

**BAZI ANTIOKSİDAN MOLEKÜLLERİN MOLEKÜLER ETKİLEŞİMLERİNİN  
KUANTUM KİMYASAL METOTLARLA İNCELENMESİ**

**Sertan KURNALI**

**Bülent Ecevit Üniversitesi  
Fen Bilimleri Enstitüsü  
Fizik Anabilim Dalında  
Doktora Tezi  
Olarak Hazırlanmıştır**

**ZONGULDAK**

**Temmuz 2012**

**KABUL:**

Sertan KURNALI tarafından hazırlanan “BAZI ANTİOKSİDAN MOLEKÜLLERİN MOLEKÜLER ETKİLEŞİMLERİNİN KUANTUM KİMYASAL METOTLARLA İNCELENMESİ” başlıklı bu çalışma jürimiz tarafından değerlendirilerek, Bülent Ecevit Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalında Doktora Tezi olarak oybirliği ile kabul edilmiştir. 12/07/2012

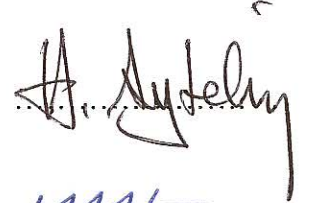
Başkan : Prof. Dr. M. Halûk GÜVEN (BEÜ)



Üye : Prof. Dr. Dilek DADAYLI PAKTAŞ (KBÜ)



Üye : Doç. Dr. Hüseyin AYTEKİN (BEÜ)



Üye : Doç. Dr. Mehmet AKYÜZ (BEÜ)



Üye : Yrd. Doç. Dr. Meral ERYÜREK (BEÜ)



---

**ONAY:**

Yukarıdaki imzaların, adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylarım. .../.../2012



Prof. Dr. Özden ÖZEL GÜVEN  
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

*“Bu tezdeki tüm bilgilerin akademik kurallara ve etik ilkelere uygun olarak elde edildiğini ve sunulduğunu; ayrıca bu kuralların ve ilkelerin gerektirdiği şekilde, bu çalışmadan kaynaklanmayan bütün atıfları yaptığımı beyan ederim.”*



Sertan KURNALI

## ÖZET

Doktora Tezi

### BAZI ANTIÖKSİDAN MOLEKÜLLERİN MOLEKÜLER ETKİLEŞİMLERİNİN KUANTUM KİMYASAL METOTLARLA İNCELENMESİ

Sertan KURNALI

Bülent Ecevit Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Tez Danışmanı: Prof. Dr. M. Halûk GÜVEN

Temmuz 2012, 187 sayfa

Ürik asit ve askorbik asit gibi insan vücudu için önemli iki antioksidan molekülün su molekülleri ile olan etkileşimleri kuantum kimyasal hesaplamalarla incelenmiştir. Hesaplamalarda GAUSSIAN 09 paket programı kullanılmıştır. Bu çalışmada DFT B3LYP seviyesinde 6-311++G(d,p) baz seti ile yoğunluk fonksiyoneli teorisi kullanılmıştır. Etkileşimin modellenmesi su moleküllerini teker teker aktif uçlara yaklaştırarak ve bütün aktif uçlara aynı anda su moleküllerini yaklaştırarak yapılmıştır. Etkileşim sonucu oluşan yapıların optimize geometrileri elde edilmiştir ve bu yapıların IR titreşim analizi, hidrojen bağ enerjisi analizi, proton ilgisi ve proton verme entalpisi, bağ uzama ve kısalmaları, yük dağılımı ve elektriksel potansiyel dağılımları, HOMO-LUMO enerji analizi yapılmıştır. Modelleme için ürik asit ve askorbik asidin aynı kimyasal formüle sahip farklı izomerlerinin en kararlı olan yapıları seçilmiştir.

**Anahtar Sözcükler:** Kuantum kimyasal hesaplama, ürik asit, askorbik asit, moleküler etkileşim.

**Bilim Kodu:** 404.01.01



## **ABSTRACT**

**Ph.D. Thesis**

### **EXAMINATION OF THE MOLECULAR INTERACTIONS OF SOME ANTIOXIDANT MOLECULES BY QUANTUM CHEMICAL METHODS**

**Sertan KURNALI**

**Bülent Ecevit University  
Graduate School of Natural and Applied Sciences  
Department of Physics**

**Thesis Advisor: Prof. M. Halûk GÜVEN**

**July 2012, 187 pages**

The interaction of two important antioxidants uric acid and ascorbic acid molecules with water molecules is investigated by quantum chemical calculations. GAUSSIAN 09 software is used for modeling. Density functional theory at B3LYP level with 6-311++G(d,p) basis sets is used for modeling. The interaction is modeled by interacting uric acid and ascorbic acid with one water molecule one by one and one by five water molecules at the five active sides of the molecules. The optimized interacting structures are obtained and they are investigated by the IR vibrational analysis, bond length, angle and dihedral analysis, charge distribution and electric potential analysis and HOMO-LUMO analysis. The most stable tautomers of uric acid and isomers of ascorbic acid is determined for interaction.

**Key Words:** Quantum chemical calculations, uric acid, ascorbic acid, molecular interaction.

**Science Code:** 404.01.01



## TEŐEKKÜR

Tez alıőmam sũresince deęerli bilgi ve tecrũbelerini esirgemeyen, destek ve yardımları ile her zaman yanımda olan, kendisiyle alıőmaktan bũyũk onur duyduęum hocam, sayın Prof. Dr. M. Halũk GũVEN'e (BEũ) saygı ve Őukranlarımı sunarım.

İő istasyonu ve yazılımı edinmemizde destek saęlayan B.E.ũ Bilimsel Araőtırma Proje Destek Birimine teőekkũrlerimi sunarım.

Bilimsel alıőmaları etkili bir Őekilde devam ettirebilmek iin gerekli olan sosyal ortamın oluőmasında etkili olan Bũlent Ecevit Őniversitesi Fen Edb. Fak. oęretim elemanlarına mesai arkadaőlarıma teőekkũr ederim.

Bana desteklerini hibir zaman esirgemeyen aileme minnettarlıęımı sunmaktan mutluluk duyarım. Yanımda olmaları bana motivasyon kaynaęı olan eőim ve oęluma da sevgilerimi ve teőekkũrlerimi sunarım.





## İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
KABUL .....	ii
ÖZET .....	iii
ABSTRACT .....	v
TEŞEKKÜR .....	vii
İÇİNDEKİLER.....	ix
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	xiii
ÇİZELGELER DİZİNİ .....	xvii
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ.....	xix
BÖLÜM 1 GİRİŞ .....	1
BÖLÜM 2 TİTREŞİM SPEKTROSKOPİSİ .....	7
2.1 SPEKTRAL BÖLGELER .....	7
2.2 KIZİLÖTESİ SPEKTROSKOPİSİ.....	9
BÖLÜM 3 MOLEKÜLER MODELLEME YÖNTEMLERİ.....	15
3.1 YOĞUNLUK FONKSİYONELİ TEORİSİ.....	15
3.1.1 Kohn-Sham yörüngeleri ve denklemleri .....	15
3.1.2 Değiş tokuş ilgileşim fonksiyonelleri.....	18
3.2 TEMEL SETLER .....	19
3.2.1 Minimal Temel Setler .....	19
3.2.2 Split Valans Temel Setleri .....	20
3.2.3 Polarize Temel Setleri.....	20
3.2.4 Difüze Fonksiyonlar .....	21
3.2.5 Yüksek Açısız Momentum Temel Setleri.....	21
3.2.6 İleri-Üçüncü –Satır Atomları için Temel Setler .....	22

## İÇİNDEKİLER (devam ediyor)

	<u>Sayfa</u>
3.3 GEOMETRİ OPTİMİZASYONU .....	22
3.4 GAUSSİAN PROGRAMI .....	23
3.4.1 Gaussian için yakınsama kriterleri.....	24
3.4.2 Gaussian'da Frekans hesaplamaları .....	24
BÖLÜM 4 MOLEKÜL ETKİLEŞİMLERİ .....	25
4.1 GİRİŞ .....	25
4.2 HİDROJEN BAĞI .....	25
BÖLÜM 5 ÜRİK ASİT VE SU MOLEKÜLÜ ETKİLEŞİMİ .....	29
5.1 GİRİŞ .....	29
5.2 ÜRİK ASİT TOTOMERLERİNİN EN KARARLI YAPISININ BELİRLENMESİ ....	30
5.3 PROTON ALMA VE VERME EĞİLİMİ VE HİDROJEN BAĞI ENERJİ HESAPLAMALARI.....	32
5.4 ÜRİK ASİT BAĞ UZUNLUKLARININ, AÇILARININ VE DİHEDRALLERİNİN ETKİLEŞİM SONRASI ANALİZİ .....	34
5.5 ETKİLEŞİM SONRASI ÜRİK ASİT MOLEKÜLÜNÜN ÜZERİNDEKİ YÜK VE ELEKTRİKSEL POTANSİYEL DAĞILIMLARININ ANALİZİ .....	40
5.6 ÜRİK ASİT HOMO-LUMO ANALİZİ .....	44
5.7 UA MOLEKÜLÜNÜN KIZILÖTESİ SPEKTRUMUNUN DENEYSEL SONUÇLARLA KARŞILAŞTIRILMASI.....	47
5.8 ÜRİK ASİT VE SU MOLEKÜLÜNÜN ETKİLEŞİMİNİN KIZILÖTESİ SPEKTRUM ANALİZİ .....	52
5.8.1 146 Kodlu Etkileşimin Kızılötesi Spektrum Analizi .....	52
5.8.2 147 Kodlu Etkileşimin Kızılötesi Spektrum Analizi .....	58
5.8.3 156 Kodlu Etkileşimin Kızılötesi Spektrum Analizi .....	65
5.8.4 168 Kodlu Etkileşimin Kızılötesi Spektrum Analizi .....	70
5.8.5 169 Kodlu Etkileşimin Kızılötesi Spektrum Analizi .....	75
5.8.6 UA ve 5 Su Molekülünün Etkileşimin Kızılötesi Spektrum Analizi.....	81

## İÇİNDEKİLER (devam ediyor)

Sayfa

BÖLÜM 6 ASKORBİK ASİT VE SU MOLEKÜLÜNÜN ETKİLEŞİMİ .....	93
6.1 GİRİŞ.....	93
6.2 ASKORBİK ASİT İZOMERLERİNİN EN KARARLI YAPISININ BELİRLENMESİ.....	94
6.3 PROTON ALMA VE VERME EĞİLİMİ VE HİDROJEN BAĞI ENERJİ HESAPLAMALARI.....	95
6.4 ASKORBİK ASİT BAĞ UZUNLUKLARININ, AÇILARIN VE DİHEDRALLERİN ETKİLEŞİM SONRASI ANALİZİ.....	97
6.5 ETKİLEŞİM SONRASI ASKORBİK ASİT MOLEKÜLÜNÜN ÜZERİNDEKİ YÜK VE ELEKTRİKSEL POTANSİYEL DAĞILIMLARININ ANALİZİ .....	102
6.6 ASKORBİK ASİT HOMO-LUMO ANALİZİ .....	106
6.7 ASKORBİK ASİT KIZILÖTESİ SPEKTRUMUNUN DENEYSEL DEĞERLERLE KARŞILAŞTIRILMASI .....	108
6.8 ASKORBİK ASİT SU ETKİLEŞİMİNİN KIZILÖTESİ SPEKTRUM ANALİZİ .....	113
6.8.1 H8 Kodlu Etkileşimin Kızılötesi Spektrum Analizi .....	113
6.8.2 H10 Kodlu Etkileşimin Kızılötesi Spektrum Analizi .....	118
6.8.3 H15 Kodlu Etkileşimin Kızılötesi Spektrum Analizi .....	124
6.8.4 H20 Kodlu Etkileşimin Kızılötesi Spektrum Analizi .....	127
6.8.5 AA ve 5 Su Molekülünün Etkileşimin Kızılötesi Spektrum Analizi.....	133
BÖLÜM 7 SONUÇ .....	139
KAYNAKLAR.....	143
EK AÇIKLAMALAR A ÜRİK ASİT PARAMETRE DEĞİŞİMLERİ.....	151
EK AÇIKLAMALAR B ASKORBİK ASİT PARAMETRE DEĞİŞİMLERİ .....	173
ÖZGEÇMİŞ .....	187



## ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>No</u>	<u>Sayfa</u>
2.1	Frekans ve dalga boyu birimlerinde radyo frekans, bölgesinden gama radyasyonuna kadar elektromanyetik radyasyon spektrumu ..... 7
2.2	Bir molekülde gerilme (simetrik ve asimetrik), düzlem içi eğilme (makaslama ve yana sallanma), düzlem dışı eğilme (bükülme ve öne arkaya sallama) hareketleri. Bu gösterimde (+), kağıt düzleminde öne doğru, (-) ise, arkaya doğru hareket anlamındadır ve periyodik hareketin sadece yarısı çizilmiştir..... 10
2.3	Su molekülünde mümkün olan simetrik gerilme, asimetrik gerilme ve makaslama titreşim hareketleri. .... 11
3.1	İki boyutlu potansiyel enerji yüzeyi..... 22
4.1	4A, 5A, 6A, 7A grubu elementlerinin hidrojenle yaptıkları bileşiklerin kaynama noktaları ..... 27
5.1	Ürik asidin beş farklı totomer yapısı..... 31
5.2	Ürik asit molekülü. .... 33
5.3	146 kodlu etkileşim sonucu bağ uzunlukları. .... 35
5.4	147 kodlu etkileşim sonucu bağ uzunlukları. .... 36
5.5	156 kodlu etkileşim sonucu bağ uzunlukları. .... 37
5.6	168 kodlu etkileşim sonucu bağ uzunlukları. .... 38
5.7	169 kodlu etkileşim sonucu bağ uzunlukları. .... 39
5.8	Ürik asit ve 5 su molekülünün etkileşim sonucu bağ uzunlukları. .... 40
5.9	UA için (a) HOMO, (b) LUMO gösterimi. .... 45
5.10	146 kodlu etkileşim için (a) HOMO, (b) LUMO gösterimi. .... 45
5.11	147 kodlu etkileşim için (a) HOMO, (b) LUMO gösterimi. .... 45
5.12	156 kodlu etkileşim için (a) HOMO, (b) LUMO gösterimi. .... 46
5.13	168 kodlu etkileşim için (a) HOMO, (b) LUMO gösterimi. .... 46
5.14	169 kodlu etkileşim için (a) HOMO, (b) LUMO gösterimi. .... 46
5.15	Katı haldeki UA molekülü için çektiğimiz deneysel kızılötesi spektrumu. .... 48
5.16	UA molekülünün NIST'ten alınan kızılötesi spektrumu ..... 49
5.17	UA molekülünün hesaplanan kızılötesi spektrumu. .... 49
5.18	UA için deneysel ve hesaplanan kızılötesi dalgasayısı değerlerinin korelasyon grafiği..... 50
5.19	UA için çektiğimiz kızılötesi spektrumunun deneysel ve hesaplanan değerlerinin korelasyonunun doğrusalığa uydurulması. .... 50

## ŞEKİLLER DİZİNİ (devam ediyor)

<u>No</u>	<u>Sayfa</u>
5.20 UA için NIST'ten alınan kızılötesi spektrumun deneysel ve hesaplanan değerlerinin korelasyonunun doğrusalığa uydurulması. ....	51
5.21 UA için Majoube ve Vergoten'nin çektiği kızılötesi spektrumun deneysel ve hesaplanan değerlerinin korelasyonunun doğrusalığa uydurulması. ....	51
5.22 146 kodlu etkileşimin, ürik asidin ve suyun ayrı ayrı kızılötesi spektrumu. ....	53
5.23 146 kodlu etkileşimin, ürik asidin ve suyun aynı şiddet ve frekans eksenlerinde kızılötesi spektrumunun gösterimi. ....	54
5.24 147 kodlu etkileşimin, ürik asidin ve suyun ayrı ayrı kızılötesi spektrumu. ....	59
5.25 147 kodlu etkileşimin, ürik asidin ve suyun aynı şiddet ve frekans eksenlerinde kızılötesi spektrumunun gösterimi. ....	60
5.26 156 kodlu etkileşimin, ürik asidin ve suyun ayrı ayrı kızılötesi spektrumu. ....	66
5.27 156 kodlu etkileşimin, ürik asidin ve suyun aynı şiddet ve frekans eksenlerinde kızılötesi spektrumunun gösterimi. ....	67
5.28 168 kodlu etkileşimin, ürik asidin ve suyun ayrı ayrı kızılötesi spektrumu. ....	71
5.29 168 kodlu etkileşimin, ürik asidin ve suyun aynı şiddet ve frekans eksenlerinde kızılötesi spektrumunun gösterimi. ....	72
5.30 169 kodlu etkileşimin, ürik asidin ve suyun ayrı ayrı kızılötesi spektrumu. ....	76
5.31 169 kodlu etkileşimin, ürik asidin ve suyun aynı şiddet ve frekans eksenlerinde kızılötesi spektrumunun gösterimi. ....	77
5.32 UA ve 5 su etkileşiminin, ürik asidin ve 5 suyun ayrı ayrı kızılötesi spektrumu. ....	82
6.1 Askorbik asidin beş farklı izomer yapısı. ....	95
6.2 Askorbik asit molekülü. ....	96
6.3 H8 kodlu etkileşim sonucu bağ uzunlukları. ....	98
6.4 H10 kodlu etkileşim sonucu bağ uzunlukları. ....	99
6.5 H15 kodlu etkileşim sonucu bağ uzunlukları. ....	100
6.6 H20 kodlu etkileşim sonucu bağ uzunlukları. ....	101
6.7 AA ve 5 su molekülünün aynı anda etkileşim sonucu bağ uzunlukları. ....	102
6.8 AA için (a) HOMO, (b) LUMO gösterimi. ....	107
6.9 H8 kodlu etkileşim için (a) HOMO, (b) LUMO gösterimi. ....	107
6.10 H10 kodlu etkileşim için (a) HOMO, (b) LUMO gösterimi. ....	107
6.11 H10 kodlu etkileşim için (a) HOMO, (b) LUMO gösterimi. ....	108
6.12 H10 kodlu etkileşim için (a) HOMO, (b) LUMO gösterimi. ....	108
6.13 Katı haldeki AA molekülünün için çektiğimiz deneysel kızılötesi spektrumu. ....	109
6.14 AA molekülünün (Yadav et al., 2011)'dan alınan kızılötesi spektrumu. ....	110
6.15 AA molekülünün hesaplanan kızılötesi spektrumu. ....	110

## ŞEKİLLER DİZİNİ (devam ediyor)

<u>No</u>	<u>Sayfa</u>
6.16 AA için deneysel ve hesaplanan kızılötesi dalgasayısı değerlerinin korelasyon grafiği.....	111
6.17 AA için çektiğimiz kızılötesi spektrumunun deneysel ve hesaplanan değerlerinin korelasyonunun doğrusallığa uydurulması.....	111
6.18 AA için Bichara ve arkadaşlarının yaptığı çalışmadan alınan kızılötesi spektrumun deneysel ve hesaplanan değerlerinin korelasyonunun doğrusallığa uydurulması.....	112
6.19 AA için Yadav ve arkadaşlarının yaptığı çalışmadan alınan kızılötesi spektrumun deneysel ve hesaplanan değerlerinin korelasyonunun doğrusallığa uydurulması.....	112
6.20 H8 kodlu etkileşimin, askorbik asidin ve suyun ayrı ayrı kızılötesi spektrumu.....	114
6.21 H8 kodlu etkileşimin, askorbik asidin ve suyun aynı şiddet ve frekans eksenlerinde kızılötesi spektrumunun gösterimi.....	115
6.22 H10 kodlu etkileşimin, askorbik asidin ve suyun ayrı ayrı kızılötesi spektrumu.....	119
6.23 H10 kodlu etkileşimin, askorbik asidin ve suyun aynı şiddet ve frekans eksenlerinde kızılötesi spektrumunun gösterimi.....	120
6.24 H15 kodlu etkileşimin, askorbik asidin ve suyun ayrı ayrı kızılötesi spektrumu.....	125
6.25 H15 kodlu etkileşimin, askorbik asidin ve suyun aynı şiddet ve frekans eksenlerinde kızılötesi spektrumunun gösterimi.....	126
6.26 H20 kodlu etkileşimin, askorbik asidin ve suyun ayrı ayrı kızılötesi spektrumu.....	128
6.27 H20 kodlu etkileşimin, askorbik asidin ve suyun aynı şiddet ve frekans eksenlerinde kızılötesi spektrumunun gösterimi.....	129
6.28 AA ve 5 su etkileşiminin, ürik asidin ve suyun ayrı ayrı kızılötesi spektrumu.....	134
6.29 AA ve 5 su etkileşiminin, ürik asidin ve suyun aynı şiddet ve frekans eksenlerinde kızılötesi spektrumunun gösterimi.....	135





## ÇİZELGELER DİZİNİ

<u>No</u>		<u>Sayfa</u>
4.1	Çok kutuplu etkileşim potansiyel enerjileri .....	26
5.1	Ürik asidin beş farklı totomerinin optimize enerjileri ve dipol momentleri. ....	30
5.2	Ürik asit molekülünün farklı uçlarındaki PA ve DPE değerleri. ....	33
5.3	Ürik asit molekülünün farklı uçlarından bağlanan su molekülü ile yaptığı hidrojen bağ enerji değerleri. ....	34
5.4	146 kodlu etkileşimin yük ve elektriksel potansiyelinin değişimi.....	41
5.5	147 kodlu etkileşimin yük ve elektriksel potansiyelinin değişimi.....	41
5.6	156 kodlu etkileşimin yük ve elektriksel potansiyelinin değişimi.....	42
5.7	168 kodlu etkileşimin yük ve elektriksel potansiyelinin değişimi.....	43
5.8	169 kodlu etkileşimin yük ve elektriksel potansiyelinin değişimi.....	43
5.9	UA ve 5 su molekülünün aynı anda etkileşiminin yük ve elektriksel potansiyelinin değişimi. ....	44
6.1	Askorbik asidin dört farklı izomerinin optimize enerjileri ve dipol momentleri.....	94
6.2	Askorbik asit molekülünün farklı uçlarındaki PA ve DPE değerleri.....	96
6.3	Askorbik asit molekülünün farklı uçlarından bağlanan su molekülü ile yaptığı hidrojen bağ enerji değerleri. ....	97
6.4	H8 kodlu etkileşimin yük ve elektriksel potansiyelinin değişimi. ....	103
6.5	H10 kodlu etkileşimin yük ve elektriksel potansiyelinin değişimi. ....	103
6.6	H15 kodlu etkileşimin yük ve elektriksel potansiyelinin değişimi. ....	104
6.7	H20 kodlu etkileşimin yük ve elektriksel potansiyelinin değişimi. ....	105
6.8	AA ve 5 su molekülünün aynı anda etkileşiminin yük ve elektriksel potansiyelinin değişimi. ....	106
A.1	UA ve 146 bağ ve açı değerleri .....	153
A.2	UA ve 147 bağ ve açı değerleri .....	156
A.3	UA ve 156 bağ ve açı değerleri .....	159
A.4	UA ve 168 bağ ve açı değerleri .....	162
A.5	UA ve 169 bağ ve açı değerleri .....	165
A.6	UA ve UA5 bağ ve açı değerleri.....	168
B.1	AA ve H8 bağ ve açılar.....	175
B.2	AA ve H10 bağ ve açıları .....	177

## ÇİZELGELER DİZİNİ (devam ediyor)

<u>No</u>		<u>Sayfa</u>
B.3	AA ve H15 bağ ve açıları .....	179
B.4	AA ve H20 bağ ve açıları .....	182
B.5	AA ve AA 5 su bağ ve açıları .....	184

## SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

$E_{xc}$	: Değiş tokuş Enerjisi
R	: Bağ Uzunluğu
A	: Bağlararası Aç ı
D	: Dihedral Aç ı
e	: Elektron yükü
R	: Rydberg sabiti
T	: Sıcaklık
$a_0$	: Bohr yarıçap ı

### **KISALTMALAR**

DFT	: Yoğunluk fonksiyoneli teorisi
LDA	: Yerel yoğunluk yaklaş ımı
LSDA	: Yerel Spin Yoğunluk Yaklaş ımı
KS	: Kohn-Sham
PA	: Proton İlgisi
DPE	: Deprotonasyon Entalpisi
PES	: Potansiyel Enerji Yüzeyi
APT	: Atomsal Polar Tensör
NBO	: Doğal Bağ Yörüngesi
EP	: Elektriksel Potansiyel
R	: Regresyon
SD	: Standart Sapma
NIST	: Ulusal Standartlar ve Teknoloji Enstitüsü
STO	: Slater Tipi Yörünge
GTO	: Gaussian Tipi Yörünge
DNA	: Deoksiribonükleik Asit
HF:	: Hartree-Fock
RHF	: Sınırlı Hartree-Fock
UA:	: Ürik Asit
AA:	: Askorbik Asit

## SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ (devam ediyor)

HOMO	:	En Yüksek Dolu Yörünge
LUMO	:	En Düşük Boş Yörünge
UV	:	Morötesi
B3LYP	:	Becke, Üç parametre, Lee-Yang-Parr
BLYP	:	Becke, Lee-Yang-Parr
LANL2DZ	:	Los Alamos Ulusal Laboratuvarı 2 Çift Zeta
BSSE	:	Baz Seti Süperpozisyon Hatası
ZPE	:	Sıfır Nokta Enerjisi
D95	:	Dunning-Huzinaga

## BÖLÜM 1

### GİRİŞ

Serbest radikaller bir veya daha fazla çiftlenmemiş elektronlara sahiptirler. Çiftlenmemiş elektronlu moleküller çok reaktiftirler ve genelde kısa ömürlüdürler. Canlı sistemlerde radikallerin oluşumu genelde ya oksijenle olan etkileşimden ya da çevredeki moleküllerden transfer ile olur. Radikaller kanser ve kalp rahatsızlıkları gibi ölümcül hastalıklara neden olur. Ayrıca serbest radikallerin yaşlanmaya neden oldukları rapor edilmiştir (Harman 1981, Tolmasoff et al. 1980, Totter 1980). Yine de, serbest radikallerle etkileşim, hayatın normal ve gerekli bir parçasıdır. Canlı sistemler, insan vücudu, mutojenlere, kanserojenlere ve diğer oksidatif zararlara karşı bünyesinde doğal olarak var olan antioksidanları kullanarak korumaktadır (Ames et al. 1981, Shukla and Mishra 1996).

Antioksidan ortamda bulunan oksitlenebilir maddelerden daha az konsantrasyonlarda bulunduğu zaman o maddenin oksidasyonunu erteleyen veya engelleyen maddedir. Birçok özelliğinden dolayı C vitamini ya da askorbik asit, biyolojik sistemlerde ideal antioksidandır. Özelliklerinden biri, askorbatın ve askorbil radikalinin düşük tek-elektron indirgeme potansiyeline sahip olmasıdır. Bu durum radikallerle reaksiyona girmesine ve oksijen ve azot türlerini indirgemesine olanak sağlar. Askorbik asit canlı organizmalardaki biyolojik işlemlerde hayati rol oynamaktadır. Güçlü bir antioksidan olarak, biyomolekülleri bazı yüksek kanserojen radikallere karşı korur (Higdon and Frei 2002, Shukla and Mishra 1996).

Ürik asit (UA) insanda pürin katabolizmasının son ürünüdür. Kanda yüksek konsantrasyonda bulunur ve önemli bir anti kanserojen olarak dikkate alınır (Lehninger 1982). Ürik asit yaşamda koruyucu rol oynar. DNA'yı serbest radikallerden korur (Cohen et al. 1984). Fazla UA guta neden olur (Ames 1983, Klotz 1994) ve böbrek taşı da bulunur (Grases et al. 2006, Grases et al. 2000). Ürik asit, pürinler ve primidinler arasında ozonla olan degradasyona en duyarlı olanıdır (Meadows and Smith 1986). Doymamış yağ asitlerini hava oksidasyonunda, DNA'yı süperoksit ve peroksi radikalsi üreten sistemlerde hasardan (Cohen

et al. 1984) ve askorbatı da insan kanında demir-iyon–katalizlenmiş oksidasyondan korur (Davies et al. 1986). Kristallografik çalışmalara göre, ürik asit bir çeşit mosomirik yapılarla resonans halinde, kristallerde triketo formda bulunur (Ringertz 1966). Çözeltilerde, ürik asit keto-enol totomerizması gösterir ve nötr ph'ın yakınında monoanyon olarak bulunduğu gösterilmiştir (Allen et al. 2004, Maples and Mason 1988).

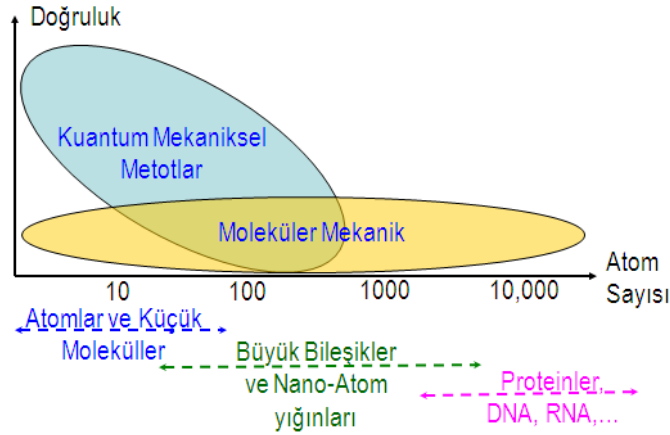
Askorik asit ve ürik asit su ile etkileştiklerinde güçlü hidrojen bağı kurabilen moleküllerdir. Bu etkileşimler sonucu sistemin yapısında ve kızılötesi spektroskopisinde değişimler gözlenir. Vücudumuza sıvı olarak aldığımızdan ve vücut içerisinde de ortamda su olduğundan antioksidan moleküllerin etkileşim mekanizmasında su ile etkileşimi önemlidir.

Yadav ve arkadaşları (Yadav et al. 2011) tarafından L askorbik asidin (L-AA) kızılötesi ve Raman spektrası  $4000-50 \text{ cm}^{-1}$  bölgesinde kaydedilmiştir. Titreşimlerin karşılıklarını bulabilmek için sınırlandırılmış Hartree-Fock (RHF) ve Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT) metotları ile moleküler geometri ve harmonik titreşimsel frekanslar L-AA, L-AA<sup>-</sup> ve L-AA<sup>+</sup> için yapılmıştır. Mora ve Melendez (Mora and Melendez 1998) de AA'nın 36 konformasyonu için RHF ve Moller-Plasset-2 (MP2) metotlarını kullanarak hesaplamalar yapmıştır. Bu çalışma sonucu B tipi kristal yapı gaz fazında L-AA molekül yapısına en yakın yapı olarak bulunmuştur. Dimitrova (Dimitrova 2006) L-AA'nın titreşimsel frekanslarını DFT metotlarını kullanarak hesaplamıştır ve hesaplama frekansları deneysel değerler kullanılarak ilişkilendirmiştir.

Ürik asidin totemerik yapıları kuantum kimyasal olarak birçok çalışmada incelenmiştir (Demir et al. 2004, Jimenez and Alderete 2005, Raczynska et al. 2010). Ürik asidin su molekülü ile olan etkileşimi Chandra (Chandra and Zeegers-Huyskens 2007) tarafından incelenmiş ve beş farklı yönden su ile yaptığı hidrojen bağları teker teker incelenmiştir. Kuantum kimyasal olarak kızılötesi spektroskopisi, proton afinitesi, deprotonasyon entalpisi ve molekül yapısındaki değişimler, bağ uzunluklarına ve açılara bakılarak incelenmiştir.

Kuantum kimyasal hesaplamalar yapılarak, atomlar ve küçük moleküller için kuantum yaklaşıklıkları kullanarak doğruya daha yakın sonuçlar elde edilebilir (Şekil 1.1). Sistemin enerji, yapı ve özellikleri; Verilen bir geometrinin enerjisi nedir? Geometri değişimiyle enerji nasıl değişir? Hangi geometriler karardır? Atomlar yeni molekülleri oluşturmak için nasıl

konuslanırlar? Dışarıdan müdahalelerde enerji nasıl değişir? Yapı, enerji ve özellikler zamanla nasıl değişir? Gibi sorulara yanıt bulmak için incelenir (Moors et al. 2009).



Şekil 1.1 Kuantum mekaniksel Metotlarla Moleküler Mekaniksel metotların doğruluk bölgeleri (URL-1 2011).

Bu çalışmada, ürik asit ve en kararlı askorbik asidin su molekülleri ile etkileşimleri kuantum kimyasal olarak incelenmiştir. Bu etkileşimler su molekülleri ile hidrojen bağı yapabilecek uçlarından teker teker ve aynı anda hepsi etkileştirilerek optimize edilmesiyle ele alınmıştır. Bu etkileşim sonucu en kuvvetli hidrojen bağı tespiti, yapılardaki bozulmaların bağı uzunlukları ve açılarına bakılarak tespiti, kızılötesi spektrometresindeki kaymalar, yük dağılımlarındaki değişiklikler, en yüksek dolu moleküler yörünge (HOMO), en düşük boş moleküler yörünge (LUMO) hesaplamaları G09 (M J Frisch et al. 2009) programı ve Gaussview 5 programı kullanılarak incelenmiştir. Modellemede yoğunluk fonksiyoneli teorisi kullanılarak B3LYP (Kohn et al. 1996) seviyesinde 6-31++G(d,p), 6-31+G(d,p) 6-311++G(d,p) baz seti ile en kararlı yapılar elde edilmeye çalışılmıştır. En düşük enerjili yapılar 6-311++G(d,p) baz seti ile elde edildiği için etkileşimler bu baz seti ile incelenmiştir.

İkinci bölümde titreşim spektrometresi ile ilgili teorik bilgi verilmiştir. Etkileşim sonrası kızılötesi spektrumdaki değişiklikler molekülün normal titreşim kiplerinde nasıl bir değişikliğe sebep olduğu önemli olduğundan, bu çalışmada kızılötesi spektrumunun analizlerine yer verilmiştir.

Üçüncü bölümde kullanılan hesaplama yöntemlerinin teorisi ve programların özellikleri anlatılmıştır. Hesaplama süresi diğer yöntemlere göre daha kısa olan ve daha doğru sonuçlar



veren yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT)'den bahsedilmiş ve bu çalışmada kullanılan Gaussian 09 programı hakkında da bilgi verilmiştir.

Dördüncü bölümde moleküler etkileşimlerin en kuvvetlisi olan hidrojen bağından bahsedilmiştir.

Beşinci bölümünde ürik asidin en kararlı yapısının hangisi olduğuna karar verilip o yapı incelenmiştir. En kararlı yapının proton alma ve proton verme eğilimleri hesaplanarak hangi ucunun daha asidik veya bazik olduğuna karar verilmiştir. Böylece elde edilen sonuçlardan yararlanılarak su molekülü ile daha fazla etkileşebileceği taraf önceden kestirilmeye çalışılmıştır. Burada hidrojen bağının hangi uçtan daha kuvvetli olduğunu belirleyen ana faktör asitliliğe bağlıdır (Chandra and Zeegers-Huyskens 2007). Daha sonra ürik asidin asidik ve bazik beş farklı yerine su molekülleri yerleştirilip sistem optimize edilmiştir. Hidrojen bağ enerjileri ve uzunlukları karşılaştırılmıştır. Molekülün bu beş farklı asidik ve bazik konumuna 5 su molekülünü aynı anda bağlayarak da sistem optimize edilmiştir. Bu optimize edilen sistemlerin bağ uzunluklarındaki, bağ açılarındaki, dihedral açılarındaki, yük dağılımlarındaki, elektriksel potansiyel dağılımlarındaki, kızılötesi spektrumlarındaki ve en yüksek dolu moleküler yörüngeleri (HOMO) ve en düşük boş moleküler yörüngelerindeki (LUMO) değişikliklerin analizi yapılmıştır.

Altıncı bölümde de askorbik asidin en kararlı yapısının hangisi olduğuna karar verilmiştir. En kararlı yapının proton alma ve proton verme eğilimleri hesaplanarak hangi ucunun daha asidik ve ya bazik olduğuna karar verilmiştir. Dolayısıyla su molekülü ile daha fazla etkileşebileceği taraf önceden kestirilmeye çalışılmıştır. Daha sonra askorbik asidin asidik ve bazik beş farklı yerine su molekülleri yerleştirilip sistem optimize edilmiştir. Bu beş farklı konumdan ikisi optimizasyon sonucu H8 kodu ile ifade ettiğimiz etkileşim ile aynı yapıyı verdiği için toplam 4 farklı konumdan etkileşim incelenmiştir. Hidrojen bağ enerjileri ve uzunlukları karşılaştırılmıştır. Molekülün bu beş farklı asidik ve bazik konumuna 5 su molekülünü aynı anda bağlayarak da sistem optimize edilmiştir. Bu optimize edilen sistemlerin bağ uzunluklarındaki, bağ açılarındaki, dihedral açılarındaki, yük dağılımlarındaki, elektriksel potansiyel dağılımlarındaki, kızılötesi spektrumlarındaki ve en yüksek dolu moleküler yörüngeleri (HOMO) ve en düşük boş moleküler yörüngelerindeki (LUMO) değişikliklerin analizi yapılmıştır.

Yedinci bölümde bu etkileşimlerin analiz sonuçları verilerek ve bu farklı analizlerin sonucunda en belirgin değişimler su molekülünün hangi tarafından etkileşimi ile meydana geldiği belirlenmiştir.



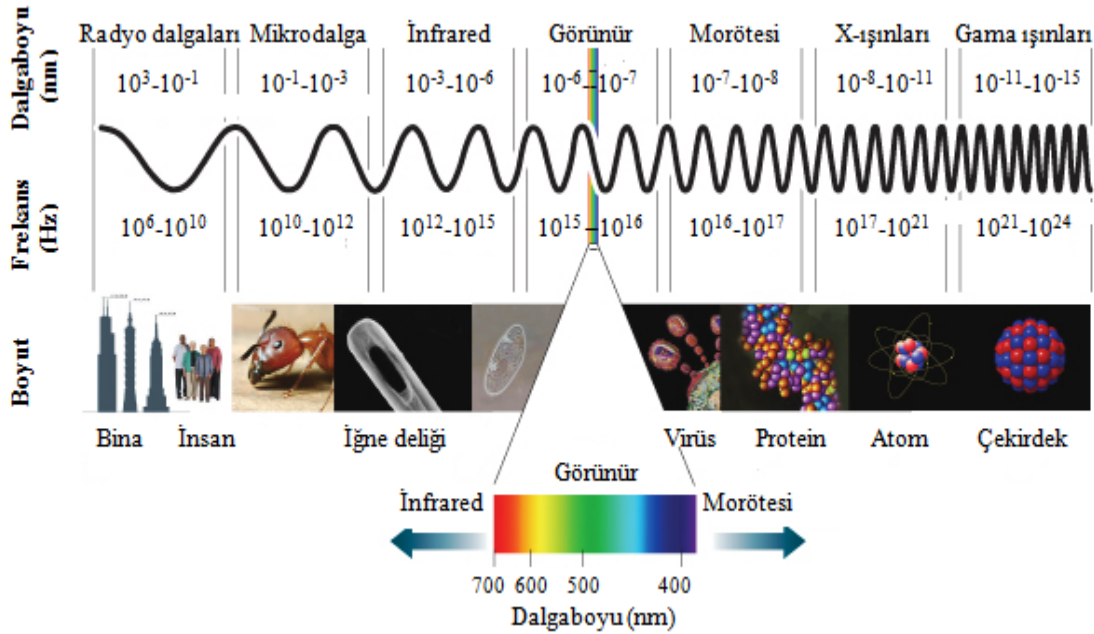
## BÖLÜM 2

### TİTREŞİM SPEKTROSKOPİSİ

Radyo frekansı, mikrodalga, kızılötesi, görünür spektrum bölgesi, mor altı bölgesi, X-ışınları bölgesi ve oldukça kısa dalga boylu gama radyasyonuna kadar uzanan geniş bir bölgedeki bütün dalga boyları içinde olacak şekilde elektromanyetik radyasyonu kullanarak yapılan spektroskopik yaklaşımlar, molekül fiziğinin en önemli deneysel bilgi kaynağı olmaktadır.

#### 2.1 SPEKTRAL BÖLGELER

Şekil 2.1'de elektromanyetik spektrumdaki değişik spektrum bölgelerinin kısa bir özeti verilmiştir.



Şekil 2.1 Frekans ve dalga boyu birimlerinde radyo frekans, bölgesinden gama radyasyonuna kadar elektromanyetik radyasyon spektrumu (Başköşe 2011).

Radyo frekans bölgesinde, yani birkaç kHz'den birkaç yüz MHz'e kadar olan bölgede nükleer rezonans geçişleri gözlenebilir.

Mikrodalga terimi 1 ile 100 GHz'lik bir aralıkta bulunan elektromanyetik dalgalardır. Bu, elektron spin rezonans spektrumunun bölgesidir. Uzun dalga boyu parçası, yani uzak kızıl ötesi bölge ( $\lambda = 0.1-1$  mm) dönme spektrumlarını uyarmada, kısa dalga boyu ucu (yakın kızıl ötesi,  $\lambda = 10^{-3}-10^{-1}$  mm) moleküllerin karakteristik titreşim spektrumlarının gözlemlenmesinde kullanılır.

Morötesi (UV) spektrum bölgesinde, moleküllerin bant yapısı, yani üst üste düşmüş dönme ve titreşim geçişleriyle elektronik geçişlerini içeren spektrumlar gözlenmektedir.

