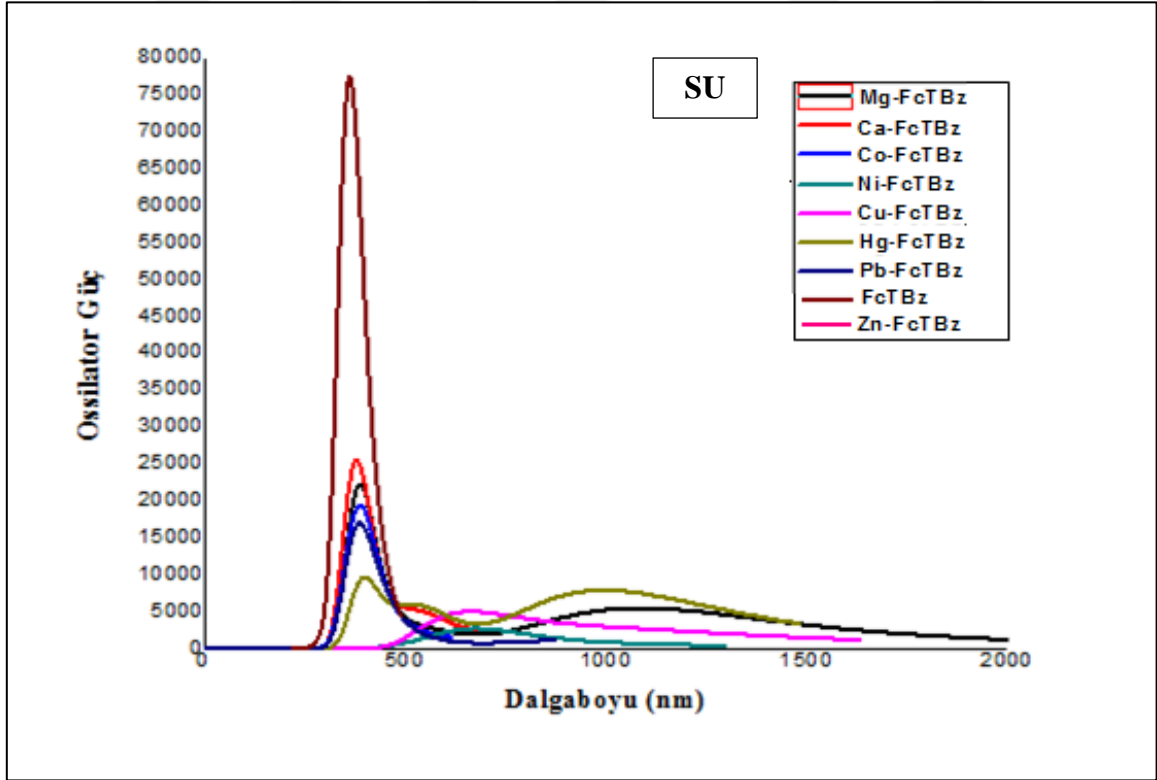
Maksimum absorpsiyon dalga boyları görünür bölgede karşılık gelen renklere göre incelendiğinde ise Tablo 7'de görüldüğü üzere su fazında Ni-FcTBz kompleksi kırmızı, Cu-FcTBz turuncu, Hg-FcTBz ise mor renktedir.

Tablo 7. Sensörün ve komplekslerinin maksimum absorpsiyon dalga boylarına karşılık gelen renkler.

İsim	Gaz		Su	
	λ_{Abs} (nm)	Karşılık Gelen Renk	λ_{Abs} (nm)	Karşılık Gelen Renk
FcTBz	347,0	-	356,3	-
Mg-FcTBz	403,5	Mor - mavi	373,0	-
Ca-FcTBz	371,5	-	385,9	-
Co-FcTBz	356,6	-	386,1	-
Ni-FcTBz	912,3	-	666,1	Kırmızı
Cu-FcTBz	745,0	Kırmızı	674,7	Turuncu
Zn-FcTBz	360,9	-	364,5	-
Hg-FcTBz	390,7	~ Mor	392,2	~ Mor
Pb-FcTBz	393,5	~ Mor	382,3	-



Şekil 19. Sensör ve metal iyonları ile oluşturduğu komplekslerin maksimum absorpsiyon spektrumları (nm).

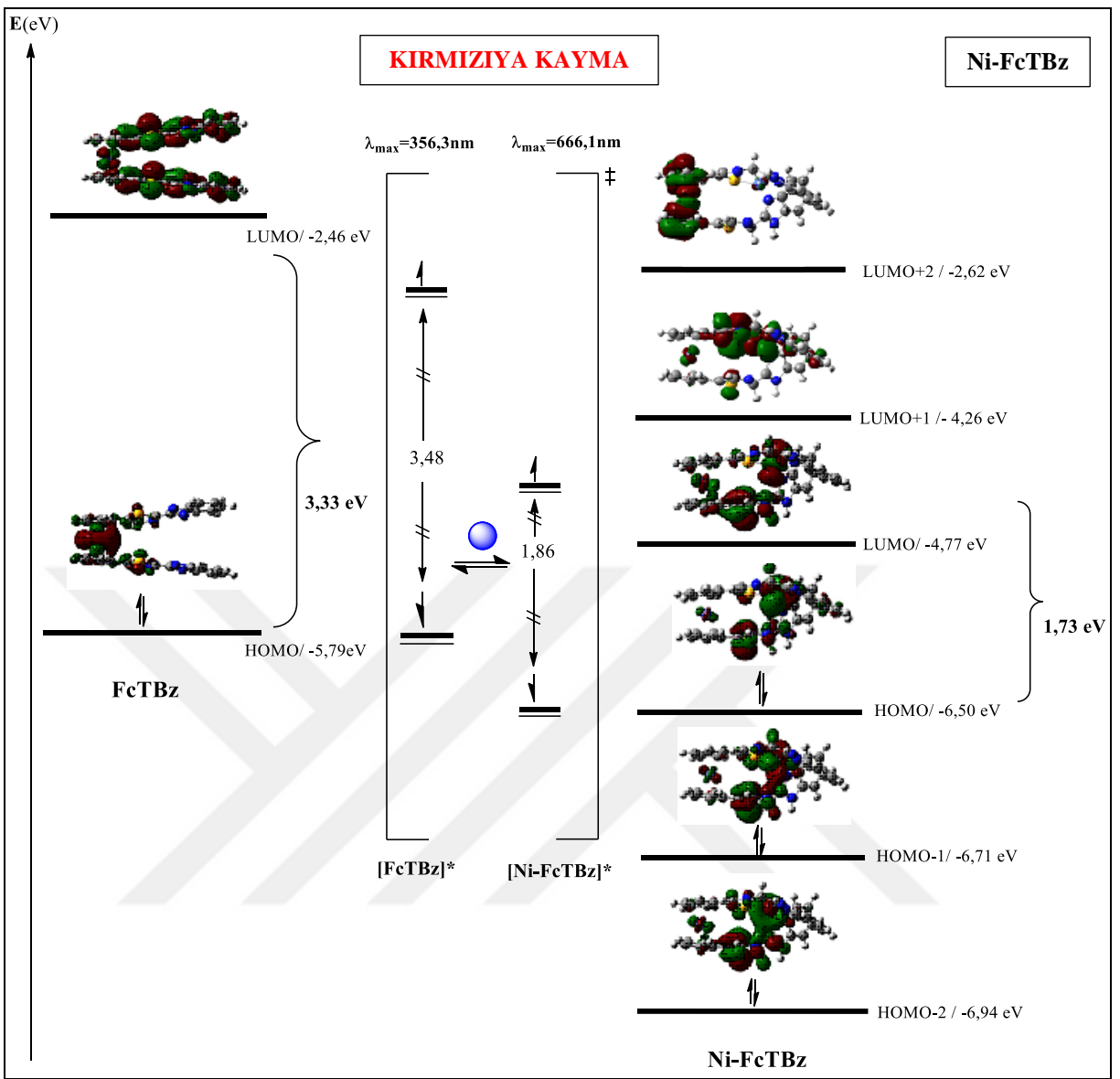


Şekil 20. Sensör ve metal iyonları ile oluşturduğu komplekslerin maksimum absorpsiyon spektrumları (nm)

Ferrosenil tiyazol benzimidazol sensörünün hesaplanan gaz ve su fazı emisyon değerleri Ek-10'da verilmiştir. Floresans hesaplamaları için yapılan emisyon hesaplamalarında maksimum emisyon dalga boyu değerleri çok yüksek bulunmuştur. Bu nedenle emisyon çalışmaları için daha ileri düzeyde ve daha hassas sonuç veren hesaplamalar önerilmektedir.

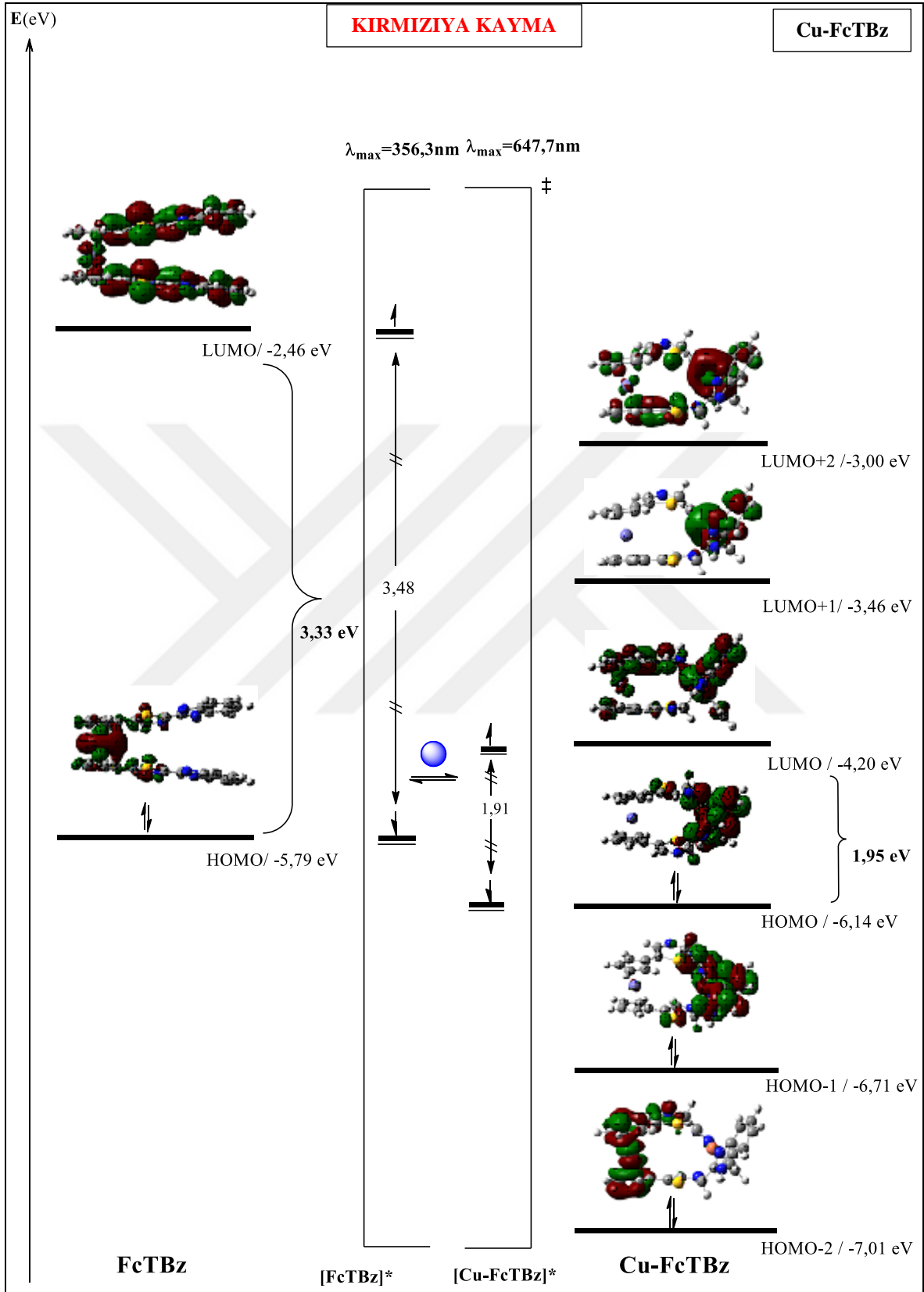
4.2.3. Elektron Transferi

Elektron transferi bölümünde UV-görünür bölge absorpsiyon dalga boyu ve indirgenme potansiyeli yüksek bulunan, kompleks kararlılığı yüksek olan **Ni-FcTBz** ve **Cu-FcTBz** kompleksleri ele alınmıştır. Sensör ile Ni-FcTBz ve Cu-FcTBz komplekslerinin temel hal ve uyarılmış hal moleküler orbital enerji değerleri ve gösterimleri Şekil 22 ve Şekil 23'te sunulmuştur.



Şekil 21. FcTBz sensörü ile Ni-FcTBz kompleksinin HOMO-LUMO orbitalleri ve bant aralıkları gösterimi.

Tasarlanan sensöre, Ni^{2+} iyonunun eklenmesiyle kırmızıya kayma gözlenmektedir. Sensörde HOMO orbitalinde elektron yoğunluğu ferrosen biriminde iken, Ni^{2+} iyonu ile elektron yoğunluğu daha çok tiyazol ve benzimidazol bölümünde bulunmaktadır. Sensöre Ni^{2+} iyonu bağlanmasıyla Fe^{2+} iyon yükünde büyük bir değişiklik görülmezken, esas değişim Ni^{2+} ve C_4 , N_1 , N_3 atomları üzerinde olmuştur. (Bakınız Şekil 10, Tablo 2) Ni^{2+} sensörden elektron alırken, C_4 , C_8 , N_1 , N_3 , N_4 , S_2 elektron vermiştir. Elektronlar sensörün bağlayıcı ve benzimidazol kısmından Ni^{2+} iyonuna aktarılarak “**molekül içi yük transferi**” sağlanmıştır. Benzer durumu, tasarlanan sensör ile Cu^{2+} iyonu da vermektedir. Cu-FcTBz kompleksindeki farklılık, yük transferinin ferrosen birimine ait Fe^{2+} ve benzimidazole ait C_4 , N_3 ve N_6 atomları üzerinden Cu^{2+} iyonuna doğru olmasıdır.



Şekil 22. FcTBz sensörü ile Cu-FcTBz kompleksinin HOMO-LUMO orbitalleri ve bant aralıkları gösterimi.

5. SONUÇLAR

- Reaktifliğin bir ölçüsü olan dipol moment, her iki fazda da **Ni-FcTBz** kompleksinde yüksek bulunmuştur. Kompleksin gaz fazında dipol momentini 7,85 D iken, su fazında 14,11 D şeklindedir. Tasarlanan sensörün Ni^{2+} iyonu varlığında dipol momentini artmıştır.
- Tasarlanan sensörün metal iyonları ile oluşturduğu komplekslerin toplam enerji, Gibbs serbest enerjisi, entalpi ve entropi değerleri incelendiğinde her iki fazda da en istemli yapı **Ni-FcTBz** kompleksidir.
- Tasarlanan sensöre metal iyonları girdiğinde, HOMO- LUMO bant genişlikleri su fazında $\text{Cu-FcTBz} > \text{Ni-FcTBz} > \text{Zn-FcTBz} > \text{Hg-FcTBz} > \text{Mg-FcTBz} > \text{Ca-FcTBz} > \text{Co-FcTBz} > \text{Pb-FcTBz}$ sırasıyla azalmaktadır.
- Tasarlanan sensörün HOMO moleküler orbitalinde elektronlar ferrosen biriminde iken, metal iyonları girdiğinde elektron yoğunluğu tiyazol ve benzimidazol bölümünde bulunmaktadır.
- Uv-Görünür bölgeye ait maksimum absorpsiyon dalga boyları incelendiğinde her iki fazda da **Ni-FcTBz** ve **Cu-FcTBz** komplekslerinde dalga boyunun belirgin şekilde arttığı belirlenmiştir. Su fazında **Ni-FcTBz** kompleksine ait maksimum absorpsiyon dalga boyu 666,1 nm, **Cu-FcTBz** kompleksine ait maksimum absorpsiyon dalga boyu 647,7 nm'dir. Bu komplekslerde kırmızıya kayma olmaktadır.
- **Cu-FcTBz** kompleksinin 1,029 eV ile **Ni-FcTBz** kompleksinin 1,013 eV indirgenme potansiyeli ile diğer komplekslerin indirgenme potansiyellerinden yüksek olması, kimyasal kararlılık göstergesi olan global tanımlayıcıların ve Gibbs serbest enerjisi gibi değerlerinin de bu durumu desteklemesi sonucu sensörün metal iyonları arasında duyarlılığının en yüksek olduğu iyonlar Ni^{2+} ve Cu^{2+} olarak bulunmuştur.
- **Ni-FcTBz** ve **Cu-FcTBz** komplekslerine ait HOMO-LUMO moleküler orbitalleri, bant aralığı ve elektron transferi incelendiğinde, sensörden metal iyonlarına elektron aktarıldığı, dolayısıyla kompleksleşmenin “Molekül İçi Yük Transferi (ICT)” mekanizmasıyla gerçekleştiği düşünülmektedir.
- Hesaplanan redoks ve absorpsiyon özellikleri incelendiğinde, tasarlanan sensörün, diğer metal iyonları ile karşılaştırıldığında Ni^{2+} ve Cu^{2+} iyonlarına karşı daha duyarlı olduğu bulunmuştur.

KAYNAKLAR

- [1] Duman, S., Cakmak, Y., Kolemen, S., Akkaya E., U., Dede, Y., Heavy atom free singlet oxygen generation: doubly substituted configurations dominate S1 states of bis-BODIPYs, *The Journal of Organic Chemistry*, 77, 4516-4527, **2012**.
- [2] Cakmak, Y. Kolemen, S. Akkaya, E., U., Designing excited states: theory- guided access to efficient photosensitizers for photodynamic action, *Angewandtee Chemie*, 50, 11937-11941, **2011**.
- [3] Rogers, C.W., Wolf, M.O., Luminescent molecular sensors based on analyte coordination to transition-metal complexes, *Coordination Chemistry Reviews*, 233–234, Pages 341-350, **2002**.
- [4] Prodi, L., Bollta F., Montalti, M. Zaccheroni, N., *Coordination Chemistry Review*, 205, 59, **2000**.
- [5] Guliyev, R., *Design strategies for chemosensors and their applications in molecular scale logic gates*, Doktora Tezi, Bilkent University, Ankara, **2013**.
- [6] Petrukhin, O., M., Maksimenko, O., O., Sensors in analytical chemistry, *Rossiiskii Khimicheskii Zhurnal*, 52, 3-6, **2008**.
- [7] Atkins, P., de Paula, P., Atkins, J., *Physical Chemistry*, Oxford University Press, **2002**.
- [8] Valeur, B., Leray, I., Design principles of fluorescent molecular sensors for cation recognition, *Coordination Chemistry Reviews*, 205, 3-40, **2000**.
- [9] de Silva, A., P., Gunaratne, H., Q., N., Gunnlaugsson, T., Huxley, A., J., M, McCoy, C., P., Rademacher J., T., Rice, T., E., Signaling recognition events with fluorescent sensors and switches, *Chemical Reviews*, 97, 1515-1566, **1997**.
- [10] Erten-Ela, S., Yilmaz, M., D., Icli, B., Dede, Y., Icli, S., Akkaya, E., U., A panchromatic boradiazaindacene(BODIPY) sensitizer for dye- sensitized solar cells, *Organic Letters*, 10(15), 3299-3302, **2008**.
- [11] Ozlem, S., Akkaya, E. U., Thinking outside the silicon box: molecular AND logic as an additional layer of selectivity in singlet oxygen generation for photodynamic therapy, *Journal of the American Chemical Society*, 131, 48-49, **2009**.
- [12] Zapata, F., Caballero, A., Espinosa, A., Tarraga, A., Molina P. Triple channel sensing of Pb(II) ions by a simple multiresponsive ferrocene receptor having a 1-deazapurine backbone, *Organic Letter*, 10, 41-44, **2008**.
- [13] Majzoub, A., Cadiou, C., Dechamps, I., Tinant, B. Chuburu, F. Cyclam-methylbenzimidazole: a selective OFF-ON fluorescent sensor for zinc, *Inorganic Chemistry*, 50, 4029-4038, **2011**.
- [14] Fermi, E., A statistical method for the determination of some properties of atoms and its application to the theory of the periodic system of the elements, *Zeitschrift für Physik*, 36, 902, **1926**.
- [15] Thomas, L., H., The calculation of atomic fields in Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. *Cambridge University Press*, **1927**.
- [16] Hohenberg, P., Kohn, W., Inhomogeneous electron gas, *Physical Review*, 136-3B, B864, **1964**.

- [17] Kohn, W., Sham, L., J., Perspective on self-consistent equations including exchange and correlation effects, *Physical Review*, 140-4A, A1133-1138, **1965**.
- [18] De Proft, F., Geerlings, P., Conceptual and computational DFT in the study of aromaticity, *Chemical Reviews*, 101(5), 1451-1464, **2001**.
- [19] Fitzgerald, G., Andzelm, J., Chemical applications of density functional theory: comparison to experiment, HartreeFock, and perturbation theory, *The Journal of Physical Chemistry*, 95(26), 10531-10534, **1991**.
- [20] Becke, A., D., Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior, *Physical Review A*, 38, 3098–3100, **1988**.
- [21] Lee, C., Yang, W., Parr, R., Development of the Colle-Salvetti correlation energy formula into a functional of the electron density, *Physical Review B*, 37, 785–789, **1988**.
- [22] Özkan, N., *İzosiyano Temelli Üç Çekirdekli Altın (I) Kompleksleri Üzerine Kuantum Kimyasal Çalışmalar*, Yüksek Lisans Tezi, T.C. Cumhuriyet Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Sivas, **2017**.
- [23] Tugsuz T., A theoretical investigation on the adsorption of heavy metals on dye containing zeolite, *Hacettepe University*, 25-30, **2007**.
- [24] Mandl, F., *Statistical Physics*, Wiley, London, **1923**.
- [25] Parr, R., G., Pearson R., G., Absolute hardness: companion parameter to absolute electronegativity, *Journal of the American Chemical Society*, 105 (26), 7512-7516, **1983**.
- [26] Jeddi S., Sevin F., Theoretical Investigation of linker effects on new designed bodipy-ferrocene based three channels calcium (II) ion sensors; as redox, colorimetric and fluorescent properties, *Journal of Chemistry and Applications*, 2(1), 7, **2015**.
- [27] Tugsuz, T. Dft study on the standard electrode potentials of imidazole, tetrathiafulvalene, and tetrathiafulvalene-imidazole, *Journal of Physical Chemistry*, 114, 17092–17101, 2010.