Mor altı bölgenin kısa dalga boyu ucunun daha ötesinde ve onunla üst üste düşebilecek bir X-ışını bölgesi ve daha altında  $\gamma$  radyasyonu bölgesi bulunmaktadır. Böyle yüksek kuantum enerjili radyasyonla, iç kabuklardaki elektronların geçişleri ve içinde buldukları haller, özellikle fotoelektron spektroskopisiyle incelenebilmektedir.

Radyasyonun frekans ve dalga boyunu ölçmede kullanılan birimler aşağıda verilmiştir.

$$1\text{cm}^{-1}=29,979\text{GHz}=1,2398\times 10^{-4}\text{ eV}$$

$$1\frac{\text{kcal}}{\text{kmol}}=0,349\text{cm}^{-1} \quad (2.1)$$

Enerji genelde  $[\text{cm}^{-1}]$  ya da  $[\text{m}^{-1}]$  birimlerinden birinde ölçülür.  $\bar{\nu}$  ya da dalga sayısı,

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{\text{enerji}}{hc} [\text{cm}^{-1}] \quad (2.2)$$

bağıntısıyla tanımlanır. Frekans birimi ise

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{\text{enerji}}{h} [\text{s}^{-1}] \quad (2.3)$$

şeklinde ifade edilir. Enerji bunlardan başka  $\hbar\omega$ , yani  $(h/2\pi)2\pi\nu$  şeklinde ifade edilir (Haken and Wolf 2004).

## 2.2 KIZILÖTESİ SPEKTROSKOPİSİ

Molekülleri oluşturan atomlar sürekli bir hareket içinde olduklarından, molekülün öteleme hareketleri, bir eksen etrafında dönme hareketleri ve bir bağın uzunluğunun periyodik olarak azalıp çoğalmasına veya moleküldeki açıların periyodik olarak değişmesine neden olan titreşim hareketleri meydana gelir. Bir atomun bir yöne doğru olan hareketini x, y, z koordinatları boyunca oluşturulacak, vektörel bileşenlere ayırmak mümkündür. Molekülde n tane atom bulunduğunda, bu bileşenlerin sayısı da 3n tane olur. Molekülün bir yönden bir yöne hareketi, yani öteleme hareketi de vektör gösteriminde x, y, z eksenleri boyunca üç bileşene ayrılabilmesi için, atomların toplam hareket serbestliğinden üç tanesi molekülün öteleme hareketini belirler. Atomların toplam hareket serbestliğinden üç tanesi ise, molekülün x, y, z eksenleri etrafındaki periyodik dönme hareketlerine karşı gelir. Doğrusal moleküllerde, molekül eksenini etrafındaki dönmenin, molekülün tümünün yer değiştirmesi açısından bir anlamı olmayacağı için, sadece öteki iki eksen etrafındaki dönmeler önemlidir. Buna göre moleküllerde bulunan n tane atomun 3n hareket serbestliğinden dönme ve öteleme hareketlerinden geriye kalan,  $3n - (3 + 3) = 3n - 6$  veya doğrusal moleküller için  $3n - (3 + 2) = 3n - 5$  tanesi molekülün çeşitli tür titreşim hareketlerine aittir. Bu titreşimler sırasında atom veya atom grupları birbirine çok yakın konumlara geldiğinde bunlardaki elektronlar birbirini iter ve böylece titreşim hareketinin yönü terse çevrilir. Atom veya atom grupları birbirinden çok fazla uzak konumlarda da bulunamazlar, çünkü bu durumda bunları bir arada tutan ve değerlik elektronlarının ortak kullanılması sonucu oluşan kimyasal bağlar kopar. Moleküllerde atom veya atom gruplarını bir arada tutarak molekülü kararlı kılan bu bağ kuvvetlerinin etkisi ile de titreşim hareketinin kendine özgü bir frekansı vardır ve bu frekans

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \left( \frac{k}{\mu} \right)^{1/2} \quad (2.4)$$

eşitliği ile verilir. Burada k titreşimin din/cm cinsinden kuvvet sabiti,  $\mu$  ise bağın ucundaki atom veya atom gruplarının kütleleri ( $m_1$  ve  $m_2$ ) ile

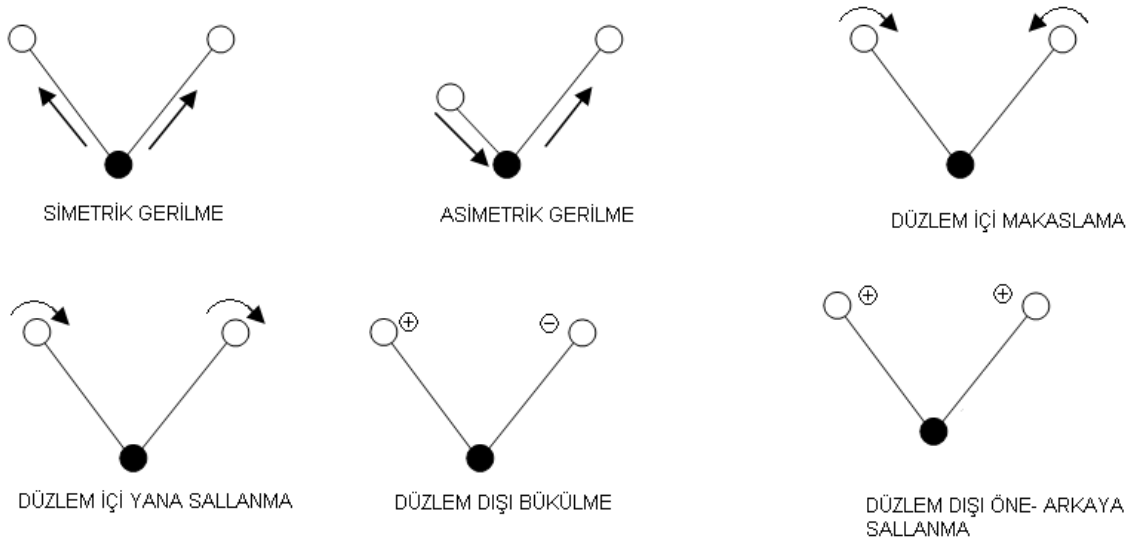
$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \quad (2.5)$$

ilişkisi içinde bulunan ve indirgenmiş kütle adı verilen bir niceliktir. Titreşim hareketlerinin periyodikliği, frekans yerine çoğu kez birimi  $\text{cm}^{-1}$  olan dalgasayısı,  $\bar{\nu}$ , ile belirlenir ve

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{2\pi c} \left( \frac{k}{\mu} \right)^{1/2} \quad (2.6)$$

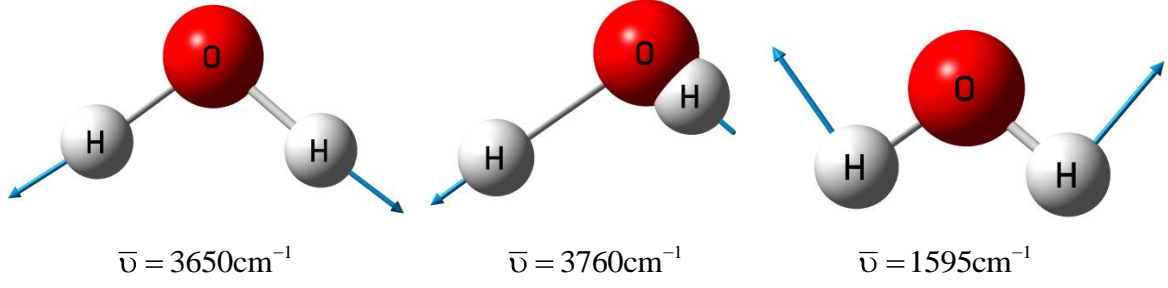
ilişkisi geçerli olur.

Moleküllerde ortaya çıkan titreşimler gerilme ve eğilme hareketleri oluşturur. Eğilme titreşimlerinin kuvvet sabitleri gerilme titreşimlerine göre çok daha küçüktür. Bir molekülde gerilme (simetrik ve asimetric), düzlem içi eğilme (makaslama ve yana sallanma), düzlem dışı eğilme (bükülme ve öne arkaya sallama) hareketleri Şekil 2.2’de gösterilmiştir.



Şekil 2.2 Bir molekülde gerilme (simetrik ve asimetric), düzlem içi eğilme (makaslama ve yana sallanma), düzlem dışı eğilme (bükülme ve öne arkaya sallama) hareketleri. Bu gösterimde (+), kağıt düzleminde öne doğru, (-) ise, arkaya doğru hareket anlamındadır ve periyodik hareketin sadece yarısı çizilmiştir.

Moleküllerde bu hareketin hepsi birden oluşmayabilir. Örneğin su molekülünde,  $(3 \times 3 - 6) = 3$  titreşim hareketi mümkün olup bunlar Şekil 2.3’de gösterilmiştir.



Şekil 2.3 Su molekülünde mümkün olan simetrik gerilme, asimetrik gerilme ve makaslama titreşim hareketleri.

Bu titreşimlerin her birinin titreşim frekansı ayrı değerlere sahiptir. Su için simetrik gerilme titreşiminin dalgasayısı  $3650\text{ cm}^{-1}$ , asimetrik gerilme titreşiminin dalgasayısı  $3760\text{ cm}^{-1}$  ve makaslama titreşiminin dalgasayısı  $1595\text{ cm}^{-1}$  dir.

Her bir tür titreşim hareketinin enerjisi ancak belirli değerler alabilir, yani titreşim enerjileri de elektronik enerjiler gibi kuantlaşmıştır. Enerjileri

$$E = \left( n + \frac{1}{2} \right) h\nu \quad n=0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.7)$$

ile gösterilen bu kuantalanmış enerji düzeyleri arasında, uygun frekanstaki foton soğurması sonucu,  $\Delta n = \pm 1$  seçim kuralına uygun geçişler olabilir. Eşitlikte  $\nu$  titreşimin kendi frekansı,  $n$  ise titreşim kuantum sayısıdır.  $n=0$  ve  $n=1$  titreşim sayıları ile belirtilen iki enerji düzeyi arasındaki enerji farkı,  $\Delta E$ ,

$$\Delta E = E_1 - E_0 = \frac{3}{2} h\nu - \frac{1}{2} h\nu = h\nu \quad (2.8)$$

eşitliği ile verilir.  $n=0$  titreşim düzeyinde bulunan ve  $\nu$  frekansı ile titreşmekte olan bir molekülü  $n=1$  ile belirlenen titreşim düzeyine çıkarmak, yani titreşim enerjisini arttırmak için bu molekülü titreşim frekansına eşit frekansa sahip bir foton ile etkileştirmek gerekir.

Foton soğurumunun gerçekleşmesi için bir başka koşul da titreşim hareketi sırasında soğurma bandının şiddeti, titreşim sırasında oluşan dipol momenti değişmesinin hızının karesiyle orantılı olmasıdır.  $\text{H}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$  gibi iki atomlu moleküllerin gerilme titreşimleri,  $\text{C}_2\text{H}_2$ , gibi



simetri merkezi olan moleküllerin simetrik gerilme titreşimleri sırasında molekülün yük dağılımı yani dipol momenti değişmez. Bu yüzden, bu tür moleküllerin bahsedilen titreşim enerjilerini moleküle uygun enerjili fotonlar soğurtarak değiştirmek mümkün değildir.

Moleküllerde yukarıda belirtilen koşullara uyulduğu takdirde titreşim enerji düzeyleri arasındaki geçişleri gerçekleştirecek fotonlar, elektromanyetik ışımının kızılötesi bölgesinde yer alırlar. Genellikle, moleküllerdeki titreşimlerin frekanslarına uyan kızılötesi fotonlarının dalga sayıları  $4000 \text{ cm}^{-1}$  ile  $650 \text{ cm}^{-1}$  arasındadır. Bu değerler  $2.5 \text{ }\mu\text{m}$  ile  $15 \text{ }\mu\text{m}$  dalga boylarına karşı gelir. Enerjisi normal kızılötesi ışınlarından daha fazla olan ışınları kapsayan  $12500 \text{ cm}^{-1}$  ( $0.8 \text{ }\mu\text{m}$ ) ile  $4000 \text{ cm}^{-1}$  ( $2.5 \text{ }\mu\text{m}$ ) arasındaki bölgeye yakın kızılötesi bölgesi denir. Enerjisi daha az olan ışınların oluşturduğu  $650 \text{ cm}^{-1}$  ( $15 \text{ }\mu\text{m}$ ) ile  $25 \text{ cm}^{-1}$  ( $400 \text{ }\mu\text{m}$ ) arasındaki bölgeye ise uzak kızılötesi bölge adı verilir.

Kızılötesi bölgesindeki geçişlerde  $\Delta n = \pm 1$  seçim kuralları ideal koşullarda tam harmonik bir salınım yapan sistem için geçerlidir. Bu geçişlere ana tonlar denir. Titreşen moleküllerde harmoniklikten sapmalar da olabilir ve bu yüzden bazen az bir olasılıkla  $\Delta n = 2$  veya  $\Delta n = 3$  gibi geçişler de gerçekleşebilir. Bu geçişlere üst tonlar adı verilir. Bazen de bir fotonla iki ayrı titreşimi birden uyarmak (birleşik ton) veya bir titreşimin enerjisini artırırken ötekinin enerjisini azaltmak (fark tonu) mümkündür. Birleşik ve fark tonlarının gerçekleşme olasılıkları ana tonlara göre çok azdır. Üst tonlar için ana tonun frekansının katlarına eşit frekanslarda ( $2\nu_1$ ,  $3\nu_1$ ), birleşik tonlar için ana tonların frekanslarının toplamı olan frekanslarda ( $\nu_1 + \nu_2$ ) ve fark tonları için ana tonların frekanslarının farkına karşı gelen frekanslarda ( $\nu_1 - \nu_2$ ) fotonlar göndermek gerekir. Üst tonlar ve birleşik tonlar için daha fazla enerjili fotonlar gerektiğinden bu geçişlere yakın kızılötesi bölgesinde rastlanır. Üst, birleşik ve fark tonlarında bu geçişlerin gözlenmesi nedeni ile  $3n-6$  (veya doğrusal moleküller için  $3n-5$ ) tane olarak belirlenen soğurma bandı sayısı beklenenden daha fazla çıkabilir. Öte yandan, beklenen sayıdan daha az sayıda band gözlenmesi de mümkündür. Örneğin, simetrik moleküllerde her titreşim kızılötesi bölgesinde gözlenmeyebilir veya simetri nedeniyle bazı titreşimlerin frekansları birbirine eşit olabilir ve birkaç titreşim aynı dalga sayısında gözlenebilir.

Su molekülü için 3 tür titreşim söz konusudur. Su, simetri merkezi olan bir molekül olmadığı için, bu hareketlerin tümü periyodik bir dipol momenti değişikliği ile elele gider. Gerçekten

suyun her üç titreşimi de kızılötesi aktif olup bunlar spektrumda  $3650\text{ cm}^{-1}$ ,  $3760\text{ cm}^{-1}$  ve  $1595\text{ cm}^{-1}$  de gözlenirler.

Uygun enerjili kızılötesi fotonunu absorplayarak titreşim geçişini gerçekleştirmesi sırasında, molekülün dönme enerjileri de değişebilir. Bu nedenle kızılötesi bandları, elektronik geçiş bantları kadar olmamakla beraber, belli bir genişliğe sahiptir. Bu yüzden birbirine yakın frekanslara düşen komşu bantlar bazen birbiri ile örtüşebilir. Bazı geçişler ise doğal olarak çok düşük absorpsiyon katsayılarına sahiptir. Bazen de gözlenmesi gereken bandın frekansı, kullanılan aletin dalgaboyu sınırları dışında kalabilir. Bütün bu nedenlerle, molekülün titreşimlerinin bir kısmına karşı gelen absorpsiyon bandlarının sayısı beklenenden az olabilir. Fonksiyonel grup bölgesinde karşılaşılan bandların frekansları molekülden moleküle fazla değişmemekle birlikte, bu değerleri belli bir miktarda değiştiren etkiler vardır. Çizelge 2.1’de, bazı titreşimler için gözlenen ve şiddeti oldukça yüksek olan bazı bandların dalgasayısı aralıkları verilmiştir.

Çizelge 2.1 Bazı titreşim türlerinin kızılötesi bölgesinde gözlenebilme aralıkları.

Titreşim türü	Dalgasayısı aralığı, $\text{cm}^{-1}$
C- H gerilme	2700-3300
C-H eğilme	1300-1500
O-H gerilme	3000-3700
O-H gerilme (üst ton)	6700-7100 (yakın IR)
N-H gerilme	3000-3700
N-H gerilme (üst ton)	6300-7100 (yakın IR)
N-H eğilme	700-900
C-O gerilme	900-1300
C-N gerilme	900-1300
C=C gerilme	1600-1700
C=O gerilme	1600-1900
C=N gerilme	1600-1700
C≡C gerilme	2100-2400
C≡N gerilme	2100-2400
C-F gerilme	1000-1350
C-Cl gerilme	710-770
C-Br gerilme	500-670 (uzak IR)
C-I gerilme	480-600 (uzak IR)

Bir molekülde rezonans söz konusu olduğu zaman ikili bağın bağ derecesi azalır, tekli bağın bağ derecesi ise artar. Rezonansın söz konusu olduğu durumlarda ikili bağa ait bandın dalgasayısı  $30\text{ cm}^{-1}$  kadar azalırken, tekli bağa ait bandın dalgasayısı bir miktar artar. Molekülde konjugasyonun artması bazı gruplara ait titreşim frekanslarını değiştirir. Örneğin,

C=C ve C=O gerilme titreşimlerine ait frekans değerleri, molekülde bu gruplara komşu çift bağlar bulunuyorsa, daha küçük değerlere kayar. Bu gruplara komşu elektron çekici veya elektron itici gruplar varsa, grubun titreşim frekansı sırasıyla daha büyük veya daha küçük değerlere kayar.

Halkalı bileşiklerde C=O grubunun gerilme titreşiminin frekansını etkileyen bir başka faktör ise, halkadaki karbon atomu sayısıdır. Bu tür bileşiklerde halkadaki karbon atomu sayısının artması ile C=O gerilme titreşiminin frekansı daha küçük değerlere kayar.

Titreşim frekansını etkileyen bir başka olay ise, moleküllerdeki hidrojen bağlarıdır. Alkol, fenol veya amin türü moleküllerde sık karşılaşılan hidrojen bağlarının varlığı, O-H ve N-H gerilme titreşimi frekanslarının daha küçük değerlere kaymasına ve aynı zamanda bantların genişlemesine yol açar. Bu bağı yapabilen moleküllerin çözündüğü çözücünün polarlığının artması ile bu etki daha belirgin olarak gözlenir. Molekül içi hidrojen bağları incelenen molekülün derişiminden pek etkilenmez, moleküller arası hidrojen bağları incelenen molekülün derişimine bağlıdır.

Kızılötesi bölgesinin  $1300\text{cm}^{-1}$ -  $650\text{cm}^{-1}$  arasındaki frekans aralığında gözlenen bantlar fonksiyonel grup bölgesindeki bantların aksine, molekülün yapısından çok etkilenir. Bu bölgedeki bantların tümü incelenen moleküle özgüdür ve bu nedenle bu bölgeye molekülün *parmak izi bölgesi* adı verilir (Yıldız et al. 1997).

## BÖLÜM 3

### MOLEKÜLER MODELLEME YÖNTEMLERİ

#### 3.1 YOĞUNLUK FONKSİYONELİ TEORİSİ

Hartree Fock (HF) yaklaşımı kullanan ab-initio yöntemlerinde HF denklemleri, konfigürasyon durum fonksiyonlarını oluşturmak için kullanılan spin yörüngeleri bulmak için çözülür. Fakat bu yöntemlerle çok atom ve elektron içeren moleküller için büyük temel setleri kullanarak kesin hesap yapmak zordur.

HF yöntemlerine alternatif olarak, yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) elektron olasılık yoğunluğu kavramı ile başlar. DFT'nin popüler olmasındaki diğer bir sebep de elektron ilgileşimini hesaba katarken daha az sürede hesap yapılabilmesidir. HF metotlarından daha kısa zamanda 100 ve daha fazla atomlu moleküller için hesaplamaları yapabilmektedir. D-blok metalleri içeren sistemler için, DFT, HF metotlarına göre deneysel değerlere daha yakın sonuçlar verir.

DFT'nin arkasındaki temel fikir bir elektronun sistemin enerjisini, elektron olasılık yoğunluğu  $\rho$ , cinsinden yazılabilesidir. N elektronlu bir sistem için,  $\rho(\vec{r})$  uzayda herhangi bir  $\vec{r}$  noktasındaki toplam elektron yoğunluğunu ifade eder. Elektronik enerji, E, elektron yoğunluğunun fonksiyonelleridir ve  $E(\rho)$  ile ifade edilir ve verilen  $\rho(\vec{r})$  fonksiyonuna karşılık tekil bir enerji vardır (Atkins and Friedman 1997, Kohn et al. 1996, Parr 1989).

##### 3.1.1 Kohn-Sham yörüngeleri ve denklemleri

Enerji için yoğunluk fonksiyoneli kavramı daha eski ama kullanışlı yaklaşıklık yöntemlerinin temelini oluşturur. Bu yöntemler Thomas-Fermi (1920'lerde E. Fermi ve L.U. Thomas tarafından ortaya atıldı) ve Hartree-Fock-Slater ya da  $X_\alpha$  metodu (J.C. Slater'ın 1950'lerdeki çalışmalarından ortaya atılmıştır) olarak sıralanabilir. Fakat resmi olarak ispatı 1964'lerde D.

Hohenberg ve W. Kohn tarafından yapılmıştır (Hohenberg and Kohn 1964). Hohenberg ve Kohn temel-seviye enerji ve diğer bütün temel-seviye elektronik özellikleri tek bir elektron yoğunluğu ile tanımlamıştır. Fakat Hohenberg-Kohn teoremi enerjinin yoğunluğa fonksiyonel bağlılığının yapısını belirtmez, sadece böyle bir fonksiyonelin varlığını ispatlanmıştır. DFT'nin gelişimindeki bir sonraki büyük adım, elektron yoğunluğu  $\rho$ 'un elde edilebileceği, bir takım bir-elektron denklemlerinin türetilmesiyle olmuştur (Kohn and Sham 1965).

Çiftlenmiş elektronların aynı uzaysal bir-elektron yörüngeleri ile tanımlandığı sistemler dikkate alındığında (sınırlandırılmış Hartree Fock teorisinde olduğu gibi),  $j_0 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$  olmak üzere, Kohn ve Sham'ın gösterimine göre, bir n elektronlu sistemin temel seviye elektronik enerjisi E,

$$E[\rho] = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^n \int \psi_i^*(\vec{r}_1) \nabla_1^2 \psi_i(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 - j_0 \sum_{I=1}^N \frac{Z_I}{r_{1I}} \rho(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 + \frac{1}{2} j_0 \int \frac{\rho(\vec{r}_1) \rho(\vec{r}_2)}{r_{12}} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 + E_{xc}[\rho] \quad (3.1)$$

olarak yazılabilir. Burada bir-elektron uzaysal yörüngeleri  $\psi_i$  ( $i=1,2,\dots,n$ ) Kohn-Sham yörüngeleridir. Denklemlerin çözümü aşağıda verilmiştir. Kesin temel-seviye elektron yoğunluğu

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^n |\psi_i(\vec{r})|^2 \quad (3.2)$$

ile verilir. Burada toplam, tüm doldurulmuş Kohn-Sham (KS) yörüngeleri üzerindedir; bu yörüngeler bir kere hesaplandığından  $\rho$  bilinir. Eşitlik 3.1'deki sağdaki ilk terim elektronların kinetik enerjisini temsil eder. İkinci terim elektron-çekirdek etkileşimini temsil eder ve burada toplam, I indeksi ve  $Z_I$  atom numarası ile N sayıdaki bütün çekirdekler üzerindedir. Üçüncü terim  $\vec{r}_1$  ve  $\vec{r}_2$ 'deki toplam yük dağılımı arasındaki Coulomb etkileşimini temsil eder (toplam tüm KS yörüngeleri üzerindedir). Son terim sistemin değiş tokuş-ilişim enerjisidir ve bu terim de yoğunluğun fonksiyoneldir ve bütün klasik olmayan elektron-elektron etkileşimleri hesaba katar. Dört terim arasında,  $E_{xc}$ 'nin tam olarak nasıl elde edileceğini bilinmiyor. Hohenberg-Kohn teoremi E ve  $E_{xc}$ 'nin elektron yoğunluğunun

fonksiyoneli olmak zorunda olduğunu söylemesine rağmen,  $E_{xc}$ 'nin tam analitik yapısı bilinmediğinden yaklaşık ifadeler kullanılır.

KS yörüngeleri Kohn-Sham denklemlerini çözerek bulunur. Bu denklemler  $E(\rho)$  elektronik enerjisine 3.2'de verilen yük yoğunluğu ile varyasyon prensibini uygulayarak türetilir. Bir elektron yörüngeleri  $\psi_i(\vec{r}_1)$  için KS denklemleri

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_1^2 - j_0 \sum_{I=1}^N \frac{Z_I}{r_{1I}} + j_0 \int \frac{\rho(\vec{r}_1)}{r_{12}} d\vec{r}_2 + V_{xc}(\vec{r}_1) \right\} \psi_i(\vec{r}_1) = \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}_1) \quad (3.3)$$

yapısındadır, burada  $\varepsilon_i$  KS yörünge enerjileridir ve değiş tokuş ilgileşim potansiyeli  $V_{xc}$ , değiş tokuş-korelasyon enerjisinin fonksiyonel türevidir.

$$V_{xc}[\rho] = \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho} \quad (3.4)$$

Eğer  $E_{xc}$  bilirse,  $V_{xc}$  de elde edilebilir. KS yörüngelerinin belirginliği  $\rho$  yoğunluğunu 3.2 denkleminde hesaplanabilmesine olanak sağlamasıdır. KS denklemleri öz-uyumlu olarak çözülür. İlk olarak elektron yoğunluğu  $\rho$  tahmin edilir. Bu tahmin genelde atomik yoğunlukların üst üste binmesini kullanarak olur.  $E_{xc}(\rho)$  için yaklaşık yapısını kullanarak (bu bütün iterasyonlar boyunca sabit kalır)  $V_{xc}$ 'yi  $\vec{r}$ 'nin fonksiyonu olarak hesaplarız. KS denklem setleri bir başlangıç KS yörünge seti elde etmek için çözülür. Bu yörünge setleri denklem 3.2'de daha gelişmiş bir yoğunluk hesaplamak için kullanılır ve bu işlem yoğunluk ve değiş tokuş-İlgileşim enerjisi belirli bir toleransa yakınsayana kadar tekrarlanır. Daha sonra elektronik enerji denklem 3.1'den hesaplanır.

KS yörüngeleri nümerik olarak hesaplanabilir ya da bir temel fonksiyonlar seti cinsinden ifade edilebilir. İkinci durumda temel seti açılımındaki katsayılar bulunarak KS denklemleri çözülür. HF metotlarında olduğu gibi Slater tipi yörünge (STO) ve Gaussian tipi yörünge (GTO) temel seti fonksiyonları kullanılabilir. DFT hesaplarının süresi temel fonksiyonlarının sayısının üçüncü kuvveti ile orantılıdır. Dolayısıyla DFT hesapları, HF metotlarının hesaplama süresinin temel fonksiyonların dördüncü kuvvetine bağlı olmasından dolayı daha verimlidir (Atkins and Friedman 1997).

### 3.1.2 Değiş tokuş ilgileşim fonksiyonelleri

Değiş tokuş-İlgileşim enerjisi için fonksiyonellerin yaklaşık yapılarını elde etmek için birçok yöntem geliştirilmiştir; tam fonksiyoneli elde etmek için birçok araştırma yapılmaktadır. DFT'deki ana hatanın kaynağı  $E_{xc}$ 'nin yaklaşık olarak elde edilmiş yapısından kaynaklanmaktadır. Bu fonksiyonel genelde değiş tokuş enerjisini temsil eden bir değiş tokuş fonksiyoneline ve bir dinamik ilgileşim enerjisiyi temsil eden ilgileşim fonksiyoneline ayrılır. Yerel Yoğunluk yaklaşımına göre (LDA), değiş tokuş-İlgileşim fonksiyoneli,

$$E_{xc} = \int \rho(r) \epsilon_{xc}(\rho(r)) dr \quad (3.5)$$

şeklindedir, burada  $\epsilon_{xc}[\rho(\vec{r})]$  sabit yoğunluktaki homojen bir elektron gazı içindeki her bir elektron için değiş tokuş-İlgileşim enerjisidir. Bir hipotetik homojen elektron gazı içinde, elektriksel nötrlülüğü sağlamak için içinde tekdüze sürekli dağılımlı pozitif yük olan sonsuz hacimli bir uzay içinde sonsuz sayıda elektron hareket eder. Denklem 3.5 net bir şekilde yaklaşım olduğundan (çünkü gerçek moleküllerde ne pozitif yük ne de elektronik yük tekdüze dağılmamıştır), hesaplamada LDA özellikle yapısal özellikleri tahmin etmede sürpriz bir şekilde tam sonuç verir. Tam sonuç vermesi birçok molekülde ve sistemde değişken elektron yoğunluğunun varlığı ile azalır. Değiş tokuş fonksiyoneli ve ilgileşim fonksiyoneli sadece  $\rho$ 'ya bağlı olan ama  $\rho$ 'nun herhangi bir türevine bağlı olmayan LDA bağlanma enerjileri için, deneysel değerlerden daha büyük sonuçlar verdiği görülmüştür. Elektron yoğunluğunun homojen olmamasını hesaba katmak için  $\rho$ 'nun gradyenini içeren yerel olmayan düzeltme terimi denklem 3.5'te verilen değiş tokuş ilgileşim enerji terimine eklenir. Birkaç farklı gradyen-düzeltilmeli fonksiyonel önerilmiştir; genelleme yapılırsa genelleştirilmiş gradyen yaklaşımı olarak tanımlanan (GGA) gradyen düzeltilmeli LDA, temel seviye bağ uzaklıklarını  $0,03a_0$  (1,5pm) ve bağlanma enerjilerini 20 kJ/mol değerleri içindeki farkla verir. GGA-DFT yöntemi d-metal komplekslerini içeren hesaplamalar için verimli ve tam bir prosedürdür.

DFT hesaplamalarında kullanılmak üzere mPWPWW91, B3LYP, MPW1K, PBE1PBE, BLYP, BP91 ve PBE gibi isimleri olan çeşitli değiş tokuş-İlgileşim fonksiyonelleri geliştirilmiştir; isimler bir değiş tokuş fonksiyonelin ve bir korelasyon fonksiyonelinin kısmi paylaşımını gösterir. Örneğin, popüler fonksiyonel BLYP fonksiyoneli A.D. Becke tarafından geliştirilen gradyen-düzeltilmeli değiş tokuş fonksiyoneli ve C. Lee ve W. Yang ve R.G. Parr

tarafından geliştirilen gradyen-düzeltilmeli ilgileşim fonksiyonelin kombinasyonudur (Lee et al. 1988). B3LYP gibi fonksiyoneller hibrit fonksiyonellerdir. Hibrit kelimesinin nedeni DFT hesaplamalarının Hartree-Fock düzeltmelerinin DFT ilgileşim ve deęiş tokuş fonksiyonellerinin birleřtirilmesi ile yapılmasıdır.

Yoęunluk fonksiyoneli teorisi açık-kabuk atomlara ve moleküllere de uygulanmıştır. LDA'nın açık kabuk sistemlerine uzantısı yerel spin-yoęunluk yaklaşımını (LSDA) verir. Spin yoęunluęu spin-yukarı elektron yoęunluęu ile spin-ařaęı elektron yoęunluęu arasındaki farka karřılık gelir ve LSDA'da deęiş tokuş-ilgileşim enerjisi toplam elektron yoęunluęuna baęlı olduęu gibi spin yoęunluęuna da baęlıdır. LSDA, DFT hesaplamalarında metallerin ve alařımların manyetik özelliklerini arařtırmada kullanılmaktadır (Atkins and Friedman 1997).

### 3.2 TEMEL SETLER

Baz setleri bir sistemin teorik hesaplamalarda kullanmak için yörüngelerinin matematiksel gösterimidir. Daha büyük temel setleri elektronun uzaydaki konumunda daha az kısıtlama getirdiklerinden daha iyi yaklaşımla yörüngeleri tanımlarlar. Elektronik yapı hesaplamaları için standart temel setleri yörüngeleri oluřturmak için gaussian fonksiyonların lineer kombinasyonunu kullanır. Baz setleri bir molekülün yörüngelerini yaklaşık olarak belirlemek için moleküldeki her bir atoma bir grup temel fonksiyonu tahsis eder. Bu temel fonksiyonları gaussian fonksiyonların lineer kombinasyonundan oluřur ve bileşen gaussian fonksiyonları *primitif* olarak bahsedilir. Tek bir gaussian fonksiyonundan oluřan temel fonksiyonu *sınırlandırılmamıř* terim olarak adlandırılır (Foresman 1996, Szabo 1982).

#### 3.2.1 Minimal Temel Setler

Minimal temel setler her bir atom için gerekli minimum sayıda temel fonksiyonu içerirler. Ařaęıdaki örnekte H atomu için bir, C atomu için beř tane temel fonksiyon içerir.

H: 1s

C: 1s, 2s, 2p<sub>x</sub>, 2p<sub>y</sub>, 2p<sub>z</sub>



Minimal temel setleri, sabit boyutla atomik-tip yörüngeler kullanır. STO-3G temel seti mümkün olan en küçük temel seti olmamasına rağmen minimal temel setidir. Her bir temel fonksiyon için üç gaussian primitifi kullanır. 3G bunu ifade etmektedir. “STO” (Slater Tipi Yörünge) Slater tipi yörüngeleri ifade eder ve STO-3G temel seti Slater yörüngeleri gaussian fonksiyonlarıyla yaklaşık olarak ifade eder.

### 3.2.2 Split Valans Temel Setleri

Bir temel seti daha büyük yapmanın ilk yolu her bir atom için temel fonksiyon sayısını artırmaktır. 3-21G ve 6-31G gibi Split Valans Temel setleri her bir valans yörünge için iki ya da daha fazla temel fonksiyona sahiptir. Örneğin hidrojen ve karbon şu şekilde temsil edilir:

H: 1s, 1s'

C: 1s, 2s, 2s', 2p<sub>x</sub>, 2p<sub>y</sub>, 2p<sub>z</sub>, 2p<sub>x</sub>', 2p<sub>y</sub>', 2p<sub>z</sub>'

Burada üslü ve üssüz yörünge büyüklük olarak farklıdır.

Dunning-Huzinaga temel seti (D95) gibi çift zeta temel setler, her bir atomik yörünge için iki fonksiyonun lineer kombinasyonundan bütün moleküler yörüngeleri oluştururlar. Benzer şekilde 6-311G gibi triple split valans temel setleri her bir yörünge için üç tane *sınırlandırılmış* fonksiyon kullanır.

### 3.2.3 Polarize Temel Setleri

Split valans temel setleri yörüngelerin büyüklüklerinin değişmesine izin verir fakat şekillerinin değişmesine izin vermez. Polarize temel setleri her bir atomun tanımlanmasına açısal momentumlu yörüngeleri ekleyerek bu kısıtlamayı ortadan kaldırır. Örneğin polarize temel setleri karbon atomlarına d fonksiyonlarını, geçiş metallerine f fonksiyonlarını, bazıları da hidrojen atomuna p fonksiyonunu ekler.

6-31G(d) (Petersson et al. 1988) polarize temel seti ağır atomlara d fonksiyonu eklenmiş 6-31G temel setidir. Bu temel seti 6-31G\* olarak da gösterilir. 6-31G(d,p) (Petersson and

Allaham 1991) polarize temel seti ise hidrojen atomlarına p fonksiyonlarını ağır atomlara da d fonksiyonlarını ekler ve 6-31G\*\* olarak da bilinir.

### 3.2.4 Difüze Fonksiyonlar

Difüze fonksiyonlar valans fonksiyonlarının aksine s- ve p-tipi fonksiyonların daha büyük sürümleridir. Yörüngelerin daha geniş bir alan kaplamasını sağlarlar. Elektronları çekirdekten çok uzakta duran sistemler için difüze fonksiyonlu temel setler çok önemlidir. Bu tür sistemlere örnek olarak yalnız çiftli moleküller, anyonlar ve negatif yüklü diğer sistemler, uyarılmış durumdaki sistemler, düşük iyonlaşma potansiyelli sistemler verilebilir.

6-31+G(d) baz seti 6-31G(d) baz setinin difüze fonksiyonları eklenmiş halidir. Eğer 6-31++G(d)'deki gibi iki artı işareti kullanılmışsa hidrojen atomlarına da difüze fonksiyonları eklenmiştir. Hidrojen atomlarına eklenen difüze fonksiyonları hesaplamalardaki kesinliğe nadiren katkı sağlar.

### 3.2.5 Yüksek Açısız Momentum Temel Setleri

Birçok sistem için büyük temel setleri bile pratik olarak kullanılır. Bu tür temel setleri triple zeta temel setlerine çoklu polarizasyon fonksiyonları eklerler. Örneğin 6-31G(2d) baz seti her bir ağır atom için bir yerine iki d fonksiyonu eklerken 6-311++G(3df,3pd) baz seti, üç takım valans bölge fonksiyonu, hem hidrojen hem de ağır atomlarda difüze fonksiyonları ve çoklu polarizasyon fonksiyonlarını: ağır atomlarda 3 d fonksiyonu ve 1 f fonksiyonu hidrojen atomlarında 3 p fonksiyonu ve 1 d fonksiyonu içerir. Bu tür temel fonksiyonları elektron ilgileşim yöntemlerinde elektronlar arasındaki etkileşimi tanımlamak için uygundur.

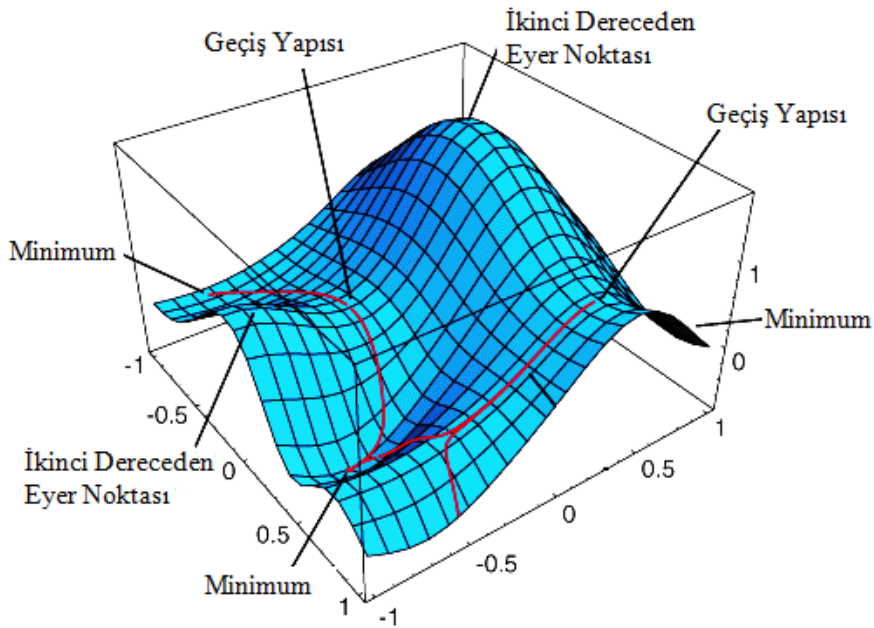
Bazı büyük temel setleri periyodik tablodaki konumlarına bağlı olarak bazı ağır atomlar için farklı polarizasyon fonksiyon setleri belirtirler. Örneğin, 6-311+(3df,2df,p) baz seti periyodik tabloda ikinci ve daha yüksek satırdaki ağır atomlara 3 d, 1 f fonksiyonu ekler; ilk satır ağır atomlara 2 d ve 1 f fonksiyonu ekler; hidrojen atomlarına 1 p fonksiyonu ekler. Burada H ve He'nin bulunduğu satırlar ihmal edilir.

### 3.2.6 İleri-Üçüncü –Satır Atomları için Temel Setler

Üçüncü satırın ötesindeki atomlar için olan baz setleri daha farklı ele alınır. Çok büyük çekirdeklerden dolayı, çekirdeğin etrafındaki elektronlar etkili çekirdek potansiyelleri ile (ECPs) yaklaşık bir yolla ele alınırlar. Bu yöntem bu atomlarda önemli olan bazı rölativistik etkileri içerir. Bu temel setlerden LANL2DZ en çok bilinenidir (Foresman 1996).

### 3.3 GEOMETRİ OPTİMİZASYONU

Bir moleküler sistemin yapısındaki ufak değişimlere karşılık enerjisindeki değişimler potansiyel enerji yüzeyi ile gösterilir. Bir potansiyel enerji yüzeyi, moleküler yapı ile enerjisini bağlayan matematiksel ilişkidir. İki atomlu bir molekül için potansiyel enerji yüzeyi, X-ekseni çekirdekler arası ayrıma karşılık gelen, Y-ekseni de o bağ uzunluğundaki enerji değerini veren, iki boyutlu bir eğridir. Daha büyük moleküller için yüzey molekülün serbestlik derecesi kadar fazla boyutlu olur. Şekilde iki serbestlik derecesine sahip bir molekül için Potansiyel enerji yüzeyi (PES) gösterilmiştir. Bu potansiyel enerji yüzeyinde 3 tane minimum vardır. Bir minimum kısıtlı bir alanda en düşük enerjili konumsa lokal minimumdur, eğer her yerde en düşük değer o ise global minimumdur. Bir eksen boyunca maksimum, diğer eksen boyunca minimuma karşılık gelen noktaya eyer noktası denir. Bu noktalar iki denge yapı arasındaki geçiş yapılarını belirtirler.



Şekil 3.1 İki boyutlu potansiyel enerji yüzeyi (Başköşe 2011).

Geometri optimizasyonları PES üzerinde minimumların konumlarını bulmaya çalışır. Minimum noktalarda ve eyer noktalarında enerjinin ilk türevi, yani gradyeni sıfırdır. Gradyen aynı zamanda kuvvetin de negatif değeri olduğundan, bu noktalarda kuvvetler de sıfırdır. PES üzerinde kuvvetin sıfır olduğu noktalara sabit nokta denir. Bütün başarılı optimizasyonlar sabit nokta verir fakat her zaman bu istenilen nokta olmayabilir (Foresman 1996).

### 3.4 GAUSSIAN PROGRAMI

Gaussian ilk olarak 1970 yılında John Pople ve Carnegie-Mellon Üniversitesindeki araştırma grubunun ortaya attığı hesaplamalı kimya yazılımıdır. Bundan sonra devamlı güncellenmiştir. Gaussian ismini almasının sebebi Pople'in hesaplamaların daha hızlı olması için Slater tipi yörüngeler yerine Gaussian tipi yörüngeleri kullanmasındandır. Bu tercihi Hartree-Fock hesaplamalarında kullanılan donanım performansını geliştirmek için yapılmıştır. Programın şuan ki versiyonu Gaussian 09'dur. Önceden QCPE (Quantum Chemistry Program Exchange) yoluyla dağıtılan program sonradan CMU lisansından çıkmıştır ve 1987'den bu yana Gaussian Inc. tarafından geliştirilip lisanslanmıştır (URL-2 2011).

Gaussian 09 moleküler mekanik, yarı-denel ve ab initio yöntemleri içeren oldukça kapsamlı bir programdır. Her üç yöntem için de çok sayıda teori ve temel set seçeneğine sahiptir. Gaussian 09 programı ile atom ve moleküllerin enerjileri hesaplanabilir, geometrik optimizasyonları yapılabilir ve enerjiye bağlı olan titreşim frekansları, kuvvet sabitleri ve dipol momentleri hesaplanabilir. Program potansiyel enerji yüzeyinde dolaşarak minimumlar, geçiş halleri ve tepkime güzergahını tarayabilir. Molekül dalga fonksiyonunun kararlılığını test edebilir. Ayrıca IR ve Raman spektrumları, termokimyasal özellikleri, bağ ve tepkime enerjileri, molekül orbitalleri, atom yükleri, çok kutuplu momentler, NMR ve manyetik duyarlılık titreşimsel şiddetleri, elektron ilgisi ve iyonlaşma enerjileri, kutuplanabilirlik ve hiper kutuplanma, elektrostatik potansiyel ve elektron yoğunluğu gibi pek çok özelliğin atomlar ve moleküller için kuantum kimyasal hesaplanmasında kullanılır. Tüm bu özellikler gaz fazında, çözelti içinde ve kristal yapılarında hesaplanabilir. Hesaplamalarda atom veya molekülün temel hali ya da uyarılmış hali kullanılabilir (Foresman 1996, A Frisch et al. 2009).

### 3.4.1 Gaussian için yakınsama kriterleri

Gaussian için yakınsama kriterleri şu şekilde sıralanmıştır:

- i. Kuvvetler sıfır olmalı, özellikle kuvvetin en büyük bileşeni kesim limitinin değerinin altında olmalıdır ( $<0.00045$ ).
- ii. Kuvvetlerin kare ortalama karekökleri de sıfır olmalıdır ( $<0.0003$ ).
- iii. Bir sonraki adım için hesaplanan yer değiştirme tanımlanmış kesim limitinden küçük olmak zorundadır ( $<0.0018$ ).
- iv. Bir sonraki adım için yer değiştirmenin kare ortalama karekökleri de  $0.0012$  kesme limiti değerinden küçük olmak zorundadır (Foresman 1996).

### 3.4.2 Gaussian'da Frekans hesaplamaları

Gaussian'da frekans hesaplamaları şu amaçlar için yapılır:

- Moleküllerin IR ve Raman spektrumlarını tahmin eder (frekanslarını ve şiddetlerini).
- Bir geometri optimizasyonu için kuvvet sabitlerini hesaplar.
- Potansiyel enerji yüzeyindeki sabit noktaların doğasını belirler.
- Toplam enerjiye sıfır-nokta titreşim ve termal enerji düzeltmelerini hesapladığı gibi, entalpi ve entropi gibi diğer istenilen termodinamik nicelikleri hesaplayabilir (Foresman 1996).

## BÖLÜM 4

### MOLEKÜL ETKİLEŞİMLERİ

#### 4.1 GİRİŞ

İyon-iyon, iyon-dipol, dipol-dipol, dispersiyon gibi moleküler etkileşimler arasında iyon-iyon etkileşiminden sonra en kuvvetli etkileşim özel bir dipol-dipol etkileşimi olan hidrojen bağıdır. Bu çalışmada iki farklı molekülün etkileşimi sırasında hidrojen bağı kurulmaktadır. Bu bağıın özellikleri ve moleküldeki hangi atomlar arasında oluşabileceği önemli olduğundan hidrojen bağıının özellikleri bu bölümde bahsedilecektir.

#### 4.2 HİDROJEN BAĞI

Dipol-dipol, indüklenmiş dipol-dipol, indüklenmiş dipol-indüklemiş dipol (London ya da Dispersiyon etkileşimi) gibi diğer moleküler etkileşimler moleküllerin kendine has özelliklerinden bağımsız olarak bütün moleküllerde gözlenebilir. Ancak belirli bir kurala sahip etkileşim türü olan hidrojen bağı  $A-H \cdots B$  şeklinde bağlanan iki molekül arasındaki etkileşimdir. Burada A ve B yüksek elektronegatif değere sahip elementlerdir ve B bağlanmamış elektron çiftlerine sahiptir. Hidrojen bağı genelde N, O ve F atomları ile sınırlıdır fakat eğer B anyonik ise ( $Cl^-$  gibi) hidrojen bağı kurabilir. Hidrojen bağı kurma yeteneğinde kesin bir kesme noktası yoktur ama N, O ve F elementleri daha etkili hidrojen bağı kurarlar.

Hidrojen bağı hidrojen atomundaki pozitif yüklerinin bir kısmı ile B atomunun negatif yüklerinin bir kısmının birbirlerine yaklaşımı sonucu oluşur. A, H ve B her biri bir atomik yörünge sağlayarak üç delokalize moleküler yörünge oluşturulur. Dolayısıyla A-H bağı, bir  $\psi_A$  ve hidrojen 1s yörüngesinin  $\psi_H$ , A üzerine gelmesiyle, B üzerindeki bağ yapmamış elektron çiftlerinin B üzerinde  $\psi_B$  yörüngesini doldurmalarıyla meydana gelir. Eğer bu iki molekül yaklaşırlarsa, 3 baz yörüngeden 3 moleküler yörünge elde edilebilir.

$$\psi = c_1\psi_A + c_2\psi_H + c_3\psi_B \quad (4.1)$$

Moleküler yörüngelerden biri bağ yapar, biri hemen hemen bağ yapmaz ve üçüncüsü de anti-bağ yapar. Bu üç yörünge 4 adet elektronu barındırırlar. 2 tanesi A-H bağından diğer 2 tanesi de B'nin bağ yapmamış elektron çiftinden gelir. Bunların iki tanesi bağ yapan yörüngeye diğer ikisi de bağ yapmayan yörüngeye girer. Anti-bağ yörüngelerinin boş kalmasından dolayı, bağ yapmayan yörüngeye tam konumuna bağlı olarak enerji azaltılabilir.

Çizelge 4.1 Çok kutuplu etkileşim potansiyel enerjileri (Atkins and de Paula 2006).

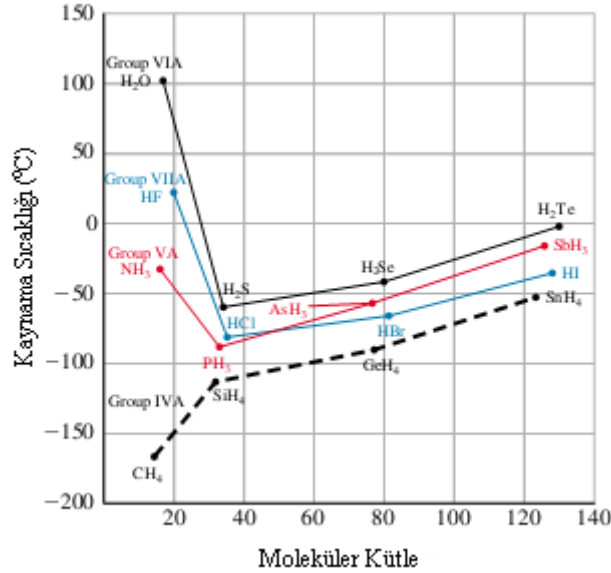
Etkileşim türü	Potansiyel enerjinin mesafeye bağlılığı	Tipik enerjisi (kJ/mol)	Açıklama
İyon-iyon	$1/r$	250	Sadece iyonlar arasında
İyon-dipol	$1/r^2$	15	
Dipol-dipol	$1/r^3$	2	Sabit kutuplu moleküller arasında
	$1/r^6$	0,6	Dönen kutuplu moleküller arasında
London (Dispersiyon)	$1/r^6$	2	Bütün moleküller arasında

Pratikte hidrojen bağının kuvveti 20 kJ/mol olarak bulunmuştur. Diğer etkileşimlerin karşılaştırmalı enerji değerleri Çizelge 4.1'de verilmiştir. Bağ yapma, yörüngelerin üst üste binmesine dayandığından, bu durum temas-benzeri bir etkileşimdir. Yani A-H, B'ye temas ettiğinde bağ oluşur temas kaybolduğunda sıfırlanır. Hidrojen bağı diğer bütün moleküler etkileşimlerden baskındır. Örneğin suyun katı ve sıvı haldeki özellikleri H<sub>2</sub>O molekülleri arasındaki hidrojen bağının baskınlığına bağlıdır. DNA'nın yapısı ve dolayısıyla genetik bilgilerin aktarılması temel çiftler arasındaki hidrojen bağlarına önemli bir şekilde bağlıdır. Hidrojen bağının yapısal olarak oluşması çekirdekler arası mesafenin van der Waals temas mesafesinden daha kısa olduğunda olur. Bu mesafeden daha kısa olduğunda daha baskın bir çekici etkileşim oluşur. Örneğin  $O-H\cdots O$  arasındaki O-O mesafesi, van der Waals yarıçapları bazında 280pm'dir, fakat bileşiklerde 260pm olarak bulunmuştur. Dahası  $H\cdots O$  mesafesi 260pm beklenirken 170pm bulunmuştur.

Hidrojen bağları ya simetrik ya da asimetric olur. Simetrik bir hidrojen bağında, H atomları diğer iki atom arasında ortada bulunur. Bu çok nadir bir durumdur fakat  $F-H\cdots F^-$  durumunda oluşur ve her iki bağ uzunluğu 120pm'dir. Daha sık görülen asimetric

durumlarda, A-H bağı  $H \cdots B$  bağından daha kısadır. En düşük enerjili durumun, bağı lineer olması durumunda oluştuğu belirtilir, çünkü iki kısmi negatif yükler birbirinden daha çok ayrılır (Atkins and de Paula 2006).

Hidrojen bağının kendine özgü durumunu göstermek için, bir dizi benzer bileşiğin kaynama noktalarını içeren grafik Şekil 4.1'de gösterilmiştir. Grafikten de görüleceği üzere, 4A grubu elementlerinin hidrürleri  $CH_4$ 'dan  $SnH_4$ 'e doğru beklenen davranışı gösterirler ve kaynama noktaları molekül kütleleriyle düzenli olarak artar. Ancak 5A, 6A ve 7A gruplarındaki  $NH_3$ ,  $H_2O$  ve  $HF$  farklı davranış gösterirler. Bunların kaynama noktaları gruplarının en düşük değerine sahip olması gerekirken, aksine en yüksek değerine sahiptir. Bu beklenmedik davranışın nedeni, H- bağlarıdır.



Şekil 4.1 4A, 5A, 6A, 7A grubu elementlerinin hidrojenle yaptıkları bileşiklerin kaynama noktaları (Whitten et al. 2003).

H atomunun küçüklüğü nedeniyle, iki molekül arasındaki H- bağı, etkileşmesi, dipol-dipol etkileşmesinden çok, bir bağ olarak gözönüne alınır. Su, H- bağının oluştuğu en tanınmış bileşiktir. Buzda H- bağları, su moleküllerini oldukça seyrek tutarlar. Sıvı sudaki su molekülleri buzdakilerden daha sıkı istiflenmiştir. Bu nedenle sıvı su buzdan daha yoğundur. Sıvı su  $3,98^\circ$  ta maksimum yoğunluğa ulaşır. Bu sıcaklığın üstünde su normal davranışına döner; yoğunluk sıcaklıkla düşer. Tatlı su göllerinin üstten aşağıya doğru donmasının nedeni budur. Suyun sıcaklığı  $4^\circ C$  in altına düştüğünde, bu yoğun su gölün dibine batar ve yüzeydeki daha soğuk su donar (Pütün et al. 1999).





## BÖLÜM 5

### ÜRİK ASİT VE SU MOLEKÜLÜ ETKİLEŞİMİ

#### 5.1 GİRİŞ

Ürik Asit DNA, RNA ve adenin nükleotitlerin pürin degradasyon ürünüdür (Sautin and Johnson 2008) ve insan vücudunda bulunan bir moleküldür. Molekül bir adet beşli bir adet altılı halkadan oluşmaktadır (Ringertz 1966). Bu halkaların, üç adet karbon atomuna bağlı oksijen atomları ve dört adet azot atomuna bağlı hidrojen atomundan oluşan etkileşime girme yönünden aktif kısımları mevcuttur. Proton alma ve proton verme özellikleri yüksek olan, dolayısıyla asitlik ve bazlık özellikleri fazla olan bu bağların oksidan maddelere elektron transfer etmesiyle ürik asit antioksidan özellik göstermektedir (Ames et al. 1981, Nieto et al. 2000, Sautin and Johnson 2008, Shukla and Mishra 1996, Spitsin et al. 2002). Fakat vücutta fazla miktarda bulunması durumunda obeziteye, hipertansiyona ve kardiyovasküler rahatsızlıklara neden olmaktadır (Gagliardi et al. 2009). Aktif bağları nedeniyle H atomları farklı uçlara bağlanabilir, bu nedenle çeşitli totomerik yapılarda bulunabilir (Demir et al. 2004, Jimenez and Alderete 2005).

Ürik asit gibi hayati moleküllerin suyla etkileşmesinin moleküler kuantum mekaniksel olarak incelenmesi gibi çalışmalar bu moleküllerin insan hayatına olan etkilerinin modelleme yapılarak tahmin edilebilmesini sağlayabilmektedir. Bu tür organik moleküllerin farklı maddelerle etkileşmeleri, bu etkileşme sırasında oluşabilecek geçiş molekülleri, bu etkileşmenin sonucu ortamın asitliği veya bazlığı, etkileşmenin şiddeti ve moleküllerin son şekli hakkında bilgi edinilmesini sağlayacaktır.

Ürik asit doymamış yağ asitlerini hava oksidasyonundan korur (Lehninger 1982, Shukla and Mishra 1996, Smith and Lawing 1983). Organik çözücülerde az çözünen ürik asidin su bulunan ortamlarda elektron verme ve proton transferi özellikleri yüksektir. Potansiyel bir antioksidan olan ürik asidin su ile etkileşimi 5 farklı konumdan ayrı ayrı ele alınarak Chandra ve Huykens (Chandra and Zeegers-Huyskens 2007) tarafından Gaussian 98 ile incelenmiş ve

su molekülleri ile hidrojen bağı kuvveti ile PA ve DPE arasında ilişkiye bakılmıştır. Bu çalışmada ürik asidin ayrı ayrı ve aynı anda beş farklı konumdaki su molekülleri ile etkileşime girerek hidrojen bağı oluşturması G09 (M J Frisch et al. 2009) programı kullanılarak DFT yöntemi ve B3LYP fonksiyoneli (Kohn et al. 1996) ile 6-311++G(d,p) baz seti kullanılarak incelenmiştir. Hesaplamalarda öncelikle sistemin optimizasyonu yapılmıştır. Hesaplamalarda molekülün Chandra ve Huykens (Chandra and Zeegers-Huyskens 2007) tarafından G98 ile elde edilen proton ilgisi (PA) ve proton verme entalpisi (DPE) (Foresman 1996, Nguyen et al. 1998) G09 (M J Frisch et al. 2009) programı ile tekrar elde edilmiştir. Sonuçlar karşılaştırılarak uyum içinde oldukları görülmüştür. Minimum enerjili yapı elde edildikten sonra aynı yöntem ve baz seti kullanılarak kızılötesi titreşim kipleri elde edilmiş, molekülün yük dağılımı, bağ uzunluğu, bağ açıları ve dihedral açıları hesaplanmıştır. Etkileşim sonucu bu parametrelerde ne tür bir değişim olduğuna bakılmıştır.

## 5.2 ÜRİK ASİT TOTOMERLERİNİN EN KARARLI YAPISININ BELİRLENMESİ

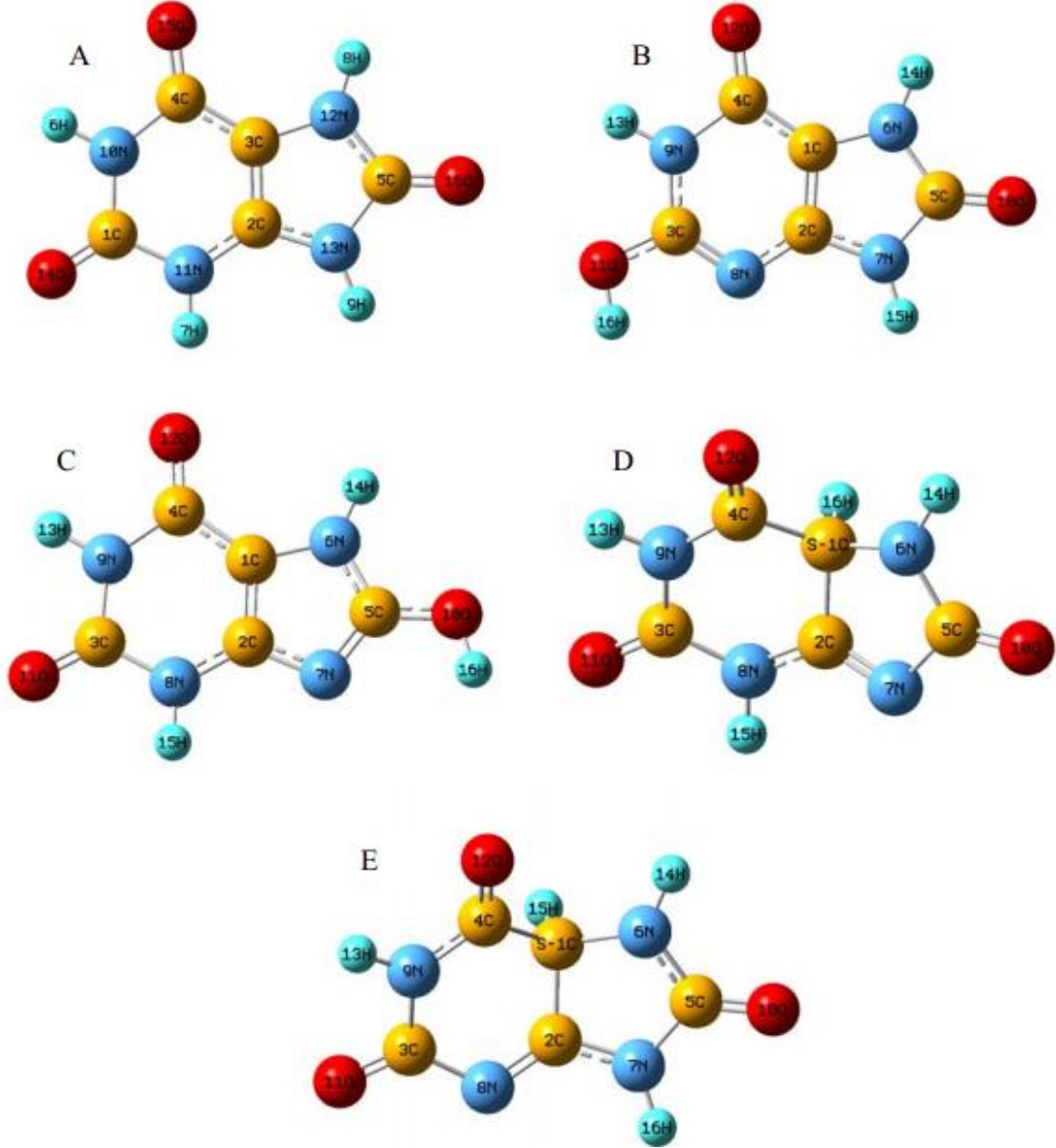
Totomer, bir molekülle aynı kimyasal formüle sahip, fakat bazı atomların bağlandıkları yerlerin farklılaşmasından oluşan yapılardır. Farklı konumlara bağlı hidrojen atomları bulunan ürik asidin totomerleri birçok çalışmada incelenmiştir (Jimenez and Alderete 2005) (Raczynska et al. 2010). En kararlı beş totomeri (Şekil 5.1) B3LYP seviyesinde 6-311++G(d,p) baz seti ile DFT kullanılarak optimize edilmiştir. Bu yapıların optimize edildikten sonra enerjileri ve dipol momentleri Çizelge 5.1’de verilmiştir.

Çizelge 5.1 Ürik asidin beş farklı totomerinin optimize enerjileri ve dipol momentleri.

	<b>A</b>	<b>B</b>	<b>C</b>	<b>D</b>	<b>E</b>
<b>E (a.u.)</b>	-637.87006	-637.86458	-637.86287	-637.85173	-637.85408
<b><math>\mu</math> (D)</b>	3.18	5.06	4.89	3.97	2.22

Bu yapılardan A totomeri tetra-NH; B ve C totomeri tri-NH, mono-OH; D ve E totomeri mono-CH, tri NH olarak adlandırılır. A yapısında halkalara bağlı dört adet NH ucu vardır. B ve C yapılarında üç adet NH bir adet de OH ucu vardır. D ve E yapılarında ise bir adet CH ucu üç adet NH ucu vardır. Bu yapılardan A yapısının enerjisi -637.87006 a.u., dipol momentleri 3.18 Debye’dir. B yapısının enerjisi -637.86458 a.u., dipol momentleri ise 5.06 Debye’dir. C yapısının enerjisi -637.86287 a.u., dipol momentleri 4.89 Debye’dir. D yapısının enerjisi -637.85173 a.u., dipol momentleri de 3.97 Debye’dir. E yapısının enerjisi ise -637.85408 a.u.,

dipol momenti ise 2.22 Debye'dır. Bu enerji değerlerine göre en düşük enerjili yapı A yapısıdır ve diğerlerinden daha karardır. Dolayısıyla bu çalışmada A yapısının su molekülü ile moleküler etkileşimleri incelenmiştir.



Şekil 5.1 Ürik asidin beş farklı totomer yapısı.

### 5.3 PROTON ALMA VE VERME EĞİLİMİ VE HİDROJEN BAĞI ENERJİ HESAPLAMALARI

Ürik asit molekülünün (Şekil 5.2) farklı uçlarındaki hidrojen atomlarını verme (DPE) ve oksijen atomlarına hidrojen alma (PA) eğilimleri iki farklı durumdaki enerji farklarını sıfır nokta titreşim enerjisi düzeltme terimleri de hesaba katılarak incelenmiştir.

Proton verme enerjisi PA,

$$\Delta E^{298} = \Delta E_e^0 + \Delta(\Delta E_e)^{298} + \Delta E_v^0 + \Delta(\Delta E_v)^{298} + \Delta E_r^{298} + \Delta E_t^{298} \quad (5.1)$$

olmak üzere,

$$PA = -\Delta E^{298} - \Delta(PV) \quad (5.2)$$

şeklinde hesaplanır. Burada  $\Delta E_e^0$ , 0 K'da ürün ve reaksiyona girenler arasındaki enerji farkı,  $\Delta(\Delta E_e)^{298}$ , 0 K ve 298 K arasında elektronik enerjideki değişim (ihmal edilecek kadar küçüktür),  $\Delta E_v^0$ , 0 K'da ürünlerin ve reaksiyona girenlerin sıfır-nokta enerjilerindeki fark,  $\Delta(\Delta E_v)^{298}$ , 0 K ve 298 K arasında titreşimsel enerjideki fark,  $\Delta E_r^{298}$ , ürün ve reaksiyona girenler arasındaki dönmesel enerji farkı,  $\Delta E_t^{298}$ , ürün ve reaksiyona girenler arasındaki öteleme enerji farkı,  $\Delta(PV)$  ise PV iş terimi farkıdır bir mol gaz için  $-RT$ 'ye eşittir (R Rydberg sabiti, T sıcaklıktır). Titreşimsel enerji ihmal edilir öteleme ve dönme hareketlerinden gelen  $-\frac{3}{2}RT$  'lik enerji terimi eklenirse denkleminiz,

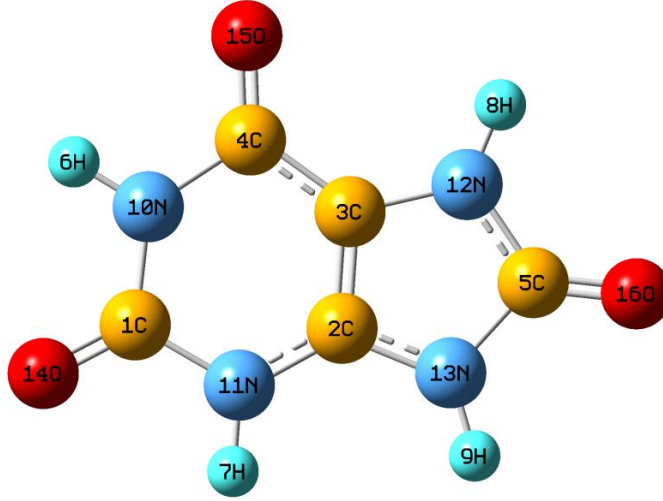
$$PA = -\Delta E_e^0 - \Delta E_v^0 + \frac{5}{2}RT \quad (5.3)$$

şeklini alır. Proton verme enerjisi DPE ise,

$$DPE = -\Delta E_e^0 - \Delta E_v^0 - \frac{5}{2}RT \quad (5.4)$$

eşitliğinden hesaplanır (Foresman 1996).

Bu ifadeler kullanılarak elde edilen sonuçlara göre ürik asidin en bazik ucu O15 atomunun N10 tarafı en asidik ucu da H7 bağlı olan ucudur. Bunun anlamı O15 atomunun N10'a bakan tarafından proton yakalamasının daha kolay, H7 bağlı olan ucundan da proton verilmesinin yani hidrojen atomunun verilmesi daha kolay olduğudur. Dolayısıyla hidrojen bağı oluşurken O15'in N10 tarafı suyun hidrojeni ile, H7 de suyun oksijeni ile daha kolay etkileşime geçebilir (Çizelge 5.2).



Şekil 5.2 Ürik asit molekülü.

Çizelge 5.2 Ürik asit molekülünün farklı uçlarındaki PA ve DPE değerleri.

UA	PA(kJ/mol)		DPE(kJ/mol)
O15 (C3 tarafı)	852.01	H6	1412.68
O15 (N10 tarafı)	852.29	H7	1332.75
O14 (N10 tarafı)	814.58	H8	1405.73
O14 (N11 tarafı)	807.41	H9	1335.63
O16 (N12 tarafı)	829.18		
O16 (N13 tarafı)	825.14		

Ürik asidin su molekülleri ile yaptığı hidrojen bağları teker teker incelendiğinde, 146 kodlu etkileşim ürik asidin O14 ve H6 atomlarıyla suyun hidrojen bağı kurmasından dolayı 146 olarak adlandırılmıştır. 147 kodlu etkileşim O14 ve H7, 156 kodlu etkileşim O15 ve H6, 168 kodlu etkileşim O15 ve H6, 168 kodlu etkileşim O16 ve H8, 169 kodlu etkileşim de O16 ve

H9 ile su molekülünün aynı anda hidrojen bağı kurduğunu belirtmek için bu şekilde kodlanmıştır. Bu etkileşimler sonucu sıfır nokta titreşim enerji baz set süperpozisyon hataları da (Boys and Bernardi 1970) göz önüne alındığında en kuvvetli hidrojen bağı -36.19 kJ/mol değerinde olup 169 kodlu etkileşimde gerçekleşmektedir. Ondan sonraki en kuvvetli etkileşim 35.11 kJ/mol enerjili hidrojen bağı kuran 147 kodlu etkileşimdir (Çizelge 5.3).

Çizelge 5.3 Ürik asit molekülünün farklı uçlarından bağlanan su molekülü ile yaptığı hidrojen bağ enerji değerleri.

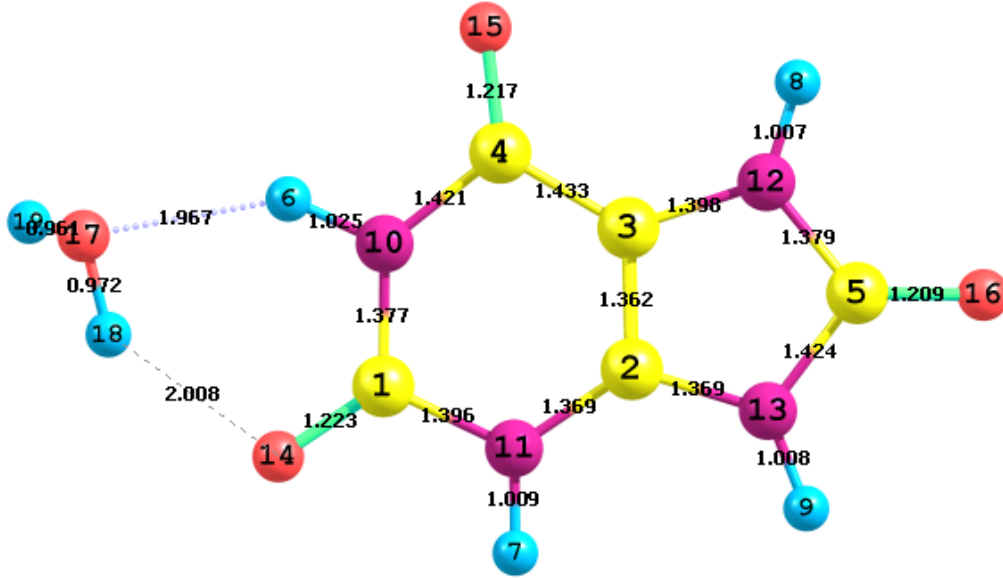
UA_Su	-EHB kJ/mol	-EHB (ZPE) kJ/mol	-EHB(ZPE + BSSE) kJ/mol
146	35.51	27.02	23.77
147	48.39	38.57	35.12
156	37.98	29.18	26.04
168	38.47	29.29	26.65
169	48.59	38.71	36.19

#### 5.4 ÜRİK ASİT BAĞ UZUNLUKLARININ, AÇILARININ VE DİHEDRALLERİNİN ETKİLEŞİM SONRASI ANALİZİ

Ürik Asit ve su molekülünün etkileşimi sonrası ürik asit molekülünün bağ uzunluklarındaki değişiklikler Ek Açıklamalar A'da belirtilmiştir. 146 kodlu etkileşim sonucu H6-N10 bağı 0.0122 Å uzamıştır ve en fazla uzayan bağıdır (Şekil 5.3). İkinci olarak C1-O14 bağı da 0.0113 Å uzamıştır. Bu bağlar su molekülüyle hidrojen bağı yapan bağlardır. C1-N10 bağı da 0.0091 Å kısalmıştır. C1-N11 bağı ise 0.0052 Å kısalmıştır. Molekülün bağ uzunluklarındaki etki etkileşim tarafında en fazla hissedilmektedir. Su molekülünün oksijeninin H6 atomu ile yaptığı hidrojen bağı ise 1.967 Å değerindedir.

Bağ açılarındaki değişimlere göre en fazla artış C4-N10-H6 açısında 1.28° olmuştur. İkinci olarak N11-C1-O14 açısında 1.23° azalış olmuştur. Bu her iki açı da hidrojen bağı yapan atomları içermektedir.

Dihedral açı değişimleri en fazla O15-C4-N10-H6, C3-C4-N10-H6, O14-C1-N10-H6 dihedrallerinde sırasıyla, 0.80°, 0.66°, 0.53° olmuştur. Bu dihedraller de hidrojen bağı yapan H6 atomunu içermektedir.



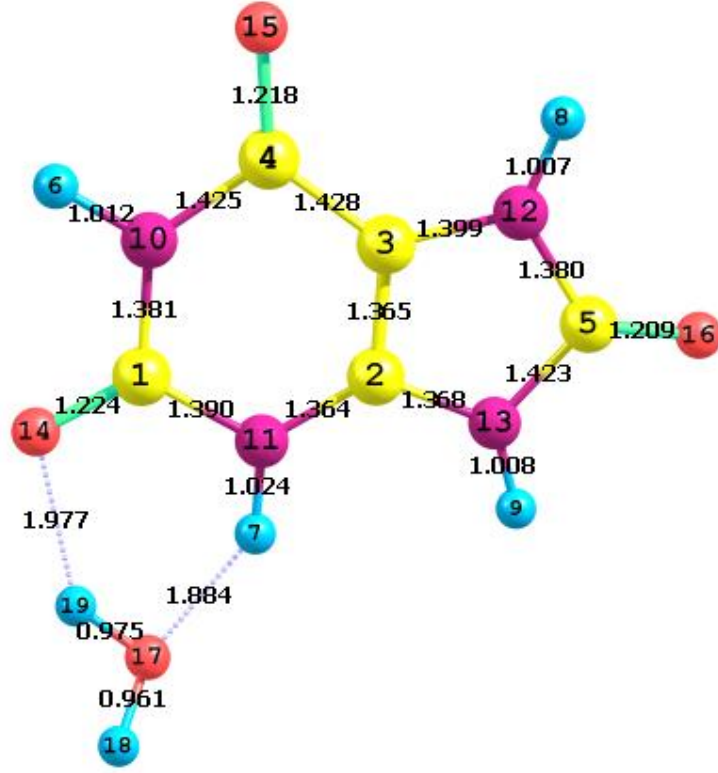
Şekil 5.3 146 kodlu etkileşim sonucu bağ uzunlukları.

147 kodlu etkileşimde ürik asit molekülünün bağ uzunluklarındaki değişikliklerin en fazla olduğu bağlar da hidrojen bağının kurulduğu bağlardır (Şekil 5.4). H7-N11 bağı 0.0147 Å uzamıştır. C1-O14 bağı ise 0.0125 Å uzamıştır. Su molekülünün H7 atomu ile yaptığı hidrojen bağı ise 1.884 Å değerindedir. Bu bağ değeri de tek su molekülü ile etkileşmeler arasında en kısa hidrojen bağı uzunluğudur. O14 atomunun suyun hidrojen atomuyla yaptığı hidrojen bağı uzunluğu ise 1.977 Å değerindedir.

Bağ açılarındaki açılardaki değişimlere göre en fazla N10-C1-O14 ve C2-N11-H7 açılarında -1.15° ve 1.05° değişim vardır. Bu açılarda hidrojen bağı kurulan açılardır. N10-C1-N11 açısında ise 0.99° bir artış vardır.

Dihedral açı değişimleri en fazla N11-C2-N13-H9, O16-C5-N13-H9, C3-C2-N13-H9 ve N12-C5-N13-H9 dihedral açılarındaki sırasıyla 1.66°, 1.24°, 1.03°, 0.89° değerlerinde olmuştur.



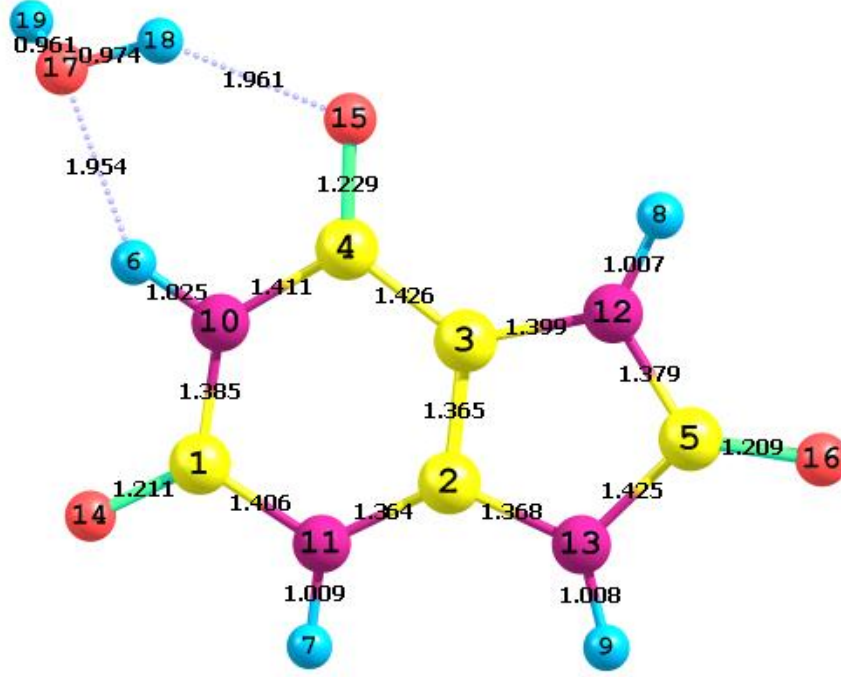


Şekil 5.4 147 kodlu etkileşim sonucu bağ uzunlukları.

156 kodlu etkileşimde ürik asit molekülünün bağ uzunluklarındaki değişikliklerin en fazla olduğu bağlar da hidrojen bağının kurulduğu bağlardır (Şekil 5.5). H6-N10 bağı  $0.0124 \text{ \AA}$  uzamıştır. C4-O15 bağı ise  $0.0119 \text{ \AA}$  uzamıştır. H6 atomunun suyun oksijeni ile yaptığı hidrojen bağı  $1.954 \text{ \AA}$ , O15 atomunun suyun hidrojeni ile yaptığı hidrojen bağı ise  $1.961 \text{ \AA}$  uzunluğundadır.

En fazla açı değişimi etkileşim tarafındaki açılardan C3-C4-O15 açısında  $1.51^\circ$  azalış, C3-C4-N10 açısında  $1.15^\circ$  azalış, C1-N10-H6 açısında  $1.08^\circ$  artış şeklinde olmuştur. C1-N10-C4 açısında ise  $0.87^\circ$  azalış olmuştur.

Dihedral açılardaki değişimlere göre en fazla değişimler O14-C1-N10-H6, O16-C5-N12-H8, O15-C4-N10-H6 dihedrallerinde sırasıyla  $0.57^\circ$ ,  $0.52^\circ$ ,  $0.52^\circ$  değerlerinde olmuştur.

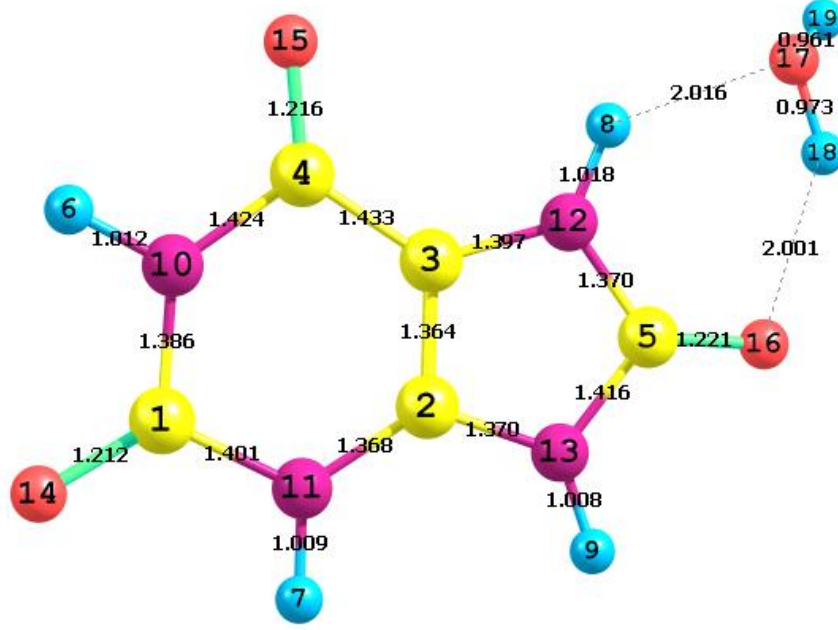


Şekil 5.5 156 kodlu etkileşim sonucu bağ uzunlukları.

168 kodlu etkileşimde ürik asit molekülünün bağ uzunluklarındaki değişikliklerin en fazla olduğu bağlar da hidrojen bağının kurulduğu bağlardır (Şekil 5.6). Fakat buradaki etkileşimde 2 Å uzunluğundan kısa bir hidrojen bağı kurulamamıştır. Etkileşim sonucu C5-O16 bağındaki uzama 0.0121 Å, H8-N12 bağındaki uzama ise 0.0107 Å değerinde olmuştur.

Bağ açılarındaki değişimlerine göre C3-N12-H8, C5-N12-H8, N12-C5-N13 açılarında sırasıyla 2.63°, -2.21°, 0.93° değişimler olmuştur. Bu açıları etkileşim tarafındaki açılarıdır.