EKLER

EK 1 Ferrosenil tiyazol benzimidazol ve metal iyonları ile komplekslerinin oluşum tepkimelerine ait enerji değişimi (ΔE) değerleri

Gaz Fazı					
Tepkimeye Girenler		Tepkime Ürünleri		Tepkime Sonucu	
Sensörün Adı	E (Hartree)	Sensörün Adı	E (Hartree)	ΔE (Hartree)	ΔE (kcal/mol)
FcTBz	-1626,69	-	-	-	-
Mg²⁺	0,00	Mg-FcTBz	-1664,02	-1,60	- 1001,93
Ca²⁺	-35,88	Ca-FcTBz	-1628,28	-1,46	- 913,35
Co²⁺	-143,99	Co-FcTBz	-1670,07	-1,42	- 893,50
Ni²⁺	-168,16	Ni-FcTBz	-1823,56	-1,81	- 1138,37
Cu²⁺	-195,06	Cu-FcTBz	-1628,29	-1,81	- 1133,28
Zn²⁺	-64,63	Zn-FcTBz	-1692,97	-1,66	- 1042,57
Hg²⁺	-41,79	Hg-FcTBz	-1630,87	1,59	-1000,56
Pb²⁺	-2,65	Pb-FcTBz	-1796,66	-1,53	- 957,85

Su Fazı					
Tepkimeye Girenler		Tepkime Ürünleri		Tepkime Sonucu	
Sensörün Adı	E (Hartree)	Sensörün Adı	E (Hartree)	ΔE (Hartree)	ΔE (kcal/mol)
FcTBz	-1626,71	-	-	-	-
Mg²⁺	-0,63	Mg-FcTBz	-1664,29	-1,13	-711,69
Ca²⁺	-36,44	Ca-FcTBz	-1628,47	-1,14	-713,02
Co²⁺	-144,66	Co-FcTBz	-1670,33	-1,42	-896,37
Ni²⁺	-168,84	Ni-FcTBz	-1823,75	-1,32	-826,56
Cu²⁺	-195,61	Cu-FcTBz	-1628,52	- 1,43	-900,41
Zn²⁺	-65,31	Zn-FcTBz	-1693,16	-1,14	-714,33
Hg²⁺	-42,52	Hg-FcTBz	-1631,06	-1,11	-694,37
Pb²⁺	-3,10	Pb-FcTBz	-1796,87	-1,26	-788,56

EK 2 Ferrosenil tiyazol benzimidazol ve metal iyonları ile komplekslerin oluşum tepkimelerine ait Gibbs serbest enerji değişimi (ΔG) değerleri

Gaz Fazı					
Tepkimeye Girenler		Tepkime Ürünleri		Tepkime Sonucu	
Sensörün Adı	G (Hartree)	Sensörün Adı	G (Hartree)	ΔG (Hartree)	ΔG (kcal/mol)
FcTBz	-1626,747983	-	-	-	-
Mg²⁺	-0,01	Mg-FcTBz	-1626,75	-1,58	-993,04
Ca²⁺	-35,90	Ca-FcTBz	-1664,09	-1,44	-904,71
Co²⁺	-144,01	Co-FcTBz	-1628,34	-1,42	-893,59
Ni²⁺	-168,18	Ni-FcTBz	-1670,14	-1,80	-1129,54
Cu²⁺	-195,08	Cu-FcTBz	-1823,62	-1,79	-1125,70
Zn²⁺	-64,64	Zn-FcTBz	-1628,35	-1,65	-1032,32
Hg²⁺	-41,81	Hg-FcTBz	-1693,04	-1,58	-992,86
Pb²⁺	-2,67	Pb-FcTBz	-1630,93	-1,51	-949,16

Su Fazı					
Tepkimeye Girenler		Tepkime Ürünleri		Tepkime Sonucu	
Sensörün Adı	G (Hartree)	Sensörün Adı	G (Hartree)	ΔG (Hartree)	ΔG (kcal/mol)
FcTBz	-1626,78	-	-	-	-
Mg²⁺	-0,64	Mg-FcTBz	-1664,35	-1,12	-701,76
Ca²⁺	-36,46	Ca-FcTBz	-1628,54	-1,12	-702,48
Co²⁺	-144,68	Co-FcTBz	-1670,40	-1,43	-896,49
Ni²⁺	-168,85	Ni-FcTBz	-1823,82	-1,30	-814,92
Cu²⁺	-195,62	Cu-FcTBz	-1628,59	-1,42	-889,53
Zn²⁺	-65,33	Zn-FcTBz	-1693,22	-1,12	-699,79
Hg²⁺	-42,53	Hg-FcTBz	-1631,13	-1,09	-683,17
Pb²⁺	-3,12	Pb-FcTBz	-1796,93	-1,24	-777,35

EK 3 Ferrosenil tiyazol benzimidazol ve metal iyonları ile komplekslerinin oluşum tepkimelerine ait entalpi değişimi (ΔH) değerleri

Gaz Fazı					
Tepkimeye Girenler		Tepkime Ürünleri		Tepkime Sonucu	
Sensörün Adı	H (Hartree)	Sensörün Adı	H (Hartree)	ΔH (Hartree)	ΔH (kcal/mol.K)
FcTBz	-1626,66	-	-	-	-
Mg²⁺	0,00	Mg-FcTBz	-1663,99	-1,60	-1002,44
Ca²⁺	-35,88	Ca-FcTBz	-1628,25	-1,46	-913,48
Co²⁺	-143,99	Co-FcTBz	-1670,04	-1,42	-893,49
Ni²⁺	-168,16	Ni-FcTBz	-1823,52	-1,81	-1138,39
Cu²⁺	-195,06	Cu-FcTBz	-1628,26	-1,81	-1132,94
Zn²⁺	-64,62	Zn-FcTBz	-1692,94	-1,66	-1043,71
Hg²⁺	-41,79	Hg-FcTBz	-1630,83	-1,59	-1000,23
Pb²⁺	-2,65	Pb-FcTBz	-1796,63	-1,53	-957,66

Su Fazı					
Tepkimeye Girenler		Tepkime Ürünleri		Tepkime Sonucu	
Sensörün Adı	H (Hartree)	Sensörün Adı	H (Hartree)	ΔH (Hartree)	ΔH (kcal/mol.K)
FcTBz	-1626,68	-	-	-	-
Mg²⁺	-0,63	Mg-FcTBz	-1664,35	-1,13	-712,07
Ca²⁺	-36,44	Ca-FcTBz	-1628,54	-1,14	-713,25
Co²⁺	-144,66	Co-FcTBz	-1670,40	-1,42	-896,36
Ni²⁺	-168,84	Ni-FcTBz	-1823,82	-1,32	-827,11
Cu²⁺	-195,61	Cu-FcTBz	-1628,59	-1,44	-901,06
Zn²⁺	-65,31	Zn-FcTBz	-1693,22	-1,14	-716,86
Hg²⁺	-42,51	Hg-FcTBz	-1631,13	-1,11	-694,47
Pb²⁺	-3,10	Pb-FcTBz	-1796,93	-1,26	-788,08

EK 4 Ferrosenil tiyazol benzimidazol ve metal iyonları ile komplekslerinin kimyasal potansiyel, elektron ilgisi, iyonizasyon potansiyeli ve elektrofilisite deęerleri

İsim	Elektron İlgisi (A)		İyonizasyon Potansiyeli (I)	
	Gaz	Su	Gaz	Su
FcTBz	2,48	2,92	5,69	5,89
Mg-FcTBz	9,60	3,54	10,68	5,02
Ca-FcTBz	9,26	3,72	10,41	5,07
Co-FcTBz	9,23	3,93	10,51	5,22
Ni-FcTBz	9,95	4,77	10,99	6,50
Cu-FcTBz	9,36	4,20	11,25	6,14
Zn-FcTBz	9,22	3,76	10,47	5,30
Hg-FcTBz	9,15	3,48	10,32	5,01
Pb-FcTBz	9,30	4,10	10,51	5,40

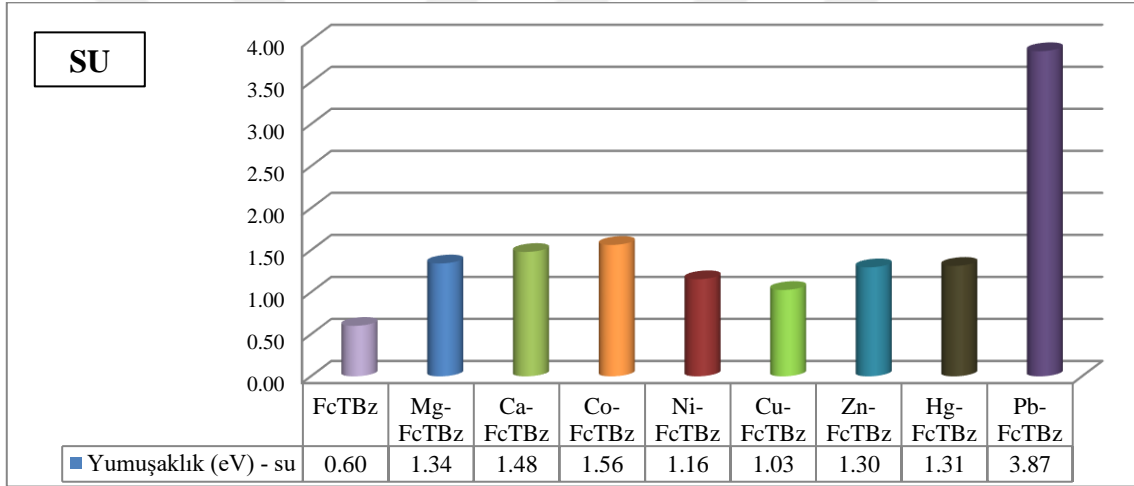
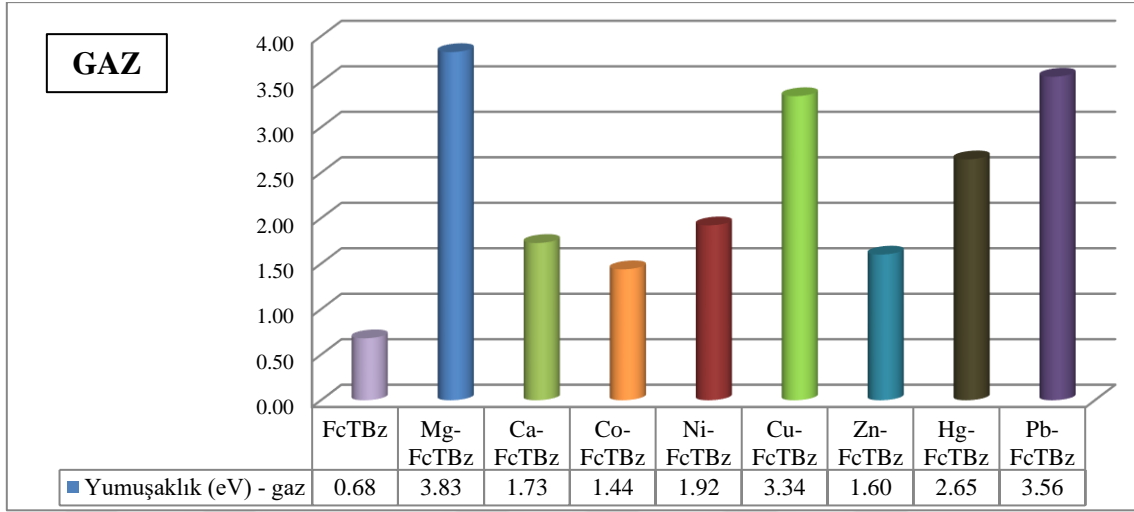
EK 5 Ferrosenil tiyazol benzimidazol ve metal iyonu ile komplekslerinin HOMO-LUMO enerji deęerleri ve grafikleri

Moleköl Adı	Gaz fazı (eV)		Su fazı (eV)	
	HOMO	LUMO	HOMO	LUMO
FcTBz	-5,69	-2,48	-5,88	-2,92
Mg-FcTBz	-10,68	-9,60	-5,02	-3,53
Ca-FcTBz	-10,41	-9,26	-5,07	-3,72
Co-FcTBz	-10,51	-9,23	-5,22	-3,93
Ni-FcTBz	-10,99	-9,95	-6,50	-4,77
Cu-FcTBz	-11,25	-9,36	-6,14	-4,20
Zn-FcTBz	-10,47	-9,22	-5,30	-3,76
Hg-FcTBz	-10,32	-9,15	-5,00	-3,48
Pb-FcTBz	-10,51	-9,30	-5,40	-4,10

EK 6 Metal iyonlarının HOMO-LUMO orbital enerjileri, bant aralığı, toplam enerji değerleri

İyon Adı	HOMO (eV)	LUMO (eV)	Bant Aralığı (eV)	E_{toplam} (kcal/mol)
Fe²⁺	-9,637	-6,675	2,962	-77152,02
Fe³⁺	-20,317	-16,327	3,990	-76890,41
Mg²⁺	-	-	-	-394,60
Ca²⁺	-30,183	-0,702	29,482	-22866,85
Co²⁺	-11,444	-7,713	3,732	-90775,41
Ni²⁺	-11,900	-9,058	2,842	-105947,89
Cu²⁺	-17,574	-5,779	11,795	-122746,43
Zn²⁺	-17,482	-3,131	14,350	-40985,40
Hg²⁺	-13,545	-3,193	10,352	-26679,28
Pb²⁺	-16,170	-4,887	11,283	-1944,02

EK 7 Ferrosenil tiyazol benzimidazol ve metal iyonları ile komplekslerin yumuşaklık parametreleri değerleri

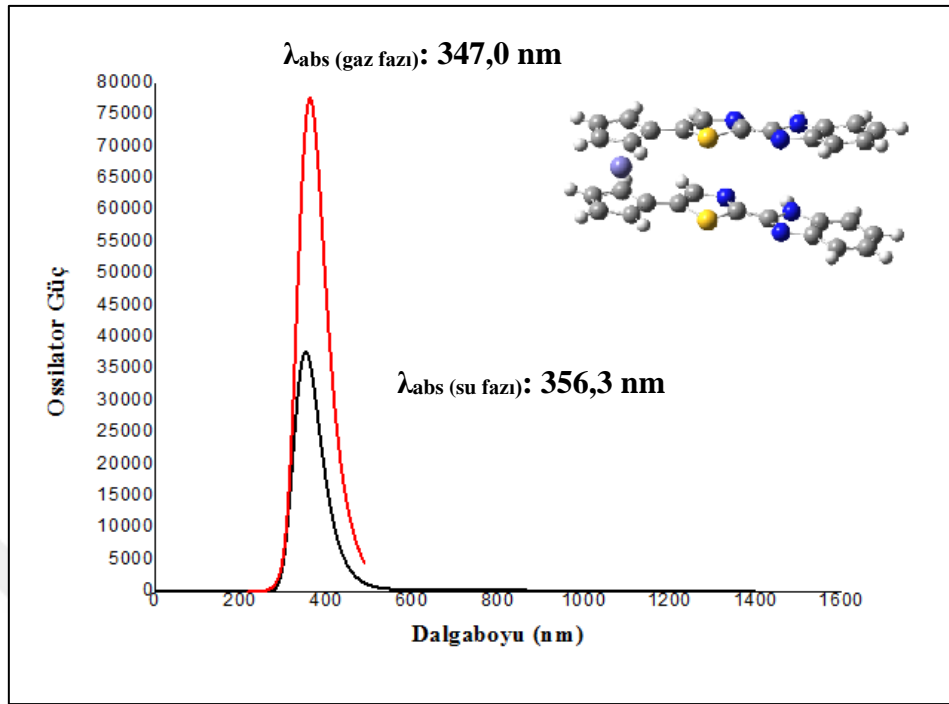


EK 8 Gaz ve su fazı için ossilatör güç değerleri

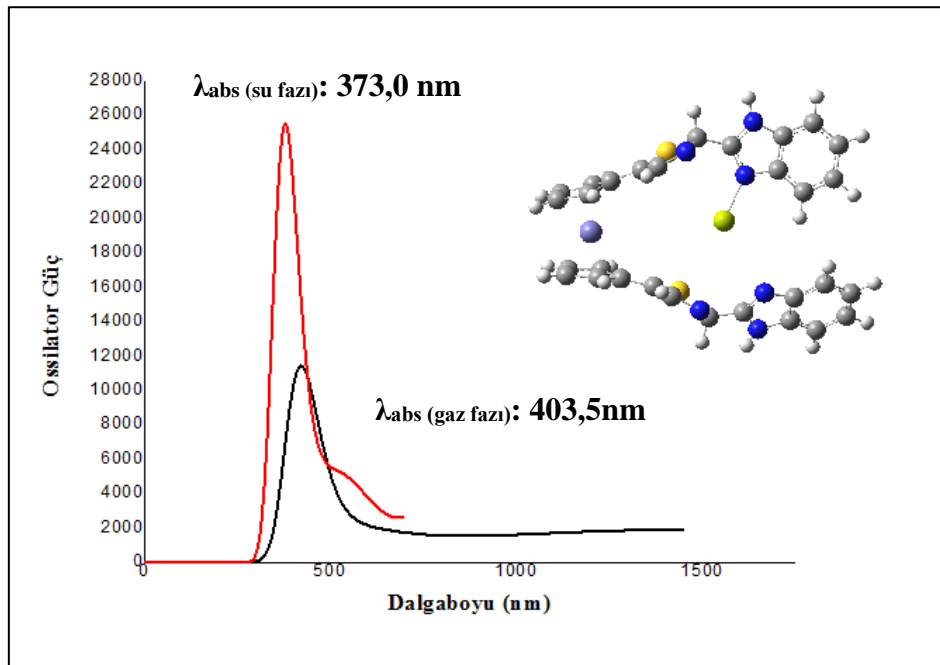
Tablo 9: Gaz ve su fazı ossilatör güç değerleri

İsim	Ossilatör Güç	
	Gaz Fazı	Su Fazı
FcTBz	0,8017	0,0176
Mg-FcTBz	0,1304	0,3777
Ca-FcTBz	0,0841	0,4271
Co-FcTBz	0,0926	0,2629
Ni-FcTBz	0,0233	0,0147
Cu-FcTBz	0,0226	0,0523
Zn-FcTBz	0,1221	0,0823
Hg-FcTBz	0,1461	0,0934
Pb-FcTBz	0,2278	0,1858

EK 9 Gaz ve su fazı için absorpsiyon spektrumları

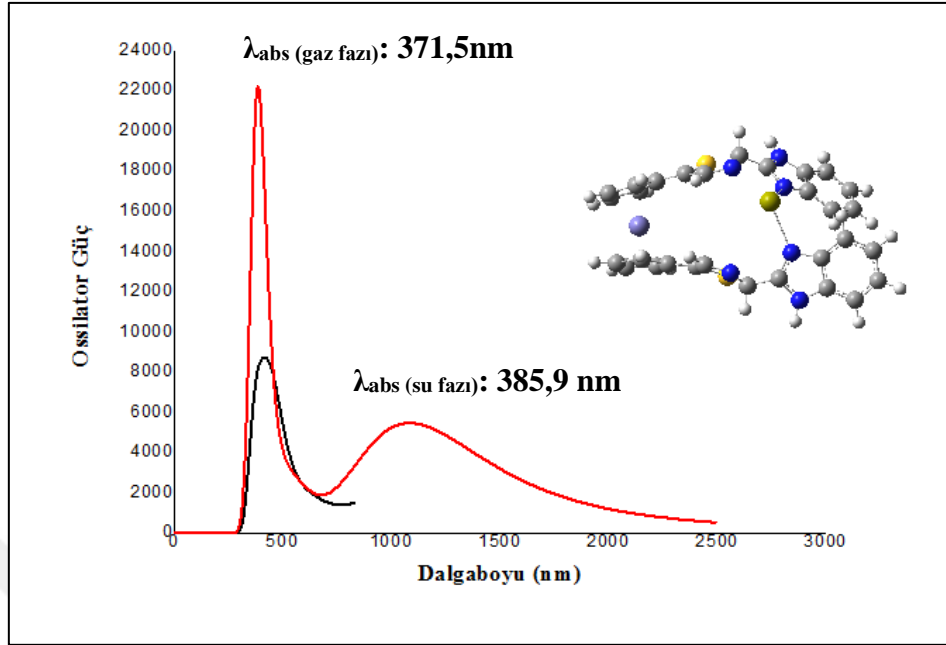


(a) Sensörün (FcTBz) gaz ve su fazı maksimum absorpsiyon dalga boylarının karşılaştırılması.

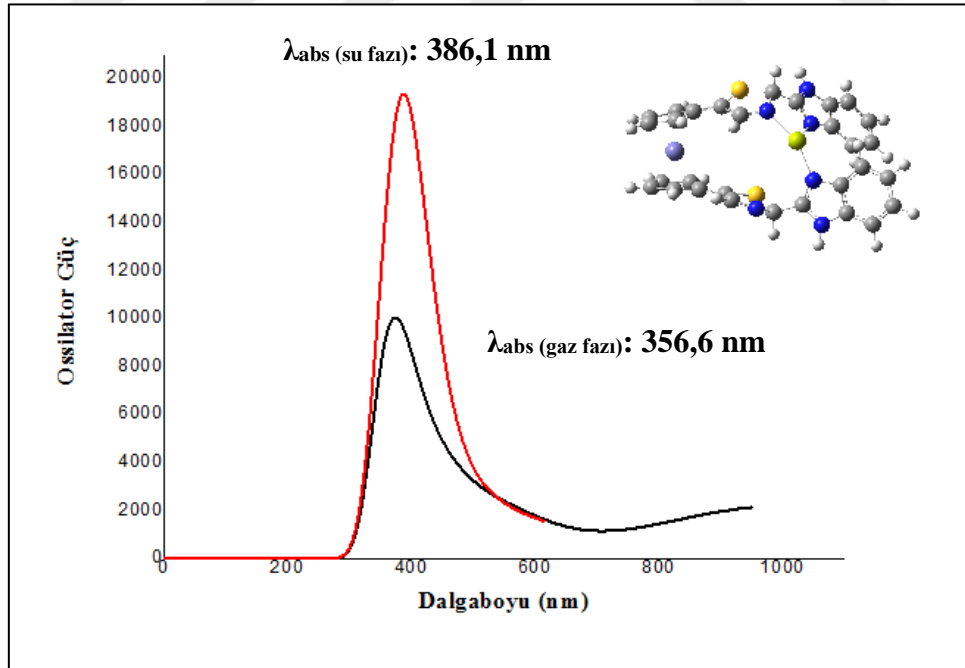


(b) Mg^{2+} iyonu ile sensörün (Mg-FcTBz) gaz ve su fazı maksimum absorpsiyon dalga boylarının karşılaştırılması.

EK 9 Gaz ve su fazı için absorpsiyon spektrumları (devam)

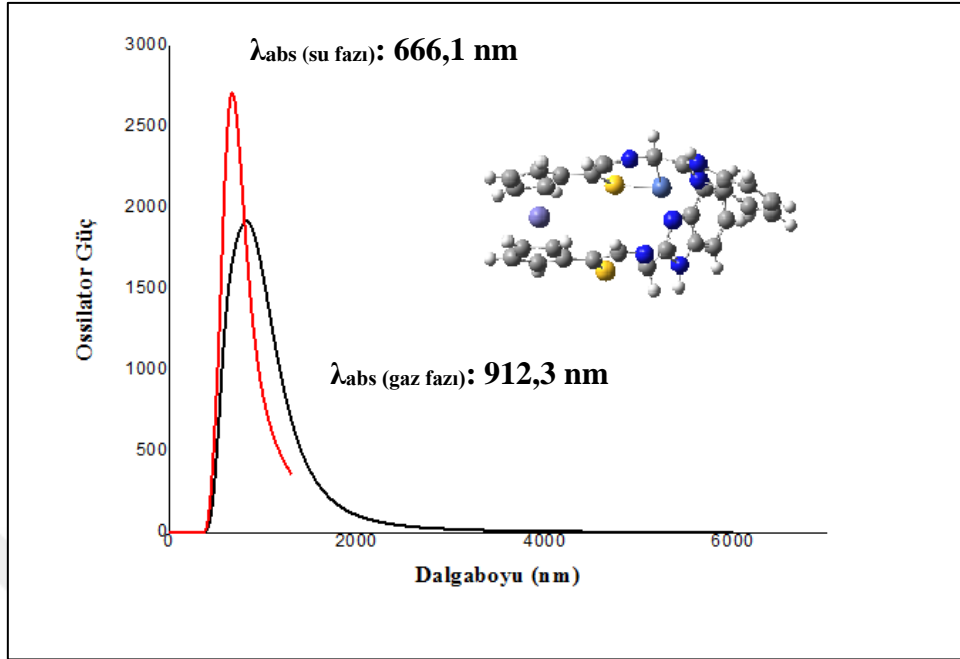


(c) Ca^{2+} iyonu ile sensörün (Ca-FcTBz) gaz ve su fazı maksimum absorpsiyon dalga boylarının karşılaştırılması.