Dihedral açı değişimlerine göre en fazla değişim C4-C3-N12-H8, C2-C3-N12-H8, O16-C5-N12-H8 dihedrallerinde sırasıyla, 1.76°, 0.99°, 0.90° değerlerinde olmuştur. Hidrojen bağı kuran H8 atomu bu dihedrallerde yer almaktadır.

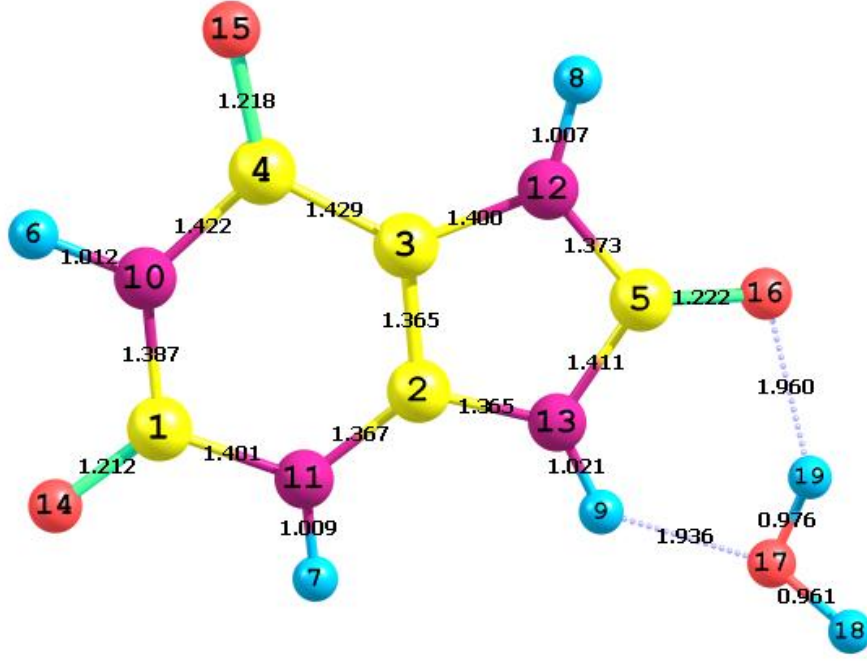


Şekil 5.6 168 kodlu etkileşim sonucu bağ uzunlukları.

169 kodlu etkileşimde ürik asit molekülünün bağ uzunluklarındaki değişikliklerin en fazla olduğu bağlar da hidrojen bağının kurulduğu taraftaki bağlardır (Şekil 5.7). En fazla değişiklik C5-N13 bağındaki 0.0135 Å değerindeki kısalmadır. C5-O16 bağı ve H9-N13 bağı 0.0129 Å uzamıştır. O16 atomunun su hidrojeni ile kurduğu hidrojen bağı 1.960 Å değerindedir. H9 atomunun su oksijeni ile kurduğu bağ ise 1.936 Å değerindedir.

Bağ açılarındaki değişimlere göre en fazla değişim C2-N13-H9, C5-N13-H9, N12-C5-N13 açılarında sırasıyla 2.34°, -1.89°, 1.04° değerlerinde olmuştur. Bu değişimler de hidrojen bağı kurulan taraftaki açıların etkileşim sonrası değişimleridir.

Dihedral açı değişimlerine göre N13-C2-N11-H7, C4-C3-N12-H8, C3-C2N11-H7 dihedrallerinde sırasıyla 1.10°, 0.84°, 0.81° değişimler oluşmuştur.

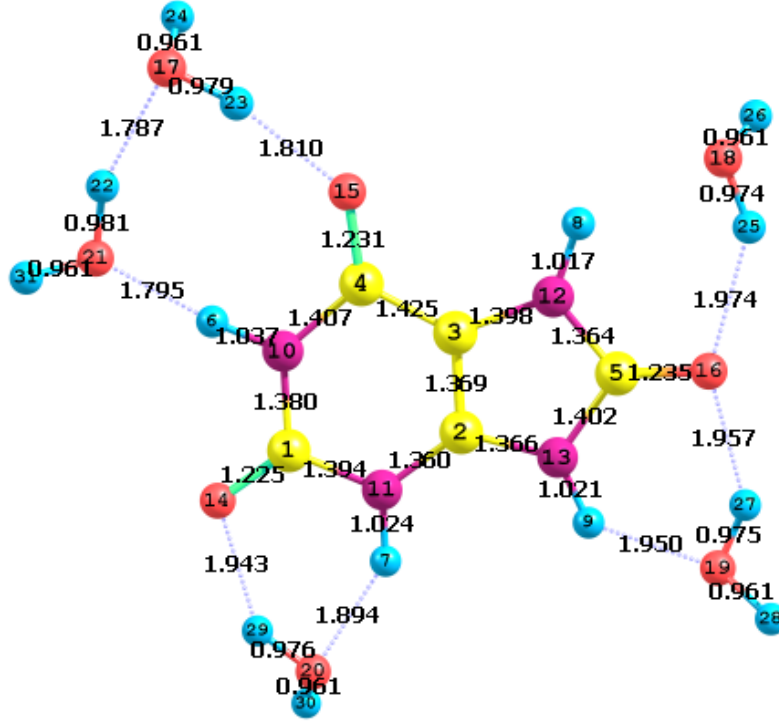


Şekil 5.7 169 kodlu etkileşim sonucu bağ uzunlukları.

Ürik asidi 5 su molekülüyle aynı anda etkileştirdiğimiz sistemde ise en azla bağ uzaması C5-O16 bağında 0.0262 Å değerinde olmuştur (Şekil 5.8). Bunda iki ayrı su molekülün bu bağ ile etkileşmesi etkin olmuştur. H6-N10 bağı ise 0.0242 Å uzamıştır. Bu bağ da en fazla uzayan ikinci bağıdır. C5-N13 bağı 0.0221 Å kısalmış, C4-N10 bağı 0.0154 Å kısalmıştır. H7-N11 bağı 0.0152 Å uzamıştır. C5-N12 bağı ise 0.0147 Å kısalmıştır. En kısa hidrojen bağları ise H6 atomu ile su oksijeni arasında 1.795 Å uzunluğunda oluşmuştur.

Bağ açı değişimlerine göre en fazla değişim C3-N12-H8, C2-N13-H9, N12-C5-N13, C3-C4-O15, N10-C1-N11 açılarında sırasıyla 2.78°, 2.17°, 2.05°, -1.91°, 1.77° değerlerinde olmuştur.

Dihedral değişimlerine göre en fazla değişim O14-C1-N10-H6, N11-C1-N10-H6, C3-C4-N10-H6, N11-C1-N10-C4, O15-C4-N10-H6 dihedrallerinde sırasıyla 1.41°, 1.28°, 1.04°, 0.93°, 0.92° olmuştur. Etkileşim sonrası H6 tarafındaki moleküler yapı daha fazla dihedral olarak değişime uğramıştır.



Şekil 5.8 Ürik asit ve 5 su molekülünün etkileşim sonucu bağ uzunlukları.

## 5.5 ETKİLEŞİM SONRASI ÜRİK ASİT MOLEKÜLÜNÜN ÜZERİNDEKİ YÜK VE ELEKTRİKSEL POTANSİYEL DAĞILIMLARININ ANALİZİ

Çizelge 5.4'te gösterildiği gibi H8 kodlu etkileşimde Mulliken yük dağılımına (Mulliken 1955, Vijayakumar et al. 2008) göre en fazla yük değişimi C4 atomunda 0.133e, atomal polar tensör (APT) (Milani and Castiglioni 2010, Person and Newton 1974) yük dağılımına göre H6 atomunda 0.141e, doğal bağ orbitali (NBO) (Foster and Weinhold 1980, Reed et al. 1988, Reed and Weinhold 1985, Reed et al. 1985) yük dağılımına göre O14 atomunda -0.049e olmuştur. Merz-Singh-Kollman (Besler et al. 1990) tasarısından hesaplanan elektriksel potansiyel (EP) değişimi de en fazla -0.012eV ile H6 atomunda olmuştur. Bu değerler etkileşim tarafındaki atomlara aittir.

Çizelge 5.4 146 kodlu etkileşimin yük ve elektriksel potansiyelinin değişimi.

		Mulliken(e)	APT(e)	NBO (e)	EP (eV)
1	C	0.044	0.014	0.008	0.001
2	C	<b>-0.119</b>	-0.022	-0.005	-0.003
3	C	-0.094	0.020	0.005	-0.003
4	C	<b>0.133</b>	-0.001	0.001	-0.005
5	C	0.005	0.009	0.000	-0.002
6	H	0.085	<b>0.141</b>	<b>0.037</b>	<b>-0.012</b>
7	H	0.000	0.001	0.000	-0.001
8	H	0.001	0.000	0.000	-0.003
9	H	-0.002	-0.001	-0.001	-0.002
10	N	-0.026	-0.065	-0.009	-0.009
11	N	-0.016	-0.007	0.006	-0.001
12	N	-0.002	-0.008	0.000	-0.002
13	N	0.005	0.001	-0.001	-0.002
14	O	-0.034	<b>-0.083</b>	<b>-0.049</b>	<b>0.003</b>
15	O	0.008	0.013	0.005	-0.006
16	O	-0.001	-0.010	-0.002	-0.002

Çizelge 5.5’de gösterildiği gibi 147 kodlu etkileşimde Mulliken yük dağılımına göre en fazla yük değişimi C3 atomunda 0.091e, APT yük dağılımına göre H7 atomunda 0.166e, NBO yük dağılımına göre O14 atomunda -0.051e olmuştur. Elektriksel potansiyel değişimi de en fazla -0.013eV ile H7 atomunda olmuştur. Bu değerler de etkileşim tarafındaki atomlara aittir.

Çizelge 5.5 147 kodlu etkileşimin yük ve elektriksel potansiyelinin değişimi.

		Mulliken(e)	APT(e)	NBO (e)	EP (eV)
1	C	0.012	-0.003	0.008	0.001
2	C	-0.026	0.030	0.007	-0.005
3	C	<b>0.091</b>	0.002	-0.001	-0.004
4	C	-0.042	-0.002	-0.002	-0.003
5	C	-0.003	0.007	0.000	-0.004
6	H	-0.003	0.001	-0.001	0.000
7	H	0.063	<b>0.166</b>	<b>0.037</b>	<b>-0.013</b>
8	H	0.000	-0.001	-0.001	-0.004
9	H	0.004	0.002	0.002	-0.006
10	N	-0.023	0.002	0.008	0.000
11	N	<b>-0.049</b>	-0.078	-0.010	-0.012
12	N	-0.010	-0.011	-0.001	-0.004
13	N	0.008	-0.002	0.003	-0.005
14	O	-0.035	<b>-0.086</b>	<b>-0.051</b>	<b>0.004</b>
15	O	0.001	-0.014	-0.003	-0.003
16	O	0.000	-0.005	-0.002	-0.004

Çizelge 5.6’da gösterildiği gibi 156 kodlu etkileşimde Mulliken yük dağılımına göre en fazla yük değişimi C4 atomunda 0.126e, APT yük dağılımına göre H6 atomunda 0.143e, NBO yük dağılımına göre O15 atomunda -0.050e olmuştur. Elektriksel potansiyel değişimi de en fazla -0.011eV ile H6 atomunda olmuştur. Bu değerler de etkileşim tarafındaki atomlara aittir.

Çizelge 5.6 156 kodlu etkileşimin yük ve elektriksel potansiyelinin değişimi.

		Mulliken(e)	APT(e)	NBO (e)	EP (eV)
1	C	0.023	0.004	0.001	-0.005
2	C	-0.049	0.016	0.007	-0.001
3	C	<b>-0.123</b>	-0.025	0.002	-0.001
4	C	<b>0.126</b>	0.023	0.006	0.001
5	C	0.003	0.015	0.000	0.000
6	H	0.076	<b>0.143</b>	<b>0.038</b>	<b>-0.011</b>
7	H	0.011	-0.001	-0.001	-0.003
8	H	0.000	-0.001	0.000	0.000
9	H	-0.001	0.001	0.000	0.000
10	N	-0.050	-0.072	-0.009	-0.009
11	N	0.002	0.001	0.001	-0.003
12	N	0.007	-0.003	0.000	0.000
13	N	0.002	-0.014	0.000	0.000
14	O	0.010	0.010	0.004	-0.006
15	O	-0.037	<b>-0.093</b>	<b>-0.050</b>	<b>0.004</b>
16	O	-0.006	-0.011	0.000	0.000

Çizelge 5.7 ’de gösterildiği gibi 168 kodlu etkileşimde Mulliken yük dağılımına göre en fazla yük değişimi C2 atomunda 0.200e, APT yük dağılımına göre H8 atomunda 0.116e, NBO yük dağılımına göre O16 atomunda -0.050e olmuştur. Elektriksel potansiyel değişimi de en fazla -0.012eV ile H8 atomunda olmuştur. Bu değerler de etkileşim tarafındaki atomlara aittir.

Çizelge 5.7 168 kodlu etkileşimin yük ve elektriksel potansiyelinin değişimi

		Mulliken(e)	APT(e)	NBO (e)	EP (eV)
1	C	-0.003	0.015	0.000	-0.003
2	C	<b>-0.200</b>	-0.034	-0.004	-0.003
3	C	<b>0.133</b>	0.035	0.007	-0.002
4	C	0.024	-0.013	0.003	-0.003
5	C	0.021	-0.018	0.003	-0.001
6	H	0.005	-0.001	0.000	-0.003
7	H	-0.004	-0.001	-0.001	-0.002
8	H	0.077	<b>0.116</b>	<b>0.034</b>	<b>-0.012</b>
9	H	0.002	0.001	0.000	0.000
10	N	-0.011	-0.004	-0.001	-0.003
11	N	0.006	-0.007	-0.001	-0.002
12	N	-0.034	-0.033	0.000	-0.009
13	N	-0.012	0.015	0.007	0.000
14	O	0.001	-0.012	-0.002	-0.002
15	O	0.013	0.016	0.008	-0.003
16	O	-0.028	<b>-0.078</b>	<b>-0.050</b>	<b>0.004</b>

Çizelge 5.8’de gösterildiği gibi H20 kodlu etkileşimde Mulliken yük dağılımına göre en fazla yük değişimi C3 atomunda -0.120 e, APT yük dağılımına göre H9 atomunda 0.151e, NBO yük dağılımına göre O16 atomunda -0.050e olmuştur. Elektriksel potansiyel değişimi de en fazla -0.013eV ile H9 atomunda olmuştur. Bu değerler de etkileşim tarafındaki atomlara aittir.

Çizelge 5.8 169 kodlu etkileşimin yük ve elektriksel potansiyelinin değişimi

		Mulliken(e)	APT(e)	NBO (e)	EP (eV)
1	C	0.001	0.008	0.000	-0.003
2	C	<b>0.095</b>	0.027	0.006	-0.004
3	C	<b>-0.120</b>	-0.040	-0.003	-0.003
4	C	-0.016	0.026	0.000	-0.002
5	C	0.028	-0.018	0.005	0.001
6	H	0.002	0.000	-0.001	-0.003
7	H	0.005	0.002	0.002	-0.005
8	H	0.003	0.002	-0.002	0.001
9	H	0.070	<b>0.151</b>	<b>0.039</b>	<b>-0.013</b>
10	N	-0.006	-0.006	0.000	-0.003
11	N	0.006	-0.005	0.002	-0.004
12	N	-0.006	0.013	0.011	0.002
13	N	-0.054	-0.057	-0.005	-0.010
14	O	0.003	-0.002	-0.001	-0.003
15	O	-0.002	-0.013	-0.003	-0.003
16	O	-0.027	<b>-0.087</b>	<b>-0.050</b>	<b>0.006</b>



Çizelge 5.9’da gösterildiği gibi UA ve 5 su molekülünün aynı anda etkileşiminde Mulliken yük dağılımına göre en fazla yük değişimi C3 atomunda -0.468e, APT yük dağılımına göre H6 atomunda -0.251e, NBO yük dağılımına göre O16 atomunda -0.101e olmuştur. Elektriksel potansiyel değişimi de en fazla -0.023eV ile H7 atomunda olmuştur.

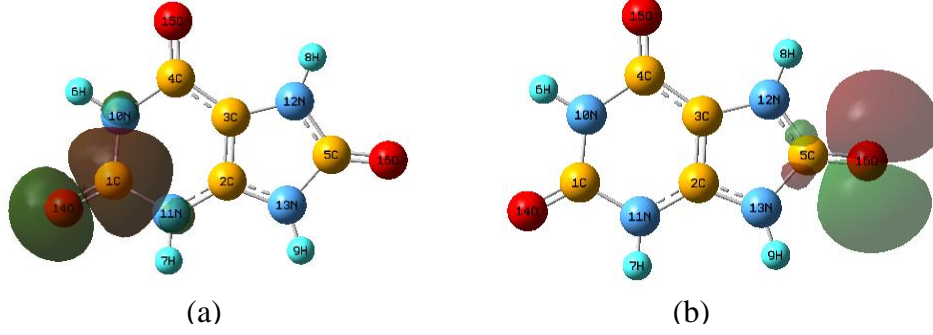
Çizelge 5.9 UA ve 5 su molekülünün aynı anda etkileşiminin yük ve elektriksel potansiyelinin değişimi.

		Mulliken(e)	APT(e)	NBO (e)	EP (eV)
1	C	-0.061	0.016	0.010	-0.011
2	C	<b>0.285</b>	0.043	0.015	-0.013
3	C	<b>-0.468</b>	-0.045	0.005	-0.010
4	C	0.141	0.074	0.015	-0.005
5	C	-0.006	-0.014	0.007	-0.003
6	H	0.151	<b>0.251</b>	<b>0.044</b>	-0.021
7	H	0.082	0.167	0.037	<b>-0.023</b>
8	H	0.070	0.111	0.032	-0.014
9	H	0.075	0.153	0.040	-0.019
10	N	-0.099	-0.141	-0.005	-0.019
11	N	-0.041	-0.089	-0.006	-0.021
12	N	0.018	-0.032	0.010	-0.010
13	N	-0.060	-0.061	0.005	-0.015
14	O	-0.021	-0.090	-0.050	-0.008
15	O	-0.050	-0.177	-0.072	-0.002
16	O	-0.069	<b>-0.179</b>	<b>-0.101</b>	<b>0.008</b>

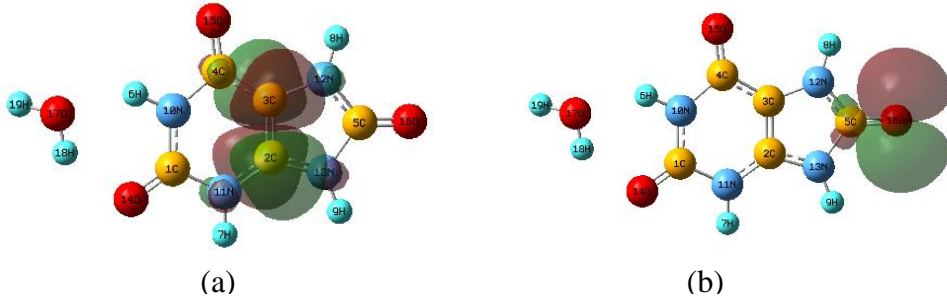
## 5.6 ÜRİK ASİT HOMO-LUMO ANALİZİ

En yüksek dolu moleküler yörünge (HOMO) ile en düşük boş moleküler yörünge (LUMO) molekülün kimyasal olarak etkileşimin nereden olacağını belirleyen parametrelerdir. Bu iki moleküler yörünge molekülün elektron alan (LUMO) ve veren (HOMO) yörüngelerdir. Bu iki yörünge arasındaki enerji aralığı molekül yapısının kararlılığı hakkında da bilgi verir. HOMO-LUMO enerji aralığının azalma olması ise molekül içinde elektronik transferlerin fazla olacağı anlamına gelir ve yapı daha karardır (Arivazhagan and Jeyavijayan 2011, Arunagiri et al. 2011, Karthick et al. 2011, Laarej et al. 2010, Nagabalasubramanian et al. 2011, Udayakumar et al. 2011). Şekil 5.9’da HOMO C1-O14 atomları üzerinde iken LUMO C5-O16 üzerindedir. Etkileşim yokken HOMO-LUMO enerji aralığı 0.245 eV değerindedir. Şekil 5.10’da ise HOMO C2-C3 üzerine kaymıştır ve enerji aralığı 0.249eV değerindedir. Şekil 5.11’de de HOMO C2-C3 üzerine kaymıştır ve enerji aralığı 0.240eV değerindedir. Şekil 5.12’de de aynı şekilde HOMO C2-C3 üzerine kaymıştır. Enerji aralığı -0.248eV

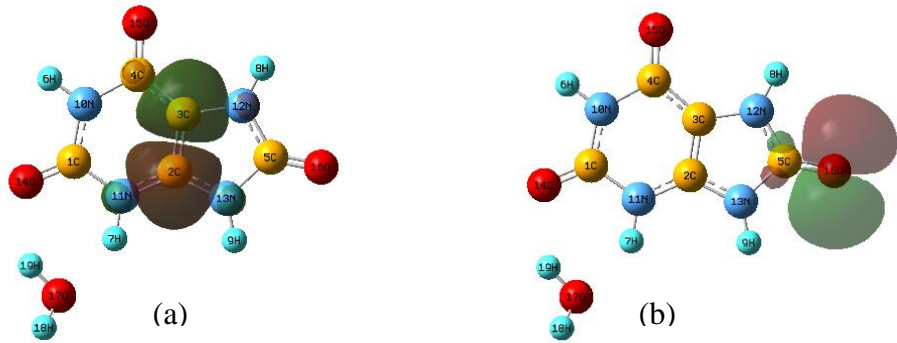
değerindedir. Şekil 5.13'teki sistemde ise C5-O16 üzerine HOMO gelmiş, LUMO ise C4-O15 üzerine gelmiştir. Enerji aralığı ise 0.248eV değerindedir. Şekil 5.14'te C5-O16 üzerine HOMO gelmiş, LUMO ise C4-O15 üzerine gelmiştir. Enerji aralığı ise 0.250eV değerindedir.



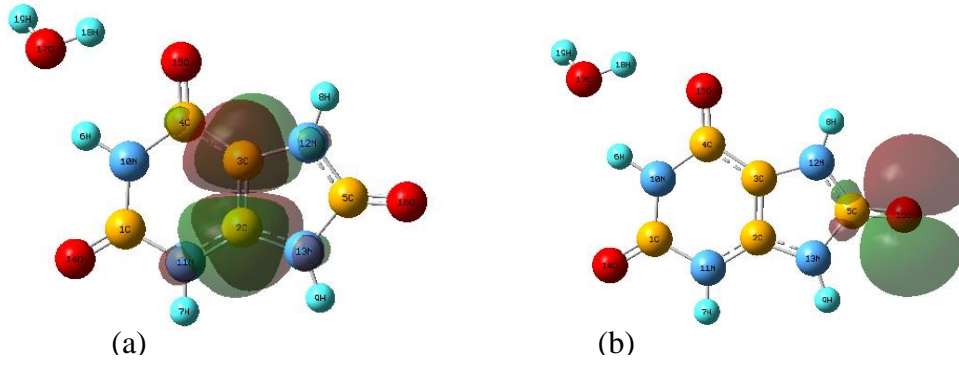
Şekil 5.9 UA için (a) HOMO, (b) LUMO gösterimi.



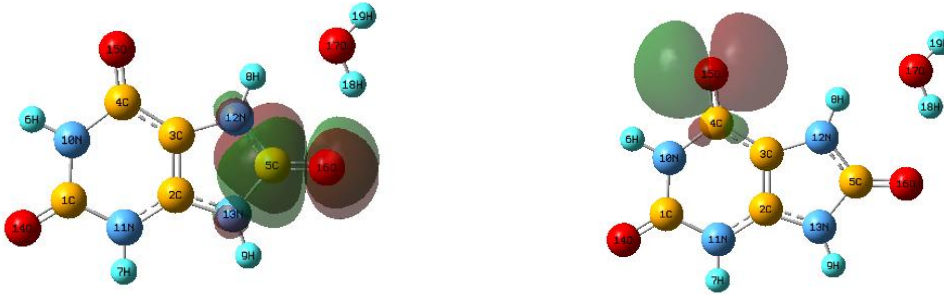
Şekil 5.10 146 kodlu etkileşim için (a) HOMO, (b) LUMO gösterimi.



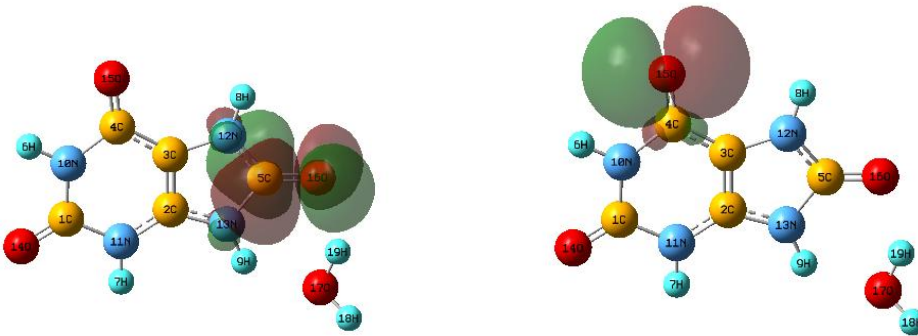
Şekil 5.11 147 kodlu etkileşim için (a) HOMO, (b) LUMO gösterimi.



Şekil 5.12 156 kodlu etkileşim için (a) HOMO, (b) LUMO gösterimi.



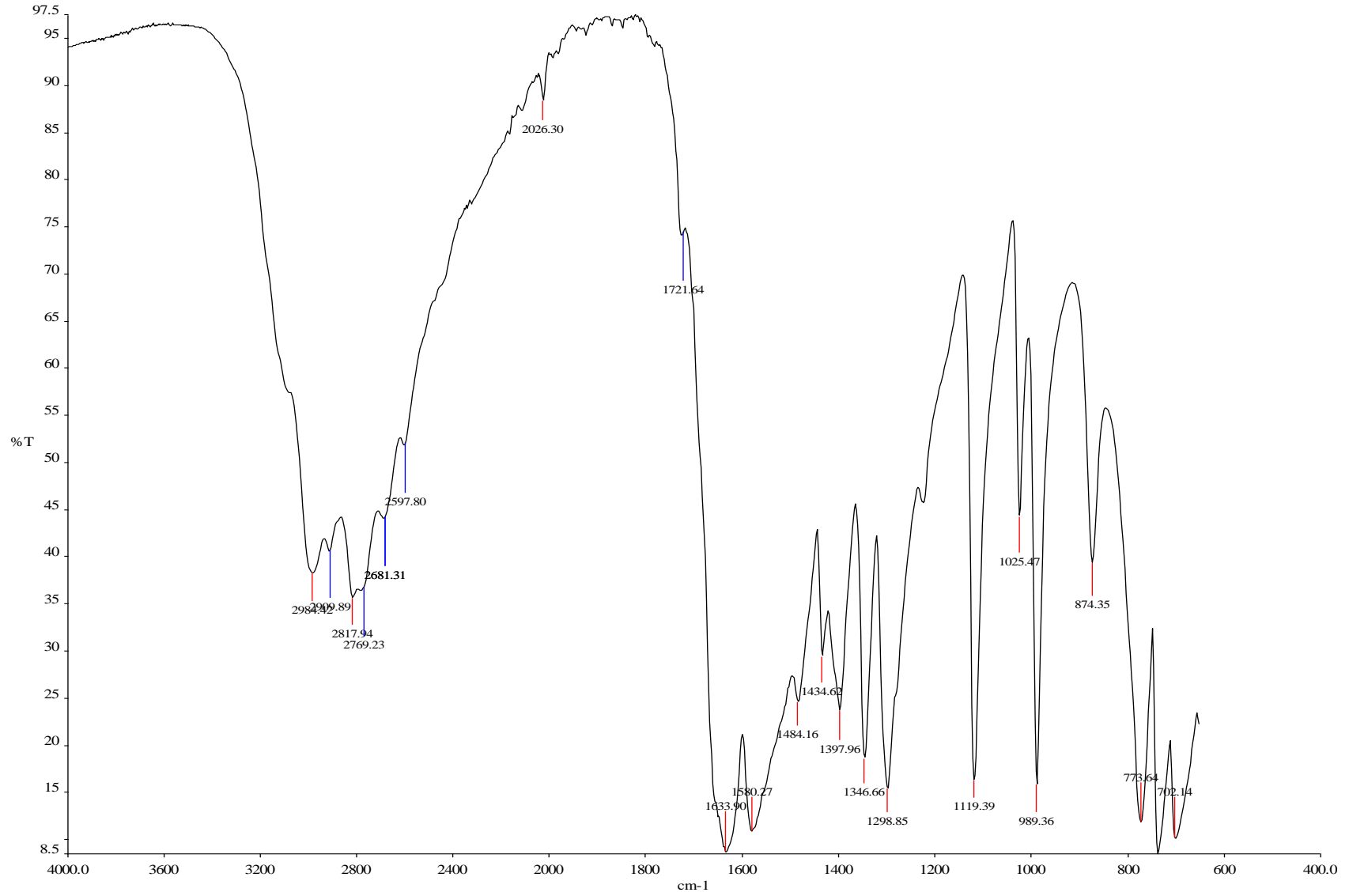
Şekil 5.13 168 kodlu etkileşim için (a) HOMO, (b) LUMO gösterimi.



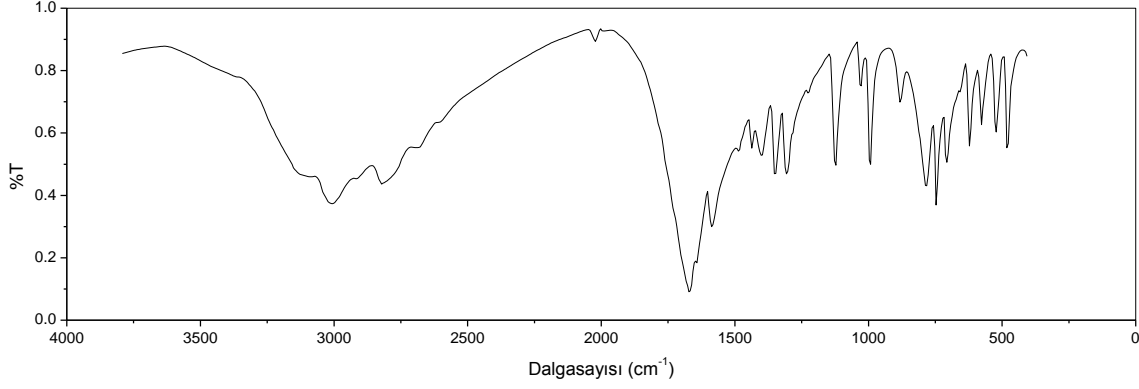
Şekil 5.14 169 kodlu etkileşim için (a) HOMO, (b) LUMO gösterimi.

## 5.7 UA MOLEKÜLÜNÜN KIZILÖTESİ SPEKTRUMUNUN DENEYSEL SONUÇLARLA KARŞILAŞTIRILMASI

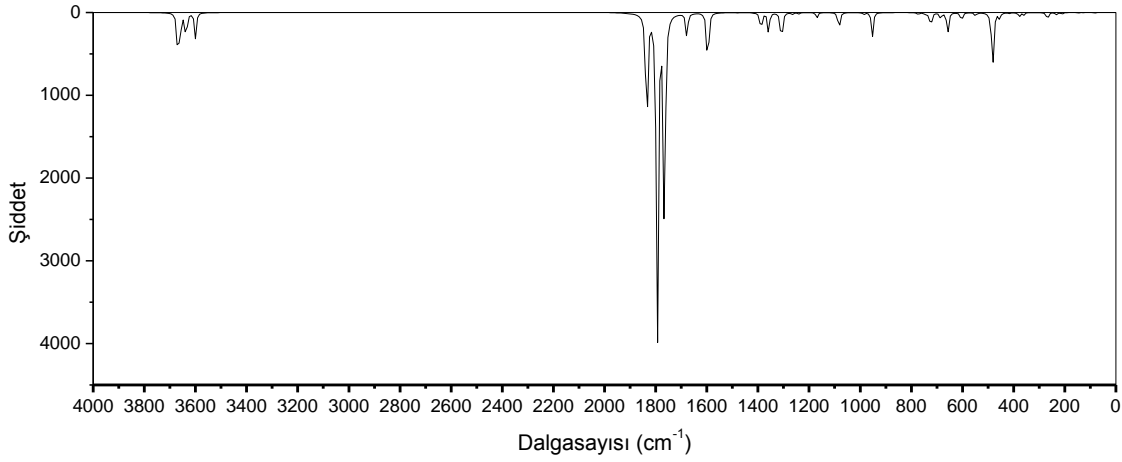
Katı haldeki ürik asit için çektiğimiz kızılötesi spektrum (Şekil 5.15) ve literatürdeki diğer kızılötesi spektrumlar (Şekil 5.16) ile DFT ile B3LYP seviyesinde 6-311++G(d,p) baz seti kullanılarak hesaplanan değerlerle (Şekil 5.17) ayrı ayrı karşılaştırılıp ilişkilendirilmiştir. Hesaplamalarımız tek bir molekül için gaz fazında olduğundan, deneysel olarak katı halde birçok molekülün kızılötesi spektrumu ile bazı bölgelerde farklılık göstermektedir (Shimada et al. 2008). Bu bölgeler molekülün hidrojen bağı kurabilen aktif uçları olarak adlandırdığımız C=O ve N-H gerilme titreşim bölgelerine karşılık gelmektedir. Dolayısıyla  $1500\text{ cm}^{-1}$  dalgasayısından sonraki bölgelerde doğrusal ilişki bozulmaktadır (Şekil 5.18). Bu bölgeler çıkarıldıktan sonra çizilen korelasyon grafiklerinde ise doğrusallığa yakın grafikler elde edilmiştir (Şekil 5.19, 20, 21).



Şekil 5.15 Katı haldeki UA molekülü için çektiğimiz deneysel kızılötesi spektrumu.

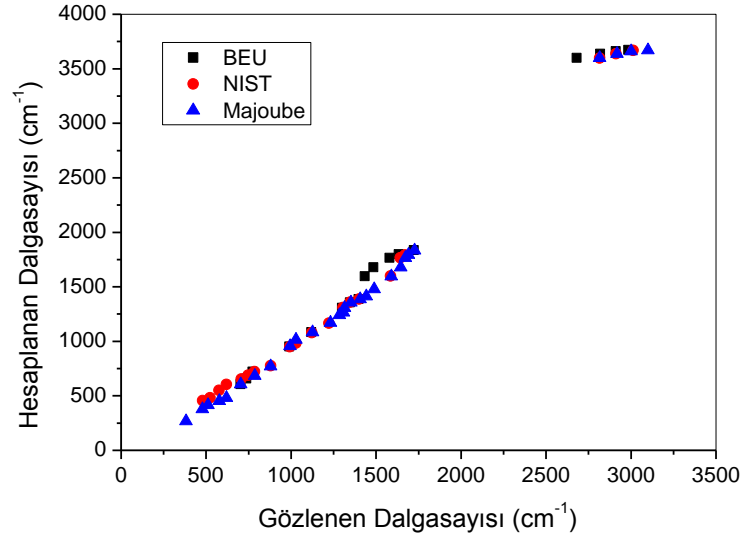


Şekil 5.16 UA molekülünün NIST'ten alınan kızılötesi spektrumu.

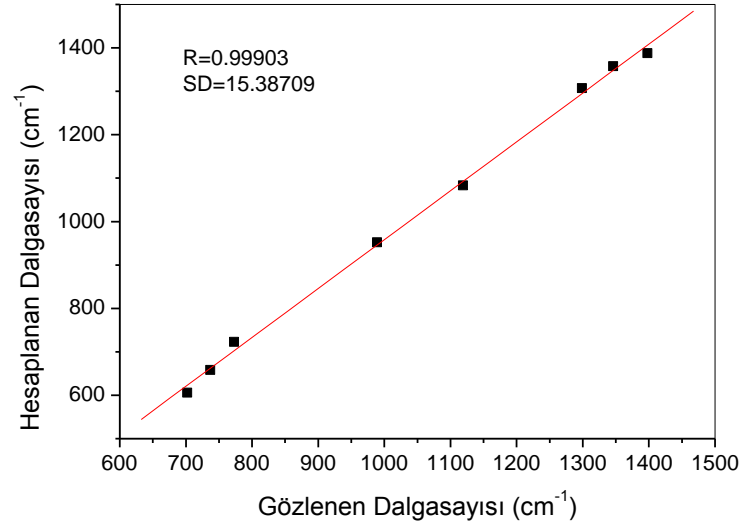


Şekil 5.17 UA molekülünün hesaplanan kızılötesi spektrumu.

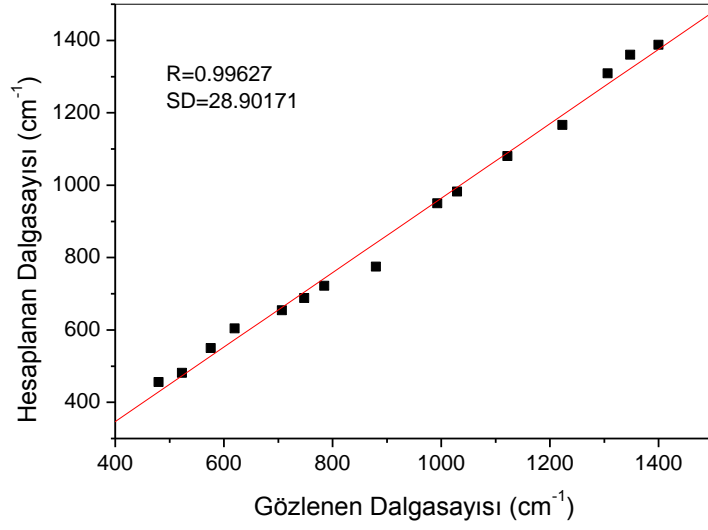
Şekil 5.18'de siyah noktalar bizim çektiğimiz, kırmızı noktalar NIST'ten alınan, mavi noktalar da Majoube ve Vergoten'nin çalışmasından (Majoube and Vergoten 1993) alınan kızılötesi deneysel dalgasayılarına göre hesaplanan değerlerle yapılan ilişkiyi göstermektedir.  $1500 \text{ cm}^{-1}$  dalgasayısından önceki değerlere göre yapılan doğrusal uydurmaya göre bizim çektiğimiz kızılötesi spektrumundan alınan 8 noktaya göre regresyon  $R=0.99903$ , standart sapma ise 15.40 değerindedir (Şekil 5.19). NIST'ten alınan 15 değere göre  $R=0.99627$ , standart sapma ise 28.90 değerindedir (Şekil 5.20). Majoube ve Vergoten'nin makalesinden alınan 19 değere göre  $R=0.99891$ , standart sapma ise 17.689 değerindedir (Şekil 5.21).



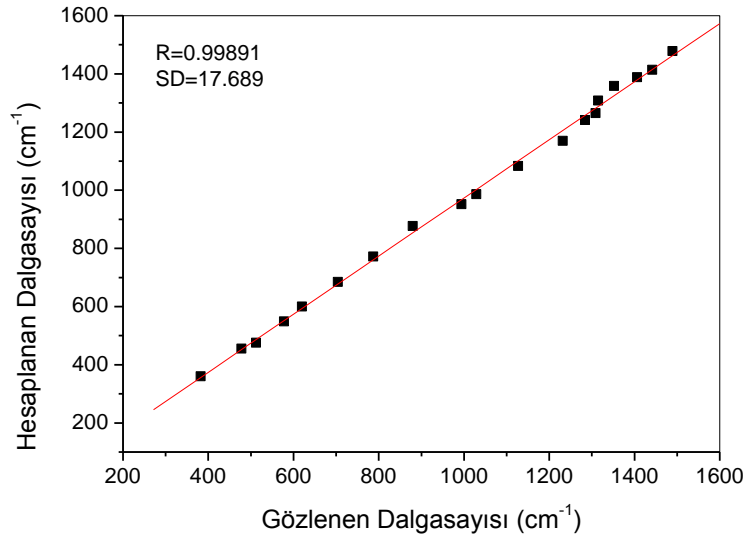
Şekil 5.18 UA için deneysel ve hesaplanan kızılötesi dalgasayısı değerlerinin korelasyon grafiği.



Şekil 5.19 UA için çektiğimiz kızılötesi spektrumunun deneysel ve hesaplanan değerlerinin korelasyonunun doğrusallığa uydurulması.



Şekil 5.20 UA için NIST'ten alınan kızılötesi spektrumun deneysel ve hesaplanan değerlerinin korelasyonunun doğrusallığa uydurulması.