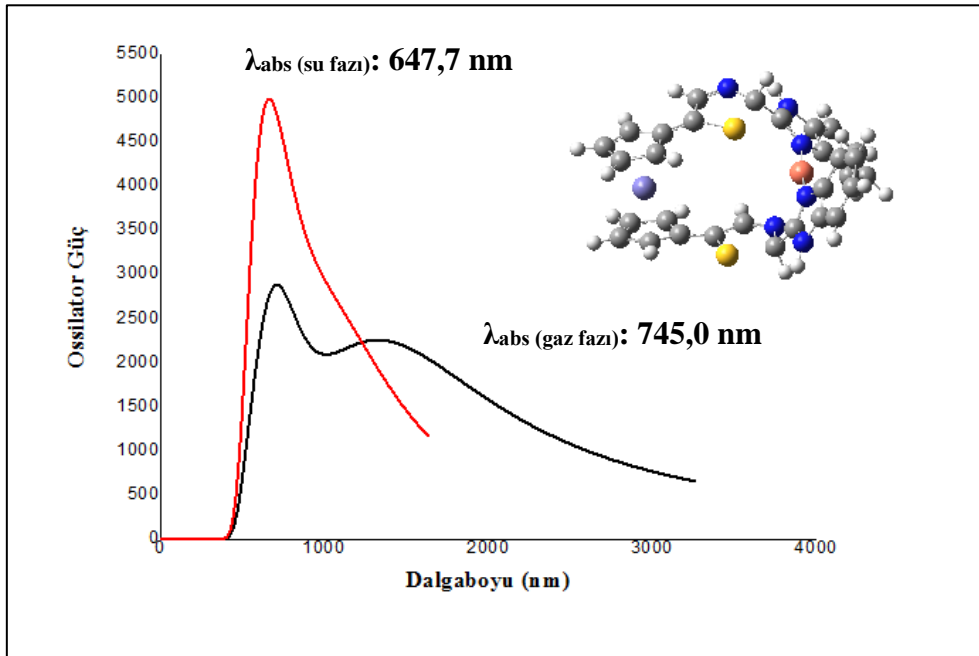


(d) Co^{2+} iyonu ile sensörün (Co-FcTBz) gaz ve su fazı maksimum absorpsiyon dalga boylarının karşılaştırılması.

EK 9 Gaz ve su fazı için absorpsiyon spektrumları (devam)

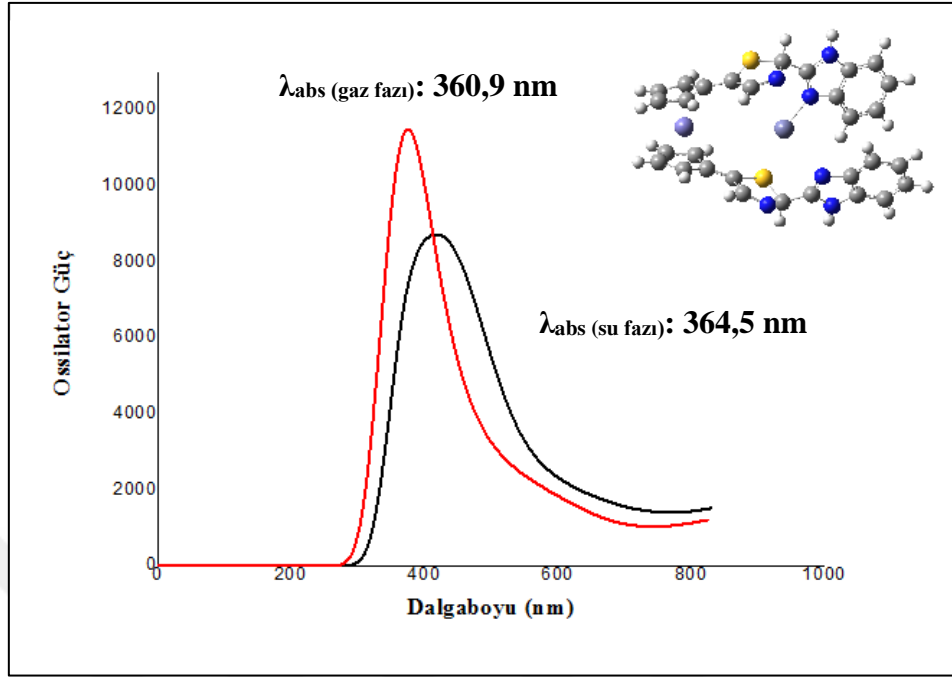


(e) Ni^{2+} iyonu ile sensörün (Ni-FcTBz) gaz ve su fazı maksimum absorpsiyon dalga boylarının karşılaştırılması.

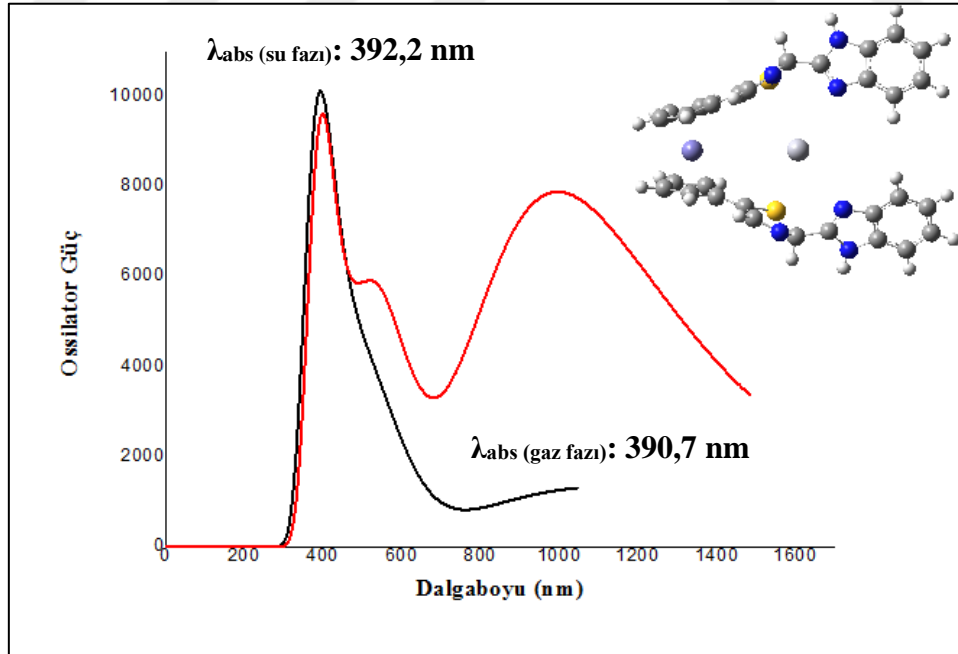


(f) Cu^{2+} iyonu ile sensörün (Cu-FcTBz) gaz ve su fazı maksimum absorpsiyon dalga boylarının karşılaştırılması.

EK 9 Gaz ve su fazı için absorpsiyon spektrumları (devam)

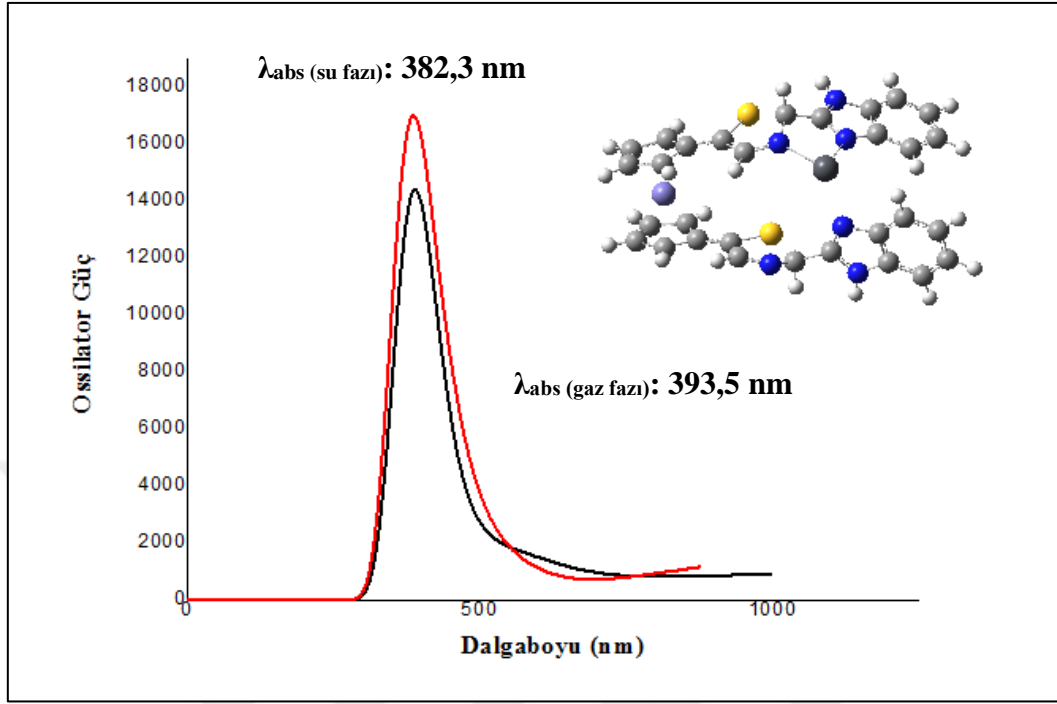


(g) Zn^{2+} iyonu ile sensörün (Zn-FcTBz) gaz ve su fazı maksimum absorpsiyon dalga boylarının karşılaştırılması.



(h) Hg^{2+} iyonu ile sensörün (Hg-FcTBz) gaz ve su fazı maksimum absorpsiyon dalga boylarının karşılaştırılması.

EK 9 Gaz ve su fazı için absorpsiyon spektrumları (devam)



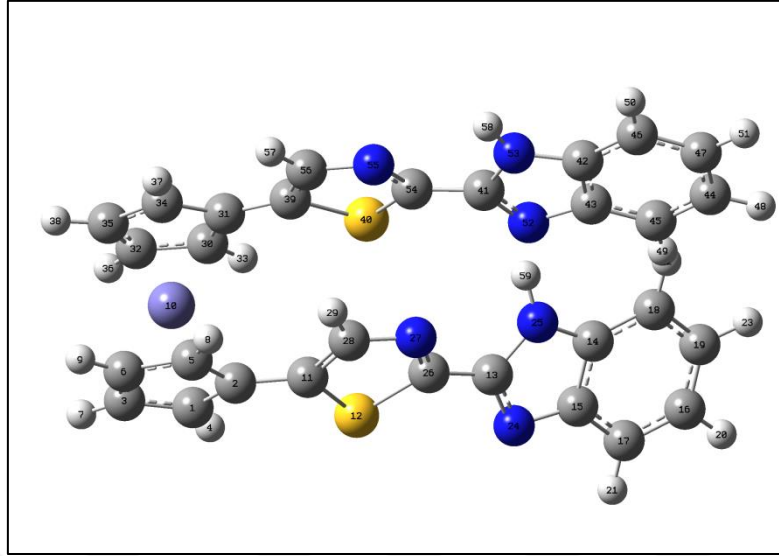
- (i) Pb^{2+} iyonu ile sensörün (Pb-FcTBz) gaz ve su fazı maksimum absorpsiyon dalga boylarının karşılaştırılması.

EK 10 Sensörün gaz ve su fazında maksimum absorpsiyon ve emisyon dalgaboyları (nm)

İsim	Gaz Fazı		Su Fazı	
	λ_{Abs} (nm)	$\lambda_{\text{Em.}}$ (nm)	λ_{Abs} (nm)	$\lambda_{\text{Em.}}$ (nm)
FcTBz	347,0	759,4	356,3	957,5
Mg-FcTBz	403,5	1627,2	373,0	1513,4
Ca-FcTBz	371,5	1340,1	385,9	1513,3
Co-FcTBz	356,6	1469,8	386,1	1664,5
Ni-FcTBz	912,3	2169,7	666,1	2390,9
Cu-FcTBz	745,0	6509,1	647,7	6741,5
Zn-FcTBz	360,9	1571,2	364,5	1812,2
Hg-FcTBz	390,7	1752,4	392,2	1575,8
Pb-FcTBz	393,5	1627,3	382,3	1857,4

EK 11 Gaz fazı hesaplamaları log dosyaları

FcTBz



```
1\1\GINC-LEVREK169\Freq\RB3LYP\LANL2DZ\C30H20Fe1N6S2\KSARIKAVAK\11-Mar-2018\0\#\# opt=calcall b3lyp/lanl2dz geom=connectivity scf=xqc\Title Card Required\0,1\C,-4.3299391181,2.0195184767,0.5668961951\C,-3.3995111024,1.5361842117,-0.4313549398\C,-5.6478714519,1.5588545579,0.2198595685\H,-4.0748627692,2.633902862,1.419144829\C,-4.1613661364,0.7497367802,-1.383574866\C,-5.5436574665,0.7766622412,-0.9875091268\H,-6.5548306264,1.7637712819,0.7704257969\H,-3.7587738779,0.2363691175,-2.24521546\H,-6.3593029282,0.2888756965,-1.5023040089\Fe,-4.3674169874,-0.1040909553,0.5466568525\C,-1.9561873751,1.7156210278,-0.4437948079\S,-1.0698407981,2.4788771997,0.941063187\C,-1.7529238853,2.212891502,0.7559895538\C,3.8086941059,1.7034441035,1.4636959443\C,3.3314556617,2.9070993198,2.0820872209\C,5.403259169,3.0714921877,3.3012889825\C,4.1402891895,3.6019643687,3.0053019742\C,5.0717017295,1.1617308703,1.7727200133\C,5.8586652061,1.8651945625,2.6967848261\H,6.0496650313,3.5832116629,4.0101573091\H,3.7808625813,4.5164348441,3.4677708564\H,5.4223847313,0.2321847123,1.3340705233\H,6.8400008168,1.4790006277,2.9628805195\N,2.0363844553,3.1927091489,1.6279799448\N,2.7829813581,1.2869533872,0.6187438622\C,0.4812968041,2.0432778046,0.0761299793\N,0.2999959418,1.4607300726,-1.0919874565\C,-1.0459798156,1.2877238362,-1.3940599008\H,-1.3076161817,0.8158562334,-2.3324083691\C,-3.2117958966,-0.9779466098,2.101961571\C,-3.0844703215,-1.785655371,0.9056291124\C,-4.5975504441,-0.9494389043,2.4836011044\H,-2.3994899923,-0.4904927807,2.6235463146\C,-4.4199716241,-2.2239469812,0.5397367063\C,-5.3434453078,-1.7215332164,1.5200751767\H,-5.0052637982,-0.4352759693,3.342042658\H,-4.6747394736,-2.83968837,-0.3110909485\H,-6.411601626,-1.8859121416,1.5253177997\C,-1.8649825176,-2.0987176528,0.1791236194\S,-0.2497810284,-1.4247086259,0.6536133023\C,1.8232136857,-2.1467845474,-1.2211234065\C,3.6150495808,-2.6465736911,-2.4856407653\C,3.9019784987,-1.5679959871,-1.5901340848\C,6.1254804631,-1.4498868371,-2.5070191012\C,5.1717589735,-0.9555288366,-1.6064054896\C,4.5684787283,-3.1468060458,-3.3890515087\C,5.8297747101,-2.5314776659,-3.3822713268\H,7.1121598061,-0.9958193228,-2.5440102594\H,5.3973692805,-0.118245932,-0.9542633106\H,4.3462205312,-3.9672910225,-4.0653876559\H,6.5984836432,-2.8844303308,-4.0651072506\N,2.7626211516,-1.2802159699,-0.8116576247\N,2.2896151157,-2.987538481,-2.2
```

247458473\C,0.4429341997,-2.2610496789,-0.7962913248\N,-0.438042894,-2.9800710619,-1.4799470497\C,-1.7126125402,-2.8973931561,-0.9456053363\H,-2.5156691195,-3.4397975663,-1.4266808775\H,1.7059791617,-3.678870897,-2.6788050344\H,2.7337470222,0.4078779113,0.0725928346\\Version=ES64L-G09RevD.01\State=1-A\HF=-1627.1254689\RMSD=6.875e-09\RMSF=2.823e-06\ZeroPoint=0.4394565\Thermal=0.4694667\Dipole=-1.4038566,-2.2669115,-0.8615084\DipoleDeriv=0.2168074,0.0398073,0.0010357,0.0247534,-0.092161,0.114052,-0.0731015,-0.0947799,-0.0123914,0.212103,-0.079281,0.0131859,0.077827,0.1429351,0.0601615,-0.285914,-0.0079225,0.0892899,-0.0107878,0.0879864,-0.1045294,-0.0898084,-0.0954195,0.1038749,-0.0617762,0.047748,0.0861597,0.109505,-0.0412909,-0.0418542,-0.0472232,0.0767194,-0.0306119,-0.0336549,-0.0671654,0.0261187,0.3132822,-0.0219409,0.0327447,0.1436297,-0.0163416,0.0033191,0.0716001,0.1905133,-0.0249649,-0.0827645,0.1089352,-0.0666166,-0.0625477,-0.0011654,0.0322346,0.128634,0.1526043,0.0287839,-0.0258182,0.02429,0.0501086,-0.0330265,0.1096036,-0.0095915,0.1045503,-0.0354535,0.0589686,0.0859276,0.0240618,0.073507,0.0096987,0.063621,-0.072997,0.0602359,-0.0334072,0.0366839,-0.0075406,-0.0405542,-0.0543534,-0.1014361,0.0701583,-0.0605649,-0.0275077,-0.0258623,0.0750715,-1.7419737,-0.0825691,0.1979636,-0.0667376,-0.3562525,-0.3227268,0.3199594,-0.4050925,-0.6948135,0.2457643,0.2398322,0.0115815,0.1008096,-0.0095877,0.0671843,-0.2568294,0.1348209,0.0166364,-0.2200203,0.0802774,0.0933766,0.1382553,0.0674056,-0.0646319,0.2634667,-0.0870754,-0.0694525,0.0854798,-0.2393036,-0.2158157,-0.1617206,0.5876572,0.2044313,-0.0356265,0.2210464,0.1015858,-0.1161826,0.1137585,0.0754746,0.2574518,0.0310073,0.1180379,0.1195198,0.0498804,0.2121767,0.0366855,0.057281,0.1129589,-0.0588229,-0.0354634,-0.0747023,-0.1161051,-0.0346292,-0.0181328,-0.3392146,-0.0032214,-0.0174686,0.3005551,-0.0421088,0.2045805,0.1398858,0.1105037,-0.0438642,0.2344752,-0.0422435,0.1193679,0.0455089,0.0669228,0.1431994,0.2160524,0.1292235,0.0159478,0.183652,-0.0946979,0.0685928,-0.1029733,0.0054743,0.0811669,0.1494248,0.0405683,-0.0966149,-0.0708611,-0.0936247,0.0287471,-0.3427193,-0.016419,-0.0259351,-0.1947217,0.0515296,-0.1766718,-0.0174683,-0.0598922,-0.1261457,-0.0604782,0.0485101,-0.108248,-0.131308,-0.1128168,0.0200288,0.0977525,0.079487,0.0193426,0.0279756,-0.0131823,-0.1001471,-0.0166445,-0.0891886,0.0933111,0.0687241,0.0641206,0.0003146,0.0820459,-0.0474919,-0.1005628,0.0300585,-0.0797219,0.1123394,-0.1072502,0.0761563,-0.0841061,0.0983819,0.0801454,-0.0040274,-0.0800747,-0.0150977,0.1045447,-0.2916042,-0.1078365,-0.0825497,-0.0388055,-0.4865393,-0.1239063,0.1066627,-0.1622092,-0.3025594,-0.307886,0.1151561,0.0262925,-0.107075,-0.780132,-0.4330639,-0.1951095,-0.3377585,-0.5064145,0.8178941,-0.106344,0.1098559,-0.1259915,0.0841232,0.2092713,-0.0535102,0.2763418,0.4910427,-0.2956309,-0.0155676,0.0723683,0.0358948,-0.3072324,-0.172739,-0.1353024,-0.2283179,-0.5903969,-0.2519792,-0.0532392,-0.0734296,0.0542148,-0.0929996,0.0736693,0.3427437,0.1280899,0.1301209,0.0635521,-0.0008251,-0.0360624,-0.0614127,0.1130949,-0.0991388,-0.0769312,-0.0926293,0.02166,0.257065,0.0526642,-0.1741295,-0.265169,0.0110084,0.0785318,-0.2604695,0.1756687,0.0751749,-0.097516,-0.2242311,0.0484586,-0.0108897,0.092487,0.0574029,0.1996624,-0.0572121,0.0344397,-0.1550959,0.0146963,0.1050469,0.0696091,-0.0000002,0.0067641,-0.0842138,0.2078372,0.0318011,0.0142615,-0.0299314,-0.0450769,-0.0351475,0.0751436,-0.0401505,-0.0636571,-0.0120888,0.1169644,0.3485079,-0.1098622,-0.1127231,0.0943108,-0.0969723,0.1093201,-0.0068619,-0.0693628,0.0267484,0.05304,-0.0604868,0.103301,0.1727317,-0.0955832,0.0394107,0.1081797,0.0788307,-0.0021531,0.051142,0.0197322,0.0536875,0.0627597,0.0669124,-0.0978875,0.031801,-0.0423416,0.027682,0.1052588,-0.0013945,-0.0076444,0.006365,0.0605771,-0.0491982,-0.0432816,-0.0897493,0.0068004,-0.0778418,-0.0348355,0.0196476,0.0341913,0.1099109,-0.0180419,-0.0244622,-0.0159805,0.1036341,0.4640317,-0.1602633,0.0301715,-0.4076261,0.0873194,0.2882208,-0.496209

7,0.2714873,0.2162467,0.0620532,-0.0493702,-0.0362133,0.019451,0.050401,-0.2131968,0.0807715,-0.216056,-0.2114242,0.4601463,-0.0063925,-0.0290775,-0.0030612,0.5231808,0.309537,0.0063318,0.3342842,0.3567995,0.0792043,0.0987973,0.0227059,0.119012,0.0129592,-0.1303784,0.1442914,-0.1226009,-0.0629889,-0.0724516,0.0136305,-0.0043694,-0.047327,-0.0101038,0.012655,-0.0417089,-0.0366102,0.031791,-0.0675998,0.1120827,0.0322984,0.4050429,-0.1322133,-0.1042382,0.3332643,-0.0186897,-0.2827272,0.325977,0.0020079,-0.1570625,0.1161899,0.0303844,0.0892453,-0.1096762,0.1167818,0.0057527,0.1625961,-0.0544143,-0.1613809,-0.0218264,-0.0352088,0.1419083,-0.1633365,0.1674227,0.0222047,-0.3002904,0.0812789,0.0862921,-0.2646656,0.0169419,0.2385917,-0.181987,0.1288332,0.0331742,-0.1007698,-0.0814904,0.0410162,-0.1011976,0.0851308,-0.0265348,0.0249883,-0.0325676,0.1162005,0.0951652,-0.0345995,-0.0086715,-0.0466442,0.0184976,-0.0899375,-0.0350488,-0.0736967,0.085371,0.0850115,-0.0658092,-0.0185564,-0.0152781,0.019726,-0.1343182,0.026026,-0.1230792,0.0552883,-0.0361969,0.0438235,0.1229249,0.0394376,0.092153,-0.0792671,0.1207703,-0.084287,0.0304687,-0.3329597,-0.1655214,-0.0918691,-0.1160496,-0.5747025,-0.267501,-0.0705,-0.1290424,-0.3042651,-0.4381293,0.021086,0.102584,-0.0416122,-0.5131033,-0.1554653,0.0111422,-0.2208485,-0.4237471,0.0653841,0.1464926,-0.0458014,-0.0580073,0.1517657,0.3536777,-0.2886863,0.2427986,0.5306142,-0.0502758,-0.064459,-0.1693737,-0.0914978,-0.34725,-0.1970793,-0.1416902,-0.2068982,-0.3797539,-0.2100684,0.103917,0.1182635,0.4714719,-0.1192486,-0.0794351,0.6918351,-0.022789,-0.2511097,-0.0197539,-0.059248,-0.0120014,-0.0757345,0.1351528,-0.0300293,-0.0646726,-0.0415745,0.1016429,0.245123,-0.0236827,0.013952,-0.0357119,0.3262828,-0.0090548,0.0038145,-0.0262071,0.283641,0.2003591,0.0386026,-0.0302867,0.0906488,0.8035693,0.3848601,0.014907,0.2939958,0.4415353\Polarr=692.1627569,10.7407335,342.2560655,-24.6883923,82.3512388,343.0306317\PG=C01 [X(C30H20Fe1N6S2)]\NImag=0