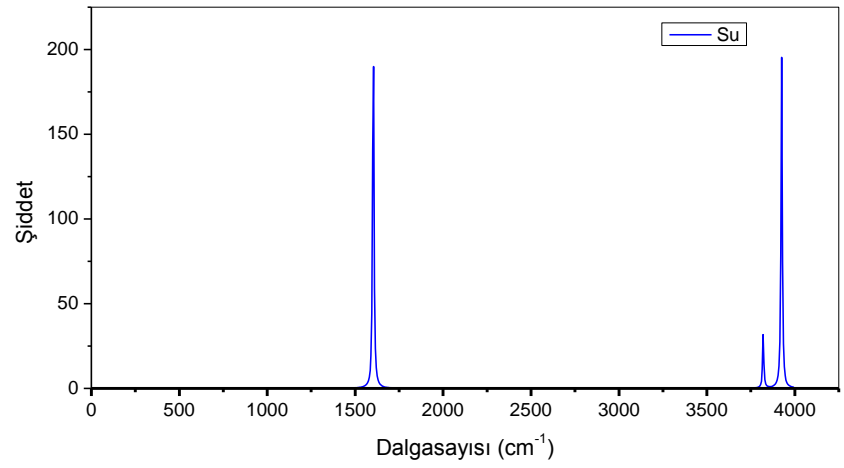
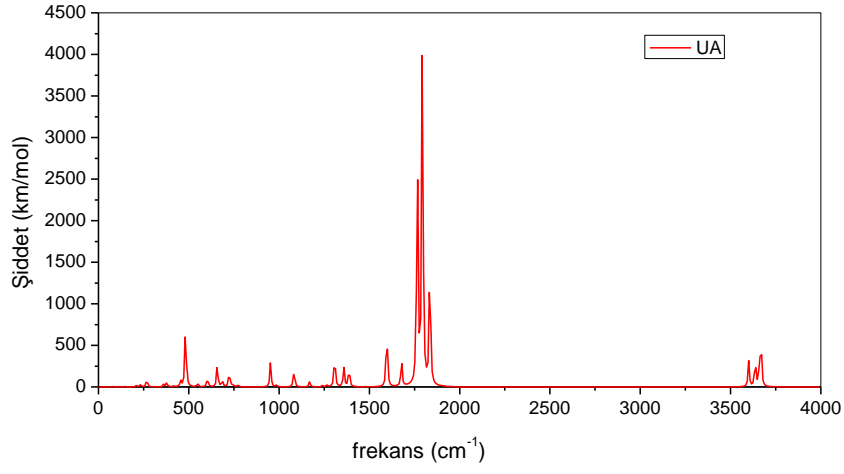
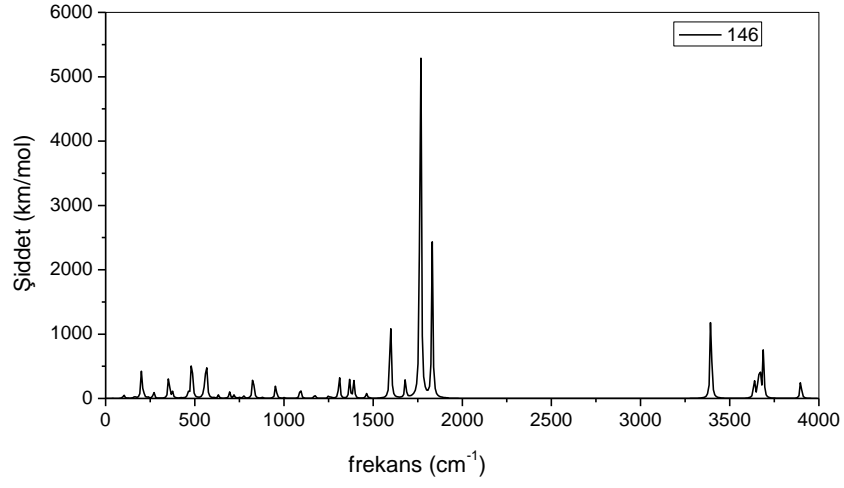
Şekil 5.21 UA için Majoube ve Vergoten'nin çektiği kızılötesi spektrumun deneysel ve hesaplanan değerlerinin korelasyonunun doğrusallığa uydurulması.



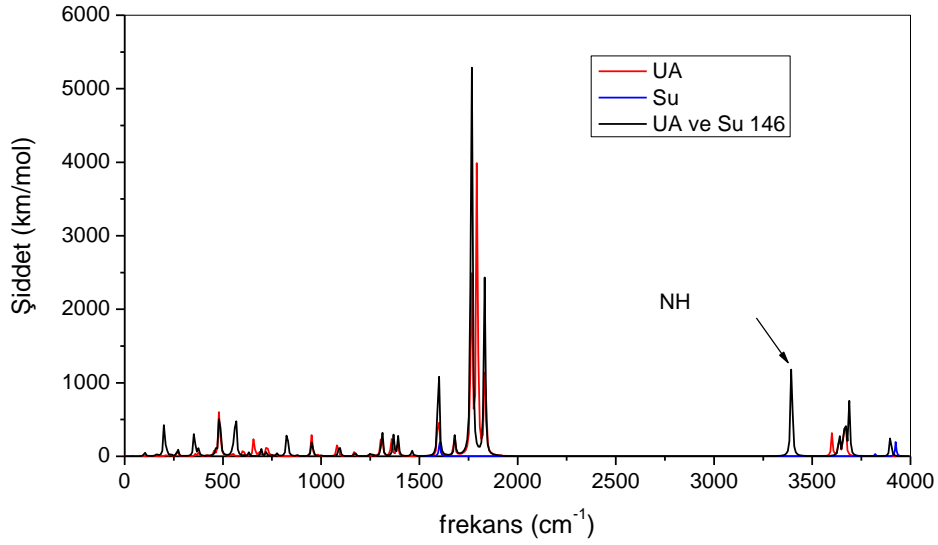
## 5.8 ÜRİK ASİT VE SU MOLEKÜLÜNÜN ETKİLEŞİMİNİN KIZILÖTESİ SPEKTRUM ANALİZİ

### 5.8.1 146 Kodlu Etkileşimin Kızılötesi Spektrum Analizi

146 kodlu etkileşimde en belirgin kaymanın görüldüğü H6-N10 bağının gerilme titreşiminin dalgasayısı  $3600\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $3395\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti  $91\text{ km/mol}$  değerinden  $479\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir (Şekil 5.22, 23). Buradaki H6-N10 bağının kipe bağlı katkısı %78.3 iken %36.4 değerine düşmüştür ve ek olarak H6 atomunun suyun oksijeni ile gerilme titreşiminin katkısı %27 olmuştur. Bu etkileşim sonrası ürik asidin toplam kip sayısı 42'den 51'e yükselmiştir. Bu kiplerden 3 tanesi tamamen su titreşim katkılarını içermektedir. Bunlar  $1599\text{ cm}^{-1}$ ,  $3688\text{ cm}^{-1}$  ve  $3898\text{ cm}^{-1}$  dalgasayılarındaki kiplerdir.



Şekil 5.22 146 kodlu etkileşimin, ürik asidin ve suyun ayrı ayrı kızılötesi spektrumu.



Şekil 5.23 146 kodlu etkileşimin, ürik asidin ve suyun aynı şiddet ve frekans eksenlerinde kızılötesi spektrumunun gösterimi.

## i. C=O titreşimleri

### a. Gerilme Titreşimleri

Etkileşimden önce C=O gerilme titreşimini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 37. normal kipinde C1-O14 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %15'dir. Bu kip etkileşimden sonra 44. normal kipine kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %5.1 değerinde olmuştur. Bu kipi dalgasayısı  $1794 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1767 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $1335 \text{ km/mol}$  değerinden  $1007 \text{ km/mol}$  değerine düşmüştür. Aynı kipte C4-O15 gerilme titreşiminin etkileşimden önce %5 değerinin üstünde bir katkısı yokken, etkileşimden sonra %7.8 değerinde bir katkısı olmuştur. Bu kipe etkileşimden sonra H6-O17 hidrojen bağını içeren gerilme ve düzlem içi bükülme titreşimleri de katkı vermiştir.

Etkileşimden önce C=O gerilme titreşimini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 38. normal kipinde C5-O16 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %14.8'dir. Bu kip etkileşimden sonra 45. normal kipine kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %15.8 olmuştur. Bu kipi dalgasayısı  $1835 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1832$

cm<sup>-1</sup> değerine kaymıştır ve şiddet değeri 502 km/mol değerinden 698 km/mol değerine yükselmiştir.

### **b. Düzlem dışı bükülme titreşimleri**

Etkileşimden önce C=O düzlem dışı bükülme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 15. normal kipinde C1-O14 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkısı %9.9'dur. Bu kip etkileşimden sonra 27. normal kipine kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %6.9 olmuştur. Bu kipi dalgasayısı 606 cm<sup>-1</sup> değerinden 827 cm<sup>-1</sup> değerine kaymıştır ve şiddet değeri 15 km/mol değerinden 140 km/mol değerine yükselmiştir. Aynı kipte C4-O15 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin katkısı %8.6 iken %6.8 olmuştur. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla H6-O17 hidrojen bağını içeren burulma titreşimleri katkı vermiştir.

## **ii. N-H Titreşimleri**

### **a. Gerilme Titreşimleri.**

Etkileşim sonucu su molekülü ile hidrojen bağı kuran bağ türlerinden biri de N-H bağlarıdır. Etkileşimden önce NH gerilme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 39. normal kipinde N10-H6 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %78.3 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 46. normal kipine kaymıştır. Bu kipi dalgasayısı 3600 cm<sup>-1</sup> değerinden 3395 cm<sup>-1</sup> değerine kaymıştır ve şiddet değeri 91 km/mol değerinden 479 km/mol değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla katkıyı yine N10-H6 bağlarının gerilme titreşimi %36.4 değerinde vermiştir. H6-O17 hidrojen bağının gerilme titreşiminin katkısı ise %27 değerinde olmuştur.

### **b. Düzlem dışı bükülme titreşimleri.**

Etkileşimden önce NH düzlem dışı bükülme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 15. normal kipinde N10-H6 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkısı toplamda %21.6 iken etkileşimden sonra %12 değerinde olmuştur. Bu kip etkileşimden sonra 27. normal kipine kaymıştır. Bu kipi dalgasayısı 606 cm<sup>-1</sup> değerinden 827 cm<sup>-1</sup> değerine kaymıştır ve şiddet değeri 15 km/mol

değerinden 140 km/mol değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla H6-O17 hidrojen bağına içeren burulma titreşimleri katkı vermiştir.

### c. Düzlem içi bükülme titreşimleri.

Etkileşimden önce NH düzlem içi bükülme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 32. normal kipinde C1-N10-H6, C4-N10-H6, C1-N11-H7, C2-N11-H7, C2-N13-H9, C5-N13-H9 açılarının düzlem içi bükülme titreşiminin kipe katkıları sırasıyla %17.2, %16.8, %5.8, %6.4, %7.4 ve %7.3 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 38. normal kipine kaymıştır. Bu kipin dalgasayısı  $1414 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1462 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri 1 km/mol değerinden 25 km/mol değerine yükselmiştir. Etkileşimden sonra sadece C1-N10-H6 ve C4-N10-H6 açılarının % 5 değerinin üstünde, sırasıyla %11.7 ve %11.5 katkıları olmuştur. Bu kipe etkileşimden sonra H6-O17 hidrojen bağına yer aldığı gerilme titreşiminin katkısı %11.5, N10-H6-O17 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin katkısı ise %15.6 değerinde olmuştur.

34. normal kipinde N-H bağlarını içeren C1-N11-H7 ve C2-N11-H7 açılarının düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi %7.5 ve %9.2 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 40. normal kipine kaymıştır. Bu kipin dalgasayısı  $1596 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1597 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri 234 km/mol değerinden 323 km/mol değerine yükselmiştir. Bu kipte etkileşimden sonra C2-N11-H7 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin kipe katkısı %5.8 olmuştur. C1-N11-H7 açısının %5 değerinin üstünde katkısı olmamıştır. Su molekülünün düzlem içi bükülme titreşiminin katkısı ise %6.4 olmuştur.

37. normal kipinde C1-N10-H6 açısını içeren düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi %7.5, C1-N11-H7 açısını içeren düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi %8.1 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 44. normal kipine kaymıştır. Bu kipin dalgasayısı  $1794 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1767 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri 1335 km/mol değerinden 1007 km/mol değerine düşmüştür. Bu kipte de etkileşimden sonra C1-N10-H6 açısının katkısı %6.2, C4-N10-H6 açısının ise etkileşimden önce %5'in üstünde olmamasına karşın etkileşimden sonra %7.2 olmuştur. H6-O17 hidrojen bağına yer aldığı gerilme titreşiminin katkısı %5.1, N10-H6-O17 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin katkısı ise %6.7 değerinde olmuştur.

38. normal kipinde C5-N12-H8 açısını içeren düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi %6.4, C5-N13-H9 açısını içeren düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi %6.5 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 45. normal kipine kaymıştır. Bu kipi dalgasayısı  $1835 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1832 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $502 \text{ km/mol}$  değerinden  $698 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Etkileşimden sonra C5-N12-H8 açısı %6.8, C5-N13-H9 açısı %7 katkı vermiştir.

### iii. Halka titreşimleri

#### a. Gerilme Titreşimleri

Ürik asit molekülünün halka yapısı içindeki gerilme titreşimlerinden C-C bağına ait olan ve titreşim kipi frekansında en belirgin kayma ya da şiddetinde değişiklik gözlenen kiplerden 37. normal kipte C3-C4 bağı gerilme titreşiminin normal kipe katkısı %5'in üstünde değilken, etkileşimden sonra 44. normal kipinde %5.3 değerindedir. Dalgasayısı  $1794 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1767 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti de  $1335 \text{ km/mol}$  değerinden  $1007 \text{ km/mol}$  değerine düşmüştür. Aynı kipte C-N bağı gerilme titreşimlerinin katkıları ise C1-N10 için %7, C1-N11 için %5.8 iken etkileşimden sonra %5 değerinin üstünde olmamıştır.

38. normal kip etkileşimden sonra 45. normal kipe kaymıştır. Dalgasayısı  $1835 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1831 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti de  $502 \text{ km/mol}$  değerinden  $23 \text{ km/mol}$  değerine düşmüştür. Bu kipte C-N bağı gerilme titreşimlerinin katkıları ise C5-N12 için %8.1, C5-N13 için %5.7 iken etkileşimden sonra C5-N12 için %8.5 ve C5-N13 için %6.1 değerinde olmuştur.

#### b. Düzlem içi bükülme titreşimleri.

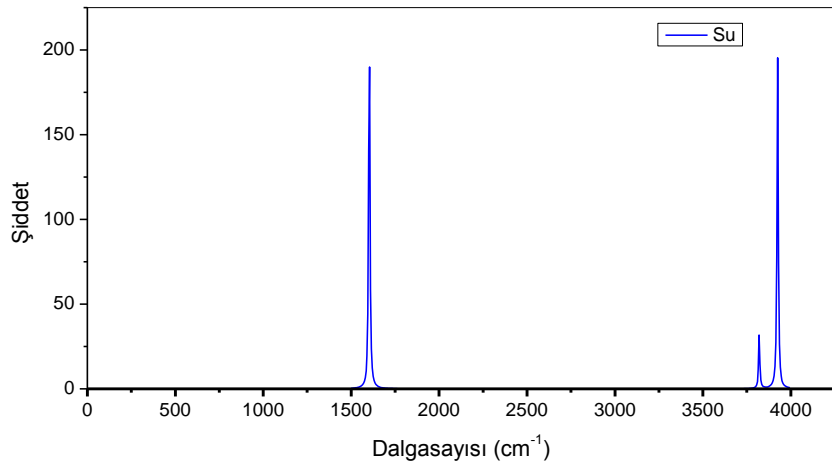
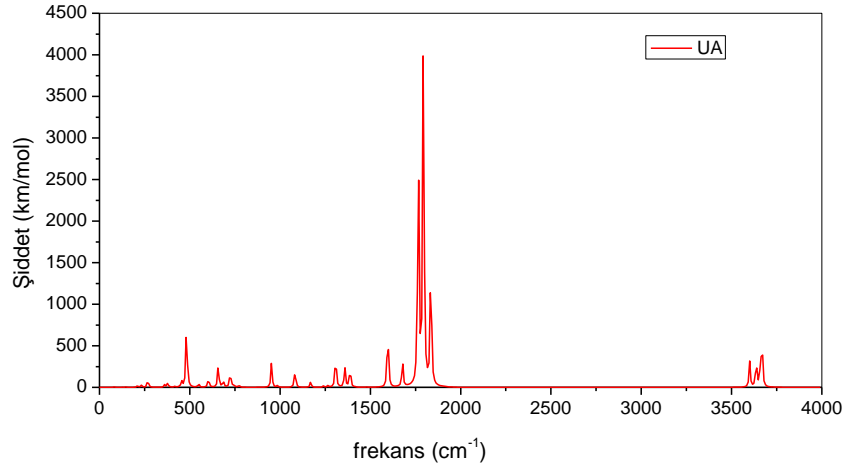
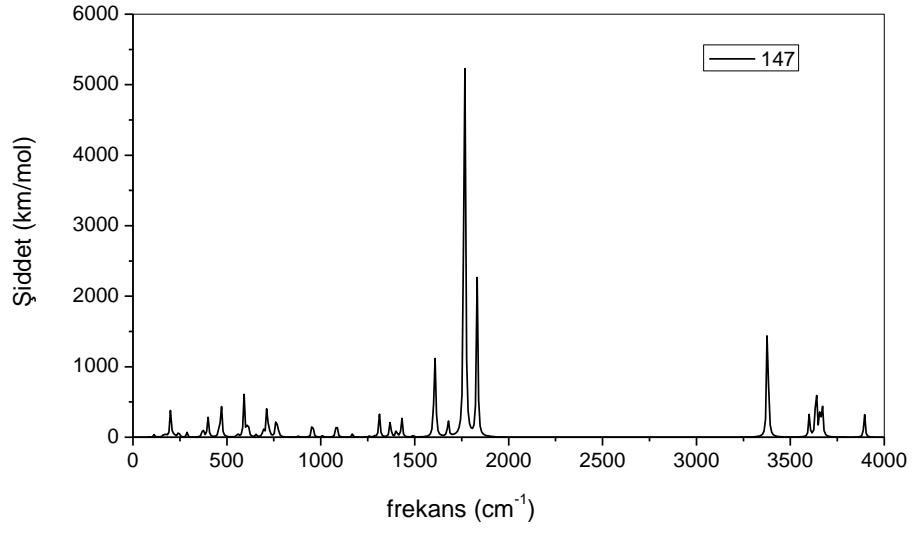
Ürik asit molekülünün halka yapısını oluşturan C3-C2-N11 açısının 34. normal kipinde katkısı %5.8 iken etkileşimden sonra %5 değerinin üstünde değildir. Bu kip 40. normal kipine ve  $1596 \text{ cm}^{-1}$  dalgasayısı değerinden  $1597 \text{ cm}^{-1}$  dalgasayısına kaymıştır ve şiddeti de  $234 \text{ km/mol}$  değerinden  $323 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

37. normal kipinde N10-C1-N11 açısının katkısı %6.9 iken etkileşimden sonra %5'in üstünde değildir. 44. normal kipi kayan kipi dalgasayısı  $1794\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1767\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti  $1335\text{ km/mol}$  değerinden  $1007\text{ km/mol}$  değerine düşmüştür.

38. normal kipinde N12-C5-N13 açısının kipi katkısı %6.4 iken, etkileşimden sonra %6.8 olmuştur. 45. normal kipi kayan kipi dalgasayısı  $1835\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1832\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır, şiddeti ise  $502\text{ km/mol}$  değerinden  $698\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

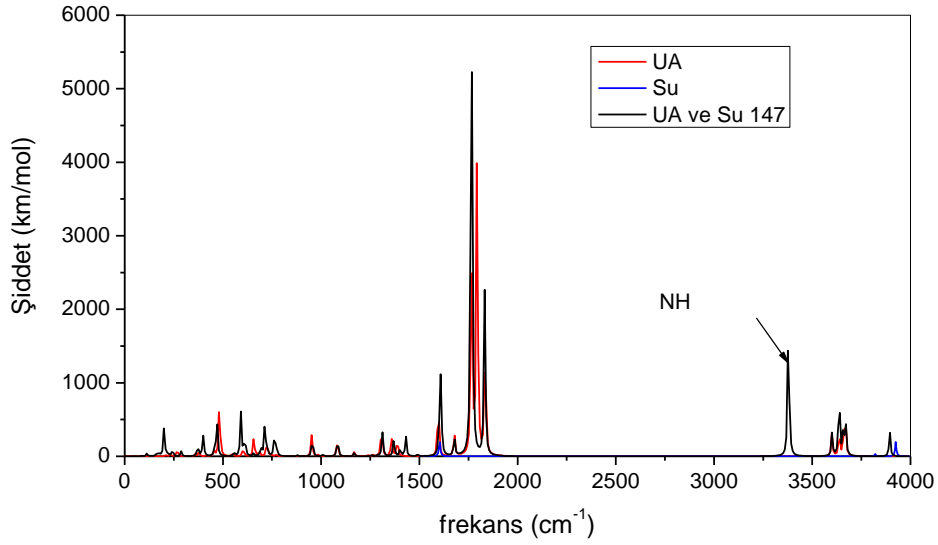
### **5.8.2 147 Kodlu Etkileşimin Kızılötesi Spektrum Analizi.**

147 kodlu etkileşimde en belirgin kaymanın görüldüğü H7-N11 bağının gerilme titreşiminin dalgasayısı  $3637\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $3379\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti  $104\text{ km/mol}$  değerinden  $607\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir (Şekil 5.24, 25). Buradaki H7-N11 bağının kipi bağı katkısı %76.8 iken %34.6 değerine düşmüştür ve ek olarak H7 atomunun suyun oksijeni ile gerilme titreşiminin katkısı %25.6 olmuştur. Bu etkileşim sonrası da ürik asidin toplam kipi sayısı 42'den 51'e yükselmiştir.



Şekil 5.24 147 kodlu etkileşimin, ürik asidin ve suyun ayrı ayrı kızılötesi spektrumu.





Şekil 5.25 147 kodlu etkileşimin, ürik asidin ve suyun aynı şiddet ve frekans eksenlerinde kızılötesi spektrumunun gösterimi.

## i. C=O titreşimleri

### a. Gerilme Titreşimleri

Etkileşimden önce C=O gerilme titreşimini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 36. normal kipinde C4-O15 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %17'dir. Bu kip etkileşimden sonra 43. normal kipine kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %6.8 değerinde olmuştur. Bu kipi dalgasayısı 1766 cm<sup>-1</sup> değerinden 1764 cm<sup>-1</sup> değerine kaymıştır ve şiddet değeri 929 km/mol değerinden 1178 km/mol değerine yükselmiştir. Aynı kipte C1-O14 gerilme titreşiminin etkileşimden önce %5 değerinin üstünde bir katkısı yokken, etkileşimden sonra %6.3 değerinde bir katkısı olmuştur.

37. normal kipinde C1-O14 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %15'dir. Bu kip etkileşimden sonra 44. normal kipine kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %6.8 değerinde olmuştur. Bu kipi dalgasayısı 1794 cm<sup>-1</sup> değerinden 1768 cm<sup>-1</sup> değerine kaymıştır ve şiddet değeri 1335 km/mol değerinden 938 km/mol değerine düşmüştür. Aynı kipte C4-O15 gerilme titreşiminin etkileşimden önce %5 değerinin üstünde bir katkısı yokken, etkileşimden sonra %7.2 değerinde bir katkısı olmuştur.

Etkileşimden önce C=O gerilme titreşimini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 38. normal kipinde C5-O16 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %14.8'dir. Bu kip etkileşimden sonra 45. normal kipine kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %14.6 olmuştur. Bu kipi dalgasayısı  $1835\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1833\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $502\text{ km/mol}$  değerinden  $659\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

### **b. Düzlem içi bükülme titreşimleri**

Etkileşimden önce 36. normal kipinde C=O bağını içeren N10-C4-O15 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin kipe katkısı %5.4 iken etkileşimden sonra 43. normal kipe %5'in üstünde bir katkısı yoktur. 43. normal kipe kayan bu kipi dalgasayısı  $1766\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1764\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti  $929\text{ km/mol}$  değerinden  $1178\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

### **c. Düzlem dışı bükülme titreşimleri**

Etkileşimden önce C=O düzlem dışı bükülme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 9. normal kipinde C1-O14 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkısı %11.2, C5-O16 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkısı ise %8'dir. Bu kip etkileşimden sonra 26. normal kipine kaymıştır ve C1-O14 bağının titreşime katkısı %6.3 olmuştur. C5-O16 bağının katkısı ise etkileşimden sonra %5'in üstünde olmamıştır. Bu kipi dalgasayısı  $417\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $764\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $3\text{ km/mol}$  değerinden  $107\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla H7-O17 hidrojen bağını içeren burulma titreşimleri katkı vermiştir.

## **ii. N-H Titreşimleri**

### **a. Gerilme Titreşimleri.**

Etkileşim sonucu su molekülü ile hidrojen bağı kuran bağı türlerinden biri de N-H bağlarıdır. Etkileşimden önce NH gerilme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 40. normal kipinde N11-H7 bağının gerilme

titreşiminin kipe katkısı %76.8 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 46. normal kipine kaymıştır. Bu kpin dalgasayısı  $3637\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $3379\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $104\text{ km/mol}$  değerinden  $607\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla katkıyı yine N11-H7 bağlarının gerilme titreşimi %34.6 değerinde vermiştir. H7-O17 hidrojen bağının gerilme titreşiminin katkısı ise %25.6 değerinde olmuştur.

#### **b. Düzlem dışı bükülme titreşimleri.**

Etkileşimden önce NH düzlem dışı bükülme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 9. normal kipinde N11-H7 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkısı toplamda %35.5 ve N12-H8 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin toplam katkısı ise %22.7 iken etkileşimden sonra %5 değerinin altında olmuştur. Bu kip etkileşimden sonra 26. normal kipine kaymıştır. Bu kpin dalgasayısı  $417\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $764\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $3\text{ km/mol}$  değerinden  $107\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla H7-O17 hidrojen bağını içeren burulma titreşimleri katkı vermiştir.

#### **c. Düzlem içi bükülme titreşimleri.**

Etkileşimden önce NH düzlem içi bükülme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 33. normal kipinde C1-N11-H7, C2-N11-H7, C3-N12-H8 ve C5-N12-H8 açılarının düzlem içi bükülme titreşiminin kipe katkıları sırasıyla %6.2, %6.4, %7.2, ve %7.4 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 38. normal kipine kaymıştır. Bu kpin dalgasayısı  $1478\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1431\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $1\text{ km/mol}$  değerinden  $84\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Etkileşimden sonra C1-N11-H7, C2-N11-H7, C2-N13-H9 ve C5-N13-H9 açılarının katkıları sırasıyla %7, %6.4, %6.1, ve %6.8 değerindedir. C2-N13-H9 ve C5-N13-H9 açılarının katkıları etkileşimden sonra %5 değerinin üstüne çıkmıştır. Bu kipe etkileşimden sonra H7-O17 hidrojen bağının yer aldığı gerilme titreşiminin katkısı %7.7, N11-H7-O17 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin katkısı ise %9.9 değerinde olmuştur.

34. normal kipinde N-H bağlarını içeren C1-N11-H7 ve C2-N11-H7 açılarının düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi %7.5 ve %9.2 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 39. normal kipine kaymıştır. Bu kpin dalgasayısı  $1596\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1492\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve

şiddet değeri 234 km/mol değerinden 10 km/mol değerine düşmüştür. Bu kipte etkileşimden sonra C1-N11-H7 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin kipe katkısı %6.1, C2-N11-H7 açısının ise %5.9 olmuştur. Bu kipe etkileşimden sonra H7-O17 hidrojen bağının yer aldığı gerilme titreşiminin katkısı %5.7, N11-H7-O17 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin katkısı ise %8 değerinde olmuştur.

36. normal kipinde N-H bağlarını içeren C1-N10-H6 ve C4-N10-H6 açılarının düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi %5.6 ve %9.8 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 43. normal kipine kaymıştır. Bu kipi dalgasayısı  $1766 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1764 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri 929 km/mol değerinden 1178 km/mol değerine yükselmiştir. Bu kipte etkileşimden sonra C1-N10-H6 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin kipe katkısı %5.7, C4-N10-H7 açısının ise %6.2 olmuştur. C1-N11-H7 açısının etkileşimden önce katkısı %5'in altında iken etkileşimden sonra %5 olmuştur.

37. normal kipinde C1-N10-H6 açısını içeren düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi %7.5, C1-N11-H7 açısını içeren düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi %8.1 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 44. normal kipine kaymıştır. Bu kipi dalgasayısı  $1794 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1768 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri 1335 km/mol değerinden 938 km/mol değerine düşmüştür. Bu kipte de etkileşimden sonra C1-N11-H7 açısının katkısı %5.6, C1-N10-H6 açısının ise %5'in üstünde olmamıştır. H7-O17 hidrojen bağını içeren N11-H7-O17 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin katkısı ise %5.3 değerinde olmuştur.

38. normal kipinde C5-N12-H8 açısını içeren düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi %6.4, C5-N13-H9 açısını içeren düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi %6.5 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 45. normal kipine kaymıştır. Bu kipi dalgasayısı  $1835 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1833 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri 502 km/mol değerinden 659 km/mol değerine yükselmiştir. Etkileşimden sonra C5-N12-H8 ve C5-N13-H9 açısı %6.4'er katkı vermiştir.

### iii. Halka titreşimleri

#### a. Gerilme Titreşimleri

Ürik asit molekülünün halka yapısı içindeki gerilme titreşimlerinden C-C bağına ait olan ve titreşim kipi frekansında en belirgin kayma ya da şiddetinde değişiklik gözlenen kiplerden

33. normal kipte C3-C4 baęının gerilim titreşiminin normal kipe katkısı %6.8, etkileşimden sonra 38. normal kipinde %5'in altındadır. Dalgasayısı 1478  $\text{cm}^{-1}$  değerinden 1431  $\text{cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti de 1 km/mol değerinden 84 km/mol değerine yükselmiştir. Aynı kipte C-N baęı gerilme titreşimlerinin katkıları ise C3-N12 için %7 iken etkileşimden sonra %5 değerinin üstünde olmamıştır. C2-N13 baęının gerilme titreşiminin etkileşimden önce %5'in üstünde katkısı yokken, etkileşimden sonra %5.7 katkısı olmuştur. Etkileşimden sonra H7-O17 hidrojen baęının gerilme titreşimi ise %7.7 katkı verirken, N11-H7-O17 açısının katkısı %9.9 olmuştur.

34. normal kipinde C2-N11 ve C2-N13 baęlarının gerilme titreşimlerinin katkıları %8.1 ve %8.3 değerinde iken etkileşimden sonra bu iki titreşimin katkısı %5 değerinin altında olmuştur. 39. normal kipe kayan bu kipin dalgasayısı 1596  $\text{cm}^{-1}$  değerinden 1492  $\text{cm}^{-1}$  değerine kaymıştır. Şiddeti ise 234 km/mol değerinden 10 km/mol değerine düşmüştür. C3-N13 baęının katkısı ise etkileşimden sonra %5 değerinin üstüne çıkarak %5.9 olmuştur.

36. normal kipinde C3-C4 ve C4-N10 baęlarının gerilme titreşimlerinin katkıları %11.5 ve %5 değerinde iken etkileşimden sonra bu iki titreşimin katkısı %5 değerinin altında olmuştur. 43. normal kipe kayan bu kipin dalgasayısı 1766  $\text{cm}^{-1}$  değerinden 1764  $\text{cm}^{-1}$  değerine kaymıştır. Şiddeti ise 929 km/mol değerinden 1178 km/mol değerine yükselmiştir.

37. normal kipinde C1-N10 ve C1-N11 baęlarının gerilme titreşimlerinin katkıları %7 ve %5.8 değerinde iken etkileşimden sonra bu iki titreşimin katkısı %5 değerinin altında olmuştur. 44. normal kipe kayan bu kipin dalgasayısı 1794  $\text{cm}^{-1}$  değerinden 1768  $\text{cm}^{-1}$  değerine kaymıştır. Şiddeti ise 1335 km/mol değerinden 938 km/mol değerine düşmüştür. C3-C4 baęının katkısı ise etkileşimden sonra %5 değerine çıkmıştır.

38. normal kipinde C5-N12 ve C5-N13 baęlarının gerilme titreşimlerinin katkıları %8.1 ve %5.7 değerinde iken etkileşimden sonra bu iki titreşimin katkıları %7.8 ve %5.7 olmuştur. 45. normal kipe kayan bu kipin dalgasayısı 1835  $\text{cm}^{-1}$  değerinden 1833  $\text{cm}^{-1}$  değerine kaymıştır. Şiddeti ise 502 km/mol değerinden 659 km/mol değerine yükselmiştir.

## **b. Düzlem içi bükülme titreşimleri**

Ürik asit molekülünün halka yapısını oluşturan C3-C2-N11 açısının 34. normal kipinde katkısı %5.8 iken etkileşimden sonra %5 değerinin üstünde değildir. Bu kip 39. normal kipine ve  $1596\text{ cm}^{-1}$  dalgasayısı değerinden  $1492\text{ cm}^{-1}$  dalgasayısına kaymıştır ve şiddeti de  $234\text{ km/mol}$  değerinden  $10\text{ km/mol}$  değerine düşmüştür.

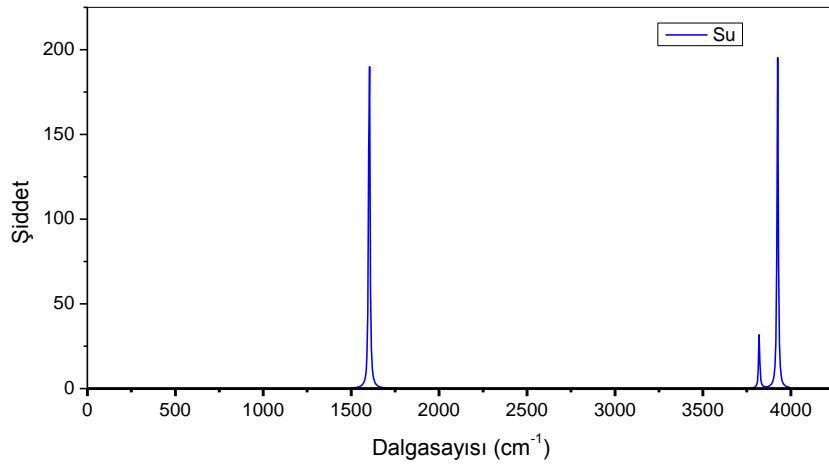
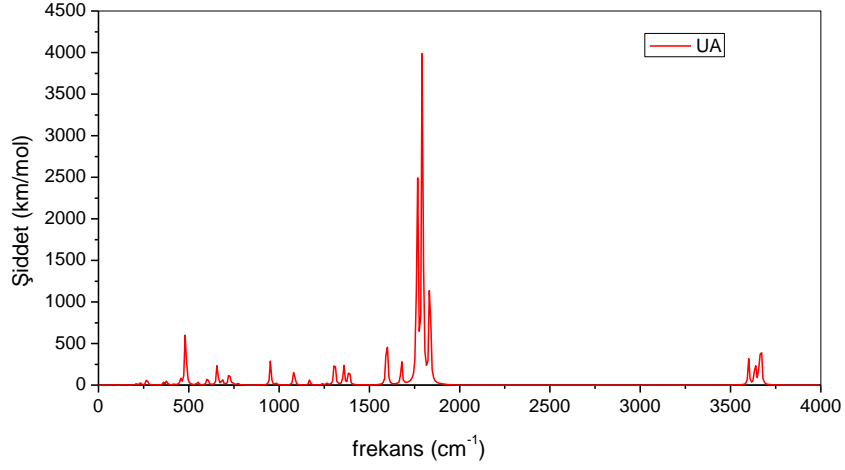
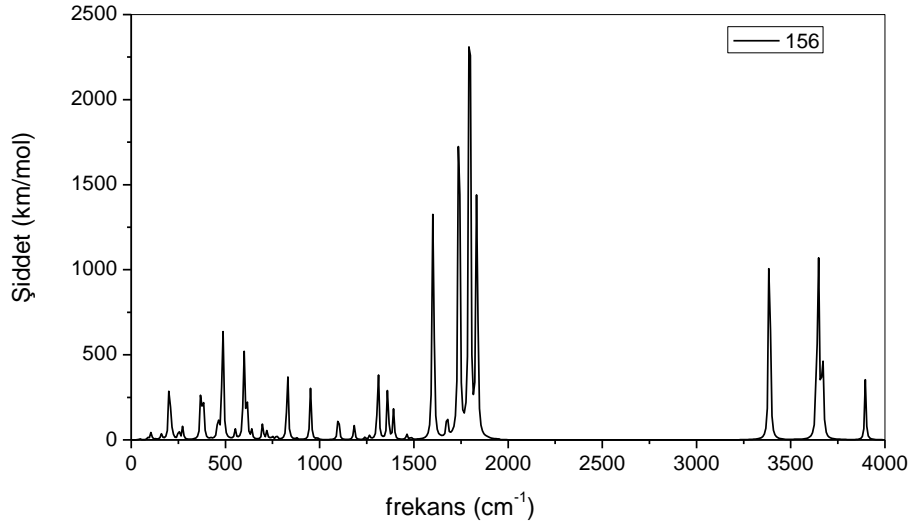
36. normal kipinde C3-C4-N10 açısının katkısı %7.3 iken etkileşimden sonra %5'in üstünde değildir. 43. normal kipine kayan kipe dalgasayısı  $1766\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1764\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti  $929\text{ km/mol}$  değerinden  $1178\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

37. normal kipinde N10-C1-N11 açısının kipe katkısı %6.9 iken, etkileşimden sonra 5'in üstünde değildir. 44. normal kipe kayan kipe dalgasayısı  $1794\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1768\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır, şiddeti ise  $1335\text{ km/mol}$  değerinden  $938\text{ km/mol}$  değerine düşmüştür.

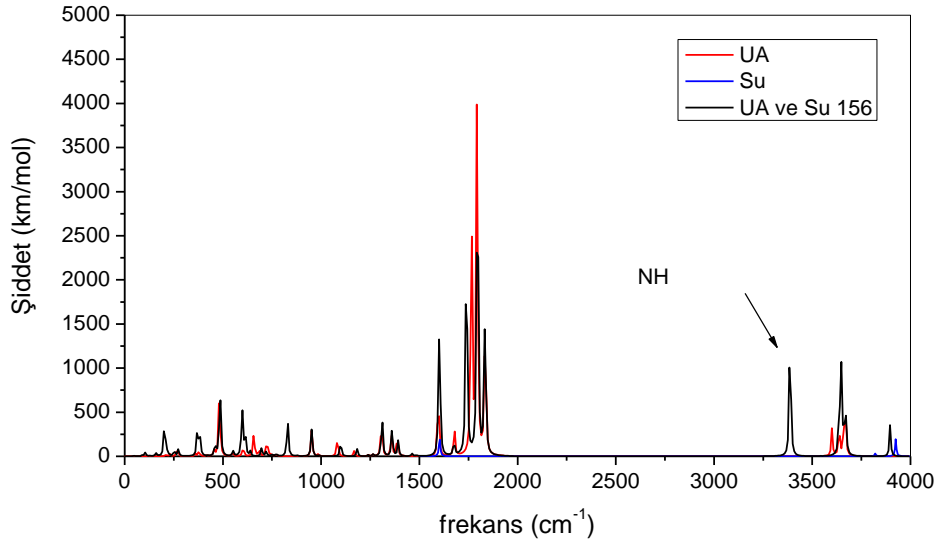
38. normal kipinde N12-C5-N13 açısının kipe katkısı %6.4 iken, etkileşimden sonra %6.3 olmuştur. 45. normal kipe kayan kipe dalgasayısı  $1835\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1833\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır, şiddeti ise  $502\text{ km/mol}$  değerinden  $659\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

### **5.8.3 156 Kodlu Etkileşimin Kızılötesi Spektrum Analizi**

156 kodlu etkileşimde en belirgin kaymanın görüldüğü H6-N10 bağının gerilme titreşiminin dalgasayısı  $3600\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $3387\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti  $90\text{ km/mol}$  değerinden  $465\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir (Şekil 5.26, 27). Buradaki H6-N10 bağının kipe bağıl katkısı %78.3 iken %35.8 değerine düşmüştür ve ek olarak H6 atomunun suyun oksijeni ile gerilme titreşiminin katkısı %26.4 olmuştur. Bu etkileşim sonrası da ürik asidin toplam kip sayısı 42'den 51'e yükselmiştir.



Şekil 5.26 156 kodlu etkileşimin, ürik asidin ve suyun ayrı ayrı kızılötesi spektrumu.



Şekil 5.27 156 kodlu etkileşimin, ürik asidin ve suyun aynı şiddet ve frekans eksenlerinde kızılötesi spektrumunun gösterimi.

## i. C=O titreşimleri

### a. Gerilme Titreşimleri

Etkileşimden önce C=O gerilme titreşimini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 38. normal kipinde C5-O16 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %14.8'dir. Bu kip etkileşimden sonra 45. normal kipine kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %14.4 değerinde olmuştur. Bu kipi dalgasayısı  $1835 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1834 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $502 \text{ km/mol}$  değerinden  $553 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

### b. Düzlem dışı bükülme titreşimleri

Etkileşimden önce C=O düzlem dışı bükülme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 15. normal kipinde C1-O14 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkısı %9.9, C4-O15 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkısı ise %8.6'dır. Bu kip etkileşimden sonra 27. normal kipine kaymıştır ve C1-O14 bağının titreşime katkısı %6.7 olmuştur. C5-O16 bağının katkısı ise etkileşimden sonra %6.8 olmuştur. Bu kipi dalgasayısı  $606 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $830 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $15 \text{ km/mol}$  değerinden  $142 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe



etkileşimden sonra en fazla H6-O17 hidrojen bağına içeren burulma titreşimleri katkı vermiştir.

## ii. N-H Titreşimleri

### a. Gerilme Titreşimleri

Etkileşim sonucu su molekülü ile hidrojen bağı kuran bağ türlerinden biri de N-H bağlarıdır. Etkileşimden önce N-H gerilme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 39. normal kipinde N10-H6 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %78.3 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 46. normal kipiye kaymıştır. Bu kipi dalgasayısı  $3600\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $3387\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $91\text{ km/mol}$  değerinden  $466\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla katkıyı yine N10-H6 bağlarının gerilme titreşimi %35.8 değerinde vermiştir. H6-O17 hidrojen bağının gerilme titreşiminin katkısı ise %26.4 değerinde olmuştur.