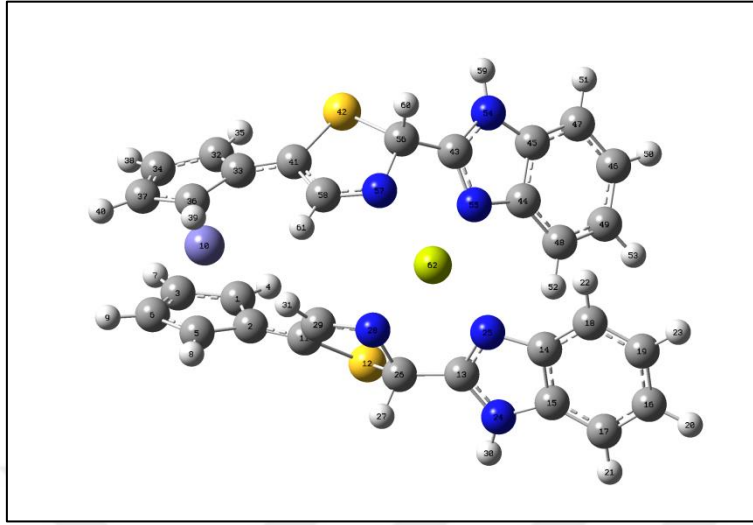
UV-Görünür Bölge Maksimum Absorbans Dalgaboyu

Excited State 12: Singlet-A 3.5732 eV 346.98 nm f=0.8017
 <S**2>=0.000

130 ->136	-0.12377
131 ->136	0.32253
132 ->137	-0.14103
134 ->136	-0.12334
134 ->137	-0.20592
135 ->137	0.50690

EK 11 Gaz fazı hesaplamaları log dosyaları (devam)

Mg-FcTBz



```
1\1\GINC-LEVREK77\FOpt\RB3LYP\LANL2DZ\C30H22Fe1Mg1N6S2 (2+) \ROOT\21-May
-2017\0\#\# opt freq b3lyp/lanl2dz geom=connectivity scf=xqc\MGGAZ\2,
1\C,-3.1181915165,-1.4366081391,1.1470711183\C,-2.4829097431,-0.137127
6286,1.3355275079\C,-4.5242513894,-1.2275626506,1.0050390142\H,-2.6140
310643,-2.3932687352,1.1627948972\C,-3.5262597603,0.8723465913,1.20138
31697\C,-4.7808799817,0.1947376145,1.0503980635\H,-5.2700156878,-1.999
7624482,0.8753814039\H,-3.3916392955,1.9358996066,1.3369034021\H,-5.75
25724746,0.6657873393,1.0026693913\Fe,-3.547202922,-0.2053893087,-0.61
17980721\C,-1.0864862949,0.1617902962,1.4544036051\S,0.1543336381,-0.8
28005761,2.3837161038\C,2.8344953294,0.5759705149,2.0108294302\C,4.909
8808754,0.6588775497,1.2423774389\C,4.9869859334,0.4696649414,2.652674
7741\C,7.3704918897,0.5052544763,2.5558824851\C,6.2112971106,0.3846583
969,3.3359593725\C,6.0822586505,0.7797832021,0.4715306396\C,7.30694029
42,0.7009238068,1.1470460852\H,8.3424413768,0.4548842347,3.0373791975\
H,6.2688468584,0.2440166862,4.410846336\H,6.0459812096,0.9324918602,-0
.6030740765\H,8.2328076934,0.7949379282,0.5877142448\N,3.6521833806,0.
4230138976,3.0980035441\N,3.5480709364,0.7136409229,0.8721284773\C,1.3
587733005,0.7582573015,2.0286868796\H,1.0592649664,1.406010164,2.86261
98563\N,0.8916074254,1.2767643525,0.7474846561\C,-0.4636758068,1.18310
40405,0.7180482709\H,3.3509933373,0.3216170292,4.0607263204\H,-1.03363
64064,1.78868637,0.0247959048\C,-3.4223478209,-1.1694257419,-2.5584823
213\C,-2.5807414936,0.0232016697,-2.6331363976\C,-4.7598691282,-0.7606
964576,-2.2795243381\H,-3.0994263563,-2.1802637013,-2.7664528636\C,-3.
4314990963,1.1564267733,-2.2301981681\C,-4.7703766753,0.6763322628,-2.
1065494876\H,-5.6207162406,-1.4110671951,-2.2125427316\H,-3.1385559625
,2.1970111827,-2.2087698183\H,-5.6409737909,1.2838127854,-1.9023657796
\C,-1.2010478269,0.0455099553,-2.9339073989\S,-0.3545164345,-1.3449476
202,-3.7380433456\C,2.3930532133,-1.2546728968,-2.9131748993\C,3.77359
28049,-2.1391066984,-1.4282988395\C,3.8393276619,-2.9418026999,-2.6038
113745\C,5.4032772525,-4.4133514586,-1.5675090791\C,4.6508922537,-4.08
25834486,-2.7033282346\C,4.5307151803,-2.4898207453,-0.2939748143\C,5.
3388194592,-3.6311243554,-0.3817068506\H,6.0456584316,-5.2884438874,-1
.5902745207\H,4.6971675088,-4.6854069018,-3.6049728214\H,4.4901499799,
-1.9099283421,0.6191060623\H,5.9319514045,-3.9308000316,0.4770907468\N
,2.9544127569,-2.3420699151,-3.5197411948\N,2.8614438419,-1.0743430627
,-1.6630334058\C,1.3374573478,-0.375883083,-3.4882331842\N,1.054232505
```

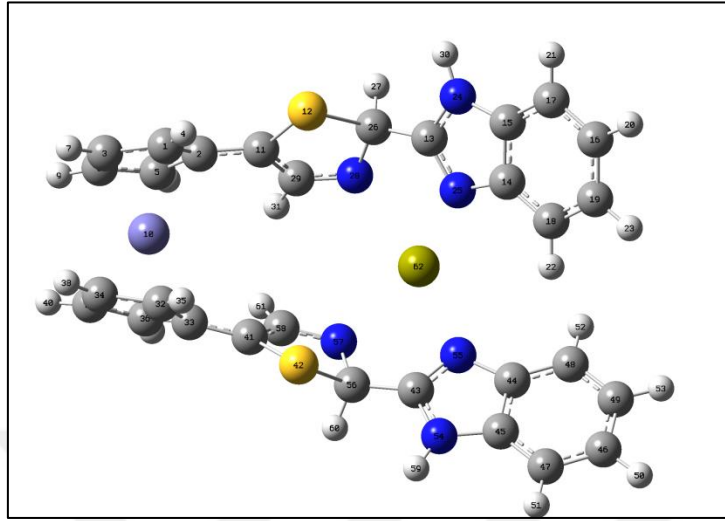
1,0.7536885424,-2.5835820347\C,-0.2519508347,1.0233428397,-2.502738030
9\H,2.7641736581,-2.6712154083,-4.4595685971\H,1.5853097761,-0.0106934
038,-4.4918551667\H,-0.566528784,1.929763013,-1.9984101109\Mg,2.274013
8954,0.7198651892,-0.7603585314\\Version=ES64L-G09RevD.01\State=1-A\HF
=-1628.7488066\RMSD=6.519e-09\RMSF=3.134e-06\Dipole=0.1247608,0.323222
8,-0.4944652\Quadrupole=60.6134989,-45.2518714,-15.3616275,-14.2709272
,15.2303919,14.8816807\PG=C01 [X(C30H22Fe1Mg1N6S2)]\@

UV-Görünür Bölge Maksimum Absorbans Dalgaboyu

Excited State	21:	Singlet-A	3.0730 eV	403.47 nm	f=0.1300
<S**2>=0.000					
123	->137	0.14349			
125	->137	0.13699			
127	->137	0.10463			
128	->137	0.14019			
135	->137	0.14628			
136	->138	-0.32811			
136	->139	-0.16539			
136	->140	0.42246			
136	->141	0.21698			

EK 11 Gaz fazı hesaplamaları log dosyaları (devam)

Ca-FcTBz



```
1\1\GINC-LEVREK11\FOpt\RB3LYP\LANL2DZ\C30H22Ca1Fe1N6S2(2+)\SSEYRAN\21-  
May-2017\0\#\# opt freq b3lyp/lanl2dz geom=connectivity scf=xqc\CAGAZ1  
\2,1\C,-3.5421318095,0.0695580353,1.792198642\C,-2.7324653,1.13758843  
29,1.2142157622\C,-4.8961919225,0.2572566853,1.3793873401\H,-3.1870438  
374,-0.6894266755,2.4757752447\C,-3.621461149,1.9034055939,0.327439056  
4\C,-4.9493027932,1.4038956365,0.4992860312\H,-5.7392578989,-0.3507567  
787,1.6761099183\H,-3.3544538947,2.7910894926,-0.2286317747\H,-5.83984  
32049,1.8077958373,0.0383512797\Fe,-3.7078838192,-0.0833716901,-0.3601  
524336\C,-1.3423370301,1.329282583,1.3882705026\S,-0.4046204757,0.6023  
071716,2.7714255528\C,2.4334383325,0.8598520706,2.2860268392\C,4.27471  
3513,-0.3015309181,1.9123750415\C,4.1411543945,-0.1721317396,3.3238549  
156\C,6.1378189138,-1.4311642623,3.6682823914\C,5.0626765308,-0.725594  
16,4.2272749814\C,5.3540736977,-1.0224296114,1.3664816998\C,6.27756099  
23,-1.5807863622,2.2606995625\H,6.878605583,-1.8792804462,4.3236510587  
\H,4.957038333,-0.6205672173,5.302644956\H,5.4637259368,-1.16450721,0.  
2973229872\H,7.1195984083,-2.1474957616,1.8744892389\N,2.9657012058,0.  
5724108235,3.5188530536\N,3.1908189181,0.3693509187,1.2863157157\C,1.1  
578775638,1.6092626452,2.1019488623\H,1.1423992788,2.5181589121,2.7185  
291812\N,0.8626538242,1.9582000455,0.7044692513\C,-0.4573595154,1.9803  
898316,0.4799958966\H,2.5783848712,0.8414708793,4.4162398392\H,-0.8271  
778784,2.4045052535,-0.4484943027\C,-3.3104181558,-2.0492180982,-1.200  
1148343\C,-2.5870550566,-1.073988892,-2.0094504622\C,-4.7041375967,-1.  
7420787735,-1.2653915449\H,-2.870299715,-2.8994403927,-0.6970541813\C,  
-3.5744001051,-0.0865692505,-2.4574941267\C,-4.8700581506,-0.544263262  
, -2.058575663\H,-5.4998327508,-2.3068317865,-0.7998388593\H,-3.3786070  
293,0.7474898354,-3.1162964148\H,-5.8109893045,-0.0753844015,-2.310053  
2712\C,-1.1918790795,-1.0028145657,-2.258764699\S,-0.0409233472,-2.436  
6998861,-2.2029493643\C,2.6956314829,-1.5095474239,-2.9447902918\C,4.8  
605432464,-1.2780812294,-2.5651276007\C,4.6962198322,-2.4647473549,-3.  
3345145092\C,7.0581184961,-2.8060555314,-3.3786227371\C,5.7818453804,-  
3.255397474,-3.7464042358\C,6.150827846,-0.8310627417,-2.2158331402\C,  
7.24030282,-1.6083978409,-2.6318234499\H,7.9308154961,-3.3771605538,-3  
.6806927431\H,5.6518249198,-4.1612347882,-4.3305342192\H,6.3095104827,  
0.0930791861,-1.6663898923\H,8.2494040607,-1.2887031224,-2.3892435389\  
N,3.3138563766,-2.5736070798,-3.5564927529\N,3.5860267108,-0.710803923
```

9,-2.3216842785\C,1.2442384288,-1.2046206216,-3.100571862\N,0.86733669
7,0.1402513448,-2.6546308971\C,-0.4666885578,0.1949298575,-2.486623599
9\H,2.8555492762,-3.3000207977,-4.0951472402\H,0.9580066769,-1.3388925
42,-4.1532847847\H,-0.9517347424,1.1635171744,-2.4133302463\Ca,2.51325
59434,1.0163185306,-0.9761089401\\Version=ES64L-G09RevD.01\State=1-A\H
F=-1664.4876882\RMSD=4.189e-09\RMSF=1.042e-05\Dipole=0.5282778,1.17886
24,-0.4032321\Quadrupole=59.0836762,-43.2702789,-15.8133973,-16.637099
8,0.1496611,15.795965\PG=C01 [X(C30H22Ca1Fe1N6S2)]\@

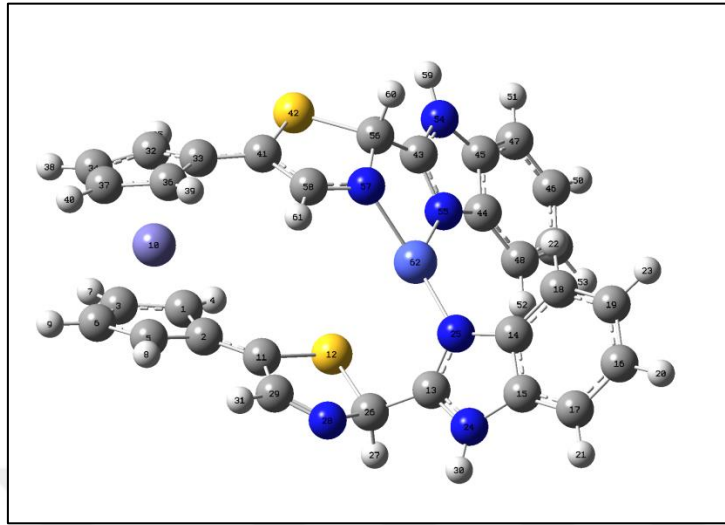
UV-Görünür Bölge Maksimum Absorbans Dalgaboyu

Excited State 22: Singlet-A 3.3373 eV 371.51 nm f=0.0841
<S**2>=0.000

127 ->141	-0.13906
128 ->141	0.49140
129 ->141	0.17603
133 ->142	-0.11639
134 ->145	0.19119
140 ->142	-0.11757
140 ->144	0.14501
140 ->146	0.23571

EK 11 Gaz fazı hesaplamaları log dosyaları (devam)

Co-FcTBz



```
1|1|UNPC-DESKTOP-GRHAD34|FOpt|RB3LYP|LANL2DZ|C30H22Fe1Co1N6S2 (2+) |KUBR
A|22-Oct-2017|0||# opt b3lyp/lanl2dz geom=connectivity scf=xqc||Kobalt
-gaz||2,1|C,-3.3157446682,-0.2559574324,-1.867863086|C,-2.9878023609,-
1.3852896522,-0.967375266|C,-4.7320329502,-0.1777529376,-1.9890490711|
H,-2.6014653278,0.2945207239,-2.4649287777|C,-4.2719991561,-1.78484582
36,-0.3629893962|C,-5.3232625824,-1.1079725105,-1.0481181293|H,-5.2726
07878,0.4828662306,-2.6524955128|H,-4.4120567201,-2.5663662063,0.36951
38128|H,-6.3818944996,-1.2634559788,-0.8947839419|Fe,-4.1698207173,0.3
081613275,0.0150597174|C,-1.7530635636,-1.9735313831,-0.6922208091|S,-
0.1259584212,-1.4616575038,-1.4152663649|C,1.8849939583,-2.989655199,0
.0221088385|C,3.5779590038,-2.1633994302,1.2005535047|C,3.7510865888,-
3.5717865571,1.1415226355|C,5.7483614614,-3.4095884188,2.4348934848|C,
4.8325692183,-4.2249680885,1.7544453127|C,4.5051863453,-1.3534432744,1
.8828891461|C,5.5879503537,-1.9973164344,2.4975155186|H,6.6028857087,-
3.8651014014,2.9258405503|H,4.962500355,-5.3016872778,1.7090513693|H,4
.4017807957,-0.2725026597,1.9401184968|H,6.3246391788,-1.4081196055,3.
0349673534|N,2.6638730115,-4.047589735,0.3861945264|N,2.3904993865,-1.
8265624048,0.4906519068|C,0.6176987647,-3.1783028147,-0.7752260033|H,0
.8152020501,-3.7558081847,-1.6870647318|N,-0.4095466533,-3.8349193781,
0.0121554035|C,-1.5677485054,-3.2301873577,0.0237714491|H,2.4493555832
,-5.0204062985,0.1930758545|H,-2.3932188728,-3.6985644242,0.5511161653
|C,-4.2443426743,2.4380306046,0.3715320975|C,-3.3176533412,1.821136628
6,1.2940130211|C,-5.537293268,1.8530712904,0.5732813889|H,-4.004204537
9,3.2114286865,-0.3446241575|C,-4.07607065,0.8109019161,2.0563844147|C
,-5.4388927394,0.88758219,1.6450406694|H,-6.4411985627,2.1149318509,0.
0415785638|H,-3.6929305682,0.2022086452,2.8637015095|H,-6.2529664685,0
.2985767517,2.0443593722|C,-1.903923699,1.9984190487,1.2846054633|S,-1
.1076923735,3.4455162146,0.4829002234|C,1.6866029743,2.7975599427,-0.0
111949435|C,3.2483779251,2.1811444964,-1.4645248028|C,3.2164970649,3.6
035908887,-1.4518449978|C,4.9565371757,3.6839101761,-3.0813474391|C,4.
0636926857,4.382915215,-2.2552815803|C,4.1502194531,1.4908408921,-2.29
53999222|C,4.9994489427,2.2619705324,-3.1009781527|H,5.6339268583,4.24
03603243,-3.7219753788|H,4.0396437316,5.4681302087,-2.2448623719|H,4.1
925290502,0.405536554,-2.3183380239|H,5.7089466914,1.7671030992,-3.757
1970815|N,2.2198181317,3.9486992321,-0.5150829464|N,2.2778911942,1.706
```

3131248,-0.5503978743|C,0.6147109556,2.6840033485,1.0298536751|N,0.359
 4000988,1.2657532689,1.3502492379|C,-0.9423016418,1.0430483336,1.65169
 71011|H,1.9442760926,4.8921179012,-0.2654368719|H,0.8738711227,3.24970
 46201,1.9339486706|H,-1.2282780163,0.077357431,2.0590267331|Co,1.54668
 47553,0.0038615735,0.2746322464||Version=IA32W-G09RevA.02|State=1-A|HF
 =-1628.7549954|RMSD=5.368e-009|RMSF=4.237e-006|Dipole=0.7498681,-0.554
 6766,0.0601804|Quadrupole=51.2609888,3.4710344,-54.7320232,-5.0791255,
 -0.3252451,-12.9356073|PG=C01 [X(C30H22Fe1Co1N6S2)]||@

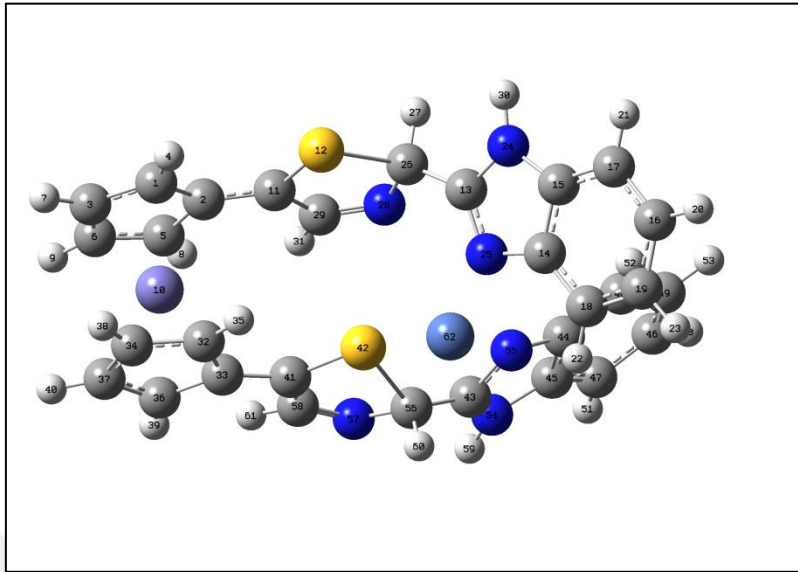
UV-Görünür Bölge Maksimum Absorbans Dalgaboyu

Excited State 24: Singlet-A 3.4773 eV 356.55 nm f=0.0926
 <S**2>=0.000

123 ->137	-0.11249
124 ->137	0.11092
125 ->137	0.11399
126 ->137	0.33517
127 ->138	-0.13774
127 ->141	-0.10207
128 ->137	-0.13996
128 ->138	-0.17552
128 ->141	-0.10206
129 ->138	-0.16488
131 ->141	0.28977
131 ->142	-0.10162
135 ->138	0.15615
135 ->141	-0.11369
136 ->138	0.12411

EK 11 Gaz fazı hesaplamaları log dosyaları (devam)

Ni-FcTBz



```
1\1\GINC-UB12\FOpt\RB3LYP\LANL2DZ\C30H22Fe1N6Ni1S2(2+)\FSGROUP\22-Sep-2017\0\#\# opt b3lyp/lanl2dz geom=connectivity scf=xqc\Title Card Required\2,1\C,-4.280673444,-2.2223974533,0.4898854398\C,-3.2140674047,-1.5640497277,1.2546477609\C,-5.5214993569,-1.6448510844,0.8782572095\H,-4.1490161935,-3.0454417012,-0.1989500163\C,-3.8636533035,-0.5068248674,2.0621543798\C,-5.2645387318,-0.5988524056,1.8476788224\H,-6.4956254799,-1.9356151594,0.5106698622\H,-3.3809304221,0.1536287417,2.76793878\H,-6.0171004841,0.0156070671,2.3221125339\Fe,-4.2127496628,-0.1533149624,-0.0043263535\C,-1.8242525935,-1.7779566717,1.126196939\S,-1.0723082423,-2.9985273933,0.1096374805\C,1.796554803,-2.2252439978,-0.1902511986\C,3.1812771202,-1.442789659,-1.7258892318\C,3.4245572603,-2.8437731505,-1.622695738\C,5.1202583125,-2.6955479154,-3.2924913122\C,4.395773056,-3.4977240778,-2.401991078\C,3.924278702,-0.6451163547,-2.6217178456\C,4.8891312811,-1.2913899514,-3.4000686239\H,5.881266077,-3.1514424719,-3.9188365547\H,4.5824499085,-4.5643228329,-2.3248951677\H,3.7566747612,0.42422677,-2.6996331602\H,5.4815993902,-0.7157910061,-4.1046891272\N,2.5368880709,-3.3029403698,-0.643186246\N,2.1565856751,-1.0969709823,-0.8273710995\C,0.7588439774,-2.3809257758,0.8557956509\H,0.9841314616,-3.2304439522,1.5143898906\N,0.4522440629,-1.2340468352,1.6529866396\C,-0.8030550896,-0.9734478435,1.848699845\H,2.4749528482,-4.2575237898,-0.3079169823\H,-1.086539802,-0.169041498,2.5191899343\C,-3.5924212769,0.1949564707,-1.9990273331\C,-3.0670956353,1.241246664,-1.1163306231\C,-5.0151291483,0.265987513,-1.9692386929\H,-2.9988606669,-0.4698105533,-2.6088068778\C,-4.2159004803,1.9236279029,-0.5349352424\C,-5.4026606835,1.3120208607,-1.0505048087\H,-5.6927608363,-0.369063418,-2.5230095769\H,-4.2015011487,2.7566729037,0.1522521833\H,-6.4162219399,1.601714875,-0.8108201452\C,-1.6628776961,1.4425539461,-0.7791993685\S,-0.4929927059,0.3737640285,-1.5041445138\C,2.3061719314,2.6763438433,0.6680306197\C,4.2018702286,1.6271483772,1.1630988228\C,4.116954556,2.8001056224,1.9764878547\C,6.2318458797,2.2856802576,2.9639251524\C,5.1282164037,3.1499067372,2.8846039365\C,5.3150418488,0.7733770115,1.2479965997\C,6.3238841306,1.1173134387,2.1597951658\H,7.0389637852,2.5177717718,3.6524343981\H,5.0719334303,4.0449231986,3.4966179286\H,5.395039974,-0.1118611772,0.6249030627\H,7.201044753,0.4835914328,2.251671921
```

```

4\N,2.8963511496,3.4325364274,1.6379995207\N,3.046633169,1.5930010779,
0.3571922528\C,1.0289305244,2.6024917812,-0.0836494688\N,-0.1639962107
,2.8818144193,0.618841291\C,-1.3399877492,2.4483151298,0.2502570444\H,
2.5293116768,4.2892188891,2.0344004036\H,1.0579813914,3.0260516475,-1.
0989183718\H,-2.1816993184,2.844416651,0.8147042101\Ni,1.5320880962,0.
742066951,-0.5257712484\\Version=ES64L-G09RevD.01\State=1-A\HF=-1797.1
24823\RMSD=7.357e-09\RMSF=1.053e-05\Dipole=-2.5073491,-1.57511,0.88026
9\Quadrupole=62.2329192,-14.72408,-47.5088391,-3.1852993,-4.5486706,14
.9967181\PG=C01 [X(C30H22Fe1N6Ni1S2)]\@

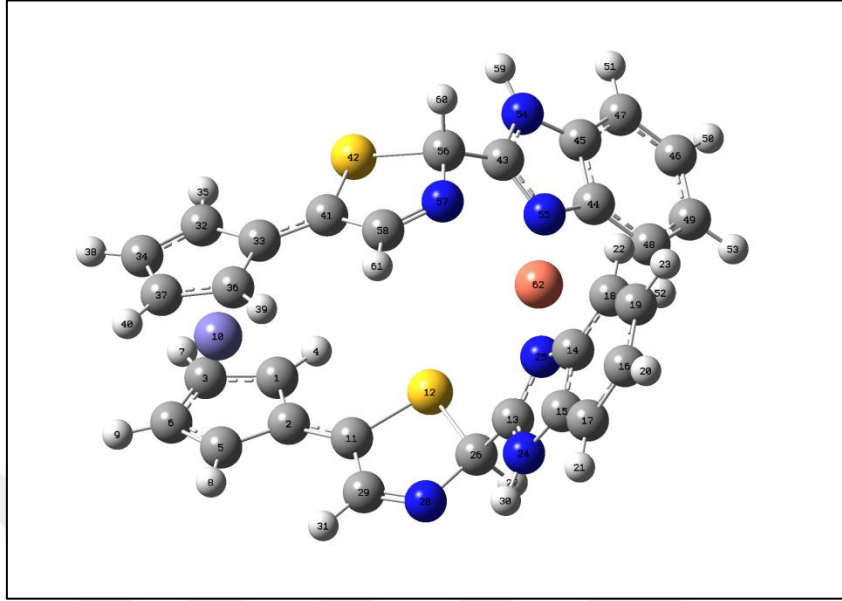
```

UV-Görünür Bölge Maksimum Absorbans Dalgaboyu

Excited State	9:	Singlet-A	1.3590 eV	912.31 nm	f=0.0233
<S**2>=0.000					
139	->145	0.28461			
140	->145	0.10797			
142	->145	0.10617			
143	->146	0.55171			
144	->146	-0.23621			

EK 11 Gaz fazı hesaplamaları log dosyaları (devam)

Cu-FcTBz



```
1\1\GINC-LEVREK108\FOpt\UB3LYP\LANL2DZ\C30H22Cu1Fe1N6S2 (2+, 2) \ROOT\21-  
May-2017\0\#\# opt freq b3lyp/lanl2dz geom=connectivity scf=xqc\CUGAZ\  
\2,2\C,-2.796310048,-1.3848218529,0.635206564\C,-2.3604384776,-0.22545  
01239,1.3897962301\C,-4.1985253977,-1.2371622701,0.3383271305\H,-2.191  
7187957,-2.2532541531,0.4092515011\C,-3.5118734349,0.6848764678,1.4438  
556553\C,-4.6447132858,0.0249673928,0.8713355248\H,-4.818469525,-1.978  
95196,-0.1462148781\H,-3.5308841328,1.6525787018,1.9266978094\H,-5.653  
2670972,0.4132979854,0.8338976023\Fe,-3.1278418896,0.3258776435,-0.676  
0340405\C,-1.0501776657,0.0460769393,1.8723959677\S,0.4014513946,-0.94  
17839335,1.4344494524\C,2.6322152546,0.8618983753,1.994650482\C,4.4171  
988626,1.3875235623,0.7939549648\C,4.2628325481,2.3993437066,1.7800222  
138\C,6.2015622611,3.526615607,0.9632377567\C,5.1470623039,3.486611558  
6,1.8863326386\C,5.4778884367,1.4387213056,-0.1300525701\C,6.364364405  
7,2.5190251045,-0.0289666655\H,6.915852215,4.3433396976,1.0071467434\H  
,5.0319189565,4.2552533744,2.6442230756\H,5.6131882902,0.6714443319,-0  
.8870811546\H,7.1998267998,2.5908350744,-0.7188524575\N,3.1228335442,2  
.0330351588,2.5110186635\N,3.3737420846,0.4380293901,0.9557599793\C,1.  
4502606187,0.1938380972,2.6478622895\H,1.7733951407,-0.4924642219,3.44  
14090301\N,0.5580053422,1.2023579858,3.199854664\C,-0.6874295984,1.100  
3893984,2.7998472923\H,2.6926763154,2.5293268699,3.2844058309\H,-1.422  
7273042,1.7996954952,3.1868258262\C,-3.0118795496,-0.026874741,-2.8421  
816051\C,-1.7172455148,0.5012628049,-2.4051219824\C,-4.0027871232,0.97  
19378779,-2.6342293434\H,-3.1677350101,-0.9758105069,-3.3377983668\C,-  
1.997563956,1.8164340571,-1.8083445356\C,-3.378718513,2.1061015193,-1.  
9848643061\H,-5.0476604692,0.8962064308,-2.9050317225\H,-1.2692806998,  
2.4955692108,-1.386046952\H,-3.8760277745,3.0239083395,-1.7010515625\C  
, -0.4557105599,-0.1287565491,-2.5384874502\S,-0.220255654,-1.732080804  
9,-3.3119925629\C,2.4637138688,-2.6109291365,-2.539916491\C,3.58919807  
34,-3.8900237565,-1.1254317598\C,3.3492113472,-4.6665576391,-2.2938243  
001\C,4.499864786,-6.5187507279,-1.3270111495\C,3.797136959,-5.992287,  
-2.419929178\C,4.3004930995,-4.4280501097,-0.0358125882\C,4.7477037154
```

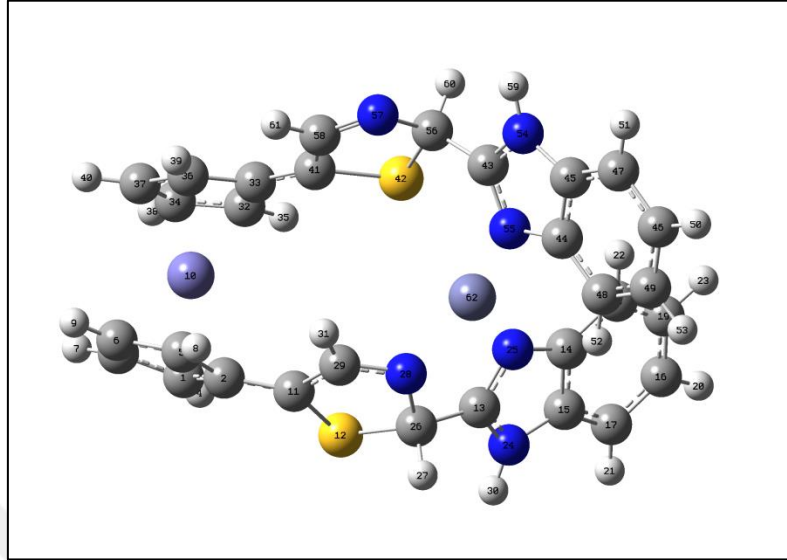
, -5.7495762104, -0.1538824535\H, 4.8691441803, -7.5387939895, -1.3748913812\H, 3.618163034, -6.5846772682, -3.3118691396\H, 4.4972928759, -3.8433878136, 0.8580260365\H, 5.2999550581, -6.2026669358, 0.6638039947\N, 2.6399721379, -3.8217681383, -3.1659447845\N, 3.0218101211, -2.611956987, -1.3170422264\C, 1.7576718338, -1.4401024179, -3.1324834908\N, 1.9262524637, -0.2341870529, -2.3449655575\C, 0.8207480621, 0.4335280992, -2.1173762864\H, 2.3292962201, -4.0663008028, -4.0990766074\H, 2.0626447228, -1.2562051426, -4.1703448899\H, 0.8807127619, 1.3853279863, -1.5989376398\Cu, 3.1349817311, -1.0449016939, -0.2257009301\\Version=ES64L-G09RevD.01\State=2-A\HF=-1824.0199354\S2=1.601255\S2-1=0.\S2A=1.03403\RMSD=3.715e-09\RMSF=1.392e-05\Dipole=-2.4903231, 0.5500618, -1.1217828\Quadrupole=32.3821001, -4.2303519, -28.1517482, -20.1256772, 7.6877892, 28.2449609\PG=C01 [X(C30H22Cu1Fe1N6S2)]\@

UV-Görünür Bölge Maksimum Absorbans Dalgaboyu

Excited State 3: Singlet-A 1.5826 eV 745.05 nm f=0.0132
<S**2>=0.000
135 ->137 0.62032
136 ->139 -0.27773
136 ->140 -0.11746

EK 11 Gaz fazı hesaplamaları log dosyaları (devam)

Zn-FcTBz



```
1|1|UNPC-DESKTOP-GRHAD34|FOpt|RB3LYP|LANL2DZ|C30H22Fe1N6S2Zn1(2+)|KUBR
A|21-Oct-2017|0||# opt b3lyp/lanl2dz geom=connectivity scf=xqc||cinko-
gaz-den4||2,1|C,-3.2989835042,1.3840519439,1.5216291857|C,-2.245370665
2,1.8446676063,0.6467984468|C,-4.5517397269,1.5379679922,0.8404164192|
H,-3.1666628515,0.9966192766,2.522191821|C,-2.8852963285,2.2615979854,
-0.6149502104|C,-4.2956042302,2.1247505791,-0.4558589082|H,-5.52554331
24,1.2967860911,1.2426337194|H,-2.3855222008,2.7011734348,-1.467124380
2|H,-5.0424487684,2.384239513,-1.1934141664|Fe,-3.3182196894,0.2230289
319,-0.2989045304|C,-0.8469682685,1.714446669,0.8946675365|S,-0.182506
6332,1.4324700892,2.586302062|C,2.5148730829,0.3743251197,2.3377869649
|C,3.8370651896,-1.4142542038,2.3900529878|C,3.8130275229,-0.860666475
5,3.7009607483|C,5.2880304802,-2.5683782995,4.4744237525|C,4.533505660
3,-1.4222680699,4.7667510469|C,4.5991623343,-2.5618771852,2.1071386908
|C,5.3207100009,-3.1285244833,3.1670698721|H,5.8637645801,-3.040752774
7,5.2645255007|H,4.5168054634,-1.0000583561,5.7666622917|H,4.631367214
8,-2.996890664,1.112385065|H,5.9207427477,-4.0161116473,2.9908468606|N
,2.9716104911,0.2693478546,3.6194268908|N,3.0133768293,-0.6143065249,1
.5642037396|C,1.6083687012,1.4335030357,1.7861949192|H,1.9919753056,2.
4387349319,2.0016414119|N,1.4155899122,1.2397721001,0.3381819953|C,0.1
635793379,1.5739125995,-0.0652409534|H,2.7417833953,0.89209869,4.38609
16096|H,-0.0475137613,1.6144127566,-1.1298519461|C,-2.782134965,-1.829
917632,-0.0399384067|C,-2.3334723093,-1.4964205438,-1.4116379264|C,-4.
1990072818,-1.7033920917,0.0083668627|H,-2.1609295387,-2.2602456966,0.
7337055029|C,-3.5169038003,-0.9250609181,-2.0813961021|C,-4.6507110988
,-1.128308305,-1.242853726|H,-4.8271970256,-1.9680460587,0.8474919853|
H,-3.5523727765,-0.5444460079,-3.0917366003|H,-5.6752469975,-0.8943132
883,-1.4958847609|C,-1.07226015,-1.637367821,-1.9902639329|S,0.4355665
522,-2.2935340045,-1.1464054917|C,2.6286005366,-1.7822204863,-2.996086
282|C,4.4655732198,-0.5812214003,-2.6181773139|C,4.6037760924,-1.17734
98684,-3.8995296076|C,6.7401805665,-0.1528705968,-4.1724151944|C,5.737
6951305,-0.9773064106,-4.703386648|C,5.4776763216,0.2417925191,-2.0915
591956|C,6.6128304199,0.4461192341,-2.8880400306|H,7.6378349565,0.0335
483906,-4.7539376952|H,5.8427716385,-1.4324373706,-5.683215311|H,5.397
```

5992446,0.7068556625,-1.1121488667|H,7.4169280305,1.0758482855,-2.5198
42256|N,3.4277095677,-1.9248810599,-4.0917125483|N,3.2106425041,-0.978
6156278,-2.0809631557|C,1.2760934282,-2.4476077542,-2.9208344002|N,0.3
652142085,-1.8718594491,-3.8973880227|C,-0.7874789425,-1.4926983912,-3
.4139615946|H,3.1724970123,-2.4351901411,-4.9310218212|H,1.3704615083,
-3.5270372196,-3.0942375142|H,-1.5337413965,-1.0972863662,-4.096153959
2|Zn,2.4218473844,-0.3816464883,-0.3516725202||Version=IA32W-G09RevA.0
2|State=1-A|HF=-1693.453664|RMSD=4.783e-009|RMSF=3.797e-006|Dipole=0.4
580422,-0.3426166,-0.5139717|Quadrupole=48.4753505,-53.3730788,4.89772
83,-15.7388585,0.21542,10.1917767|PG=C01 [X(C30H22Fe1N6S2Zn1)]||@

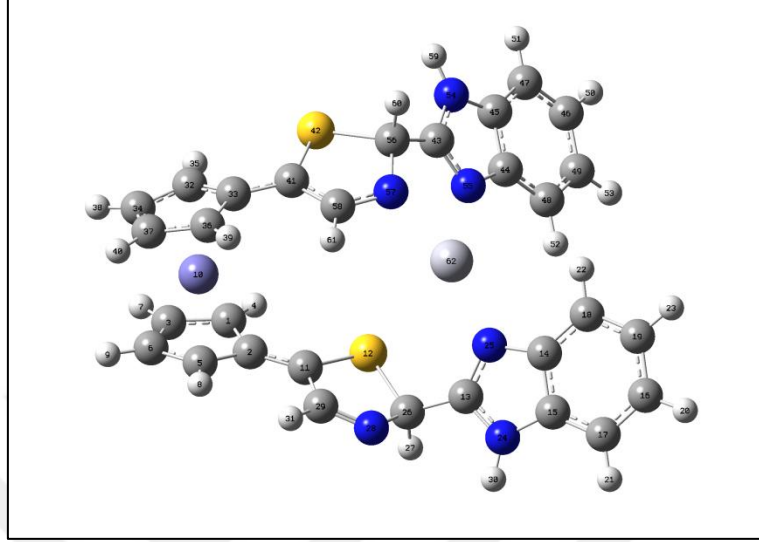
UV-Görünür Bölge Maksimum Absorbans Dalgaboyu

Excited State 23: Singlet-A 3.4351 eV 360.93 nm f=0.1221
<S**2>=0.000

128 ->142	0.20049
130 ->142	-0.28240
131 ->142	0.36586
132 ->143	-0.14733
133 ->142	0.11181
133 ->143	-0.14064
134 ->142	0.13487
134 ->143	-0.13845
136 ->144	0.17982
136 ->145	0.17969
140 ->142	0.10476
140 ->143	0.11592
141 ->143	0.14394

EK 11 Gaz fazı hesaplamaları log dosyaları (devam)

Hg-FcTBz



```
1|1|UNPC-MINE-BILGISAYAR|FOpt|RB3LYP|LANL2DZ|C30H22Fe1Hg1N6S2 (2+) |MINE
|09-May-2017|0|# opt freq b3lyp/lanl2dz geom=connectivity||HGGAZ||2,1
|C,3.4285474075,-0.9863065232,1.9415519238|C,2.9964855901,-1.956298632
2,0.9102722943|C,4.846473582,-1.049992514,2.0463459882|H,2.7697250252,
-0.4534123754,2.6134892727|C,4.2364850727,-2.4000860661,0.2451482584|C
,5.3461653992,-1.9085267475,0.9912495428|H,5.4492566629,-0.5251776841,
2.7743918802|H,4.300969295,-3.0970791039,-0.5776715348|H,6.3859705895,
-2.1363159543,0.8032380741|Fe,4.3055069349,-0.2771695142,0.1259861858|
C,1.7083785549,-2.3744636162,0.5771384222|S,0.1493429871,-1.809389398,
1.3865218683|C,-2.0647600449,-3.1108243284,-0.0479760194|C,-3.84156125
19,-2.2325958539,-1.0710982618|C,-4.0623048463,-3.6314507194,-0.965595
487|C,-6.1710710571,-3.4039603699,-2.0579855907|C,-5.2261223257,-4.246
4006045,-1.4554836949|C,-4.7961048351,-1.3942961547,-1.6749399038|C,-5
.9602275997,-2.0006467457,-2.1658609208|H,-7.0878621795,-3.8304185929,
-2.4533217221|H,-5.3944676402,-5.3158464187,-1.3765218758|H,-4.6496245
747,-0.3204397501,-1.7684020749|H,-6.7210172016,-1.3897438087,-2.64196
0094|N,-2.9264811931,-4.1387086982,-0.3122866146|N,-2.5801503145,-1.94
49103459,-0.4882423506|C,-0.7334863501,-3.383947125,0.6058782695|H,-0.
8789729268,-4.0626814731,1.4568323234|N,0.1961996368,-3.9963600036,-0.
3360431926|C,1.4016049489,-3.494727668,-0.3075312323|H,-2.7338625676,-
5.1170624241,-0.1244978045|H,2.1683703093,-3.9457287414,-0.9300332986|
C,4.5403316018,1.8671810547,0.0349013299|C,3.5792646002,1.4599361919,-
0.9639872|C,5.7846175769,1.2074061335,-0.2372480895|H,4.3573178465,2.5
658098171,0.8393913428|C,4.2575514504,0.4870256101,-1.8395058571|C,5.6
183805489,0.395677461,-1.4219839|H,6.7010827016,1.3270595441,0.3230838
639|H,3.8352357652,0.0182989677,-2.7175925316|H,6.3852119713,-0.203860
8731,-1.8928856286|C,2.1995237807,1.8163610091,-0.9825682797|S,1.55850
79501,3.2537357809,-0.0290774518|C,-1.3278416285,3.1162336338,0.092610
0592|C,-3.0698931291,2.7431144088,1.4231670582|C,-2.8069633551,4.14204
93612,-1.4492233821|C,-4.6254537221,4.4777506701,2.957373651|C,-3.57490
90518,5.0349648636,2.2132787859|C,-4.1264608733,2.1949962811,2.1722387
59|C,-4.8968659135,3.0812074062,2.9376861057|H,-5.2489961177,5.1270982
697,3.5643822254|H,-3.3763140442,6.1020234795,2.2335448563|H,-4.339874
```

5914,1.1296932714,2.1661095912|H,-5.7207754131,2.6977391348,3.5318884179|N,-1.7049982222,4.3341304402,0.5924057033|N,-2.1227923236,2.1396172065,0.5644252679|C,-0.1907693023,2.8945321193,-0.8566529144|N,-0.1316246276,1.5210749507,-1.3710707152|C,1.1447577554,1.0982545543,-1.5627775306|H,-1.263490709,5.223045119,0.3852849146|H,-0.2349164856,3.6103181399,-1.6875634203|H,1.3081395605,0.1636563968,-2.0916896689|Hg,-1.6682156868,0.0964895516,-0.3867747573||Version=IA32W-G09RevA.02|State=1-A|HF=-1670.537638|RMSD=8.713e-009|RMSF=9.990e-006|Dipole=-0.0209245,-0.8410375,0.2173099|Quadrupole=52.4444583,8.8140118,-61.2584701,0.6662645,1.8015576,13.7367746|PG=C01 [X(C30H22Fe1Hg1N6S2)]||@

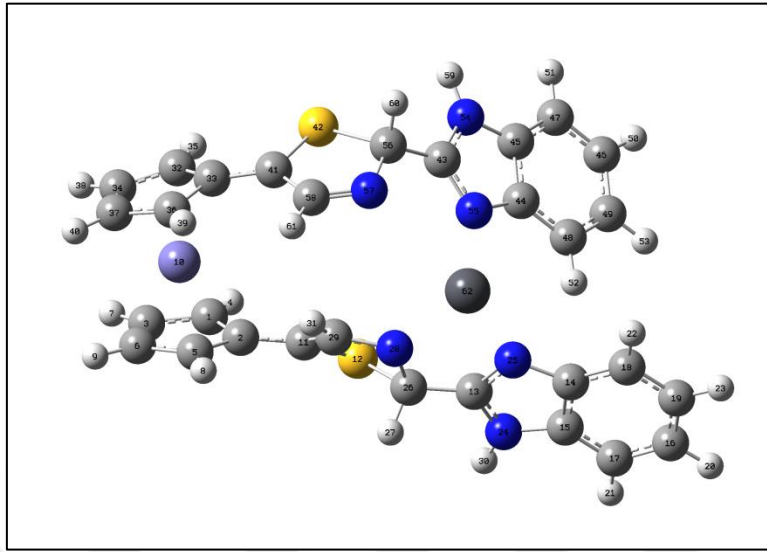
UV-Görünür Bölge Maksimum Absorbans Dalgaboyu

Excited State 21: Singlet-A 3.1731 eV 390.73 nm f=0.1461
 <S**2>=0.000

128 ->142	0.18919
129 ->142	0.25592
130 ->142	-0.10330
131 ->142	0.26319
132 ->142	-0.14116
133 ->144	-0.12809
134 ->142	0.14506
134 ->144	-0.14481
137 ->147	0.12466
140 ->142	0.14342
140 ->144	0.14892
140 ->147	0.11404
141 ->144	0.18560
141 ->148	0.21306

EK 11 Gaz fazı hesaplamaları log dosyaları (devam)