### b. Düzlem dışı bükülme titreşimleri

Etkileşimden önce NH düzlem dışı bükülme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 15. normal kipinde N10-H6 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkısı toplamda %21.6 olmuştur. Bu kip etkileşimden sonra 26. normal kipiye kaymıştır. Etkileşimden sonra katkısı %11.9 olmuştur. Bu kipi dalgasayısı  $606\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $830\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $15\text{ km/mol}$  değerinden  $142\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla H6-O17 hidrojen bağına içeren burulma titreşimleri katkı vermiştir.

### c. Düzlem içi bükülme titreşimleri

Etkileşimden önce NH düzlem içi bükülme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 32. normal kipinde C1-N10-H6, C4-N10-H6, C1-N11-H7, C2-N11-H7, C2-N13-H9 ve C5-N13-H9 açılarının düzlem içi bükülme titreşiminin kipe katkıları sırasıyla %17.2, %16.8, %5.8, %6.4, %7.4 ve %7.3 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 38. normal kipiye kaymıştır. Bu kipi dalgasayısı  $1414\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1462\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $1\text{ km/mol}$  değerinden  $10\text{ km/mol}$

değerine yükselmiştir. Etkileşimden sonra C1-N10-H6 ve C4-N10-H6 açılarının katkıları sırasıyla %10.4, ve %10.3 değerindedir. Diğer açıların katkıları etkileşimden sonra %5 değerinin üstüne çıkmamıştır. Bu kipe etkileşimden sonra H7-O17 hidrojen bağının yer aldığı gerilme titreşiminin katkısı %10.5, N10-H6-O17 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin katkısı ise %13.9 değerinde olmuştur.

34. normal kipinde N-H bağlarını içeren C1-N11-H7 ve C2-N11-H7 açılarının düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi %7.5 ve %9.2 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 40. normal kipine kaymıştır. Bu kipi dalgasayısı  $1596\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1600\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $234\text{ km/mol}$  değerinden  $171\text{ km/mol}$  değerine düşmüştür. Bu kipte etkileşimden sonra C1-N11-H7 ve C2-N11-H7 açısının katkısı %5'in altında olmuştur. Bu kipe etkileşimden sonra H6-O17 ve O15-H18 hidrojen bağlarının yer aldığı burulma ve bükülme titreşimleri katkı sağlamaktadır.

38. normal kipinde C5-N12-H8 açısını içeren düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi %6.4, C5-N13-H9 açısını içeren düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi %6.5 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 45. normal kipine kaymıştır. Bu kipi dalgasayısı  $1835\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1834\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $502\text{ km/mol}$  değerinden  $553\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Etkileşimden sonra C5-N12-H8 ve C5-N13-H9 açısı %6.2 ve %6.3 katkı vermiştir.

### iii. Halka titreşimleri

#### a. Gerilme Titreşimleri

Ürik asit molekülünün halka yapısı içindeki gerilme titreşimlerinden C-N bağına ait olan ve titreşim kipi frekansında en belirgin kayma ya da şiddetinde değişiklik gözlenen kiplerden 34. normal kipte C2-N11 ve C2-N13 bağının gerilim titreşiminin normal kipe katkıları sırasıyla %8.1 ve %8.3'tür. Etkileşimden sonra 40. normal kipinde %5'in altındadır. Dalgasayısı  $1596\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1600\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti de  $234\text{ km/mol}$  değerinden  $171\text{ km/mol}$  değerine düşmüştür. Etkileşimden sonra H6-O17 ve O15-H18 hidrojen bağlarının bükülme ve burulma titreşimlerinin katkıları görünmektedir.

38. normal kipinde C5-N12 ve C5-N13 bağlarının gerilme titreşimlerinin katkıları %8.1 ve %5.7 değerinde iken etkileşimden sonra bu iki titreşimin katkıları %7.8 ve %5.5 olmuştur. 45. normal kipe kayan bu kipin dalgasayısı  $1835\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1834\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır. Şiddeti ise  $502\text{ km/mol}$  değerinden  $553\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Etkileşimden sonra H6-O17 ve O15-H18 hidrojen bağlarının bükülme ve burulma titreşimlerinin katkıları görünmektedir.

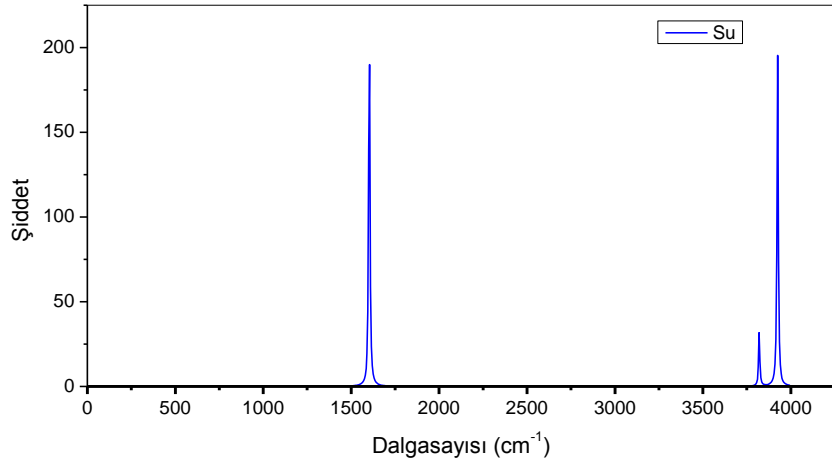
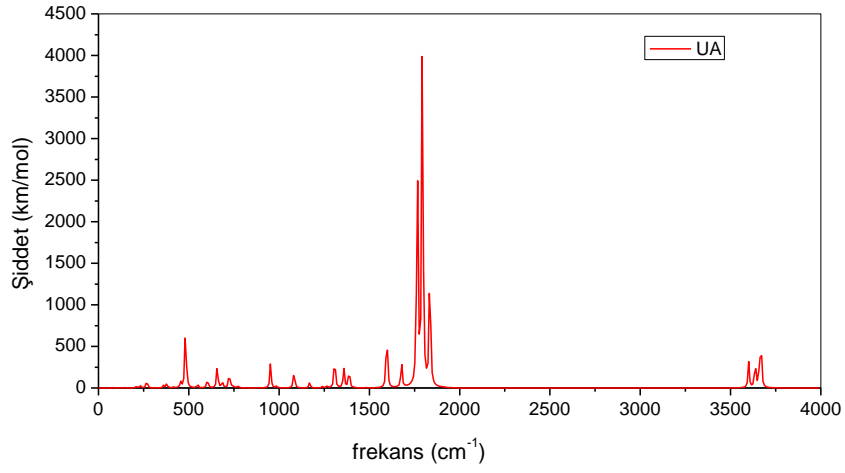
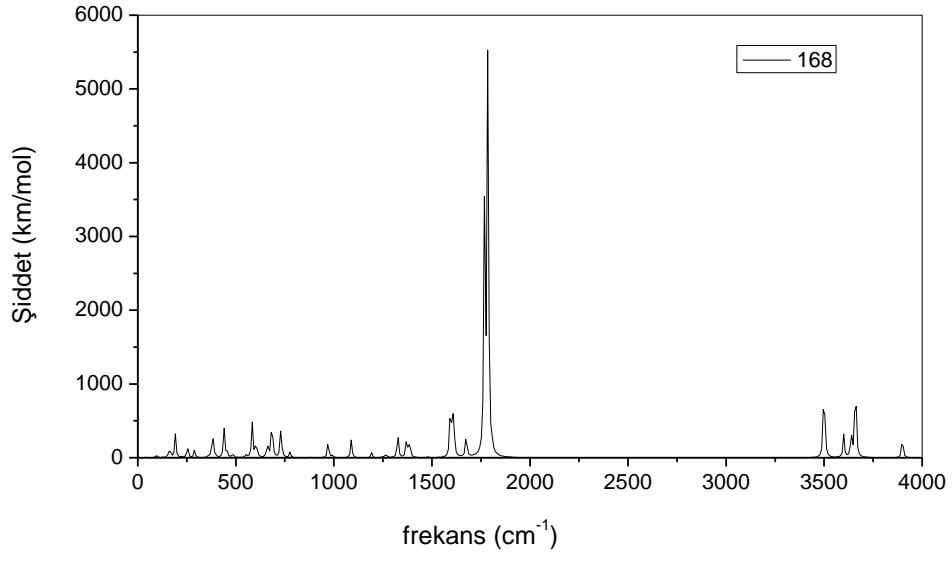
#### **b. Düzlem içi bükülme titreşimleri**

Ürik asit molekülünün halka yapısını oluşturan C3-C2-N11 açısının 34. normal kipinde katkısı %5.8 iken etkileşimden sonra %5 değerinin üstünde değildir. Bu kip 40. normal kipine ve  $1596\text{ cm}^{-1}$  dalgasayısı değerinden  $1600\text{ cm}^{-1}$  dalgasayısına kaymıştır ve şiddeti de  $234\text{ km/mol}$  değerinden  $171\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Etkileşimden sonra H6-O17 ve O15-H18 hidrojen bağlarının bükülme ve burulma titreşimlerinin katkıları görünmektedir.

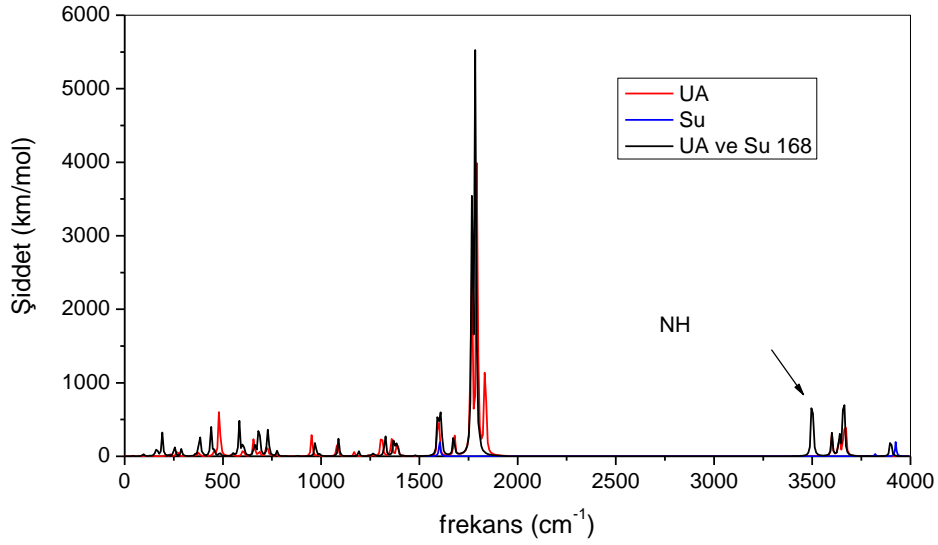
38. normal kipinde N12-C5-N13 açısının kipe katkısı %6.4 iken, etkileşimden sonra %6.2 olmuştur. 45. normal kipe kayan kipin dalgasayısı  $1835\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1834\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır, şiddeti ise  $502\text{ km/mol}$  değerinden  $553\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

#### **5.8.4 168 Kodlu Etkileşimin Kızılötesi Spektrum Analizi**

168 kodlu etkileşimde en belirgin kaymanın görüldüğü H8-N12 bağının gerilme titreşiminin dalgasayısı  $3670\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $3500\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti  $115\text{ km/mol}$  değerinden  $356\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir (Şekil 5.28, 29). Buradaki H8-N12 bağının kipe bağıl katkısı %77.3 iken %32.4 değerine düşmüştür ve ek olarak H8 atomunun suyun oksijeni ile gerilme titreşiminin katkısı %19.6 olmuştur. Bu etkileşim sonrası da ürik asidin toplam kip sayısı 42'den 51'e yükselmiştir.



Şekil 5.28 168 kodlu etkileşimin, ürik asidin ve suyun ayrı ayrı kızılötesi spektrumu.



Şekil 5.29 168 kodlu etkileşimin, ürik asidin ve suyun aynı şiddet ve frekans eksenlerinde kızılötesi spektrumunun gösterimi.

## i. C=O titreşimleri

### a. Gerilme Titreşimleri

Etkileşimden önce C=O gerilme titreşimini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 37. normal kipinde C1-O14 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %15'dir. Bu kip etkileşimden sonra 44. normal kipine kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %6 değerinde olmuştur. Bu kpin dalgasayısı  $1794 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1785 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $1335 \text{ km/mol}$  değerinden  $1686 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra C5-H18 hidrojen bağını içeren burulma titreşimleri de katkı vermiştir.

Etkileşimden önce C=O gerilme titreşimini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 38. normal kipinde C5-O16 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %14.8'dir. Bu kip etkileşimden sonra 45. normal kipine kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %15.8 olmuştur. Bu kpin dalgasayısı  $1835 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1808 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $502 \text{ km/mol}$  değerinden  $23 \text{ km/mol}$  değerine düşmüştür. Bu kipe etkileşimden sonra C5-H18 hidrojen bağını içeren burulma titreşimleri de katkı vermiştir.

## **b. Düzlem dışı bükülme titreşimleri**

Etkileşimden önce C=O düzlem dışı bükülme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 12. normal kipinde C1-O14 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkısı %5.7'dir. Bu kip etkileşimden sonra 22. normal kipine kaymıştır ve etkileşimden sonra bu bağın %5 değerinin üstünde bir katkısı olmamıştır. Bu kipi dalgasayısı  $482 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $683 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $231 \text{ km/mol}$  değerinden  $144 \text{ km/mol}$  değerine düşmüştür. Aynı kipte C4-O16 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin toplam katkısı %15.4 iken etkileşimden sonra %5 değerinin üstünde olmamıştır. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla H8-O17 hidrojen bağını içeren burulma titreşimleri katkı vermiştir.

## **ii. N-H Titreşimleri**

### **a. Gerilme Titreşimleri**

Etkileşim sonucu su molekülü ile hidrojen bağı kuran bağ türlerinden biri de N-H bağlarıdır. Etkileşimden önce NH gerilme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 41. normal kipinde N13-H9 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %75.5 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 49. normal kipine kaymıştır. Bu kipi dalgasayısı  $3661 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $3660 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $116 \text{ km/mol}$  değerinden  $275 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla katkıyı yine N13-H9 bağlarının gerilme titreşimi %24 değerinde vermiştir. O16-H18 hidrojen bağının gerilme titreşiminin katkısı ise %11.2 değerinde olmuştur. Su molekülünün O17-H18 bağının gerilme titreşiminin katkısı ise %15.2 olmuştur.

42. normal kipi ise etkileşimden sonra  $3670 \text{ cm}^{-1}$  dalgasayısından  $3500 \text{ cm}^{-1}$  dalgasayılı 46. normal kipine kaymıştır. Kipi şiddeti ise  $115 \text{ km/mol}$  değerinden  $356 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. N12-H8 bağının bu kipe katkısı %77.3 iken %32.4 olmuştur. Etkileşimden sonra H8-O17 hidrojen bağının katkısı da %19.6 değerinde olmuştur.

## **b. Düzlem dışı bükülme titreşimleri**

Etkileşimden önce NH düzlem dışı bükülme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 12. normal kipinde N11-H7 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkısı toplamda %16.8, N13-H9 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin %5.4, N12-H8 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin %24.7 olmuştur. Etkileşimden sonra sadece N12-H8 bağının katkısı olmuştur ve %5.9 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 22. normal kipine kaymıştır. Bu kipin dalgasayısı  $482 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $683 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $231 \text{ km/mol}$  değerinden  $144 \text{ km/mol}$  değerine düşmüştür. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla H8-O17 hidrojen bağını içeren burulma titreşimleri katkı vermiştir.

## **c. Düzlem içi bükülme titreşimleri.**

Etkileşimden önce NH düzlem içi bükülme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 37. normal kipinde C1-N10-H6 ve C1-N11-H7 açılarının düzlem içi bükülme titreşiminin kipe katkıları sırasıyla %7.5 ve %8.1 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 44. normal kipine kaymıştır. Bu kipin dalgasayısı  $1794 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1785 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $1335 \text{ km/mol}$  değerinden  $1686 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Etkileşimden sonra %5'in üstünde bir katkıları olmamıştır.

38. normal kipinde N-H bağlarını içeren C5-N12-H8 ve C5-N13-H9 açılarının düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi %6.4 ve %6.5 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 45. normal kipine kaymıştır. Bu kipin dalgasayısı  $1835 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1808 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $502 \text{ km/mol}$  değerinden  $23 \text{ km/mol}$  değerine düşmüştür. Bu kipte bu açıların etkileşimden sonra %5'in üstünde bir katkıları olmamıştır.

## **iii. Halka titreşimleri**

### **a. Gerilme Titreşimleri**

Ürik asit molekülünün halka yapısı içindeki gerilme titreşimlerinden C-C bağına ait olan ve titreşim kipinin frekansında en belirgin kayma ya da şiddetinde değişiklik gözlenen kiplerden

37. normal kip etkileşimden sonra 44. normal kipe kaymıştır. Dalgasayısı  $1794 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1767 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti de  $1335 \text{ km/mol}$  değerinden  $1007 \text{ km/mol}$  değerine düşmüştür. Bu kipte C-N bağı gerilme titreşimlerinin katkıları ise C1-N10 için %7, C1-N11 için %5.8 iken etkileşimden sonra %5 değerinin üstünde olmamıştır.

38. normal kip etkileşimden sonra 45. normal kipe kaymıştır. Dalgasayısı  $1835 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1808 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti de  $502 \text{ km/mol}$  değerinden  $23 \text{ km/mol}$  değerine düşmüştür. Bu kipte C-N bağı gerilme titreşimlerinin katkıları ise C5-N12 için %8.1, C5-N13 için %5.7 iken etkileşimden sonra %5 değerinin üstünde olmamıştır.

#### **b. Düzlem içi bükülme titreşimleri**

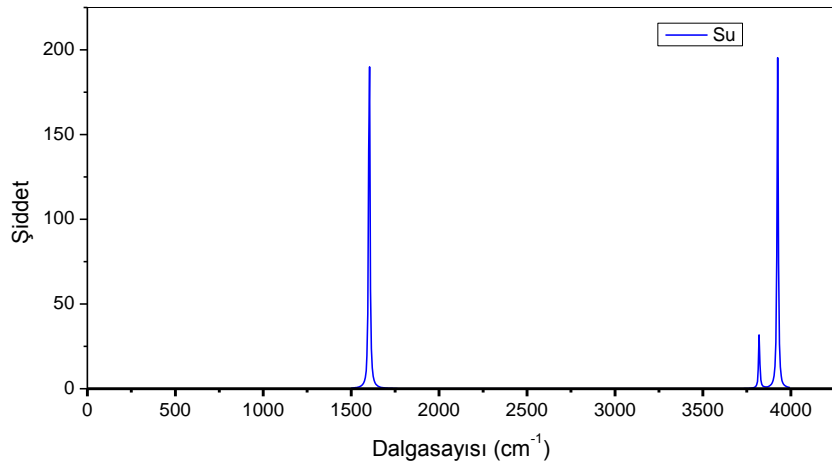
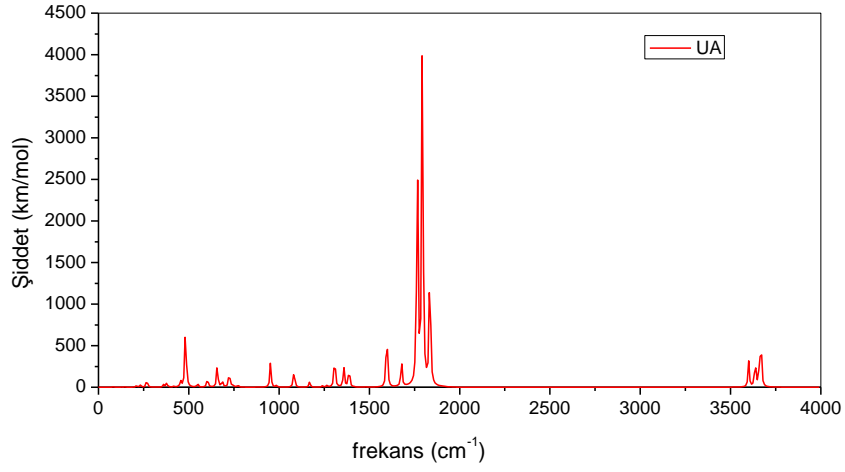
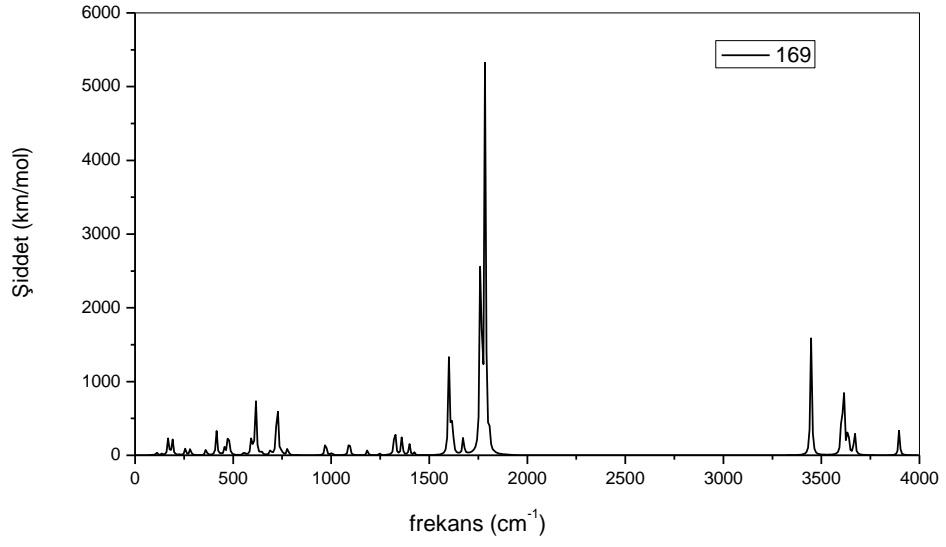
37. normal kipinde ürik asit molekülünün halka yapısını oluşturan N10-C1-N11 açısının katkısı %6.9 iken etkileşimden sonra %5'in üstünde değildir. 44. normal kipte kayan kipi dalgasayısı  $1794 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1785 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti  $1335 \text{ km/mol}$  değerinden  $1686 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

38. normal kipinde N12-C5-N13 açısının kipe katkısı %6.4 iken, etkileşimden sonra %5'in altında olmuştur. 45. normal kipte kayan kipi dalgasayısı  $1835 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1808 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır, şiddeti ise  $502 \text{ km/mol}$  değerinden  $23 \text{ km/mol}$  değerine düşmüştür.

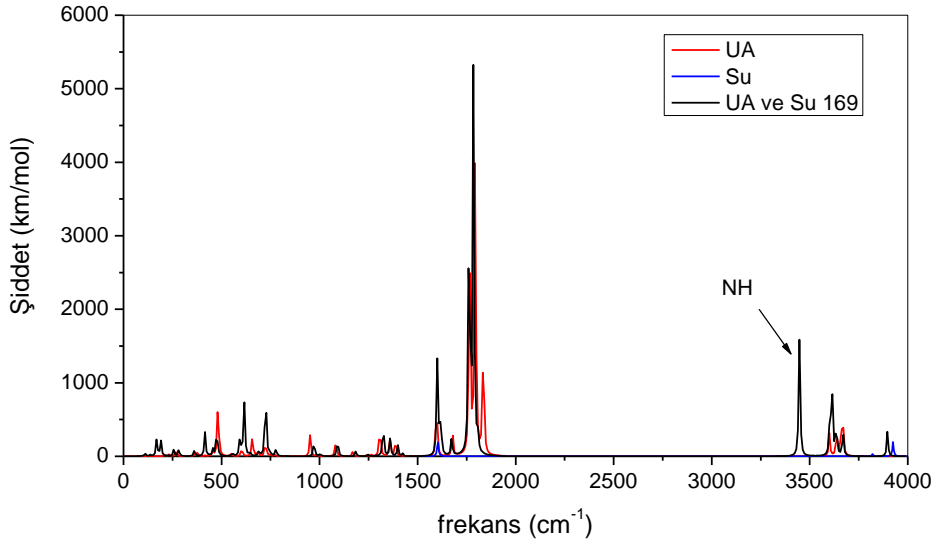
#### **5.8.5 169 Kodlu Etkileşimin Kızılötesi Spektrum Analizi**

169 kodlu etkileşimde en belirgin kaymanın görüldüğü H9-N13 bağının gerilme titreşiminin dalgasayısı  $3661 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $3448 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti  $116 \text{ km/mol}$  değerinden  $465 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir (Şekil 5.30, 31). Buradaki H9-N13 bağının kipe bağıl katkısı %75.5 iken %33.8 değerine düşmüştür ve ek olarak H9 atomunun suyun oksijeni ile gerilme titreşiminin katkısı %21.7 olmuştur. Bu etkileşim sonrası da ürik asidin toplam kip sayısı 42'den 51'e yükselmiştir.





Şekil 5.30 169 kodlu etkileşimin, ürik asidin ve suyun ayrı ayrı kızılötesi spektrumu.



Şekil 5.31 169 kodlu etkileşimin, ürik asidin ve suyun aynı şiddet ve frekans eksenlerinde kızılötesi spektrumunun gösterimi.

## i. C=O titreşimleri

### a. Gerilme Titreşimleri

Etkileşimden önce C=O gerilme titreşimini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 36. normal kipinde C4-O15 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %17'dir. Bu kip etkileşimden sonra 43. normal kipiye kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %12.9 değerinde olmuştur. Bu kipi dalgasayısı  $1766 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1763 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $929 \text{ km/mol}$  değerinden  $1074 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

37. normal kipinde C1-O14 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %15'dir. Bu kip etkileşimden sonra 44. normal kipiye kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %7.4 değerinde olmuştur. Bu kipi dalgasayısı  $1794 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1785 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $1335 \text{ km/mol}$  değerinden  $1580 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipte etkileşimden önce katkısı %5'in altında olan C5-O16 gerilim titreşiminin katkısı da %6.5 olmuştur.

Etkileşimden önce C=O gerilme titreşimini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 38. normal kipinde C5-O16 bağının gerilme

titreşiminin kipe katkısı %14.8'dir. Bu kip etkileşimden sonra 45. normal kipine kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %7.2 olmuştur. Bu kipin dalgasayısı  $1835 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1808 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $502 \text{ km/mol}$  değerinden  $61 \text{ km/mol}$  değerine düşmüştür. Bu kipte etkileşimden önce katkısı %5'in altında olan C1-O14 gerilim titreşiminin katkısı da %7.3 olmuştur.

### **b. Düzlem dışı bükülme titreşimleri**

Etkileşimden önce C=O düzlem dışı bükülme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 8. normal kipinde C5-O16 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe toplam katkısı %18.4'tür. Bu kip etkileşimden sonra 24. normal kipine kaymıştır ve etkileşimden sonra bu bağın %5 değerinin üstünde bir katkısı olmamıştır. Bu kipin dalgasayısı  $378 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $726 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $17 \text{ km/mol}$  değerinden  $203 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla H9-O17 hidrojen bağını içeren burulma titreşimleri katkı vermiştir.

## **ii. N-H Titreşimleri**

### **a. Gerilme Titreşimleri.**

Etkileşim sonucu su molekülü ile hidrojen bağı kuran bağ türlerinden biri de N-H bağlarıdır. Etkileşimden önce NH gerilme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 41. normal kipinde N13-H9 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %75.5 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 46. normal kipine kaymıştır. Bu kipin dalgasayısı  $3661 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $3448 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $116 \text{ km/mol}$  değerinden  $465 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla katkırı yine N13-H9 bağlarının gerilme titreşimi %33.8 değerinde vermiştir. H9-O17 hidrojen bağının gerilme titreşiminin katkısı ise %21.7 değerinde olmuştur.

### **b. Düzlem dışı bükülme titreşimleri**

Etkileşimden önce NH düzlem dışı bükülme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 8. normal kipinde N13-H9 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkısı toplamda %40.6, N12-H8 bağının düzlem dışı

bükülme titreşiminin %17.1 olmuştur. Bu kip etkileşimden sonra 24. normal kipine kaymıştır ve etkileşimden sonra N-H düzlem dışı titreşimlerinin %5 değerinin üstünde bir katkısı olmamıştır. Bu kipin dalgasayısı  $378 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $726 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $17 \text{ km/mol}$  değerinden  $203 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla H9-O17 hidrojen bağımlı içeren burulma titreşimleri katkı vermiştir.

### c. Düzlem içi bükülme titreşimleri

Etkileşimden önce NH düzlem içi bükülme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 34. normal kipinde C1-N11-H7 ve C2-N11-H7 açılarının düzlem içi bükülme titreşiminin kipe katkıları sırasıyla %7.5 ve %9.2 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 40. normal kipine kaymıştır. Bu kipin dalgasayısı  $1596 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1601 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $234 \text{ km/mol}$  değerinden  $419 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Etkileşimden sonra sadece C2-N11-H7 açısının %5'in üstünde bir katkısı olmuştur ve katkısı da %5.9 değerindedir.

36. normal kipinde C1-N10-H6 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin kipe katkısı %5.6, C4-N10-H6 açısının katkısı ise %9.8 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 43. normal kipine kaymıştır ve C4-N10-H6 açısının titreşime katkısı %7.2 değerinde olurken C1-N10-H6 açısının %5 değerinin üstünde bir katkısı olmamıştır. Bu kipin dalgasayısı  $1766 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1763 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $929 \text{ km/mol}$  değerinden  $1074 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

37. normal kipinde C1-N10-H6 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin kipe katkısı %7.5, C1-N11-H7 açısının katkısı ise %8.1 değerindedir.. Bu kip etkileşimden sonra 44. normal kipine kaymıştır ve bu açıların %5'in üstünde bir katkısı olmamıştır. Bu kipin dalgasayısı  $1794 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1785 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $1335 \text{ km/mol}$  değerinden  $1580 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

38. normal kipinde C5-N12-H8 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin kipe katkısı %6.4, C5-N13-H9 açısının katkısı ise %6.5 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 45. normal kipine kaymıştır ve bu açıların %5'in üstünde bir katkısı olmamıştır. Bu kipin dalgasayısı  $1835 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1808 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $502 \text{ km/mol}$  değerinden  $61 \text{ km/mol}$  değerine düşmüştür.

### iii. Halka titreşimleri

#### a. Gerilme Titreşimleri

Ürik asit molekülünün halka yapısı içindeki gerilme titreşimlerinden C-C bağına ait olan ve titreşim kipinin frekansında en belirgin kayma ya da şiddetinde değişiklik gözlenen kiplerden 36. normal kip etkileşimden sonra 43. normal kipe kaymıştır. Etkileşimden önce C3-C4 bağının gerilme titreşiminin 36. normal kipe katkısı %11.5 iken etkileşimden sonra 43. normal kipinde %8.7 olmuştur. Bu kpin dalgasayısı  $1766 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1763 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $929 \text{ km/mol}$  değerinden  $1074 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipte C-N bağı gerilme titreşimlerinin katkıları ise C4-N10 için %5 iken etkileşimden sonra %5 değerinin üstünde olmamıştır.

34. normal kipte C-N bağı gerilme titreşimlerinin katkıları ise C2-N11 için %8.1, C2-N13 için %8.3 iken etkileşimden sonra C2-N11 için %5, C2-N13 için %5.5 olmuştur. Bu kip etkileşimden sonra 40. normal kipine kaymıştır. Bu kpin dalgasayısı  $1596 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1601 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $234 \text{ km/mol}$  değerinden  $419 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

37. normal kipte C-N bağı gerilme titreşimlerinin katkıları ise C1-N10 için %7, C1-N11 için %5.8 iken etkileşimden sonra %5 değerinin üstünde olmamıştır. Bu kip etkileşimden sonra 44. normal kipine kaymıştır. Bu kpin dalgasayısı  $1794 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1785 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $1335 \text{ km/mol}$  değerinden  $1580 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

38. normal kipte C-N bağı gerilme titreşimlerinin katkıları ise C5-N12 için %8.1, C5-N13 için %5.7 iken etkileşimden sonra %5 değerinin üstünde olmamıştır. Bu kip etkileşimden sonra 45. normal kipine kaymıştır ve bu açılarda %5'in üstünde bir katkısı olmamıştır. Bu kpin dalgasayısı  $1835 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1808 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $502 \text{ km/mol}$  değerinden  $61 \text{ km/mol}$  değerine düşmüştür.

#### b. Düzlem içi bükülme titreşimleri

34. normal kipinde ürik asit molekülünün halka yapısını oluşturan C3-C2-N11 açısının katkısı %5.8 iken etkileşimden sonra %5'in üstünde değildir. 40. normal kipine kayan kpin

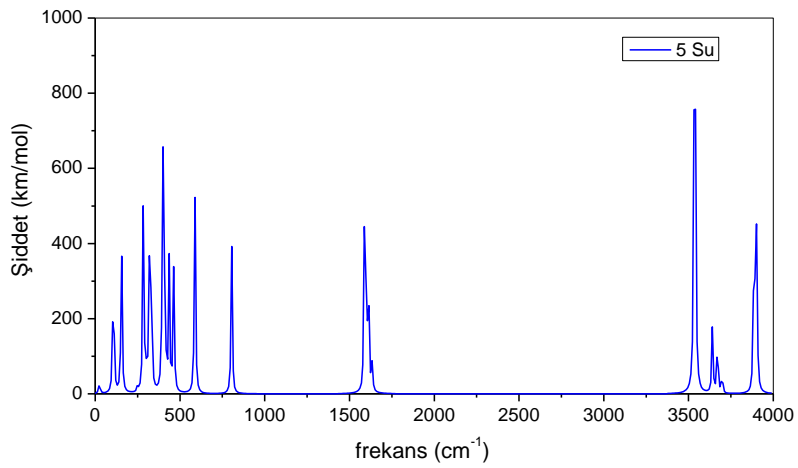
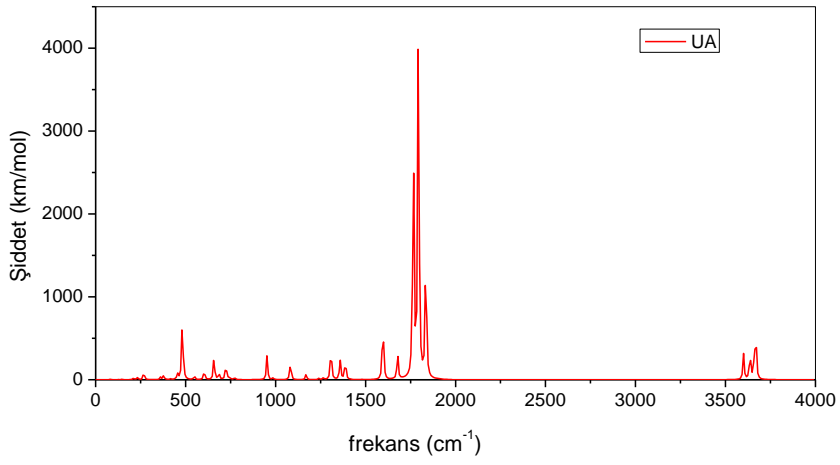
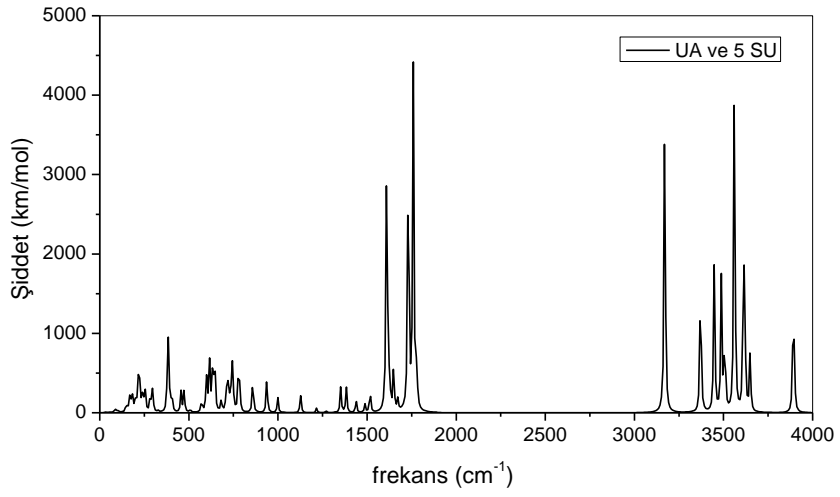
dalgasayısı  $1596\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1601\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $234\text{ km/mol}$  değerinden  $419\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

36. normal kipinde ürik asit molekülünün halka yapısını oluşturan C3-C4-N10 açısının katkısı %7.3 iken etkileşimden sonra %5.6 olmuştur. 43. normal kipine kayan kipin dalgasayısı  $1766\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1763\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $929\text{ km/mol}$  değerinden  $1074\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

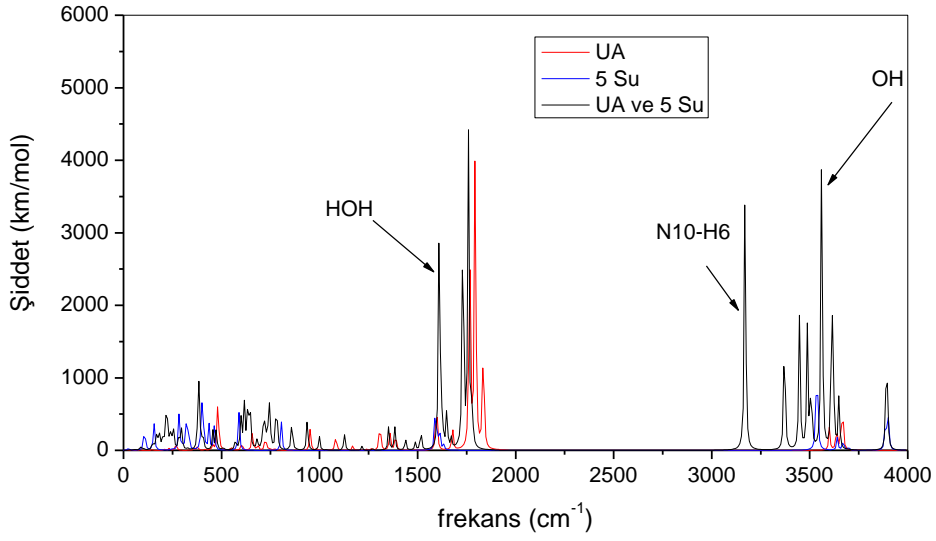
38. normal kipinde N12-C5-N13 açısının kipe katkısı %8.1 iken, etkileşimden sonra %5'in altında olmuştur. 45. normal kipe kayan kipin dalgasayısı  $1835\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1808\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır, şiddeti ise  $502\text{ km/mol}$  değerinden  $61\text{ km/mol}$  değerine düşmüştür.

### **5.8.6 UA ve 5 Su Molekülünün Etkileşimin Kızılötesi Spektrum Analizi**

UA ve 5 Su molekülünün Etkileşimin en belirgin kaymanın görüldüğü H6-N10 bağının gerilme titreşiminin dalgasayısı  $3600\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $3170\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti  $91\text{ km/mol}$  değerinden  $1178\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir (Şekil 5.32, 33). Buradaki H8-N12 bağının kipe bağıl katkısı %78.3 iken %34.5 değerine düşmüştür ve ek olarak H6 atomunun suyun oksijeni ile gerilme titreşiminin katkısı %31.9 olmuştur. Bu etkileşim sonrası da ürik asidin toplam kip sayısı 42'den 87'ye yükselmiştir. Bu etkileşimde birden fazla belirgin kayma vardır. Diğer kaymalar ayrıntılarıyla aşağıda belirtilmiştir.



Şekil 5.32 UA ve 5 su etkileşiminin, ürik asidin ve 5 suyun ayrı ayrı kızılötesi spektrumu.



Şekil 5.33 UA ve 5 su etkileşiminin, ürik asidin ve suyun aynı şiddet ve frekans eksenlerinde kızılötesi spektrumunun gösterimi.

## i. C=O titreşimleri

### a. Düzlem içi bükülme titreşimleri

Ürik asidin 5. normal kipinde C3-C4-O15 ve N10-C4-O15 açılarının kipe katkıları sırasıyla %6 ve %5.7 dir. Etkileşimden sonra bu kip 24. normal kipe kaymıştır ve bu açıların düzlem içi katkıları %5 değerinin altında olmuştur. Bu kipi dalgasayısı  $233 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $283 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $8 \text{ km/mol}$  değerinden  $73 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşim esnasında en fazla katkıyı %13.1 ile H6-O21 hidrojen bağımlı içeren burulma titreşimi vermiştir.

10. normal kipinde N10-C1-O14 ve C3-C4-O15 açılarının kipe katkısı etkileşimden önce sırasıyla %6.3 ve % 5.4 olmuştur. Etkileşimden sonra bu kip 33. normal kipe kaymıştır ve bu açıların düzlem içi katkıları %5 değerinin altında olmuştur. Bu kipi dalgasayısı  $455 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $473 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $20 \text{ km/mol}$  değerinden  $86 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

14. normal kipinde N12-C5-O16 açısının kipe katkısı etkileşimden önce %5.2 olmuştur. Etkileşimden sonra bu kip 37. normal kipe kaymıştır ve bu açının düzlem içi katkısı %5



değerinin altında olmuştur. Bu kipi dalgasayısı  $600\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $615\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $14\text{ km/mol}$  değerinden  $122\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

36. normal kipinde N10-C4-15 açılarının kipe katkısı etkileşimden önce %5.4 olmuştur. Etkileşimden sonra bu kip 71. normal kipe kaymıştır ve bu açının düzlem içi katkısı %5 değerinin altında olmuştur. Bu kipi dalgasayısı  $1766\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1731\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $929\text{ km/mol}$  değerinden  $1124\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla katkıyı H6-O21 hidrojen bağına içeren burulma titreşimleri vermiştir.

### **b. Gerilme Titreşimleri**

Etkileşimden önce C=O gerilme titreşimini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 36. normal kipinde C4-O15 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %17'dir. Bu kip etkileşimden sonra 71. normal kipe kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %5 değerinin altında olmuştur. Bu kipi dalgasayısı  $1766\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1731\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $929\text{ km/mol}$  değerinden  $1124\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla katkıyı H6-O21 hidrojen bağına içeren burulma titreşimleri vermiştir.

Etkileşimden önce C=O gerilme titreşimini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 38. normal kipinde C5-O16 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %14.8'dir. Bu kip etkileşimden sonra 73. normal kipe kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %5 değerinin altında olmuştur. Bu kipi dalgasayısı  $1835\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1778\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $502\text{ km/mol}$  değerinden  $160\text{ km/mol}$  değerine düşmüştür. Bu kipe de etkileşimden sonra en fazla katkıyı H6-O21 hidrojen bağına içeren burulma titreşimleri vermiştir.

### **c. Düzlem dışı bükülme titreşimleri**

Etkileşimden önce C=O düzlem dışı bükülme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 6. normal kipinde C5-O16 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkısı %5.9'dur. Bu kip etkileşimden sonra 26. normal kipe kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %5 değerinin altında olmuştur. Bu kipi

dalgasayısı  $268 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $326 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $30 \text{ km/mol}$  değerinden  $6 \text{ km/mol}$  değerine düşmüştür. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla katkıyı N16-H8 bağının düzlem dışı bükülme titreşimi vermiştir.

8. normal kipinde C5-O16 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkısı %18.4 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 36. normal kipine kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %5 değerinin altında olmuştur. Bu kipin dalgasayısı  $1766 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1731 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $929 \text{ km/mol}$  değerinden  $1124 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla katkıyı H6-O21 hidrojen bağını içeren burulma titreşimleri vermiştir.

9. normal kipinde C5-O16 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkısı %8, C1-O14 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkısı ise %11.2 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 38. normal kipine kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %5 değerinin altında olmuştur. Bu kipin dalgasayısı  $417 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $618 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $3 \text{ km/mol}$  değerinden  $83 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra %5 değerinin üstünde katkı veren titreşim olmamıştır.

12. normal kipinde C5-O16 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe toplam katkısı %15.4, C1-O14 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkısı ise %5.7 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 40. normal kipine kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %5 değerinin altında olmuştur. Bu kipin dalgasayısı  $482 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $646 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $231 \text{ km/mol}$  değerinden  $179 \text{ km/mol}$  değerine düşmüştür. Bu kipe etkileşimden sonra %5 değerinin üstünde katkı veren titreşim olmamıştır.

15. normal kipinde C1-O14 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkısı %9.9 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 41. normal kipine kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %5 değerinin altında olmuştur. Bu kipin dalgasayısı  $606 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $682 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $15 \text{ km/mol}$  değerinden  $47 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla katkıyı H8-O18 hidrojen bağını içeren burulma titreşimleri vermiştir.

16. normal kipinde C4-O15 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkısı %8.4, C1-O14 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkısı ise %6.6 değerindedir. Bu kip

etkileşimden sonra 43. normal kipine kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %5 değerinin altında olmuştur. Bu kipi dalgasayısı  $658 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $717 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $83 \text{ km/mol}$  değerinden  $54 \text{ km/mol}$  değerine düşmüştür. Bu kipe etkileşimden sonra %5 değerinin üstünde katkı veren titreşim olmamıştır.

19. normal kipinde C5-O16 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe toplam katkısı %11.1, C1-O14 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe toplam katkısı ise %15.1 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 45. normal kipine kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %5 değerinin altında olmuştur. Bu kipi dalgasayısı  $739 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $734 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $6 \text{ km/mol}$  değerinden  $68 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla katkıyı H6-O21 hidrojen bağını içeren burulma titreşimleri vermiştir.

## ii. N-H Titreşimleri

### a. Gerilme Titreşimleri

Etkileşim sonucu su molekülü ile hidrojen bağı kuran bağ türlerinden biri de N-H bağlarıdır. Etkileşimden önce NH gerilme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 39. normal kipinde N10-H6 bağının gerilme titreşiminin kipe katkıları sırasıyla %78.3 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 74. normal kipine kaymıştır. Bu kipi dalgasayısı  $3600 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $3170 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $91 \text{ km/mol}$  değerinden  $1178 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla katkıyı yine N10-H6 bağlarının gerilme titreşimi %34.5 değerinde vermiştir. H6-O21 hidrojen bağının gerilme titreşiminin katkısı ise %31.9 değerinde olmuştur.

40. normal kipinde N11-H7 bağının gerilme titreşiminin kipe katkıları sırasıyla %76.8 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 75. normal kipine kaymıştır. Bu kipi dalgasayısı  $3637 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $3371 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $104 \text{ km/mol}$  değerinden  $567 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla katkıyı yine N11-H7 bağının gerilme titreşimi %31.2 değerinde vermiştir. H2-O20 hidrojen bağının gerilme titreşiminin katkısı ise %22.9 değerinde olmuştur. Yine bu hidrojen bağının bükülme titreşim kiplerinin toplam ağırlığı %11.6 değerindedir.

41. normal kipinde N13-H9 bağının gerilme titreşiminin kipe katkıları sırasıyla %75.5 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 76. normal kipi kaymıştır. Bu kipi dalgasayı 3661  $\text{cm}^{-1}$  değerinden 3448  $\text{cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri 116  $\text{km/mol}$  değerinden 531  $\text{km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla katkıyı yine N11-H7 bağının gerilme titreşimi %29.7 değerinde vermiştir. H9-O19 hidrojen bağının gerilme titreşiminin katkısı ise %18.9 değerinde olmuştur. Yine bu hidrojen bağının bükülme titreşim kiplerinin toplam ağırlığı %11.7 değerindedir.

42. normal kipinde N12-H8 bağının gerilme titreşiminin kipe katkıları sırasıyla %77.3 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 78. normal kipi kaymıştır. Bu kipi dalgasayı 3670  $\text{cm}^{-1}$  değerinden 3507  $\text{cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri 115  $\text{km/mol}$  değerinden 287  $\text{km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla katkıyı yine N12-H8 bağının gerilme titreşimi %31.2 değerinde vermiştir. H8-O18 hidrojen bağının gerilme titreşiminin katkısı ise %18.8 değerinde olmuştur. Yine bu hidrojen bağının bükülme titreşim kiplerinin toplam ağırlığı %12 değerindedir. Burulma titreşim kipi ağırlığı ise %5.3 değerindedir.

### **b. Düzlem dışı bükülme titreşimleri**

Etkileşimden önce NH düzlem dışı bükülme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipi önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 6. normal kipinde N11-H7 ve N12-H8 bağlarının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkıları sırasıyla %7.4 ve %27.1 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 26. normal kipi kaymıştır. Bu kipi dalgasayı 268  $\text{cm}^{-1}$  değerinden 326  $\text{cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri 30  $\text{km/mol}$  değerinden 6  $\text{km/mol}$  değerine düşmüştür. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla katkıyı N12-H8 bağlarının düzlem dışı bükülme titreşimi %5.7 değerinde vermiştir.

8. normal kipinde N13-H9 ve N12-H8 bağlarının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkıları sırasıyla %53 ve %23.1 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 36. normal kipi kaymıştır. Bu kipi dalgasayı 378  $\text{cm}^{-1}$  değerinden 599  $\text{cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri 17  $\text{km/mol}$  değerinden 133  $\text{km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla katkıyı O16 hidrojen bağının yer aldığı burulma titreşimi %35.2 değerinde vermiştir.

9. normal kipinde N11-H7 ve N12-H8 bağlarının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkıları sırasıyla %46.7 ve %30.7 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 38. normal kipine kaymıştır. Bu kipi dalgasayısı  $417 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $618 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $3 \text{ km/mol}$  değerinden  $83 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra %5 değerinin üstünde katkı veren titreşim olmamıştır. Aynı şekilde bu bağların düzlem dışı titreşimlerinden oluşan 12. normal titreşim kipi etkileşimden sonra  $482 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $646 \text{ cm}^{-1}$  dalgasayısına kaymıştır. Şiddeti ise  $231 \text{ km/mol}$  değerinden  $179 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir ve etkileşimden sonra %5 değerinin üstünde katkı veren titreşim olmamıştır.

15. normal kipinde N10-H6 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin kipe katkısı %40.1 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 41. normal kipine kaymıştır. Bu kipi dalgasayısı  $606 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $682 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $15 \text{ km/mol}$  değerinden  $47 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Etkileşimden sonra bu kipte H8-O18 hidrojen bağının yer aldığı burulma titreşimlerinin toplam etkisi %13.4 değerinde olmuştur. N10-H6 bağının düzlem dışı titreşimlerinden oluşan 16. normal titreşim kipi etkileşimden sonra  $658 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $717 \text{ cm}^{-1}$  dalgasayısına kaymıştır. Şiddeti ise  $83 \text{ km/mol}$  değerinden  $54 \text{ km/mol}$  değerine düşmüştür ve etkileşimden sonra %5 değerinin üstünde katkı veren titreşim olmamıştır.

19. normal kipinde N13-H9, N12-H8, N11-H7 ve N10-H6 bağlarının düzlem dışı bükülme titreşimlerinin kipe katkıları sırasıyla %5.2, %5.9, %7.1 ve %8 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 45. normal kipine kaymıştır. Bu kipi dalgasayısı  $739 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $734 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $6 \text{ km/mol}$  değerinden  $68 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla katkıyı O21-H6 hidrojen bağının yer aldığı burulma titreşimi %11 değerinde vermiştir.

### c. Düzlem içi bükülme titreşimleri

Etkileşimden önce NH düzlem içi bükülme titreşim kiplerini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 21. normal kipinde C2-N13-H9 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin kipe katkısı %6.9 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 48. normal kipine kaymıştır. Bu kipi dalgasayısı  $772 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $778 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $8 \text{ km/mol}$  değerinden  $124 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

Bu kipe etkileşimden sonra O20-H7 hidrojen bağının yer aldığı burulma titreşimlerinin katkısı %20.1 değerinde olmuştur.

22. normal kipinde C3-N12-H8 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin kipe katkısı %6.3 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 50. normal kipine kaymıştır. Bu kipin dalgasayısı  $877 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $859 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri 1 km/mol değerinden 137 km/mol değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra O21-H6 hidrojen bağının yer aldığı burulma titreşimlerinin katkısı %37.2 değerinde olmuştur. O15-H23 hidrojen bağını içeren burulma titreşiminin etkisi ise %5.1 değerindedir. O15 ve H6 atomlarına hidrojen bağlarıyla bağlanan iki su molekülünün etkileşimiyle oluşan burulma titreşimlerinin topla etkisi ise % 28.7 değerindedir.

31. normal kipinde sadece N-H bağlarını içeren açılardan düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi görünmektedir. Bu kip etkileşimden sonra 61. normal kipine kaymıştır. Bu kipin dalgasayısı  $1388 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1438 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri 77 km/mol değerinden 51 km/mol değerine düşmüştür. Bu kipte etkileşimden sonra C5-N13-H9 açısının etkisi %9.5 değerinden %5.2 değerine düşmüştür. Su molekülleri ile hidrojen bağı kuran N11-H7O20 ve N13-H9-O19 açılarının etkileri ise %6.2'şer değerindedir.

32. normal kipinde de sadece N-H bağlarını içeren açılardan düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi görünmektedir. Bu kip etkileşimden sonra 62. normal kipine kaymıştır. Bu kipin dalgasayısı  $1414 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1487 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri 1 km/mol değerinden 30 km/mol değerine yükselmiştir. Bu kipte etkileşimden sonra N10-H6 bağının su molekülleri ile hidrojen bağı kurmasıyla oluşan bağların burulma titreşimleri baskındır.

33. normal kipinde N-H bağlarını içeren açılardan düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi % 27.2 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 63. normal kipine kaymıştır. Bu kipin dalgasayısı  $1478 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1517 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri 1 km/mol değerinden 88 km/mol değerine yükselmiştir. Bu kipte de etkileşimden sonra N10-H6 bağının su molekülleri ile hidrojen bağı kurmasıyla oluşan bağların burulma titreşimleri baskındır.

34. normal kipinde N-H bağlarını içeren açılardan düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi %16.7 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 67. normal kipine kaymıştır. Bu kipin dalgasayısı  $1596 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1620 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri 234 km/mol değerinden

31 km/mol değerine düşmüştür. Bu kipte etkileşimden sonra %5 değerinin üstünde katkı veren titreşim olmamıştır.

36. normal kipinde C1-N10-H6 açısını içeren düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi %5.6, C4-N10-H6 açısını içeren düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi %9.8 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 71. normal kipi kaymıştır. Bu kipi dalgasayısı 1766  $\text{cm}^{-1}$  değerinden 1731  $\text{cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri 929 km/mol değerinden 1124 km/mol değerine yükselmiştir. Bu kipte etkileşimden sonra N10-H6 bağının su molekülleri ile hidrojen bağı kurmasıyla oluşan bağların burulma titreşimleri baskındır.

37. normal kipinde C1-N10-H6 açısını içeren düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi %7.5, C1-N11-H7 açısını içeren düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi %8.1 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 72. normal kipi kaymıştır. Bu kipi dalgasayısı 1794  $\text{cm}^{-1}$  değerinden 1760  $\text{cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri 1335 km/mol değerinden 1256 km/mol değerine düşmüştür. Bu kipte de etkileşimden sonra N10-H6 bağının su molekülleri ile hidrojen bağı kurmasıyla oluşan bağların burulma titreşimleri baskındır.

38. normal kipinde C5-N12-H8 açısını içeren düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi %6.4, C5-N13-H9 açısını içeren düzlem içi bükülme titreşiminin etkisi %6.5 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 73. normal kipi kaymıştır. Bu kipi dalgasayısı 1835  $\text{cm}^{-1}$  değerinden 1778  $\text{cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri 502 km/mol değerinden 160 km/mol değerine düşmüştür. Bu kipte de etkileşimden sonra N10-H6 bağının su molekülleri ile hidrojen bağı kurmasıyla oluşan bağların burulma titreşimleri baskındır.

### iii. Halka titreşimleri

#### a. Gerilme Titreşimleri

Ürik asit molekülünün halka yapısı içindeki gerilme titreşimlerinden C-C bağına ait olan ve titreşim kipi frekansında kayma ya da şiddetinde değişiklik gözlenen kiplerden 14. normal kipte C3-C4 bağının gerilme titreşiminin normal kipe katkısı %5.4 değerindedir. Bu kip etkileşimden sonra 37. normal kipi kaymıştır. Dalgasayısı 600  $\text{cm}^{-1}$  değerinden 615 değerine kaymıştır ve şiddeti de 14 km/mol değerinden 122 km/mol değerine yükselmiştir. Etkileşimden sonra %5 değerinin üstünde katkısı görünmemektedir. 33. normal kipte C3-C4

bağı gerilme titreşimi %6.8 katkı verirken, etkileşimden sonra bu kip 63. normal kipe kaymıştır. Bu kipi dalgasayısı ise  $1478 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1517 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır. Şiddeti ise  $1 \text{ km/mol}$  değerinden  $88 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Etkileşimden sonra bu bağın gerilme titreşiminin %5 üzerinde bir katkısı görünmemektedir. 36. normal kipinde C3-C4 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %11.5 iken etkileşimden sonra 71. normal kipe kayan kipte bu titreşimin %5 üzerinde bir etkisi bulunmamaktadır.

Halka yapısındaki C-N bağı gerilme titreşimlerini içeren kiplerden 21. normal kipinde %5.5 değerinde katkı veren C5-N13 bağı etkileşimden sonra %5 değerinin üzerinde bir katkı vermemiştir. Bu kip etkileşimden sonra 48. normal kipe kaymıştır ve dalgasayısı  $772 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $778 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır. Bu kipi şiddeti ise  $8 \text{ km/mol}$  değerinden  $124 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. 22. normal kipinde C3-N12 bağının gerilme titreşiminin katkısı %5.6 iken etkileşimden sonra 50. normal kipinde %5 değerinin üstünde bir katkısı olmamıştır. 33. normal kipinde C3-N12 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %9.6 iken etkileşimden sonraki 63. normal kipinde %5 değerinin üstünde bir katkısı olmamıştır. 34. normal kipinde ise C2-N11 bağının %8.1, C2-N13 bağının katkısı ise %8.3 iken etkileşimden sonraki 67. normal kipinde %5 değerinin üstünde hiçbir katkı olmamıştır. 36. normal kipinde C4-N10 bağı %5 katkı verirken etkileşimden sonra 71. normal kipinde %5 değerinin üstünde bir katkısı bulunmamaktadır. 37. normal kipinde C1-N10 bağı %7, C1-N11 bağı %5.8 katkı verirken etkileşimden sonra 72. normal kipinde %5 değerinin üstünde bir etkisi bulunmamaktadır. Aynı şekilde 38. normal kipinde C5-N12 bağı %8.1, C5-N13 bağı %5.7 katkı verirken etkileşimden sonra 73. normal kipte %5 değerinin üstünde bir etkisi bulunmamaktadır. Bu kiplerin kaydığı kiplerde 48. normal kipte H7-N11 bağının, 50,63,71,72,73. normal kiplerde ise H6-N10 bağının su molekülleriyle kurduğu hidrojen bağının burulma titreşim kipleri öne çıkmaktadır.

## **b. Düzlem içi bükülme titreşimleri**

Ürik asit molekülünün halka yapısını oluşturan C-N-C, C-C-C, N-C-N, C-C-N açılarının düzlem içi titreşimlerinin etkileşimden önceki katkıları etkileşimden sonra %5 değerinin altında olmuştur. Buna göre 5. normal kipinde C3-C2-N11 açısı %5.3, N11-C12-N13 açısı %8.1, C2-C3-C4 açısının katkısı %5.7, C4-C3-N12 açısının katkısı %9.4 değerinde olmuştur. Etkileşimden sonra bu kip 24. normal kipe kaymıştır. 10. normal kipte C3-C4-N10 açısı %7.1, C1-N11-C2 açısı % 7.6 değerinde katkı vermiştir ve etkileşimden sonra bu normal kip 33.



normal kipe kaymıştır. 14. normal kipte C2-C3-C4 açısı %5.3, C3-C4-N10 açısı %5.8 değerinde katkı vermiştir ve bu kip etkileşimden sonra 37. normal kipe kaymıştır. 21. normal kipte N12-C5-N13 açısı %7.5, C1-N11-C2 açısı %5, C2-N13-C5 açısı %6.2 değerinde katkı vermiştir ve etkileşimden sonra bu kip 48. normal kipe kaymıştır. 22. normal kipte N10-C1-N11 açısı %5.9, C1-N11-C2 açısı %5 değerinde katkı vermiştir ve etkileşimden sonra bu kip 50. normal kipe kaymıştır. 34. normal kipte C3-C2-N11 açısının %5.8 değerinde katkısı olurken etkileşimden sonra bu kip 67. normal kipe kaymıştır.36. normal kipte C3-C4-N10 açısı %7.3 katkı verirken etkileşimden sonra bu kip 71. normal kipe kaymıştır. 37. normal kipte de N10-C5-N11 açısı %6.9 değerinde katkı verirken, etkileşimden sonra bu kip 72. normal kipe kaymıştır.

### **c. Düzlem dışı bükülme titreşimleri**

Ürik asit molekülündeki halkayı oluşturan bağların burulma titreşimleri NH ve OC bağlarının düzlem dışı titreşim hareketlerine etki etmektedir. Dolayısıyla bu burulma titreşimlerinin katkısı OC ve NH düzlem dışı bükülme titreşimleri olarak ele alınmıştır.

## BÖLÜM 6

### ASKORBİK ASİT VE SU MOLEKÜLÜNÜN ETKİLEŞİMİ

#### 6.1 GİRİŞ

L'Askorbik asit (C vitamini olarak da bilinir), L-AA olarak kısaltılacaktır. Dört karbon ve bir oksijenden oluşan beşli halka halkalardaki karbonlardan birine bağlı karbon-karbon bağı ve bu karbonlara bağlı 2 oksijen ve 5 hidrojenenden oluşur (Hvoslef 1968). İyi bilinen bir antioksidan, indirgeyici madde, güçlü elektron donörü ve suda çözülebilir vitamin olarak C vitamini insan vücudundaki kimyasal, biyolojik ve fizyolojik bazı reaksiyonlarda hayati role sahiptir (Henson et al. 1991). Ayrıca en az sekiz enzimatik reaksiyonda kofaktördür. Özellikle disfonksiyonel olduğunda çok ağır iskorbüt hastalığına sebep olan birkaç kollajen sentez reaksiyonunda kofaktördür (Lee 1999, Moss 2000).

Serbest radikallere karşı askorbatın en olağan dışı biyolojik koruyucu özelliği, radikal yok edicisi olarak çok verimli olması ve radikalinin kararlı olmasıdır (Isoda et al. 1996). Diğer serbest radikallere kıyasla (çiftlenmemiş bir elektrona sahip türlere göre)  $10^{-5}$  s yarı ömürle daha kararlıdır. Dolayısıyla askorbat kimyasal özellikleri nedeniyle iyi bir radikal yok edicisidir (Buettner and Moseley 1993). Reaktif oksijen türleri DNA'ya verdiği oksidatif hasardan dolayı kanserojenlerde, hastalıklarda ve yaşlanmada önemlidir (Halliwell and Aruoma 1991).

L-AA'nın yapısal çalışmaları X-ışını ve nötron kırınımı metotları ile yapılmıştır. L-AA'nın, anyonların ve radikallerin yapıları Allen et al. (Allen et al. 2006) tarafından tanımlanmıştır. Çalışmada yapılar kısıtlanmamış B3LYP/6-311++G(d,p) seviyesinde optimize edilmiştir ve tekil nokta hesaplamaları da MP2 seviyesinde yapılmıştır. Al-Laham ve arkadaşları (Allaham et al. 1991) AA'nın konformasyonel analizini, halka sabit tutulup sadece kenar zinciri konformasyonları optimize edilerek yapılmıştır. Mora ve Melendez (Mora and Melendez 1998) ise RHF/6-31G, RHF/6-31G(d,p), RHF/6-311+G(d,p) ve MP2/6-31G(d,p) seviyesinde 36 konformasyonla optimize etmiştir. Gaz fazında tamamen optimize yapı, L-AA'nın kristal

B yapısına çok yakın olduğu bulunmuştur. L-AA'nın konformasyonel çalışmaları ve IR ve UV arařtırmaları Lohmann ve arkadaşları (Lohmann et al. 1984) tarafından yapılmıřtır ve Panicker ve arkadaşları tarafından L-AA'nın FT-IR ve FT-Raman spektrallarına ve gümüş çarpmalı SERS spektrumuna 400-4000 cm<sup>-1</sup> aralıęında bakılmıřtır ve toplam 54 normal titreřim modundan 38'i belirlenmiřtir. L-AA'nın tetronik açıdan ve ilgili bileřiklerinin Raman spektrası Edsall ve Sagall (Edsall 1943) tarafından kaydedilmiřtir. Dimitrova ve arkadaşları (Dimitrova 2006) L-AA'nın titreřimsel frekanslarını SCF/6-31G(d,p) ve B3LYP6-31G(d,p) ve B3LYP6-31++G(d,p) metotlarını kullanarak hesaplanmıřtır ve deneysel deęerlerle iliřkilendirmiřtir. Shimada ve arkadaşları (Shimada et al. 2008) basıncın H-baęlı L-AA kristalinin moleküler ve örgü modları üzerine etkisini incelemiřtir ve Saraiva ve arkadaşları (Saraiva et al. 2011) L-AA'nın Raman spektrumunun sıcaklıęa baęlılıęı incelenmiřtir.

Bu bölümde AA molekülü için B3LYP seviyesinde 6-311++G(d,p) baz seti kullanılarak yoęunluk fonksiyoneli teorisi hesaplamaları kullanılarak geometri optimizasyonu, proton ilgisi ve proton verme entalpisi, kızılötesi spektrumu, yük daęılımları, HOMO-LUMO enerji deęiřimleri incelenmiřtir.

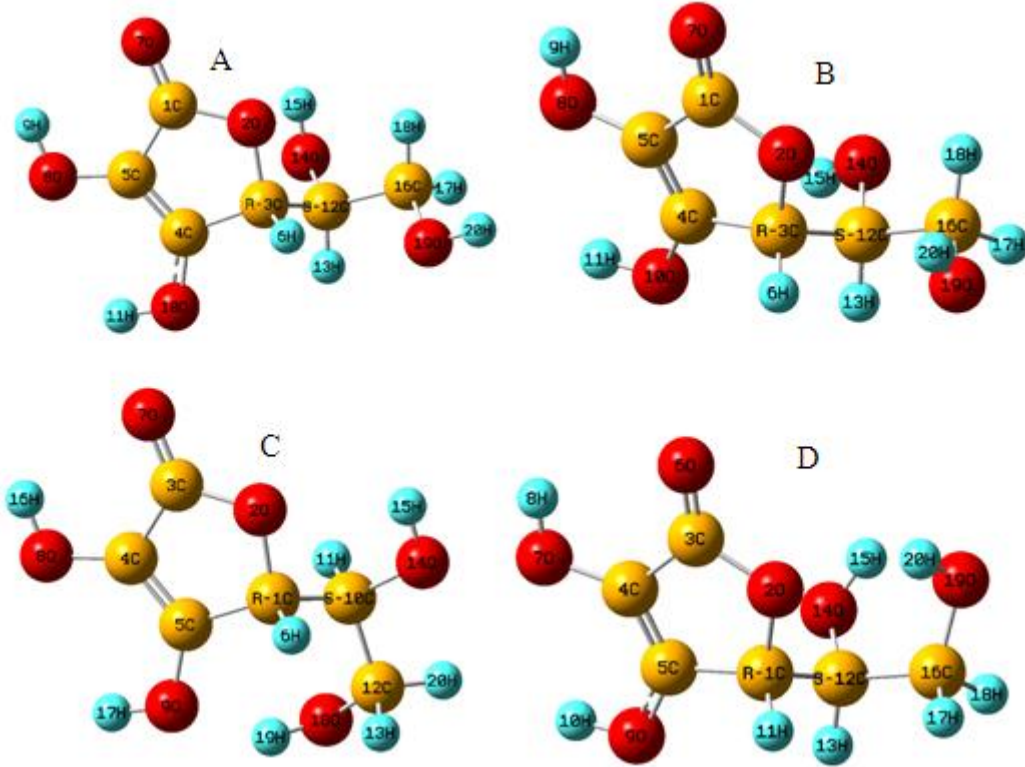
## 6.2 ASKORBİK ASİT İZOMERLERİNİN EN KARARLI YAPISININ BELİRLENMESİ

İzomer, bir molekülle aynı kimyasal formüle sahip, fakat bazı baęların yönelimlerinin farklı olduęu yapılarıdır. Beřli halkaya baęlı kısmın farklı yönelimlerinden oluřan askorbik asit molekülleri birçok çalıřmada incelenmiřtir (Dimitrova 2006, Mora and Melendez 1998). En kararlı dört izomeri (řekil 6.1) B3LYP seviyesinde 6-311++G(d,p) baz seti ile DFT kullanılarak optimize edilmiřtir. Bu yapıların optimize edildikten sonra enerjileri ve dipol momentleri Çizelge 6.1'de verilmiřtir.

Çizelge 6.1 Askorbik asidin dört farklı izomerinin optimize enerjileri ve dipol momentleri.

	<b>A</b>	<b>B</b>	<b>C</b>	<b>D</b>
<b>E (a.u.)</b>	-684.99156	-684.98887	-684.99087	-684.99450
<b><math>\mu</math> (D)</b>	2.13	3.85	3.25	3.51

Bu yapılardan A yapısının enerjisi -684.99156 a.u., dipol momenti 2.13 Debye'dır (Çizelge 6.1). B yapısının enerjisi -684.98887 a.u., dipol momentisi ise 3.85 Debye'dır. C yapısının enerjisi -684.99087 a.u., dipol momentisi 3.25 Debye'dır. D yapısının enerjisi -684.994450 a.u., dipol momentisi de 3.51 Debye'dır. Bu enerji değerlerine göre en düşük enerjili yapı D yapısıdır ve diğerlerinden daha karardır. Dolayısıyla bu çalışmada D yapısının su molekülü ile moleküler etkileşimleri incelenmiştir.

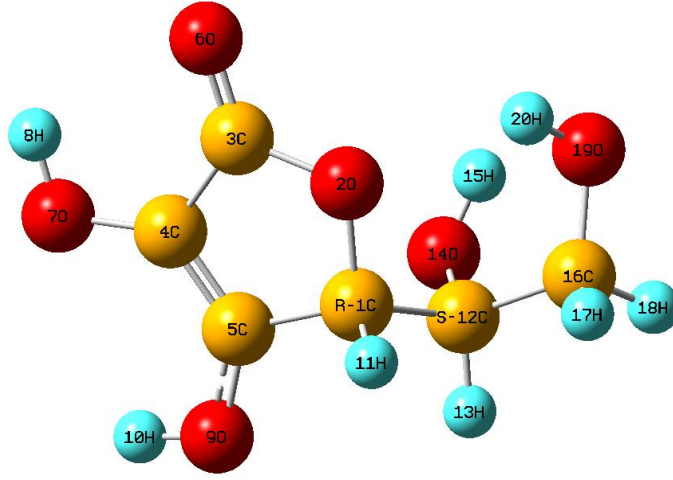


Şekil 6.1 Askorbik asidin beş farklı izomer yapısı.

### 6.3 PROTON ALMA VE VERME EĞİLİMİ VE HİDROJEN BAĞI ENERJİ HESAPLAMALARI

Askorbik asit molekölünün (Şekil 6.2) farklı uçlarındaki hidrojen atomlarını verme (DPE) ve oksijen atomlarına hidrojen alma (PA) eğilimleri iki farklı durumdaki enerji farklarını sıfır nokta titreşim enerjisi düzeltme terimleri de hesaba katılarak incelenmiştir. Bu sonuçlara göre askorbik asidin en bazik ucu O6 atomunun O2 tarafı en asidik ucu da H10 bağı olan ucudur. Bu uçlardan O6 atomunun O2'ye bakan tarafından proton yakalaması daha kolay, H10 bağı olan uçundan da proton verilmesi yani hidrojen atomunun verilmesi daha kolaydır.

Dolayısıyla hidrojen bağı kurulma esnasında O6 atomunun O2 tarafı suyun hidrojeni ile, H10 da suyun oksijeni ile daha kolay etkileşime geçebilir (Çizelge 6.2).



Şekil 6.2 Askorbik asit molekülü.

Çizelge 6.2 Askorbik asit molekülünün farklı uçlarındaki PA ve DPE değerleri.

AA	PA(kJ/mol)		DPE(kJ/mol)
O6(C4 tarafı)	847.42	H8	1412.68
O6 (O2 tarafı)	859.45	H10	1332.75
		H15	1405.73
		H20	1335.63

Askorbik asidin su molekülleri ile yaptığı hidrojen bağlarını teker teker incelersek, H8 kodlu etkileşim askorbik asidin H8 atomlarıyla suyun hidrojen bağı kurmasından dolayı H8 olarak adlandırılmıştır. H10 kodlu etkileşimde H10, H15’de H15, H20’de de H20 su ile hidrojen bağı kurmaktadır. Bu etkileşimler sonucu sıfır nokta titreşim enerji be baz set süperpozisyon hataları da göz önüne alındığında en kuvvetli hidrojen bağı -35.70 kJ/mol değerinde olup H8 kodlu etkileşimde gerçekleşmektedir. Ondan sonraki en kuvvetli etkileşim -33.82 kJ/mol enerjili hidrojen bağı kuran H10 kodlu etkileşimdir.

Çizelge 6.3 Askorbik asit molekülünün farklı uçlarından bağlanan su molekülü ile yaptığı hidrojen bağ enerji değerleri.

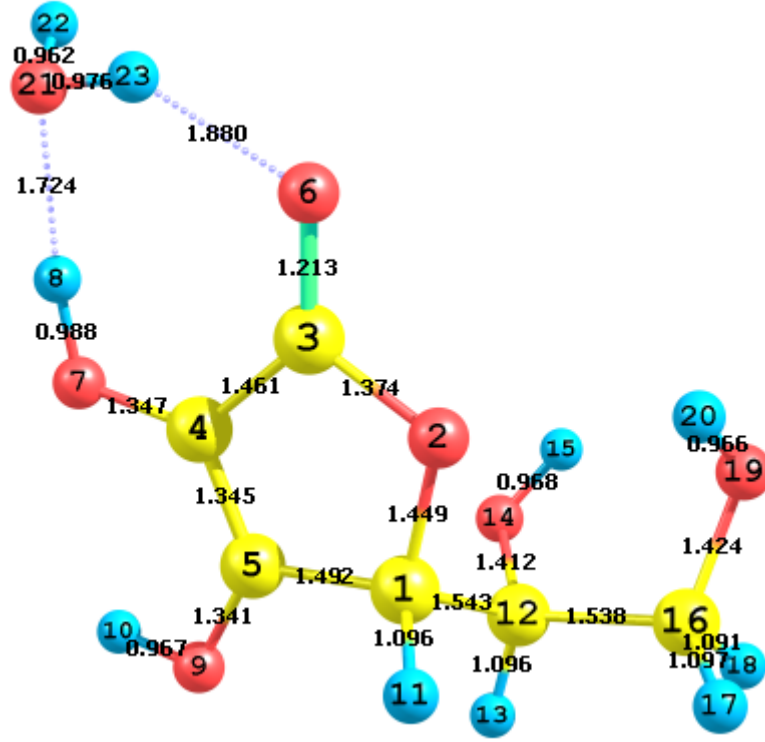
AA_Su	-EHB kJ/mol	-EHB (ZPE) kJ/mol	-EHB(ZPE + BSSE) kJ/mol
H8	50.61	40.23	35.70
H10	49.51	38.68	33.82
H15	32.59	24.15	19.48
H20	39.18	29.26	24.35

#### 6.4 ASKORBİK ASİT BAĞ UZUNLUKLARININ, AÇILARIN VE DİHEDRALLERİN ETKİLEŞİM SONRASI ANALİZİ

Askorbik asit ve su molekülünün etkileşimi sonrası AA molekülünün bağ uzunluklarındaki değişiklikler Ek Açıklamalar B'de belirtilmiştir. H8 kodlu etkileşimde AA molekülünün H8 ve O6 atomları su molekülü ile hidrojen bağı kurmaktadır (Şekil 6.3). H8 ile su molekülünün oksijeni arasındaki hidrojen bağının uzunluğu 1.724 Å, O6 ile su molekülünün hidrojeni arasındaki hidrojen bağının uzunluğu 1.880 Å değerindedir. En fazla uzama etkileşimin olduğu O7-H8 bağında 0.0204 Å değerinde, ikinci olarak C3-O6 bağında 0.0088 Å değerinde olmuştur. C4-O7 bağı da 0.0085 Å kısalmıştır.

Bağ açısı değerlerindeki değişimlerde ise en fazla değişim AA molekülünün etkileşim tarafındaki C3-C4-O7 açısındaki 4.27° değerindeki artıştır. İkinci olarak C4-O7-H8 açısı 4.14° artmıştır. C5-C4-O7 açısı ise 3.12° azalmıştır.

Dihedral açı değişimlerine bakacak olursak, en fazla C3-C4-O7-H8 dihedral açısında 1.66° değerinde azalma olmuştur. C5-C4-O7-H8 dihedrali ise 1.51° azalmıştır. Bu dihedraller değerinde hidrojen bağı kurulan atomları içermektedir.

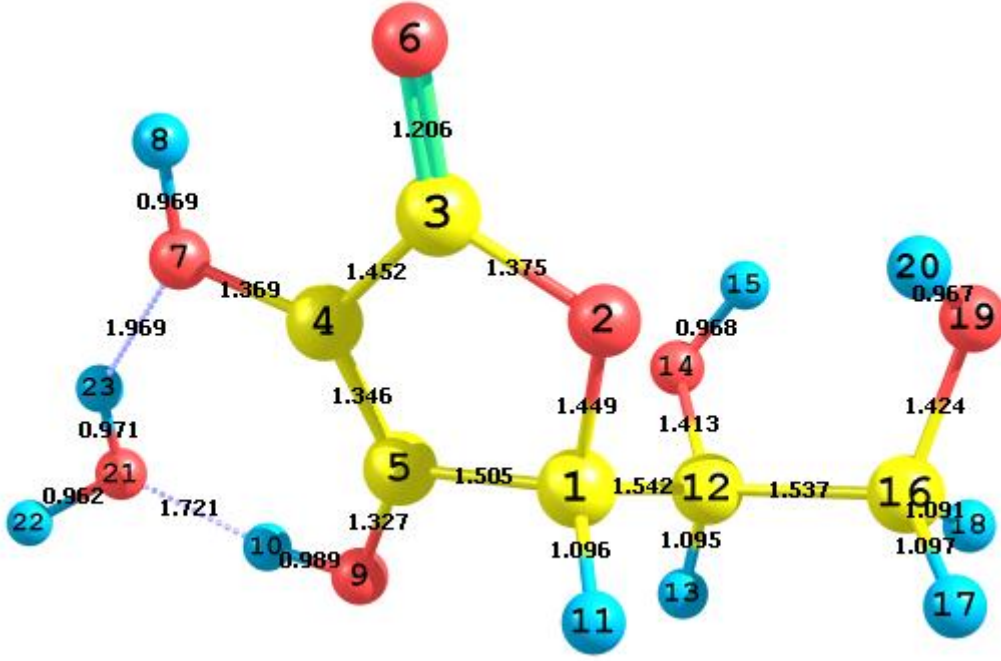


Şekil 6.3 H8 kodlu etkileşim sonucu bağ uzunlukları.

H10 kodlu etkileşimde AA molekülünün H10 ve O7 atomları su molekülü ile hidrojen bağı kurmaktadır (Şekil 6.4). H10 ile su molekülünün oksijeni arasındaki hidrojen bağının uzunluğu 1.721 Å, O7 ile su molekülünün hidrojeni arasındaki hidrojen bağının uzunluğu 1.969 Å değerindedir. En fazla uzama etkileşimin olduğu O9-H10 bağında 0.0228 Å değerinde, en fazla kısalma ise C5-O9 bağında 0.0088 Å değerinde olmuştur. C4-O7 bağı da 0.0133 Å uzamıştır.

Bağ açı değerlerindeki en fazla değişim C3-C4-O7 açısında 2.56° değerindeki değişimdir. İkinci olarak C4-C5-O7 açısındaki 2.12° değerindeki artıştır. C5-C4-O7 atomları arasındaki açıdaki artış ise 1.97° değerindedir.

Molekülün dihedral açılarındaki değişimlerde en fazla değişim C5-C1-C12-O14 dihedralindeki 2.08° değerindeki artıştır. C5-C1-C12-H13 dihedralinde ise 2.07° değişim vardır.



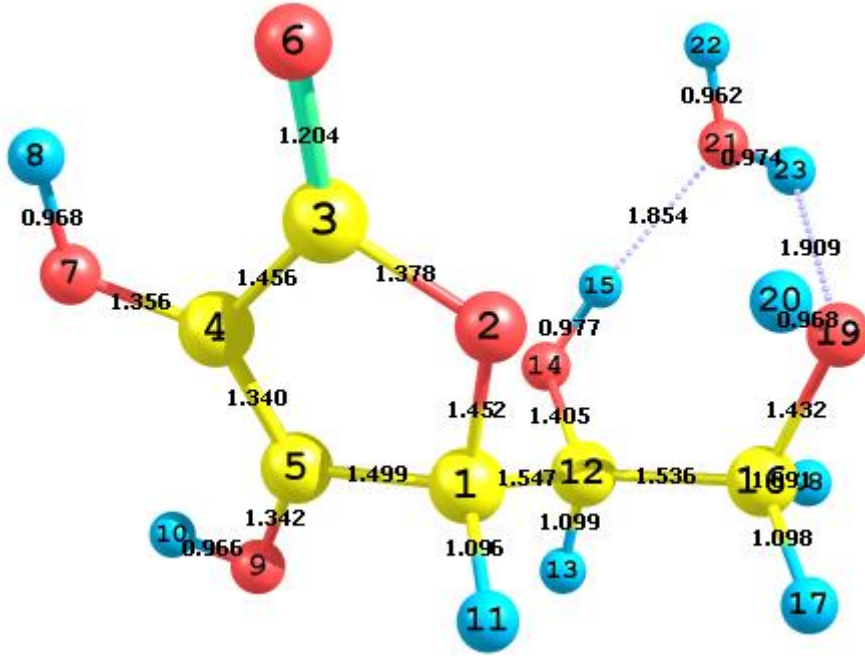
Şekil 6.4 H10 kodlu etkileşim sonucu bağ uzunlukları.

H15 kodlu etkileşimde AA molekülünün H15 ve O19 atomları su molekülü ile hidrojen bağı kurmaktadır (Şekil 6.5). H15 ile su molekülünün oksijeni arasındaki hidrojen bağının uzunluğu 1.854 Å, O19 ile su molekülünün hidrojeni arasındaki hidrojen bağının uzunluğu 1.909 değerindedir. En fazla uzama etkileşimin olduğu O14-H15 bağında 0.0086 Å değerinde, ikinci olarak ise C16-O19 bağında 0.008 Å değerinde olmuştur. C12-O14 bağı da 0.0079 Å kısalmıştır.