Pb-FcTBz



```
1\1\GINC-LEVREK76\FOpt\RB3LYP\LANL2DZ\C30H22Fe1N6Pb1S2(2+)\ROOT\21-May-2017\0\#\# opt freq b3lyp/lanl2dz geom=connectivity scf=xqc\pbGAZ\2,1\C,-3.0413519108,-1.0388992035,1.155214702\C,-2.2720157503,0.1831705542,0.988528334\C,-4.4339285461,-0.6945090807,1.1950290817\H,-2.6290993974,-2.0276883013,1.3030213177\C,-3.230991758,1.2647939926,0.8085640064\C,-4.5515758909,0.7300353172,0.9918821124\H,-5.2534303728,-1.382884141,1.3476484643\H,-2.9842211468,2.3115537601,0.7011945751\H,-5.4712408935,1.2982349767,0.9868330319\Fe,-3.6802746456,-0.1461449909,-0.7060761419\C,-0.8409399582,0.3291356805,0.967191889\S,0.3067041175,-0.7742406574,1.9505582875\C,2.9968331864,0.5305278751,1.9634326107\C,5.1703954328,0.7126120244,1.5346547488\C,5.0344628359,0.334428702,2.9003877061\C,7.4044636887,0.3822018617,3.1781375444\C,6.1414538097,0.1549721603,3.7449571936\C,6.4430016922,0.9412360763,0.9773220256\C,7.5525043464,0.7719886448,1.8181271636\H,8.2917756151,0.26654176,3.7931574683\H,6.0362726188,-0.1327687144,4.7864091476\H,6.5713926087,1.2475081854,-0.0568713764\H,8.54988979,0.9479251275,1.4266964785\N,3.6477971474,0.2319535103,3.1275632712\N,3.8719335392,0.8106781284,0.9742723954\C,1.538136332,0.7547255318,1.7957467752\H,1.174982957,1.4111934778,2.5993522172\N,1.2503727068,1.3509959169,0.4892429564\C,-0.114232624,1.2938197255,0.2871782066\H,3.2054229191,0.0024169387,4.0105926478\H,-0.5691483772,1.9733389092,-0.4254392956\C,-3.8243397761,-1.5231404986,-2.3480765965\C,-2.9761089052,-0.3891329138,-2.7345343724\C,-5.12382786,-1.0242917345,-2.0571492526\H,-3.5263438927,-2.5624649762,-2.3460105377\C,-3.7972102337,0.8286197597,-2.5624754401\C,-5.1121905936,0.4160646291,-2.2088835514\H,-5.9779314995,-1.6180469389,-1.7628589219\H,-3.4990578622,1.8409748324,-2.7947326117\H,-5.9592721195,1.0714284743,-2.0619469402\C,-1.5978424155,-0.4364444331,-2.9804909748\S,-0.6876159918,-1.9518364131,-3.2861203482\C,2.1248399384,-1.4669216747,-2.8306710355\C,3.8727303311,-1.9808182456,-1.5703296291\C,3.6804775745,-3.0571780946,-2.4815266418\C,5.546965741,-4.2358687801,-1.5798583471\C,4.4994547321,-4.1972644689,-2.5088654807\C,4.9326133995,-2.0378131851,-0.6439174435\C,5.7575114974,-3.1699142306,-0.6631728519\H,6.2123393229,-5.0935834735,-1.5590912375\H,4.3385029754,-5.0085588625,-3.2121108226\H,5.1169877576,-1.2451666708,0.0655473401\H,6.5820364007,-3.2371056906,0.0403588248\N,2.57561928,-2.6920358905,-3.2599714019\N,2.8746666071,-0.9894217664,-1.81579
```

34084\C,0.9452467979,-0.8368337655,-3.4914547798\N,0.6027840407,0.5020
824881,-3.0532960035\C,-0.6844951767,0.7053884798,-2.9340747205\H,2.18
17643038,-3.2421688909,-4.0149567593\H,1.0844149863,-0.8212474162,-4.5
815636063\H,-1.0532243555,1.7063896954,-2.7356224882\Pb,2.8781612739,1
.3841585176,-1.0640575949\\Version=ES64L-G09RevD.01\State=1-A\HF=-1631
.3301366\RMSD=4.676e-09\RMSF=1.206e-05\Dipole=-1.1279703,-0.8762174,-0
.3180479\Quadrupole=64.5962979,-43.8238717,-20.7724262,-10.7401855,25.
4049026,14.2520065\PG=C01 [X(C30H22Fe1N6Pb1S2)]\@

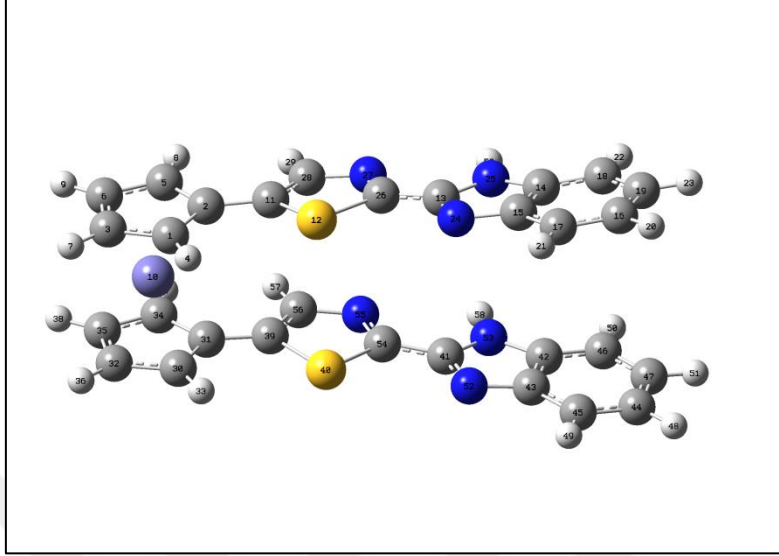
UV-Görünür Bölge Maksimum Absorbans Dalgaboyu

Excited State 21: Singlet-A 3.1511 eV 393.46 nm f=0.2278
<S**2>=0.000

123 ->138	0.11999
124 ->138	-0.16604
126 ->138	0.23997
127 ->138	0.21365
128 ->138	0.18323
129 ->138	-0.21215
131 ->142	0.10052
136 ->138	-0.17014
136 ->139	-0.10189
137 ->139	-0.15574
137 ->140	0.25591
137 ->141	-0.15484
137 ->143	-0.22848

EK 11 Su fazı hesaplamaları log dosyaları

FcTBz



```
1\1\GINC-LEVREK154\Freq\RB3LYP\LANL2DZ\C30H20Fe1N6S2\FSEVINDUZ\28-Mar-2018\0\#\ freq b3lyp/lanl2dz scrf=(solvent=water) geom=connectivity scf=xqc\\SU DEN3FREQ\\0,1\C,4.081916,2.03101,-0.85655\C,3.42385,1.741742,0.403049\C,5.503407,1.975697,-0.645928\H,3.587163,2.26385,-1.789545\C,4.462834,1.477954,1.383587\C,5.738315,1.636746,0.737551\H,6.261043,2.144679,-1.397762\H,4.304994,1.239025,2.425684\H,6.703816,1.508081,1.206006\Fe,4.639219,0.090509,-0.203492\C,1.994476,1.746488,0.65883\S,0.810769,2.371553,-0.568672\C,-1.891548,2.279215,0.329487\C,-4.109932,2.390227,0.651114\C,-3.75252,2.87013,-0.651375\C,-6.083007,3.295155,-1.094075\C,-4.751915,3.328464,-1.536299\C,-5.442713,2.355468,1.099288\C,-6.422367,2.815854,0.204221\H,-6.876065,3.640682,-1.751901\H,-4.492138,3.693024,-2.525758\H,-5.706241,1.990746,2.087316\H,-7.466168,2.806572,0.507176\N,-2.359845,2.788873,-0.822783\N,-2.903888,2.02316,1.245785\C,-0.503668,2.013245,0.633378\N,-0.070744,1.504866,1.776925\C,1.30994,1.355433,1.799751\H,1.777296,0.946457,2.685595\C,4.020628,-1.372417,-1.606362\C,3.532589,-1.737376,-0.289347\C,5.457217,-1.321866,-1.555895\H,3.410419,-1.195257,-2.481211\C,4.68981,-1.876253,0.577031\C,5.869876,-1.634476,-0.20843\H,6.110526,-1.080016,-2.381999\H,4.670447,-2.142057,1.624312\H,6.887387,-1.664944,0.154594\C,2.153504,-1.961499,0.104665\S,0.780012,-1.811444,-1.072758\C,-1.756728,-2.41598,0.080368\C,-3.901544,-2.841512,0.586303\C,-3.762556,-2.450001,-0.785562\C,-6.143425,-2.701987,-1.060488\C,-4.898287,-2.378289,-1.620289\C,-5.147512,-3.166574,1.152275\C,-6.265299,-3.09036,0.305073\H,-7.037153,-2.65725,-1.677174\H,-4.804268,-2.081502,-2.660706\H,-5.245321,-3.463325,2.192015\H,-7.248753,-3.333355,0.698935\N,-2.411084,-2.190123,-1.071778\N,-2.608401,-2.807988,1.105511\C,-0.330976,-2.291289,0.283086\N,0.283456,-2.521416,1.43316\C,1.657317,-2.342195,1.342825\H,2.265061,-2.510592,2.221835\H,-2.311423,-3.026206,2.048754\H,-2.759388,1.640282,2.172099\\Version=ES64L-G09RevD.01\State=1-A\HF=-1627.1489566\RMSD=5.861e-09\RMSF=1.434e-06\ZeroPoint=0.4385073\Thermal=0.4690984\Dipole=1.620582,-0.7838476,2.3789449\DipoleDeriv=0.376618,0.0096307,-0.089418,0.043363,-0.1488221,-0.1377121,-0.3267345,0.215682,0.0599648,-0.1807733,0.3916284,0.0567481,-0.0777429,0.1298389,0.0140101,-0.2104003,-0.0203282,0.2105921,-0.1174111
```

, -0.0981889, 0.0293006, 0.1283295, -0.1851657, -0.126271, -0.0619564, 0.1102
275, 0.1577621, 0.1016749, 0.0442136, -0.0951966, 0.0290079, 0.1413067, 0.022
3818, -0.0798087, 0.0489493, 0.0262925, 0.549721, -0.0476274, 0.035903, -0.14
44502, -0.0545489, 0.0833983, 0.2784773, -0.2762656, -0.010098, -0.1217961, -
0.1553198, -0.0651049, 0.1416614, -0.1006746, -0.0355343, 0.1992759, -0.1900
924, 0.1164799, -0.0014463, -0.0317095, 0.0938383, -0.0018598, 0.1491652, 0.0
139431, 0.118314, 0.0396121, 0.0393726, 0.1432029, -0.0011221, 0.0556432, 0.0
047308, 0.1403877, 0.050915, 0.0172395, 0.018583, -0.0349873, -0.0689282, 0.0
083518, -0.0801251, 0.053922, 0.1460046, 0.02653, -0.0691629, 0.0014215, 0.10
13651, -2.4757316, -0.0648114, 0.1303504, -0.1258991, -0.2436789, 0.2239999,
0.3157401, 0.2763323, -1.1505426, 0.9232224, -0.5185852, 0.0441758, 0.063054
8, -0.1106015, -0.1197188, -0.7912565, -0.0022805, 0.2010591, -0.0494391, -0.
0769219, 0.1547962, -0.136261, 0.097804, 0.1772098, 0.3591567, 0.1482536, -0.
2852984, 0.5060911, -0.0211526, -0.2973343, -0.0016647, 0.286072, -0.21657, -
0.129306, -0.2483473, 0.8038499, -0.1583074, -0.0020404, 0.236469, -0.084126
8, 0.1218519, -0.0142465, 0.2836142, -0.0064639, 0.0930248, -0.0623419, 0.028
6553, 0.0837872, 0.0357647, 0.008164, 0.0040061, -0.0694381, 0.0193129, -0.01
45346, -0.5287712, 0.0566094, 0.0486462, -0.1898055, -0.1493055, -0.0929333,
0.5691004, -0.1874229, 0.0086125, 0.5019234, -0.1189692, 0.0113461, -0.14828
64, -0.1195249, -0.1152455, 0.1853808, -0.1578334, 0.0944299, 0.4344646, -0.0
661681, -0.1242325, -0.047165, -0.1801241, -0.0746118, -0.0495855, -0.075702
, -0.002072, -0.241975, 0.0565695, -0.0581709, 0.2448571, -0.2122528, -0.0811
173, -0.6019119, 0.0197492, 0.0228363, -0.0747086, 0.0846021, -0.1269223, 0.0
836498, 0.1556602, 0.0831522, -0.1392366, 0.0867021, 0.0227725, 0.123087, -0.
0207135, 0.0709666, 0.0056938, 0.1647238, 0.0964763, 0.0049272, 0.1094213, -0
.0612617, 0.0888444, 0.0018122, 0.0350465, -0.0252505, 0.184811, 0.1028329, 0
.0967029, 0.092735, -0.047351, -0.1724831, 0.0133391, 0.0768892, 0.0082401, 0
.1830725, 0.0264204, 0.0744336, 0.027007, 0.1079913, -0.3442873, 0.0499426, -
0.1455075, 0.0175934, -0.4261834, 0.1297628, -0.0509526, 0.1351205, -0.64482
16, -0.5514929, -0.0281116, 0.1354974, 0.0480505, -0.4179014, 0.1620939, -0.0
508269, 0.1665642, -0.7858251, 0.5731854, 0.1563544, -0.1479233, 0.1835658, 0
.0715137, -0.3024119, -0.572651, -0.3244491, 0.7408803, 0.0649229, -0.037597
1, 0.0944277, -0.0454832, -0.3664471, 0.221538, 0.0711282, 0.2875114, -0.8619
669, -0.8540502, 0.1949855, -0.0412389, -0.2938225, -0.0128227, -0.1113887, 0
.9453507, -0.2895764, 0.0868261, 0.0751871, 0.0243452, -0.0456306, 0.071687,
0.1783005, 0.0875755, -0.1270289, 0.1069829, 0.0524688, 0.3842995, 0.0092003
, -0.1696324, 0.2265862, -0.0632745, 0.0327771, -0.3801715, -0.2931543, 0.052
7512, -0.1483361, -0.4095048, -0.0254397, 0.1094536, 0.1424318, -0.0628237, 0
.0381368, 0.0223716, 0.1746948, -0.1576961, 0.0608899, 0.1170359, -0.1430205
, -0.1055103, 0.0228419, -0.0764493, -0.2684587, 0.1148322, 0.0806714, -0.001
2312, -0.115373, 0.0069453, 0.1452265, 0.0254997, -0.0912806, 0.003884, 0.046
7384, 0.4957645, 0.1299913, 0.0078492, -0.0169227, -0.1163997, -0.1278882, 0.
2174914, 0.2213304, 0.0301449, -0.0638059, 0.1665381, 0.0386586, -0.1656184,
-0.1702781, -0.0773413, 0.136756, 0.0549983, 0.129635, 0.0268495, -0.0212787
, 0.0954995, -0.0538826, 0.1386363, 0.0577456, 0.1065774, 0.0229804, 0.020130
7, 0.1536848, -0.0181229, 0.0341667, -0.0130845, 0.129733, 0.039022, -0.01348
43, 0.0688812, -0.0352625, -0.0841658, 0.0170463, -0.0553422, -0.0348767, 0.1
514531, 0.0023599, -0.0673125, 0.0136753, 0.1156315, 0.8079341, 0.4345287, 0.
1616173, 0.4444997, -0.0341247, -0.1037084, -0.7618656, -0.3099184, 0.248820
5, 0.0120916, -0.012618, 0.1084825, -0.0951212, 0.1305145, 0.141192, 0.279243
, 0.1787612, -0.3752134, 0.4662175, 0.1917834, -0.1841276, 0.0428726, 0.25529
46, -0.2240795, -0.0392688, -0.1968895, 0.8788227, -0.0699806, -0.1502906, 0.
2310889, -0.1079097, 0.0850517, 0.0512773, 0.304507, 0.0513725, 0.0449324, -0
.058025, -0.0752914, 0.0692152, 0.0046675, 0.0053844, 0.017153, -0.0742849, 0
.0031822, -0.0165253, -0.41427, -0.084756, 0.0943553, -0.2010802, -0.2473906
, -0.040099, 0.6438454, 0.0718945, -0.0157359, 0.5294658, 0.1348553, 0.017791
3, 0.0468764, -0.1636699, -0.0825682, 0.1849914, -0.0368579, 0.105646, 0.4016
922, 0.1602128, -0.1265581, 0.1028402, -0.1748326, -0.0852161, -0.0645669, -0

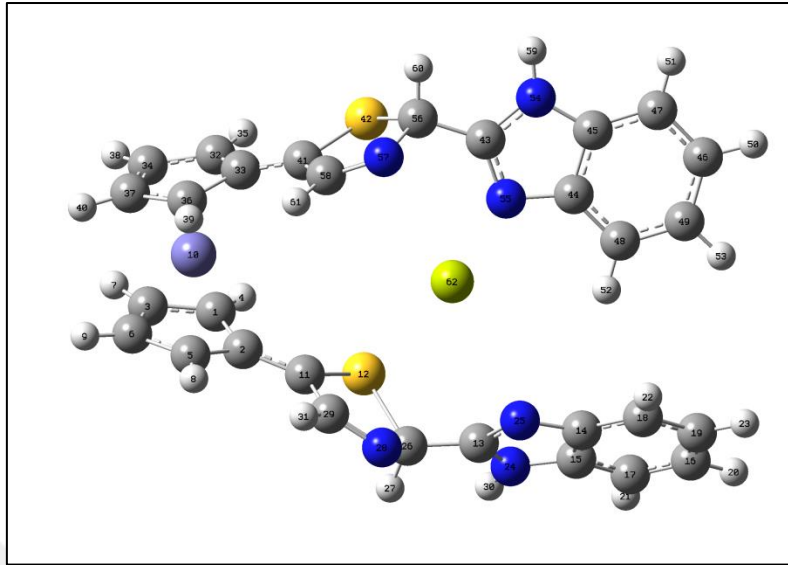
.085276,0.0285434,-0.3442957,-0.0463165,-0.0206778,0.134116,-0.1523172
,-0.0778743,-0.5754425,-0.1926213,0.0770047,-0.1192792,-0.0110987,-0.1
382741,-0.001933,0.191125,0.0271374,-0.1478569,0.0241295,0.0307032,0.1
293703,-0.0186923,0.0331382,0.0001077,0.1829387,0.0848805,-0.0342138,0
.0706291,-0.0846379,0.1051494,-0.0163927,-0.0016366,-0.0331749,0.19421
53,0.081159,0.0644721,0.0940364,-0.0751372,-0.1439151,-0.0753283,0.089
785,-0.0705728,0.1734691,0.0411172,0.088881,0.0416085,0.0878292,-0.391
0289,0.051953,-0.197281,0.0323945,-0.3750036,0.0541985,-0.1018044,0.04
70979,-0.6535939,-0.5494177,-0.0510796,0.0825069,0.0038379,-0.3865913,
0.1400023,-0.1105794,0.1288446,-0.8176628,0.4540532,-0.0506003,-0.1191
939,0.1944604,0.0171688,-0.2632128,-0.5055667,-0.2407678,0.8821529,0.0
562685,0.0251562,-0.0432575,0.0461779,-0.2763316,0.1895948,-0.0685937,
0.135182,-0.9172963,-0.6811,-0.1738692,0.0053482,-0.3283181,-0.2050686
,-0.0466253,1.0521789,0.1750725,0.0860273,0.039282,0.0091033,-0.068118
9,0.0202692,0.2265367,0.0407823,-0.1531887,0.0169105,0.0367199,0.31151
53,-0.0126323,0.001039,-0.011278,0.4413386,0.0191978,-0.0196869,0.0032
582,0.3711456,0.3128046,0.0058433,0.0003092,0.0193341,0.4296513,0.0250
138,-0.0200477,0.0424367,0.3803374\Polar=1104.9564898,-0.5300759,406.0
25699,20.1735713,-64.8815174,510.1115803\PG=C01 [X(C30H20Fe1N6S2)]\NIm
ag=0\

UV-Görünür Bölge Maksimum Absorbans Dalgaboyu

Excited State	13:	Singlet-A	3.4794 eV	356.34 nm	f=0.0176
<S**2>=0.000					
128	->136	-0.14510			
128	->138	-0.10892			
132	->136	0.42155			
132	->138	-0.16072			
133	->137	0.12516			
134	->139	0.13684			
135	->136	0.14032			
135	->138	-0.35680			
135	->139	0.12594			
135	->141	-0.13931			

EK 11 Su fazı hesaplamaları log dosyaları (devam)

Mg-FcTBz



```
1|1|UNPC-DESKTOP-GRHAD34|FOpt|RB3LYP|LANL2DZ|C30H22Fe1Mg1N6S2 (2+) |KUBR
A|02-Nov-2017|0||# opt b3lyp/lanl2dz scrf=(solvent=water) scf=xqc||Magn
ezyum-su|2,1|C,3.521922135,-0.628305357,2.1835937565|C,3.0269874345,-
1.6774272663,1.2769750622|C,4.9373008739,0.7565740031,2.2909929057|H,2
.9013965321,0.0520225309,2.7500843106|C,4.2279293859,2.3116522653,0.70
3678167|C,5.3725994815,-1.7955221897,1.3792131842|H,5.5797954858,0.160
1769238,2.9227436851|H,4.236786935,-3.1155704671,0.0171381121|H,6.3946
277839,2.1084575451,1.2206178481|Fe,4.4349638035,0.2562520392,0.279017
429|C,1.7063597027,2.0082733469,0.95448218|S,0.2129033383,-1.31107506,
1.7151902987|C,-2.1638186071,-2.5241595198,0.4294943445|C,-3.954413003
9,-1.8912208117,-0.7067818583|C,-4.3768811105,-2.8802819426,0.22466237
72|C,-6.6253979726,-2.731020074,-0.5670536446|C,-5.7098611828,-3.31732
2827,0.3178841725|C,-4.8869644042,-1.31291566,-1.5937087987|C,-6.21765
13736,-1.745522208,-1.5099255377|H,-7.6675024094,-3.0358088412,-0.5370
080728|H,-6.0143760166,-4.0727462145,1.0348002913|H,-4.598528449,0.565
471518,-2.3251298716|H,-6.9569877765,-1.3199045198,-2.1821721816|N,3.2
238424219,-3.2465235361,0.9185319223|N,-2.5592484592,-1.6802920309,-0.
5451950455|C,-0.7832628382,-2.819253944,0.9325672833|H,-0.8746861359,-
3.5112095594,1.778577871|N,0.0828986385,-3.4444126189,-0.0639868225|C,
1.3311466468,-3.0622751517,0.0176479045|H,-3.1673397593,-3.9516509031,
1.6451976432|H,2.0717749118,-3.5373496996,-0.6171439945|C,4.5852919804
,1.8256370764,-0.2376484609|C,3.7460776927,1.1876483697,-1.2353678285|
C,5.8731362184,1.1913740072,-0.249091037|H,4.2961055654,2.6606919806,0
.3847396807|C,4.5322492406,0.0819862779,-1.8000364611|C,5.8477105614,0
.1385107981.2397100776|H,6.7185499122,1.4603635885,0.3676786931|H,4.20
2838018,-0.5961675513,-2.5743478993|H,6.6653175205,-0.5262124448,-1.48
02474454|C,2.3856180083,1.4967504279,-1.495363715|S,1.6240661509,3.073
8998459,-0.9142984562|C,-1.2463282105,2.7172647315,-0.9393943428|C,-3.
1136646837,2.2742183471,0.1519034789|C,-2.8664354254,3.671320672,0.283
4914401|C,-4.8445088371,3.9278407162,1.5996149437|C,3.7192926056,4.522
0956915,1.0055410007|C,-4.2461953247,1.6906601066,0.7512051226|C,-5.10
32302867,2.5345576425,1.4742371737|H,-5.5341877351,4.5452563803,2.1682
818133|H,-3.5227251026,5.5850512084,1.1015970788|H,4.450806731,0.62965
85145,0.658793666|H,-5.9856724178,2.116463477,1.9502787472|N,-1.679117
```

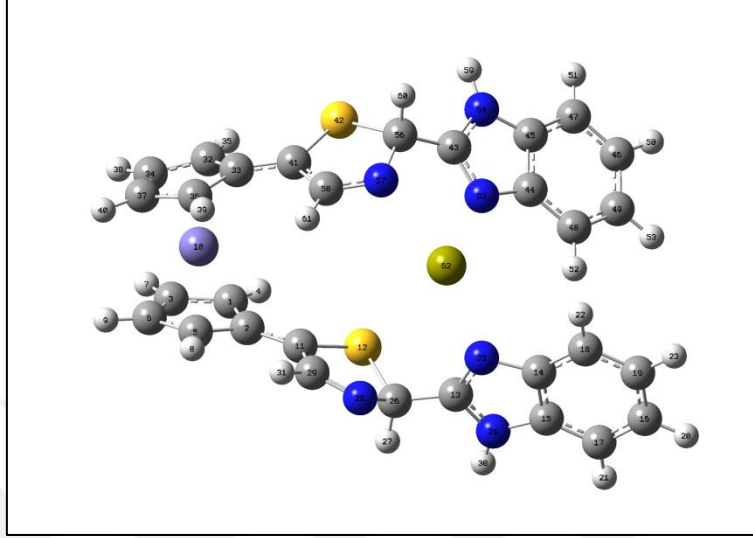
6305, 3.9100011597, -0.4267639965|N, -2.0776897616, 1.7076163006, -0.623872
 2979|C, -0.0286228992, 2.5015299835, -1.7840478507|N, 0.1204062078, 1.07008
 1642, -2.0995470696|C, 1.4026863185, 0.6617457369, -2.0581794969|H, -1.2220
 696152, 4.8080750018, -0.536999125|H, -0.0762747397, 3.1058702989, -2.97614
 9819|H, 1.6337495516, -0.3528506864, -2.369848167|Mg, -1.5317451091, 0.1132
 707884, -1.5139058265||Version=IA32W-G09RevA.02|State=1A|HF=1628.989344
 6|RMSD=1.868e-009|RMSF=1.375e-005|Dipole=-2.1344374, -1.3556379, -1.2781
 048|Quadrupole=43.2389344, -5.040428, -38.1985064, -0.4138132, 4.5579731, -
 8.0121628|PG=C01 [X(C30H22Fe1Mg1N6S2)]||@

UV-Görünür Bölge Maksimum Absorbans Dalgaboyu

Excited State 20:	Singlet-A	3.3240 eV	373.00 nm	f=0.3777
<S**2>=0.000				
127 ->137	0.37702			
128 ->137	-0.29567			
129 ->137	0.14877			
130 ->137	-0.18519			
131 ->137	0.19037			
131 ->139	-0.13254			
134 ->141	0.14076			
135 ->137	-0.16199			
136 ->139	-0.18816			
136 ->140	-0.10916			

EK 11 Su fazı hesaplamaları log dosyaları (devam)

Ca-FcTBz



```
1\1\GINC-LEVREK120\FOpt\RB3LYP\LANL2DZ\C30H22Ca1Fe1N6S2 (2+) \ROOT\29-Ju
l-2017\0\# opt b3lyp/lanl2dz scrf=(solvent=water) geom=connectivity s
cf=xqc\kalsiyum-su-den2\2,1\C,-3.078503264,-1.0167839658,1.135113285
8\C,-2.4247051539,0.3010299076,1.1311099185\C,-4.4914335603,-0.8251083
284,1.067167697\H,-2.5756350285,-1.9609664047,1.292866498\C,-3.4927896
021,1.2682529668,0.824389867\C,-4.7480552806,0.5881148368,0.8796476104
\H,-5.2391274597,-1.6036350888,1.1204732335\H,-3.3676714369,2.33627740
96,0.7234783691\H,-5.7210607022,1.0464668142,0.7743231046\Fe,-3.642195
4089,-0.1379286282,-0.7474223418\C,-1.0788367639,0.6110605513,1.358945
4885\S,0.2083728032,-0.5655401735,1.9009953244\C,2.7467002682,0.889987
6092,2.2584954213\C,4.8056319125,0.946082885,1.4823273147\C,4.89646207
59,0.6418227837,2.8727611776\C,7.2828294348,0.5782262692,2.7434449781\
C,6.1263347331,0.4481470075,3.5267675217\C,5.9791764523,1.0807298624,0
.7101914416\C,7.2097003189,0.89337512,1.3566127053\H,8.2571524285,0.43
98105951,3.2038503853\H,6.1806872496,0.2144726142,4.5853403132\H,5.940
1735774,1.3281991393,-0.3469105371\H,8.1305655345,0.9915854181,0.78864
94202\N,3.5780795091,0.6142765424,3.3264736239\N,3.4431245019,1.081449
2568,1.1259252412\C,1.2720829576,1.0113695362,2.4679844252\H,1.0791132
78,1.0535047726,3.5472710885\N,0.6672320716,2.180785909,1.8437736971\C
,-0.53002262,1.957222292,1.3583010364\H,3.2786500979,0.4512742916,4.28
10447151\H,-1.1006239129,2.7933948001,0.9656955862\C,-3.6277829488,-1.
4965563288,-2.4138413801\C,-2.7197248231,-0.4058145715,-2.740391398\C,
-4.9368392585,-0.9534938703,-2.2024620138\H,-3.363035069,-2.5442842926
,-2.3876301994\C,-3.4979569908,0.835514,-2.6102000424\C,-4.8603876454,
0.4828854108,-2.3551897489\H,-5.8290190554,-1.5183405066,-1.9728743032
\H,-3.1271032687,1.8355219642,-2.7847202871\H,-5.6828917745,1.17633575
44,-2.2504630701\C,-1.3343583007,-0.5185626771,-2.9813633393\S,-0.5221
864932,-2.1176117564,-3.368148639\C,2.3250228462,-1.807711126,-2.99420
87721\C,4.0584026636,-2.2939336164,-1.7311828017\C,3.880457732,-3.3865
695112,-2.6300102901\C,5.7511192251,-4.5228533712,-1.6680575082\C,4.71
66525615,-4.5158997145,-2.6182705108\C,5.1000788294,-2.3147451221,-0.7
833433684\C,5.9393556921,-3.439666542,-0.764307781\H,6.4238749919,-5.3
748044966,-1.6202337284\H,4.5736369758,-5.3427417398,-3.3068451492\H,5
```

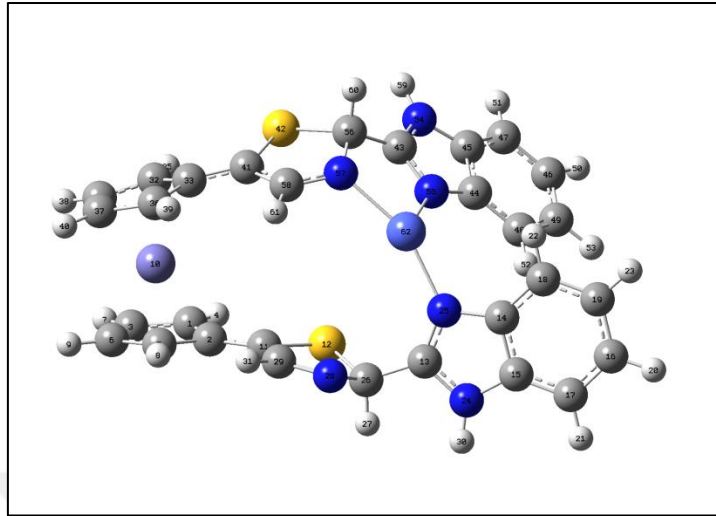
.2461367797,-1.4911199765,-0.0925445959\H,6.7518112344,-3.4879615132,-
0.044494127\N,2.7770229616,-3.0393335189,-3.4186129001\N,3.0677569564,
-1.3193609933,-1.9900843177\C,1.1552963641,-1.104709519,-3.6056694971\
N,0.9335218566,0.229127412,-3.0457799381\C,-0.3568286188,0.5101671456,
-2.8716948103\H,2.3841874506,-3.5944871848,-4.1696453963\H,1.267923887
,-1.0482779259,-4.6955024308\H,-0.6335380495,1.511962441,-2.555008427\
Ca,2.6509846274,1.0970707552,-1.3095049291\\Version=ES64L-G09RevD.01\
tate=1-A\HF=-1664.7511077\RMSD=1.840e-09\RMSF=6.139e-06\Dipole=2.72897
21,3.2773383,-1.1153824\Quadrupole=35.316188,-25.1387228,-10.1774652,-
2.4021776,3.1788504,5.2525344\PG=C01 [X(C30H22Ca1Fe1N6S2)]\@

UV-Görünür Bölge Maksimum Absorbans Dalgaboyu

Excited State 20:	Singlet-A	3.2126 eV	385.93 nm	f=0.4271
<S**2>=0.000				
131 ->141	0.41763			
132 ->141	0.17268			
133 ->141	0.28621			
139 ->141	-0.19228			
139 ->145	0.12842			
140 ->142	-0.13832			
140 ->143	0.23419			
140 ->144	-0.15303			

EK 11 Su fazı hesaplamaları log dosyaları (devam)

Co-FcTBz



```
1|1|UNPC-DESKTOP-GRHAD34|FOpt|RB3LYP|LANL2DZ|C30H22Fe1Co1N6S2 (2+) |KUBR
A|02-Nov-2017|0||# opt b3lyp/lanl2dz scrf=(solvent=water) scf=xqc|Koba
lt-su||2,1|C,3.521922135,-0.628305357,2.1835937565|C,3.0269874345,-1.6
774272663,1.2769750622|C,4.9373008739,-0.7565740031,2.2909929057|H,2.9
013965321,0.0520225309,2.7500843106|C,4.2279293859,-2.3116522653,0.703
678167|C,5.3725994815,-1.7955221897,1.3792131842|H,5.5797954858,-0.160
1769238,2.9227436851|H,4.236786935,-3.1155704671,-0.0171381121|H,6.394
6277839,-2.1084575451,1.2206178481|Fe,4.4349638035,-0.2562520392,0.279
017429|C,1.7063597027,-2.0082733469,0.95448218|S,0.2129033383,-1.31107
506,1.7151902987|C,-2.1638186071,-2.5241595198,0.4294943445|C,-3.95441
30039,-1.8912208117,-0.7067818583|C,-4.3768811105,-2.8802819426,0.2246
623772|C,-6.6253979726,-2.731020074,-0.5670536446|C,-5.7098611828,-3.3
17322827,0.3178841725|C,-4.8869644042,-1.31291566,-1.5937087987|C,-6.2
176513736,-1.745522208,-1.5099255377|H,-7.6675024094,-3.0358088412,-0.
5370080728|H,-6.0143760166,-4.0727462145,1.0348002913|H,-4.598528449,-
0.565471518,-2.3251298716|H,-6.9569877765,-1.3199045198,-2.1821721816|
N,-3.2238424219,-3.2465235361,0.9185319223|N,-2.5592484592,-1.68029203
09,-0.5451950455|C,-0.7832628382,-2.819253944,0.9325672833|H,-0.874686
1359,-3.5112095594,1.778577871|N,0.0828986385,-3.4444126189,-0.0639868
225|C,1.3311466468,-3.0622751517,0.0176479045|H,-3.1673397593,-3.95165
09031,1.6451976432|H,2.0717749118,-3.5373496996,-0.6171439945|C,4.5852
919804,1.8256370764,-0.2376484609|C,3.7460776927,1.1876483697,-1.23536
78285|C,5.8731362184,1.1913740072,-0.249091037|H,4.2961055654,2.660691
9806,0.3847396807|C,4.5322492406,0.0819862779,-1.8000364611|C,5.847710
5614,0.1385107985,-1.2397100776|H,6.7185499122,1.4603635885,0.36767869
31|H,4.202838018,-0.5961675513,-2.5743478993|H,6.6653175205,-0.5262124
448,-1.4802474454|C,2.3856180083,1.4967504279,-1.495363715|S,1.6240661
509,3.0738998459,-0.9142984562|C,-1.2463282105,2.7172647315,-0.9393943
428|C,-3.1136646837,2.2742183471,0.1519034789|C,-2.8664354254,3.671320
672,0.2834914401|C,-4.8445088371,3.9278407162,1.5996149437|C,-3.719292
6056,4.5220956915,1.0055410007|C,-4.2461953247,1.6906601066,0.75120512
26|C,-5.1032302867,2.5345576425,1.4742371737|H,-5.5341877351,4.5452563
803,2.1682818133|H,-3.5227251026,5.5850512084,1.1015970788|H,-4.450806
731,0.6296585145,0.658793666|H,-5.9856724178,2.116463477,1.9502787472|
N,-1.6791176305,3.9100011597,-0.4267639965|N,-2.0776897616,1.707616300
6,-0.6238722979|C,-0.0286228992,2.5015299835,-1.7840478507|N,0.1204062
```

078,1.070081642,-2.0995470696|C,1.4026863185,0.6617457369,-2.058179496
9|H,-1.2220696152,4.8080750018,-0.536999125|H,-0.0762747397,3.10587029
89,-2.6976149819|H,1.6337495516,-0.3528506864,-2.369848167|Co,-1.53174
51091,-0.1132707884,-1.5139058265||Version=IA32W-G09RevA.02|State=1-A|
HF=-1628.9893446|RMSD=1.868e-009|RMSF=1.375e-005|Dipole=-2.1344374,-1.
3556379,-1.2781048|Quadrupole=43.2389344,-5.040428,-38.1985064,-0.4138
132,4.5579731,-8.0121628|PG=C01 [X(C30H22Fe1Co1N6S2)]||@

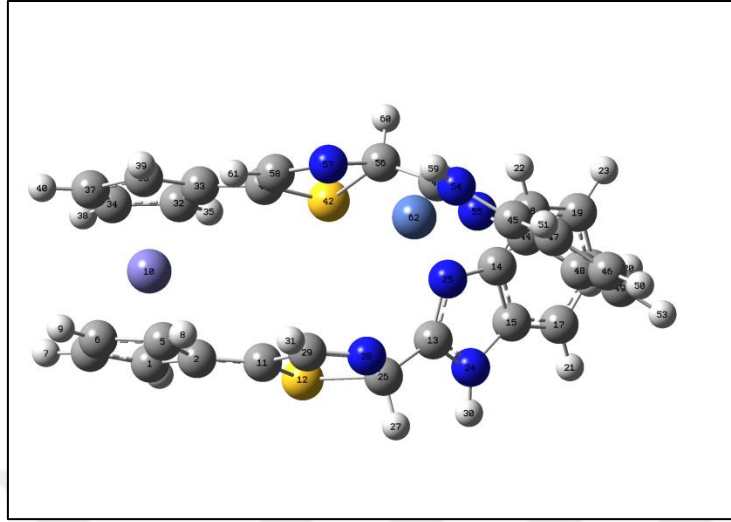
UV-Görünür Bölge Maksimum Absorbans Dalgaboyu

Excited State 20: Singlet-A 3.2113 eV 386.09 nm f=0.2629
<S**2>=0.000

124 ->137	-0.15777
126 ->137	-0.25918
127 ->137	0.28752
129 ->137	-0.19656
129 ->139	0.13704
130 ->139	0.12376
134 ->141	0.10704
135 ->137	-0.15339
135 ->141	0.19457
136 ->139	0.21158
136 ->142	-0.16285

EK 11 Su fazı hesaplamaları log dosyaları (devam)

Ni-FcTBz



```
1\1\GINC-UB12\FOpt\RB3LYP\LANL2DZ\C30H22Fe1N6Ni1S2 (2+)\FSGROUP\26-Sep-2017\0\#\# opt b3lyp/lanl2dz scrf=(solvent=water) geom=connectivity\Title Card Required\2,1\C,-4.5551068314,-1.291190928,1.4273922812\C,-3.4324801577,-0.4210735502,1.7935635711\C,-5.7415477748,-0.5055463624,1.4452371001\H,-4.4942057695,-2.3504418131,1.2228581653\C,-3.9846683135,0.9396529957,1.9637995701\C,-5.3892966853,0.8608672878,1.781412448\H,-6.7371083156,-0.862685912,1.2263755702\H,-3.4332328294,1.825694829,2.2408564276\H,-6.0807691024,1.6879027299,1.8519335048\Fe,-4.3527249336,0.2486419623,-0.0231877022\C,-2.0648918041,-0.767878102,1.8232845774\S,-1.4173828009,-2.374706696,1.5373728742\C,1.4408407229,-2.0909484858,0.9414480979\C,2.8075935364,-2.2874489504,-0.7800928733\C,2.9547724912,-3.4639195458,0.0089985356\C,4.5788332661,-4.3168741382,-1.5191505671\C,3.8398104883,-4.4992752525,-0.3423092\C,3.5584968663,-2.1142828073,-1.9611331321\C,4.4398729792,-3.1428321623,-2.3164966106\H,5.2755412747,-5.0884142048,-1.8343082709\H,3.945897291,-5.3927416395,0.264036401\H,3.4549901446,-1.2216153386,-2.5694172239\H,5.034104743,-3.0477583289,-3.2206909895\N,2.0822845113,-3.3011406401,1.0850265088\N,1.8510007722,-1.4542706627,-0.169754729\C,0.4216435159,-1.6413417269,1.9298969926\H,0.6203155712,-2.083663363,2.9145269132\N,0.2509976567,-0.2225024607,2.0815009253\C,-0.9750201401,0.2045921968,2.0944368728\H,1.9508368925,-3.95612669,1.8478665155\H,-1.1864544276,1.2506556151,2.2831856507\C,-3.7925461639,-0.4936349261,-1.9266721069\C,-3.1682690403,0.8133558498,-1.6928912851\C,-5.2049329212,-0.3142691435,-1.921050807\H,-3.26802776,-1.4201250997,-2.1038472006\C,-4.2499564945,1.7776248836,-1.5195507837\C,-5.4899775708,1.0774977545,-1.6486232225\H,-5.9416402802,-1.0933378197,-2.0541986328\H,-4.1570115614,2.8349732197,-1.3246443068\H,-6.4727167013,1.5160655331,-1.5552029261\C,-1.7495944213,1.0474243298,-1.4898173487\S,-0.6720206436,-0.3140667844,-1.5705663801\C,2.2960819696,2.5243216015,-0.7199502231\C,4.0905760146,1.7494339792,0.3277210964\C,4.0050404983,3.1555946929,0.5774414466\C,6.010525356,3.0611841188,1.880338929\C,4.9612951939,3.8325501442,1.3503324185\C,5.1452457433,0.9889171235,0.862682614\C,6.1000977692,1.6622308787,1.6426377195\H,6.7717472803,3.5450984532,2.4860177182\H,4.8957726384,4.900497793,1.5329564343\H,5.2155633656,-0.078496377,0.6776202151\H,6.9272205037,1.1045853854,2.0730421489\N,2.847813892,3.6053378744,-0.0917229828\N,3.0042088455,1.
```


3933745061,-0.4931689864\C,1.0405255715,2.1841528384,-1.4201397484\N,-
0.1246704879,2.9045781057,-1.0368517632\C,-1.3301521334,2.4233535721,-
1.1255183677\H,2.4883692056,4.552017922,-0.1079760297\H,1.1412889276,2
.0543069515,-2.5068991238\H,-2.1341700471,3.1067021719,-0.8661757583\N
i,1.3782006219,0.3299036119,-0.8510659619\\Version=ES64L-G09RevD.01\St
ate=1-A\HF=-1797.3308192\RMSD=5.915e-09\RMSF=1.278e-05\Dipole=-4.90194
95,-0.999181,2.4050819\Quadrupole=46.4945193,-2.6483172,-43.8462021,-1
2.1148061,-0.1852393,-9.221881\PG=C01 [X(C30H22Fe1N6Ni1S2)]\@

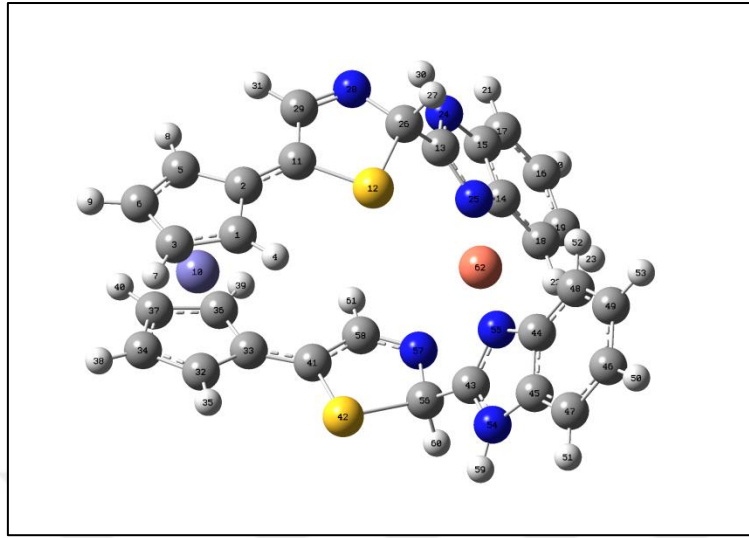
UV-Görünür Bölge Maksimum Absorbans Dalgaboyu

Excited State 11: Singlet-A 1.8614 eV 666.09 nm f=0.0147
<S**2>=0.000

130 ->145	-0.11204
133 ->145	-0.10359
136 ->145	-0.19557
136 ->146	-0.18694
137 ->145	-0.17836
137 ->146	0.11332
139 ->145	0.15295
141 ->145	0.34235
142 ->146	0.25125
143 ->146	-0.21705

EK 11 Su fazı hesaplamaları log dosyaları (devam)

Cu-FcTBz



```
1|1|UNPC-DESKTOP-GRHAD34|FOpt|UB3LYP|LANL2DZ|C30H22Cu1Fe1N6S2 (2+, 2)|KU  
BRA|18-Oct-2017|0||# opt b3lyp/lanl2dz scrf=(solvent=water) geom=conne  
ctivity scf=xqc||CUSU-F||2,2|C,-3.315595255,-1.1162354107,1.8168242315  
|C,-3.1986969457,0.3469328082,1.918125489|C,-4.6942984893,-1.446987642  
6,1.7428627727|H,-2.4970743072,-1.8197864096,1.8843665361|C,-4.5657110  
073,0.8748464943,1.7977901477|C,-5.4619077869,-0.2123388946,1.73726419  
91|H,-5.1068478109,-2.4455216007,1.7149985434|H,-4.8471965803,1.918188  
6264,1.7961450878|H,-6.5382214779,-0.1426636751,1.6602718849|Fe,-4.057  
3277804,-0.3591095003,-0.0760330363|C,-2.028932545,1.114242802,2.01825  
75463|S,-0.3572785723,0.4722624242,1.9386136528|C,1.1781830457,2.78566  
22367,1.0708916612|C,2.6363848082,3.0112147177,-0.5714994433|C,2.19354  
26181,4.3163405551,-0.2214643534|C,3.6076663788,5.2718242395,-1.893470  
9362|C,2.6662305262,5.4693517789,-0.871641358|C,3.5800007092,2.8229933  
123,-1.5992847836|C,4.0579211542,3.9692289177,-2.2512432932|H,4.004026  
3181,6.1322907966,-2.4250736471|H,2.3223756294,6.4618018714,-0.5987549  
241|H,3.9272238019,1.8316725164,-1.874513807|H,4.7884967748,3.86358953  
07,-3.0480867881|N,1.2733483586,4.1294851616,0.8144497259|N,1.97514824  
76,2.0730914402,0.2583965976|C,0.3004546706,2.2938943451,2.1926825527|  
H,0.853702938,2.259643397,3.1381982716|N,-0.8556740951,3.1714243526,2.  
3233902109|C,-2.0055442048,2.5701587256,2.2239330185|H,0.735892367,4.8  
40306612,1.2982609291|H,-2.9219208562,3.143785822,2.3059254705|C,-3.85  
70703422,-1.7482266869,-1.7636351314|C,-2.7946517041,-0.7647905148,-1.  
9746793925|C,-5.1242580784,-1.0862251133,-1.8385737748|H,-3.7084515875  
, -2.8145951953,-1.6603252709|C,-3.4446413529,0.5284052468,-2.034151063  
5|C,-4.87119268,0.3264354032,-1.9601791|H,-6.0928909951,-1.5614466023,  
-1.7795599906|H,-2.9552849834,1.4845814046,-2.1569037321|H,-5.61704367  
03,1.1045739165,-2.0419061675|C,-1.3953904415,-1.0331138903,-1.9863529  
31|S,-0.7240010078,-2.720552148,-1.9578349928|C,2.0109087813,-2.456948  
1984,-1.0539199023|C,3.3312705425,-2.5511987173,0.7159564004|C,3.32403  
74457,-3.8463133222,0.1236720322|C,4.8157492945,-4.6467898127,1.810472  
6209|C,4.0629889822,-4.9164547964,0.6563830131|C,4.0914977084,-2.29026  
70347,1.8711316599|C,4.8301325634,-3.3546772898,2.4088162281|H,5.40326  
99766,-5.442780439,2.2592755213|H,4.0548017337,-5.9017726851,0.2015874  
692|H,4.1025643344,-1.303813339,2.3249399624|H,5.4280425088,-3.1930978  
086,3.3012245493|N,2.4835028714,-3.7429133728,-0.9942943926|N,2.500223  
0629,-1.7098164144,-0.0501364661|C,1.0792126147,-1.9238315269,-2.09418
```

15524|N,0.9266159421,-0.4755130906,-1.9794017129|C,-0.3348282761,-0.06
82808708,-2.0005783942|H,2.2678587518,-4.4865780264,-1.6486299073|H,1.
4086621927,-2.1960939194,-3.1026918888|H,-0.5390151375,0.9973896776,-1
.9788245838|Cu,2.1388613375,0.1760788158,0.0139117116||Version=IA32W-G
09RevA.02|State=2-A|HF=-1824.2218637|S2=1.632709|S2-1=0.|S2A=1.067466|
RMSD=1.700e-009|RMSF=2.425e-005|Dipole=-4.470378,0.2082566,0.7038018|Q
uadrupole=31.5866173,10.8615809,-42.4481982,-9.1606588,-8.6736185,10.8
338167|PG=C01 [X(C30H22Cu1Fe1N6S2)]||@

UV-Görünür Bölge Maksimum Absorbans Dalgaboyu

Excited State 12: 2.642-A 1.8389 eV 674.22 nm f=0.0302

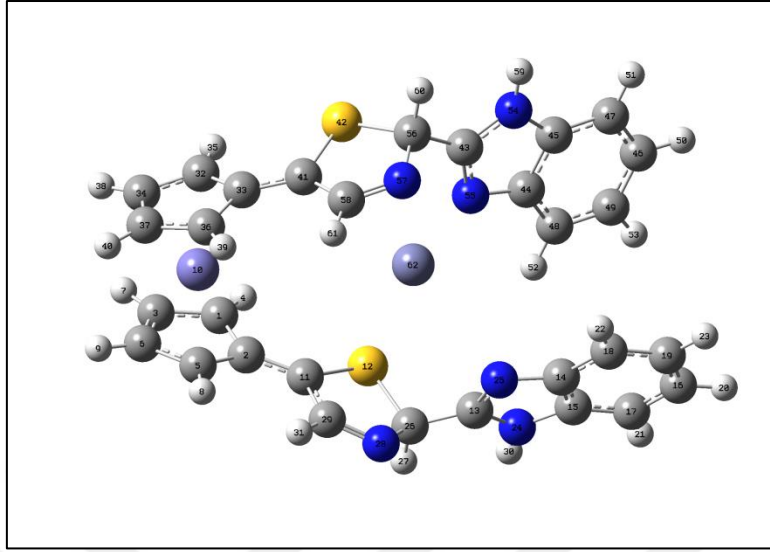
<S**2>=1.495

144A ->146A	0.81082
143B ->145B	-0.43305
144B ->147B	-0.19803



EK 11 Su fazı hesaplamaları log dosyaları (devam)

Zn-FcTBz



```
1|1|UNPC-DESKTOP-GRHAD34|FOpt|RB3LYP|LANL2DZ|C30H22Fe1N6S2Zn1(2+)|KUBR
A|21-Oct-2017|0||# opt b3lyp/lanl2dz scrf=(solvent=water) scf=xqc|cin
ko-su-den3||2,1|C,-3.4694033173,-1.7302528372,-1.7635248989|C,-2.89225
13696,-2.365135333,-0.5693395597|C,-4.8891278498,-1.9087020267,-1.7358
809155|H,-2.8997352798,-1.3379424384,-2.5945414774|C,-4.0373692744,-2.
6823164216,0.2923451073|C,-5.2421757028,-2.4935495781,-0.4602668696|H,
-5.5783252582,-1.6258408082,-2.5189057632|H,-3.9821965789,-3.129379467
7,1.2742330339|H,-6.242223996,-2.7298814066,-0.1256145975|Fe,-4.371478
7089,-0.6228373235,-0.1604504533|C,-1.5441758927,-2.589759072,-0.26345
63324|S,-0.1382552845,-2.1505238203,-1.3854199136|C,2.3693350126,-2.73
63068607,0.1408409154|C,4.0165277219,-1.5808102858,0.995607745|C,4.562
0685841,-2.3124421844,-0.1061904774|C,6.7289327065,-1.3930663262,0.317
285891|C,5.9206790375,-2.2327962166,-0.4640803226|C,4.8455227345,-0.74
12147598,1.7701017043|C,6.2001886884,-0.6580383163,1.4186950431|H,7.78
53886325,-1.300228011,0.0797968154|H,6.327830724,-2.7928761904,-1.3002
164209|H,4.4421528087,-0.1836506684,2.6102569828|H,6.866244468,-0.0221
094576,1.9955076898|N,3.4895969523,-3.0329103584,-0.6287431439|N,2.644
3418918,-1.8641124371,1.1194200235|C,1.0492811805,-3.3570670403,-0.141
3202403|H,1.1516204265,-4.2281836474,-0.7983158822|N,0.2221259921,-3.6
356177261,0.9855470903|C,-1.0478005148,-3.3146263475,0.8778357725|H,3.
5235714217,-3.6793224474,-1.4081713358|H,-1.7264502501,-3.6173461831,1
.6704291667|C,-4.6450231981,1.4637607235,-0.572239197|C,-3.8493489524,
1.3922755277,0.6535910981|C,-5.9021753834,0.8310305724,-0.3337530449|H
,-4.3566804537,1.9842171227,-1.4745586912|C,-4.6167984242,0.5461800275
,1.5907864943|C,-5.8924959965,0.2899015982,1.0101257933|H,-6.720621929
1,0.7597031966,-1.0356054519|H,-4.3167917127,0.2771076985,2.5932335229
|H,-6.6996845749,-0.2553170881,1.4782441541|C,-2.5754401173,1.93484150
73,0.8479287512|S,-1.8326752412,3.1592628565,-0.277533154|C,0.98041837
2,3.1304516012,0.2867906702|C,2.6846430142,2.3090370541,-0.8748167758|
C,3.0180647707,3.6446459954,-0.5181590845|C,5.1167112072,3.4433219354,
-1.640371932|C,4.2369691894,4.2373243748,-0.8895798002|C,3.5713067416,
1.5211594292,-1.6321994713|C,4.788201383,2.1072339739,-2.0075137304|H,
6.0718052549,3.8565899221,-1.9514373133|H,4.4859874571,5.2563742872,-0
.6122046827|H,3.3224965756,0.5030013788,-1.9167798857|H,5.4995398588,1
.5306137653,-2.5914187383|N,1.9200584479,4.120977957,0.2077393272|N,1.
4037892344,2.0229673017,-0.3530957927|C,-0.3326689302,3.3147302496,0.9
```

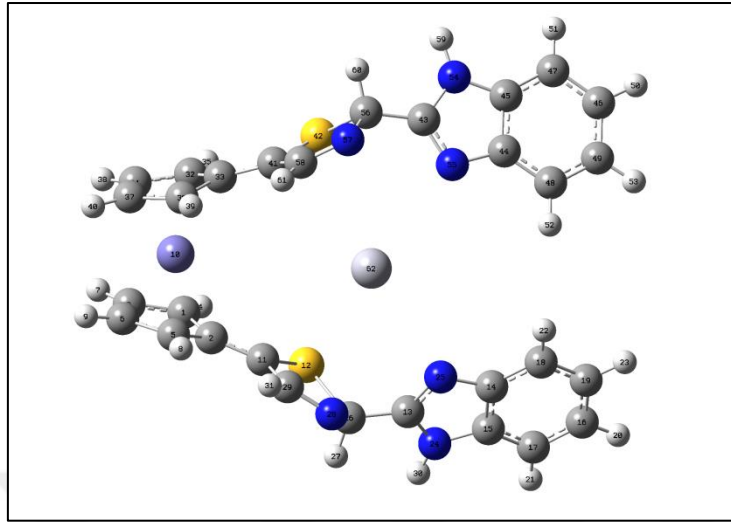
833471298|N,-0.5584540524,2.3595924193,2.0655428638|C,-1.6996118391,1.7183461404,1.98691072|H,1.8326828056,5.0449129474,0.6174110041|H,-0.3954722022,4.3335709952,1.378412641|H,-1.9660203308,1.0178035524,2.7729183417|Zn,0.4612503197,0.2498512247,-0.5872318426||Version=IA32W-G09Rev A.02|State=1-A|HF=-1693.6451621|RMSD=3.779e-009|RMSF=1.454e-005|Dipole=-0.2667809,2.4230441,-2.5849539|Quadrupole=41.7785869,0.8329946,-42.6115815,17.0240226,-18.8473781,13.8217743|PG=C01 [X(C30H22Fe1N6S2Zn1)]|
|@

UV-Görünür Bölge Maksimum Absorbans Dalgaboyu

Excited State	21:	Singlet-A	3.4313 eV	364.55 nm	f=0.0466
<S**2>=0.000					
125	->137	0.13753			
126	->137	0.48443			
128	->139	0.10047			
131	->139	0.22818			
131	->140	0.10012			
134	->141	-0.26548			
135	->139	0.14611			
136	->142	0.11753			

EK 11 Su fazı hesaplamaları log dosyaları (devam)

Hg-FcTBz



```
1\1\GINC-LEVREK126\FOpt\RB3LYP\LANL2DZ\C30H22Fe1Hg1N6S2 (2+) \ROOT\29-Ju
l-2017\0\#\# opt b3lyp/lanl2dz scrf=(solvent=water) geom=connectivity s
cf=xqc\civa su-den2\2,1\C,-3.3232841554,-0.3185761525,1.5947623411\C
,-2.5276875512,0.8947382977,1.3711030794\C,-4.685578985,-0.0404780135,
1.2586618237\H,-2.9650248646,-1.2149881868,2.0817098574\C,-3.417125030
6,1.8120368426,0.6353869118\C,-4.7436635598,1.2821088,0.6723982712\H,-
5.5237618757,-0.7068676721,1.4054619648\H,-3.1506623694,2.7958630402,0
.2760734065\H,-5.6321956667,1.7716999254,0.2993388234\Fe,-3.5618227669
,0.0172589815,-0.5126991818\C,-1.2043398847,1.1315707131,1.7494658516\
S,-0.1819603322,-0.0279672189,2.7397608021\C,2.4818052971,1.0948285948
,3.0773948787\C,4.5254218327,0.5624450035,2.4911411154\C,4.4751807213,
0.4705422043,3.9166159544\C,6.7783912221,-0.1742582202,3.9856003698\C,
5.5935592491,0.1024075741,4.6863788569\C,5.7249045229,0.2841216318,1.8
039068676\C,6.8441990274,-0.0842647087,2.5653647422\H,7.6685131785,-0.
4630168535,4.5382657183\H,5.5484708609,0.0353311291,5.7690648749\H,5.7
765743451,0.3602527921,0.7218537063\H,7.7836098716,-0.305378091,2.0659
006919\N,3.1658821125,0.8152033992,4.2548267278\N,3.2632775792,0.95096
16338,2.0021111866\C,1.0422647285,1.4956754517,3.1000028982\H,0.769100
7155,1.8027282224,4.1172032621\N,0.6775539727,2.5599167474,2.173387834
8\C,-0.4721700808,2.3707327635,1.5676777385\H,2.784955725,0.871420696,
5.1918896192\H,-0.8657916428,3.1625252532,0.9361271384\C,-3.3826691144
,-1.7707966016,-1.6808001577\C,-2.5680998058,-0.8142336029,-2.43874143
61\C,-4.7327302708,-1.2977163025,-1.6488116289\H,-3.0484040817,-2.7439
71572,-1.3490968659\C,-3.4274830206,0.3707914591,-2.6186597108\C,-4.76
01308103,0.024733241,-2.2377145746\H,-5.5826182323,-1.8306237967,-1.24
6618563\H,-3.1391668838,1.2910217163,-3.1067353961\H,-5.6320548119,0.6
552094932,-2.3409820926\C,-1.2521065343,-0.9748317539,-2.8778981695\S,
-0.2578617055,-2.5012815686,-2.6463460845\C,2.3987617846,-2.0931794792
,-3.7547182203\C,4.4494250737,-2.0545234988,-2.982593079\C,4.364321785
4,-3.1858401315,-3.8520495274\C,6.6570464585,-3.7226330787,-3.42708899
18\C,5.4594821292,-4.0360481306,-4.0896074241\C,5.6608827643,-1.753861
9918,-2.3265379618\C,6.7572007092,-2.5980621814,-2.5583963885\H,7.5301
1815,-4.3515412075,-3.5799034553\H,5.3879655335,-4.8929988414,-4.75234
0426\H,5.7384357531,-0.8942269509,-1.6677330906\H,7.7048877054,-2.3935
773517,-2.0675782167\N,3.0513799412,-3.1801225529,-4.3245650977\N,3.20
38534963,-1.3982532669,-2.9442758852\C,0.9619794957,-1.8153486459,-4.0
```

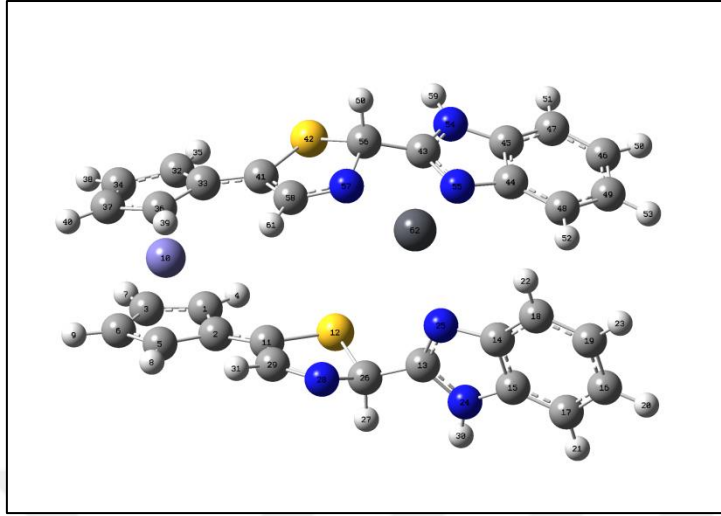
570635753\N,0.6265234579,-0.4114323675,-4.2616908632\C,-0.5093685102,-
0.0483290662,-3.711066744\H,2.6483315518,-3.8385182426,-4.9807105184\H
,0.6643767939,-2.3835757034,-4.9471057829\H,-0.8843571623,0.9538632894
, -3.9003821932\Hg,1.366482514,0.0580357182,-0.5815241017\\Version=ES64
L-G09RevD.01\State=1-A\HF=-1670.7957469\RMSD=1.671e-09\RMSF=8.991e-06\
Dipole=-1.6329154,-0.0792416,0.0766628\Quadrupole=20.8273103,-26.13903
2,5.3117217,-19.4484246,9.1082263,18.8703543\PG=C01 [X(C30H22Fe1Hg1N6S
2)]\@

UV-Görünür Bölge Maksimum Absorbans Dalgaboyu

Excited State 24:	Singlet-A	3.1613 eV	392.20 nm	f=0.0934
<S**2>=0.000				
131 ->142	0.47005			
133 ->142	-0.42073			
134 ->142	0.17424			
140 ->142	-0.10731			
141 ->144	0.14899			
141 ->146	-0.10256			

EK 11 Su fazı hesaplamaları log dosyaları (devam)

Pb-FcTBz



```
1\1\GINC-LEVREK108\FOpt\RB3LYP\LANL2DZ\C30H22Fe1N6Pb1S2 (2+) \ROOT\21-May-2017\0\#\# opt freq b3lyp/lanl2dz scrf=(solvent=water) geom=connectivity\pb1\2,1\C,-3.3607198509,-1.1793253881,1.0010558671\C,-2.6944720993,0.1200614937,1.1887153393\C,-4.7622737335,-0.9501664727,0.9018430912\H,-2.8709639278,-2.1426758929,1.0162373002\C,-3.7491223262,1.1464671135,1.0578849487\C,-5.0004387382,0.4789210726,0.9396425876\H,-5.5198894814,-1.7120741681,0.7883100093\H,-3.6127615923,2.2140537661,1.1412557354\H,-5.9657748999,0.9581859341,0.862637568\Fe,-3.7366010676,0.0177886912,-0.7180611651\C,-1.3275686273,0.3791776972,1.3306859676\S,-0.0318523099,-0.8530780611,1.5363706748\C,2.5899302979,0.526869243,1.9167533446\C,4.6672304556,0.7960799474,1.2091385971\C,4.7406681102,0.3872053738,2.5707811965\C,7.1230599229,0.5566204608,2.5487981277\C,5.9574477254,0.2476097608,3.2618482176\C,5.8514980926,1.1238241079,0.511993897\C,7.0678688966,0.9982038861,1.1966346584\H,8.0885399332,0.4712637442,3.0387427772\H,5.9911356859,-0.0706283124,4.2987645527\H,5.8441954915,1.4885614951,-0.5099991552\H,7.9920722791,1.2494355017,0.6846942014\N,3.4191010931,0.2287593372,2.9753207975\N,3.3017697361,0.8376498432,0.8139580738\C,1.1221867613,0.6184827291,2.1806083834\H,0.9818108331,0.5318274092,3.2657030895\N,0.4953060045,1.8646988135,1.7679811016\C,-0.7531165956,1.7285090767,1.4184260045\H,3.1114649737,-0.0193917632,3.9093833\H,-1.3460543066,2.6087454471,1.1958846255\C,-3.5756124772,-1.1033745084,-2.5332088147\C,-2.5673314591,-0.064805206,-2.5687868071\C,-4.8689081515,-0.4840167167,-2.4164645673\H,-3.3889595959,-2.1649425155,-2.614368313\C,-3.2694257183,1.2116673916,-2.3934788188\C,-4.6771085856,0.9468992691,-2.3631596844\H,-5.8178894097,-0.9994381124,-2.3868353641\H,-2.8101954373,2.18964023,-2.3731973485\H,-5.457313348,1.6883058799,-2.2642154348\C,-1.157521058,-0.2707625651,-2.6400404964\S,-0.4549937372,-1.9597309658,-2.9841617045\C,2.4335949048,-1.8313852836,-2.6700072935\C,4.4101550644,-2.1901275307,-1.7273979209\C,3.9674958319,-3.4218380646,-2.2896125279\C,5.9532366794,-4.5213196445,-1.5463769104\C,4.7189650201,-4.6047979404,-2.2095283366\C,5.6522674592,-2.1194350443,-1.0689920011\C,6.4114515787,-3.2970672189,-0.9877739345\H,6.5731143532,-5.4090171373,-1.4595543025\H,4.3668618007,-5.5359137181,-2.641147005\H,6.0177961863,-1.1958848719,-0.6368528203\H,7.3742851627,-3.2731553757,-0.48550826\N,2.7216972301,-3.1464531593,-2.8762007154\N,3.4149815442,-1.2103604689,-1.9811648496\C,1.257235819,-1.0810598071,-3.2011399635\N,1.1
```


58769605,0.236070589,-2.5415968166\C,-0.1355894255,0.645053261,-2.4160
366611\H,2.1362361005,-3.812359103,-3.36777356\H,1.3616016899,-0.95671
52216,-4.286980527\H,-0.3308876625,1.6619269297,-2.0903977009\Pb,3.071
3136489,1.0994363531,-1.7032323449\\Version=ES64L-G09RevD.01\State=1-A
\HF=-1631.5283282\RMSD=7.676e-09\RMSF=8.097e-06\Dipole=-0.1696883,0.03
79799,1.3792712\Quadrupole=48.6130119,-31.0563743,-17.5566376,-13.0260
911,3.2008482,8.0215754\PG=C01 [X(C30H22Fe1N6Pb1S2)]\@

UV-Görünür Bölge Maksimum Absorbans Dalgaboyu

Excited State 21: Singlet-A 3.2431 eV 382.30 nm f=0.1858
<S**2>=0.000

124 ->138	0.21323
125 ->138	-0.13312
126 ->138	0.26198
127 ->138	0.26814
128 ->138	0.14921
129 ->140	-0.13934
130 ->138	-0.12768
130 ->140	-0.16362
136 ->138	0.12500
136 ->143	0.17812
137 ->140	0.17394
137 ->144	0.17584

ÖZGEÇMİŞ

Kimlik Bilgileri

Adı Soyadı : Mine ALŞAN
Doğum Yeri : Ankara
Medeni Hali : Bekar
E-posta : mine.alsan88@gmail.com
Adres :Elçi Sokak Barış Apartmanı 15:6 Yukarı Ayrancı Çankaya/ ANKARA

Eğitim

Lise : 2003-2007 Hacı Ömer Tarman Anadolu Lisesi
Lisans : 2007-2012 Hacettepe Üniversitesi Kimya Bölümü
Yüksek Lisans : 2012-2018 Hacettepe Üniversitesi Kimya Bölümü

Yabancı Dil ve Düzeyi

İngilizce : YDS (2013) : 75/100

İş Tecrübesi

04.2018-devam: Kıdemli Kalite Güvence Uzmanı / Elixir İlaç Araştırma ve Geliştirme AŞ.
/ Hacettepe Üniversitesi Teknokent
02.2017-03.2018: Arge Analitik Uzmanı/ İlko İlaç Arge Merkezi / Hacettepe Üniversitesi
Teknokent
10.2013-02.2017: Arge Analitik Uzman Yardımcısı/ İlko İlaç Arge Merkezi/ Hacettepe
Üniversitesi Teknokent

Deneyim Alanları

Analitik Kimya, Organik Kimya, Hesaplmalı Kimya, Kalite Yönetim Sistemleri

Tezden Üretilmiş Projeler ve Bütçesi

-

Tezden Üretilmiş Yayınlar

-

Tezden Üretilmiş Tebliğ ve/veya Poster Sunumu ile Katıldığı Toplantılar

-





HACETTEPE ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
YÜKSEK LİSANS TEZ ÇALIŞMASI ORJİNALLİK RAPORU

HACETTEPE ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLER ENSTİTÜSÜ
KİMYA ANABİLİM DALI BAŞKANLIĞI'NA

Tarih: 03/07/2018

Tez Başlığı / Konusu: Metal İyonlarına Duyarlı Yeni Tasarlanmış Ferrosenil Tiyazol Benzimidazol Sensörün Teorik Olarak İncelenmesi


Yukarıda başlığı/konusu gösterilen tez çalışmamın a) Kapak sayfası, b) Giriş, c) Ana bölümler d) Sonuç kısımlarından oluşan toplam 50 sayfalık kısmına ilişkin, 01/07/2018 tarihinde tez danışmanım tarafından *Turnitin* adlı intihal tespit programından aşağıda belirtilen filtrelemeler uygulanarak alınmış olan orijinallik raporuna göre, tezimin benzerlik oranı % 4 'tür.

Uygulanan filtrelemeler:

- 1- Kaynakça hariç
- 2- Alıntılar dâhil
- 3- 5 kelimedenden daha az örtüşme içeren metin kısımları hariç

Hacettepe Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Çalışması Orjinallik Raporu Alınması ve Kullanılması Uygulama Esasları'nı inceledim ve bu Uygulama Esasları'nda 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.

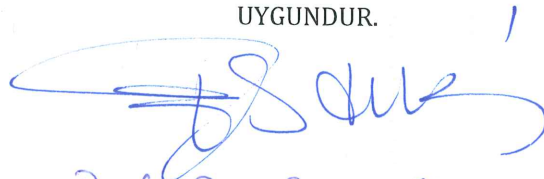
Gereğini saygılarımla arz ederim.


03/07/2018

Adı Soyadı: Mine ALŞAN
Öğrenci No: N12125898
Anabilim Dalı: Kimya
Programı: Organik Kimya
Statüsü: Y.Lisans Doktora Bütünleşik Dr.

DANIŞMAN ONAYI

UYGUNDUR.



Prof. Dr. Fatma SEVİN DÜZ
(Unvan, Ad Soyad, İmza)