Molekülün bağ açılarındaki değişimlere göre en fazla C12-O14-H15 açısında 5.66° bir artış vardır. Bu açıda hidrojen bağı kuran H15 atomu da vardır. İkinci olarak O14-C12-C16 açısında 4.19° artış olmuştur. C12-C16-O19 açısında ise 3.36° artış olmuştur.

Dihedral açılardaki en fazla değişim de O14-C12-C16-O19, H13-C12-C16-O19, H13-C12-C16-H17 dihedrallerinde sırasıyla 14.45°, 15.37°, 14.57° olmuştur. C12-C16-O19-H20 diedralinde ise 13.71° azalma olmuştur. Molekülün beşli halkası dışındaki bu etkileşimde diedral değişimleri fazla olmuştur.



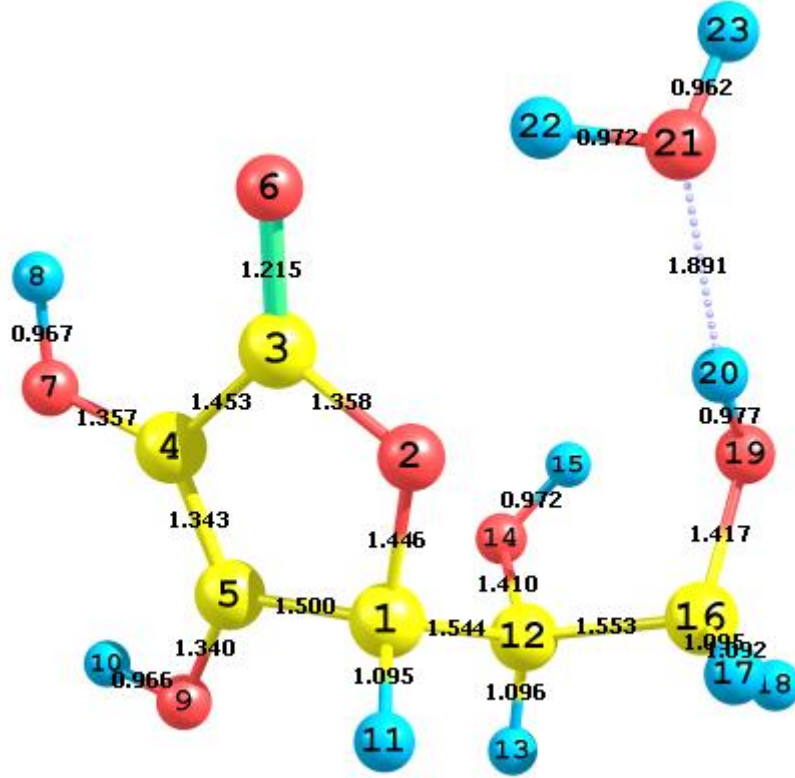


Şekil 6.5 H15 kodlu etkileşim sonucu bağ uzunlukları.

H20 kodlu etkileşimde AA molekülünün H20 atomu su molekülü ile hidrojen bağı kurmaktadır (Şekil 6.6). H20 ile su molekülünün oksijeni arasındaki hidrojen bağının uzunluğu 1.891 Å değerindedir. Etkileşim sonucu O2-C3 bağı 0.0189 Å kısalmıştır, C12-O16 bağı da 0.0156 Å uzamıştır. C3-O6 bağı da 0.0111 Å uzamıştır. Etkileşimin olduğu C3-O6 bağı 0.0109 Å uzamıştır. C16-O19 bağ uzunluğu da 0.0068 Å kısalmıştır.

Molekülün bağ açılarındaki değişimlere göre en fazla değişim C16-O19-H20 bağlarını oluşturduğu açıda olmuştur. Bu açı hidrojen bağı kurulan H20 atomunu da içerir. Artış miktarı da 3.85° değerindedir. ikinci olarak C12-O14-H15 açısında 1.29° azalma vardır. O2-C3-O6 açısında da 1.16° azalma vardır.

Dihedral açılarında en fazla değişim bu etkileşimde olmuştur. Bu etkileşim de h15 etkileşimi gibi molekülün beşli halkası dışında olan bir etkileşimdir. C12-C16-O19-H20, H17-C16-O19-H20, H18-C16-O19-H20 dihedral açılarında sırasıyla 18.96°, 18.65°, 18.31° artış olmuştur.

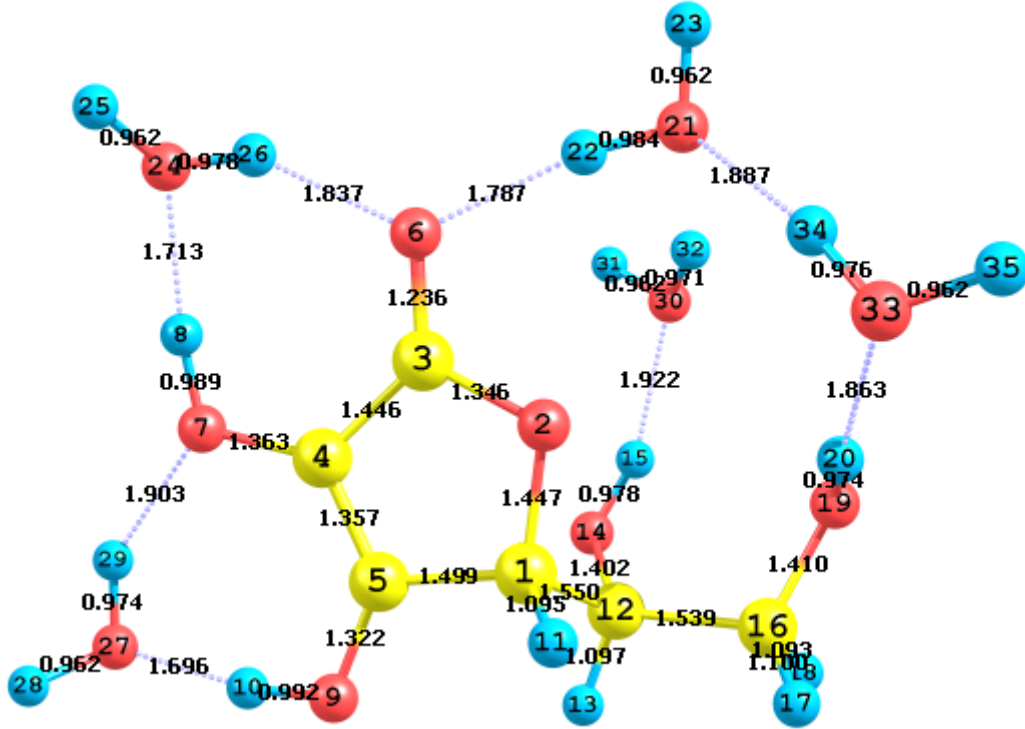


Şekil 6.6 H2O kodlu etkileşim sonucu bağ uzunlukları.

AA ile aynı anda 5 su molekülünün etkileşimi sonucu bağ uzunluklarındaki değişimlerine bakacak olursak (Şekil 6.7), en fazla uzama C3-O6 bağındaki 0.0323 Å değerinde, en fazla kısalma da O2-C3 bağındaki 0.0311 Å değerinde olmuştur. Hidrojen bağı kurulu bağlardan en fazla uzayan ise 0.026 Å değeriyle O9-H10 bağıdır. En kısa hidrojen bağı ise yine H10 ile su molekülünün oksijeni arasındaki hidrojen bağıdır. Bağ uzunluğu ise 1.696 Å değerindedir.

Açılardaki en fazla değişim C4-O7-H8 açısında 4.29°, C12-O14-H15 açısında 3.63° artış, O2-C3-O6 açısında 3.47° azalış, C16-H19-H20 açısında 3.40° artış, C12-C16-O19 açısında 2.79° artış meydana gelmiştir.

Dihedral açılardaki en fazla artışlar da beşli halka dışındaki etkileşimlerde olmuştur. C12-C16-O19-H20, H18-C16-O19-H20, H17-C16-O19-H20, O2-C1-C12-C16, C16-C12-O14-H15, H11-C1-C12-C16, H13-C12-O14-H15 ihedral açılarında sırasıyla 18.11°, 17.49°, 17.38°, 17.32°, 17.25°, 16.49° değişimler olmuştur.



Şekil 6.7 AA ve 5 su molekülünün aynı anda etkileşim sonucu bağ uzunlukları.

## 6.5 ETKİLEŞİM SONRASI ASKORBİK ASİT MOLEKÜLÜNÜN ÜZERİNDEKİ YÜK VE ELEKTRİKSEL POTANSİYEL DAĞILIMLARININ ANALİZİ

Çizelge 6.4' te gösterildiği gibi H8 kodlu etkileşimde Mulliken yük dağılımına göre en fazla yük değişimi H8 atomunda 0.160e, APT yük dağılımına göre H8 atomunda 0.210e, NBO yük dağılımına göre O6 atomunda -0.046e olmuştur. Elektriksel potansiyel değişimi de en fazla -0.025eV ile O7 atomunda olmuştur. Bu değerler etkileşim tarafındaki atomlara aittir.

Çizelge 6.4 H8 kodlu etkileşimin yük ve elektriksel potansiyelinin değişimi.

H8		Mulliken(e)	APT(e)	NBO (e)	EP (eV)
1	C	0.126	-0.010	-0.003	-0.002
2	O	-0.003	-0.011	0.007	0.001
3	C	-0.092	0.055	0.008	0.005
4	C	0.131	0.022	0.010	-0.004
5	C	-0.137	0.003	0.004	-0.007
6	O	-0.037	-0.112	<b>-0.046</b>	<b>0.005</b>
7	O	<b>-0.143</b>	<b>-0.165</b>	-0.033	<b>-0.025</b>
8	H	<b>0.160</b>	<b>0.210</b>	<b>0.025</b>	-0.022
9	O	0.003	-0.008	0.000	-0.005
10	H	0.004	0.004	0.002	-0.006
11	H	0.001	0.000	0.001	-0.001
12	C	-0.001	0.005	0.001	-0.001
13	H	0.002	0.000	0.000	-0.001
14	O	-0.002	0.002	0.001	-0.001
15	H	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001
16	C	-0.008	-0.003	0.000	0.000
17	H	-0.001	0.001	0.000	0.000
18	H	0.001	0.000	0.000	0.000
19	O	0.000	0.001	0.000	0.000
20	H	-0.002	-0.001	-0.001	0.000

Çizelge 6.5' te gösterildiği gibi H10 kodlu etkileşimde Mulliken yük dağılımına göre en fazla yük değişimi C5 atomunda 0.301e, APT yük dağılımına göre H10 atomunda 0.219e, NBO yük dağılımına göre O7 atomunda -0.035e olmuştur. Elektriksel potansiyel değişimi de en fazla -0.025eV ile O9 atomunda olmuştur. Bu değerler de etkileşim tarafındaki atomlara aittir.

Çizelge 6.5 H10 kodlu etkileşimin yük ve elektriksel potansiyelinin değişimi.

H10		Mulliken(e)	APT(e)	NBO (e)	EP (eV)
1	C	<b>-0.266</b>	-0.011	0.001	-0.007
2	O	0.012	-0.010	0.000	-0.005
3	C	0.018	0.029	-0.002	-0.005
4	C	-0.102	-0.073	-0.022	-0.005
5	C	<b>0.301</b>	0.081	0.025	-0.003
6	O	-0.010	-0.023	-0.013	-0.005
7	O	-0.039	-0.030	<b>-0.035</b>	0.006
8	H	0.005	-0.007	0.008	0.004
9	O	-0.113	<b>-0.172</b>	-0.019	<b>-0.025</b>
10	H	0.173	<b>0.219</b>	<b>0.027</b>	-0.023
11	H	0.002	0.001	-0.001	-0.005

Çizelge 6.4 (devam ediyor)

H10		Mulliken(e)	APT(e)	NBO (e)	EP (eV)
12	C	0.013	-0.003	-0.001	-0.005
13	H	0.002	0.005	0.002	<b>-0.006</b>
14	O	0.008	0.002	0.001	-0.005
15	H	0.000	-0.001	-0.001	-0.005
16	C	-0.025	0.004	0.000	-0.004
17	H	-0.003	-0.002	-0.001	-0.004
18	H	0.001	-0.002	-0.001	-0.004
19	O	0.001	-0.003	-0.001	-0.004
20	H	-0.001	0.002	0.000	-0.004

Çizelge 6.6' da gösterildiği gibi H15 kodlu etkileşimde Mulliken yük dağılımına göre en fazla yük değişimi H15 atomunda 0.137e, APT yük dağılımına göre H15 atomunda 0.123e, NBO yük dağılımına göre H15 atomunda 0.026e olmuştur. Elektriksel potansiyel değişimi de en fazla -0.015eV ile O14 atomunda olmuştur. Bu değerler de etkileşim tarafındaki atomlara aittir.

Çizelge 6.6 H15 kodlu etkileşimin yük ve elektriksel potansiyelinin değişimi.

H15		Mulliken(e)	APT(e)	NBO (e)	EP (eV)
1	C	-0.068	-0.006	-0.001	-0.001
2	O	0.034	-0.014	-0.006	0.001
3	C	-0.010	-0.001	0.002	0.000
4	C	-0.022	-0.006	-0.001	-0.001
5	C	0.071	0.008	0.005	-0.001
6	O	-0.003	0.000	-0.003	0.000
7	O	0.002	0.003	0.000	-0.001
8	H	-0.001	-0.002	-0.001	-0.001
9	O	0.007	0.001	0.002	-0.001
10	H	0.000	0.001	0.000	-0.001
11	H	0.004	0.002	-0.001	-0.001
12	C	0.065	0.036	0.003	-0.001
13	H	0.002	-0.010	-0.002	-0.005
14	O	<b>-0.110</b>	<b>-0.096</b>	<b>-0.025</b>	<b>-0.015</b>
15	H	<b>0.137</b>	<b>0.123</b>	<b>0.026</b>	-0.013
16	C	-0.102	0.000	0.002	0.002
17	H	0.008	-0.005	0.001	-0.001
18	H	0.013	0.009	0.005	0.002
19	O	-0.057	-0.058	-0.022	0.007
20	H	0.020	0.021	0.008	<b>0.008</b>

Çizelge 6.7’ de gösterildiği gibi H20 kodlu etkileşimde Mulliken yük dağılımına göre en fazla yük değişimi H20 atomunda 0.172e, APT yük dağılımına göre H20 atomunda 0.101e, NBO yük dağılımına göre O6 atomunda -0.051e olmuştur. Elektriksel potansiyel değişimi de en fazla -0.019eV ile H20 atomunda olmuştur. Bu değerler de etkileşim tarafındaki atomlara aittir.

Çizelge 6.7 H20 kodlu etkileşimin yük ve elektriksel potansiyelinin değişimi.

H20		Mulliken(e)	APT(e)	NBO (e)	EP (eV)
1	C	0.065	-0.014	0.001	-0.005
2	O	0.061	0.045	0.028	-0.002
3	C	0.035	-0.008	0.003	0.004
4	C	-0.070	-0.020	-0.002	0.001
5	C	-0.082	0.027	0.014	0.001
6	O	-0.028	-0.074	<b>-0.051</b>	<b>0.006</b>
7	O	0.004	0.006	0.000	0.001
8	H	0.001	-0.002	-0.001	0.001
9	O	0.015	-0.007	0.006	-0.001
10	H	-0.002	0.002	0.000	-0.001
11	H	0.000	0.009	0.002	-0.003
12	C	0.039	0.005	0.006	-0.008
13	H	-0.008	-0.016	-0.011	-0.012
14	O	-0.023	-0.015	-0.008	-0.011
15	H	0.004	0.022	0.006	-0.011
16	C	-0.015	0.016	0.003	-0.010
17	H	0.009	0.011	0.005	-0.010
18	H	-0.017	-0.017	-0.008	-0.013
19	O	<b>-0.147</b>	<b>-0.079</b>	-0.029	-0.018
20	H	<b>0.172</b>	<b>0.101</b>	<b>0.033</b>	<b>-0.019</b>

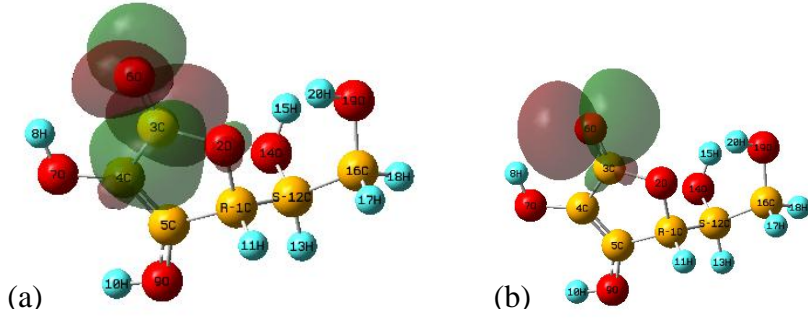
Çizelge 6.8’ de gösterildiği gibi AA ve 5 su molekülünün aynı anda etkileşiminde Mulliken yük dağılımına göre en fazla yük değişimi C4 atomunda -0.198e, APT yük dağılımına göre O6 atomunda -0.265e, NBO yük dağılımına göre O6 atomunda -0.136e olmuştur. Elektriksel potansiyel değişimi de en fazla -0.015eV ile O19 atomunda olmuştur.

Çizelge 6.8 AA ve 5 su molekülünün aynı anda etkileşiminin yük ve elektriksel potansiyelinin değişimi.

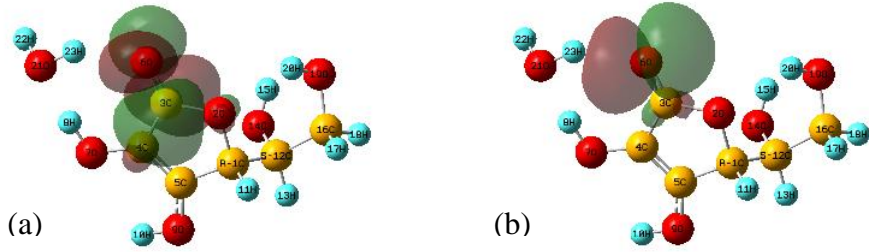
AA5		Mulliken(e)	APT(e)	NBO (e)	EP (eV)
1	C	-0.197	-0.079	-0.005	-0.016
2	O	0.102	0.043	<b>0.052</b>	-0.005
3	C	0.141	0.083	0.014	0.008
4	C	<b>-0.198</b>	-0.082	-0.015	-0.004
5	C	0.071	0.138	0.052	-0.006
6	O	-0.130	<b>-0.265</b>	<b>-0.136</b>	<b>0.013</b>
7	O	-0.194	-0.194	-0.067	-0.015
8	H	0.177	0.193	0.029	-0.013
9	O	-0.084	-0.208	-0.013	-0.027
10	H	0.163	<b>0.245</b>	0.027	-0.026
11	H	0.006	0.024	0.007	-0.012
12	C	0.097	0.043	0.007	-0.026
13	H	0.001	-0.005	-0.004	-0.027
14	O	-0.122	-0.074	-0.025	-0.036
15	H	<b>0.184</b>	0.108	0.033	-0.037
16	C	0.008	0.057	0.009	-0.031
17	H	-0.033	-0.024	-0.013	-0.029
18	H	-0.010	-0.025	-0.009	-0.034
19	O	-0.108	-0.097	-0.021	<b>-0.045</b>
20	H	0.096	0.108	0.015	-0.042

## 6.6 ASKORBİK ASİT HOMO-LUMO ANALİZİ

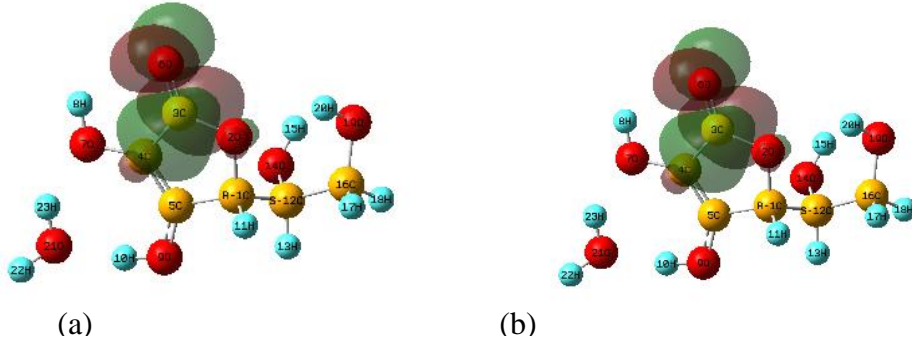
Askorbik asitte HOMO C3-O6 üzerine konuşlanmıştır (Şekil 6.8). LUMO da aynı bölgededir. HOMO-LUMO enerji aralığı 0.275eV değerindedir. Etkileşim sonrası HOMO ve LUMO yerlerinde bir değişiklik oluşmamaktadır. Enerji aralığı ise H8 kodlu etkileşimde 0.278eV (Şekil 6.9), H10 kodlu etkileşimde 0.274eV değerinde (Şekil 6.10), H15 kodlu etkileşimde 0.275eV değerinde (Şekil 6.11), H20 kodlu etkileşimde ise 0.279eV değerindedir (Şekil 6.12). Burada en düşük enerji aralığı H10 kodlu etkileşimde olmaktadır.



Şekil 6.8 AA için (a) HOMO, (b) LUMO gösterimi.

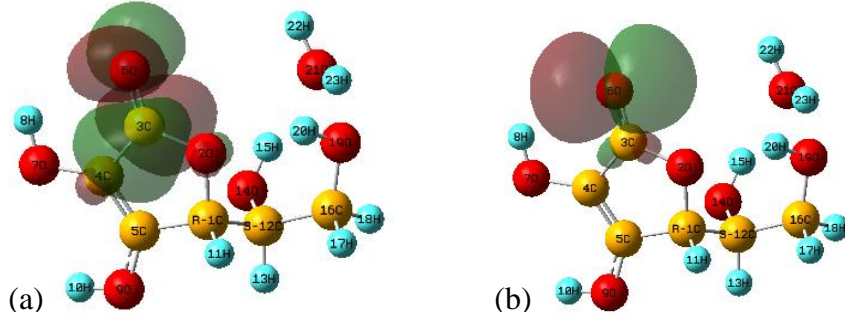


Şekil 6.9 H8 kodlu etkileşim için (a) HOMO, (b) LUMO gösterimi.

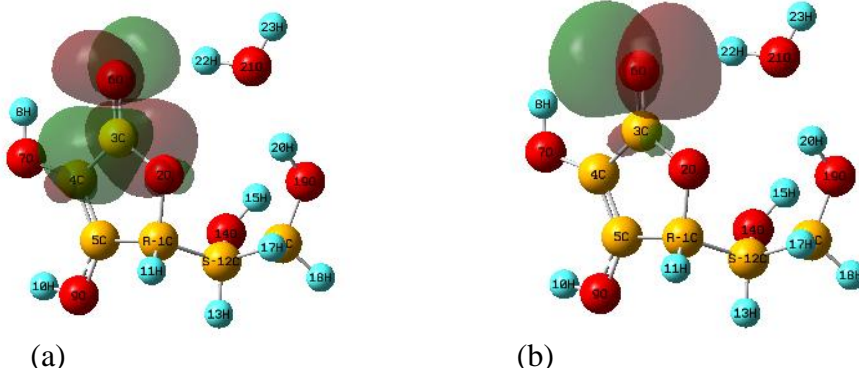


Şekil 6.10 H10 kodlu etkileşim için (a) HOMO, (b) LUMO gösterimi.





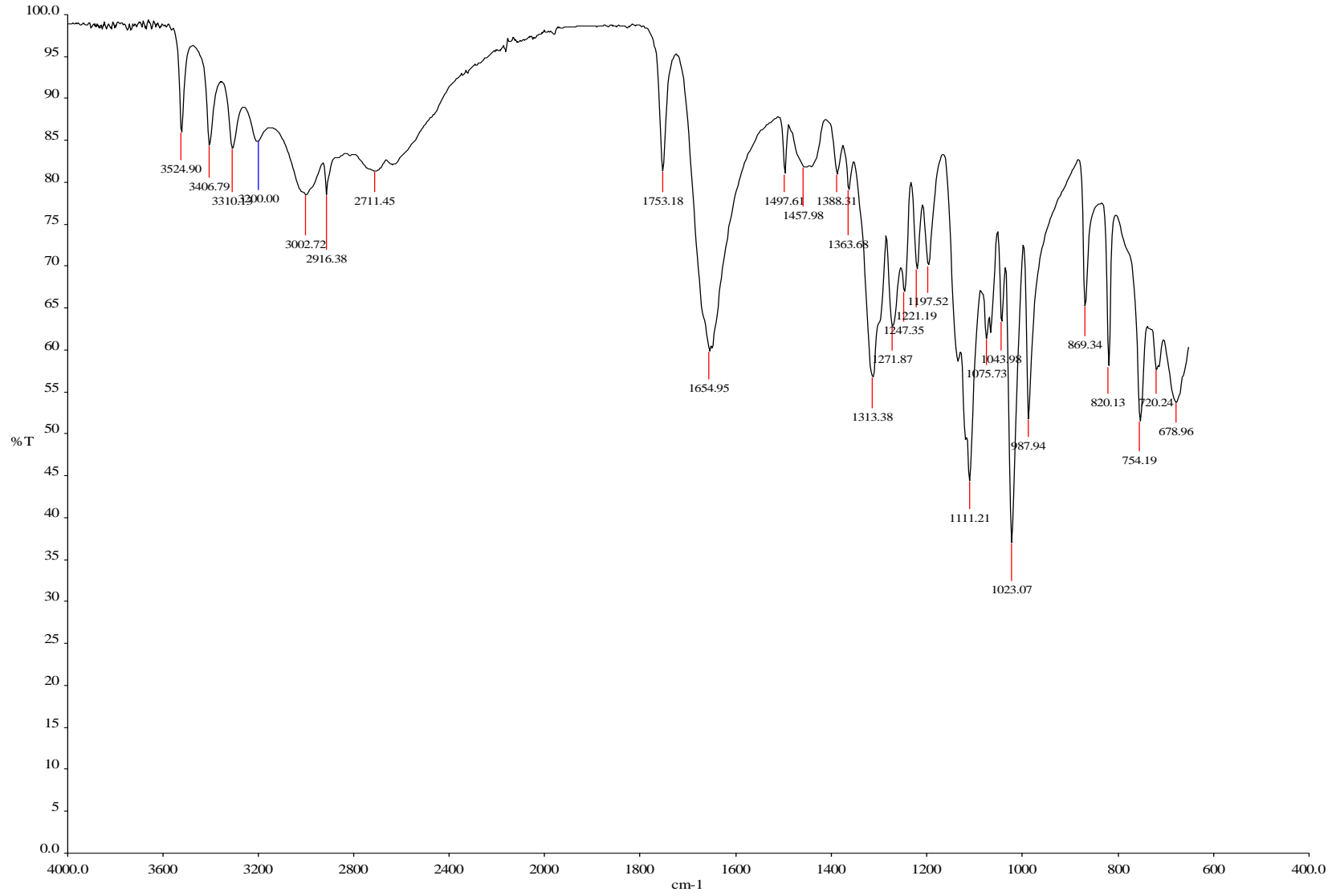
Şekil 6.11 H10 kodlu etkileşim için (a) HOMO, (b) LUMO gösterimi.



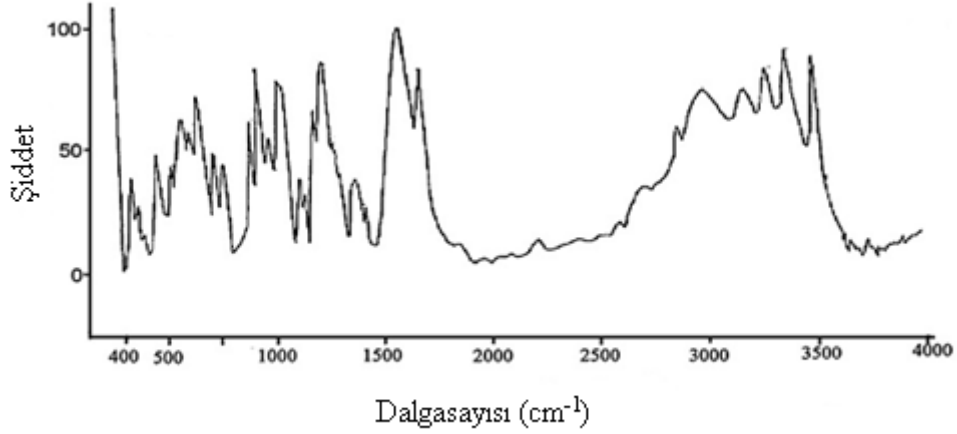
Şekil 6.12 H10 kodlu etkileşim için (a) HOMO, (b) LUMO gösterimi.

## 6.7 ASKORBİK ASİT KIZILÖTESİ SPEKTRUMUNUN DENEYSEL DEĞERLERLE KARŞILAŞTIRILMASI

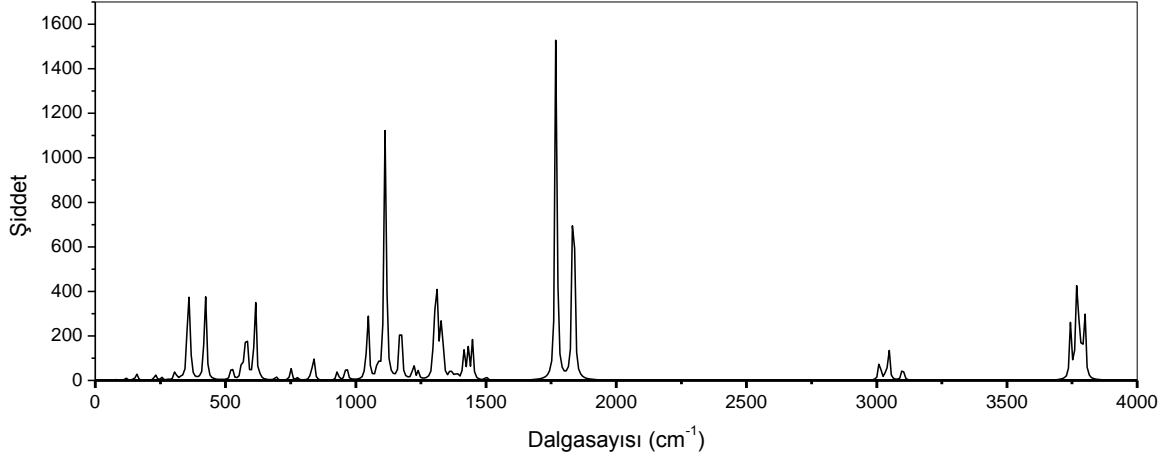
Katı haldeki askorbik asit için çektiğimiz kızılötesi spektrum (Şekil 6.13) ve literatürdeki diğer kızılötesi spektrumlar (Şekil 6.14) ile DFT ile B3LYP seviyesinde 6-311++G(d,p) baz seti kullanılarak hesaplanan değerlerle (Şekil 6.15) ayrı ayrı karşılaştırılıp ilişkilendirilmiştir. Hesaplamalarımız tek bir molekül için gaz fazında olduğundan, deneysel olarak katı halde birçok molekülün kızılötesi spektrumu ile bazı bölgelerde farklılık göstermektedir (Dimitrova 2006, Shimada et al. 2008). Bu bölgeler molekülün hidrojen bağı kurabilen aktif uçları olarak adlandırdığımız O-H ve C-H gerilme titreşim bölgelerine karşılık gelmektedir. Dolayısıyla  $2000\text{ cm}^{-1}$  dalgasayısından sonraki bölgelerde doğrusal ilişki bozulmaktadır (Şekil 6.16). Bu bölgeler çıkarıldıktan sonra çizilen korelasyon grafiklerinde ise doğrusallığa yakın grafikler elde edilmiştir (Şekil 6.17,18,19).



Şekil 6.13 Katı haldeki AA molekülünün için çektiğimiz deneysel kızılötesi spektrumu.

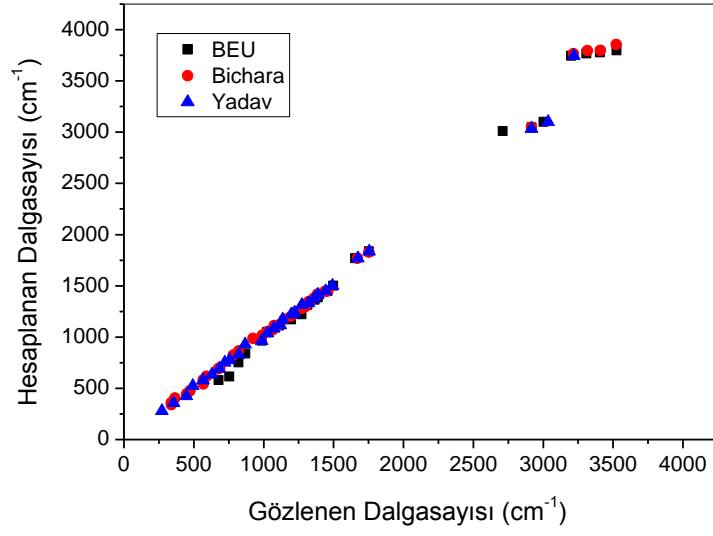


Şekil 6.14 AA molekülünün (Yadav et al. 2011)'dan alınan kızılötesi spektrumu.

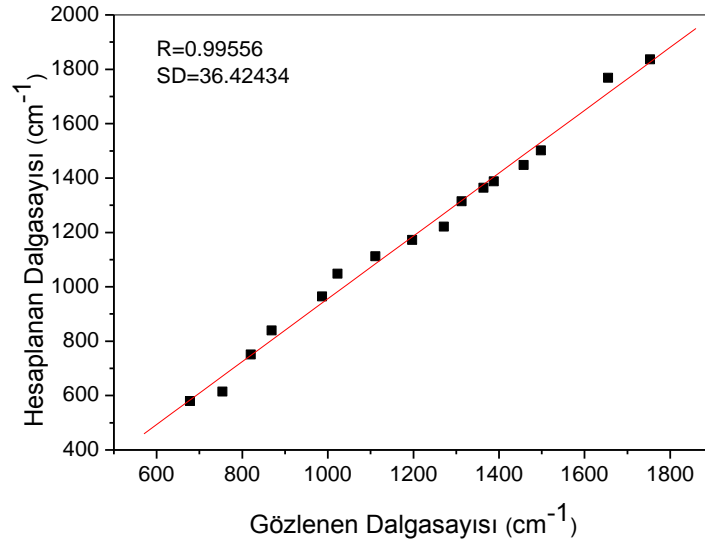


Şekil 6.15 AA molekülünün hesaplanan kızılötesi spektrumu.

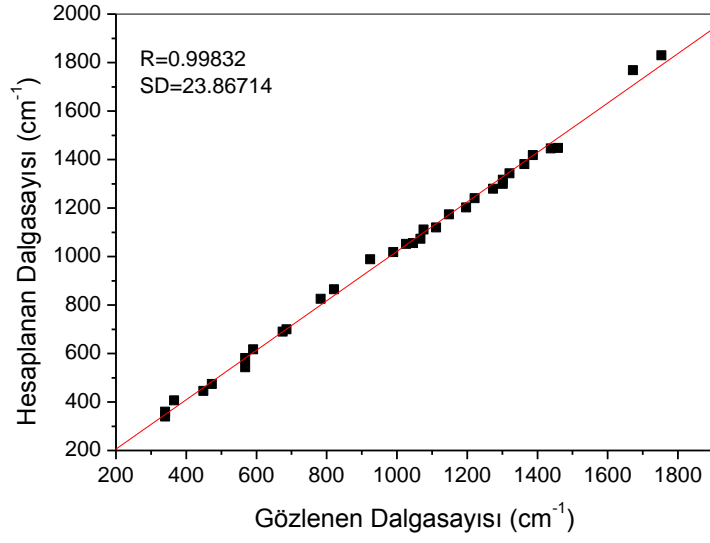
Şekil 6.16'da siyah noktalar bizim çektiğimiz, kırmızı noktalar Bichara ve arkadaşlarının yaptığı çalışmadan (Bichara et al. 2010) alınan, mavi noktalar da Yadav ve arkadaşlarının yaptığı çalışmadan (Yadav et al. 2011) alınan kızılötesi deneysel dalga sayılarına göre hesaplanan değerlerle yapılan ilişkiyi göstermektedir. 2000  $\text{cm}^{-1}$  dalga sayısından önceki değerlere göre yapılan doğrusal uydurmaya göre bizim çektiğimiz kızılötesi spektrumundan alınan 16 noktaya göre regresyon  $R=0.99556$ , standart sapma ise 36.42 değerindedir (Şekil 6.17). Bichara ve arkadaşlarının yaptığı çalışmadan alınan 32 değere göre  $R=0.99832$ , standart sapma ise 23.87 değerindedir (Şekil 6.18). Yadav ve arkadaşlarının yaptığı çalışmadan alınan 26 değere göre  $R=0.99845$ , standart sapma ise 23.92 değerindedir (Şekil 6.19).



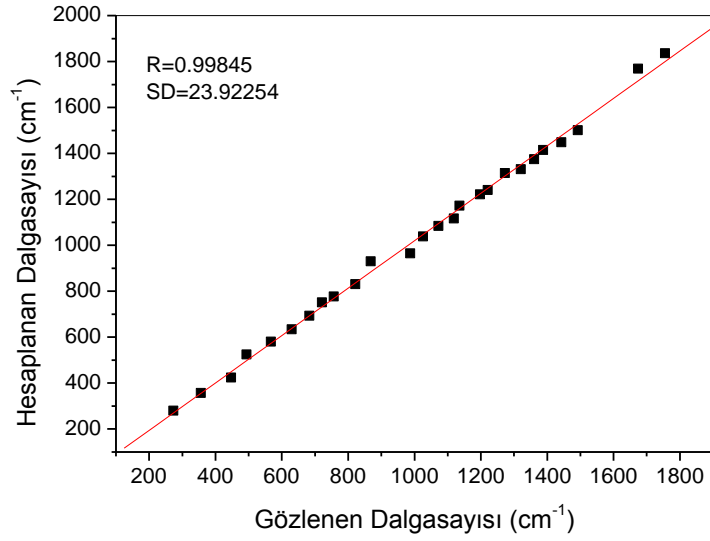
Şekil 6.16 AA için deneysel ve hesaplanan kızılötesi dalgasayısı değerlerinin korelasyon grafiği.



Şekil 6.17 AA için çektiğimiz kızılötesi spektrumunun deneysel ve hesaplanan değerlerinin korelasyonunun doğrusallığa uydurulması.



Şekil 6.18 AA için Bichara ve arkadaşlarının yaptığı çalışmadan alınan kızılötesi spektrumun deneysel ve hesaplanan değerlerinin korelasyonunun doğrusallığa uydurulması.

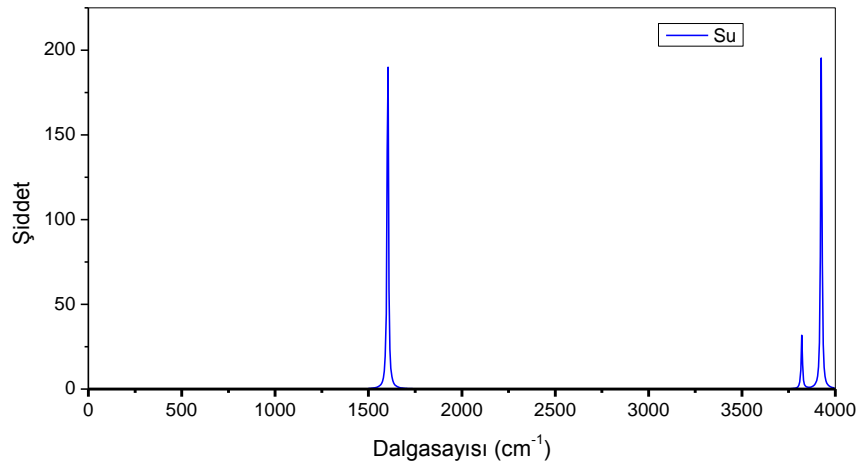
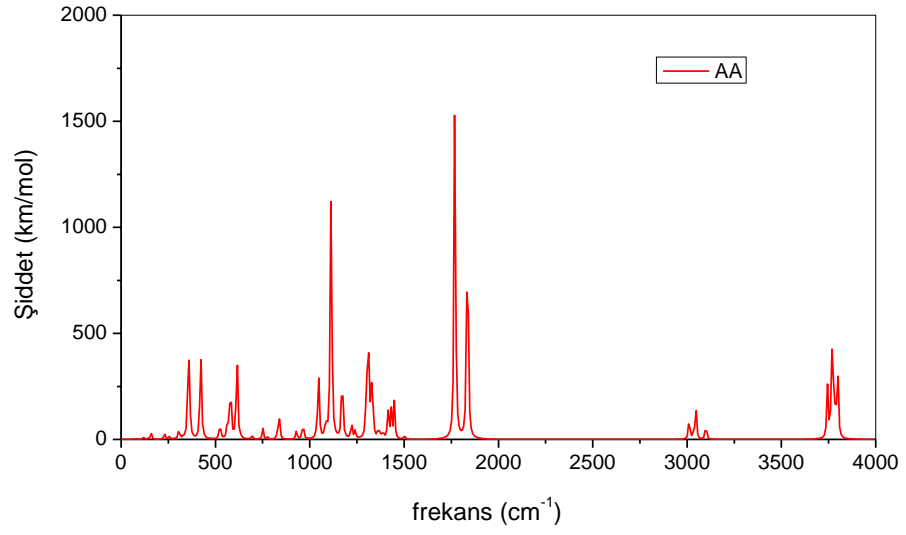
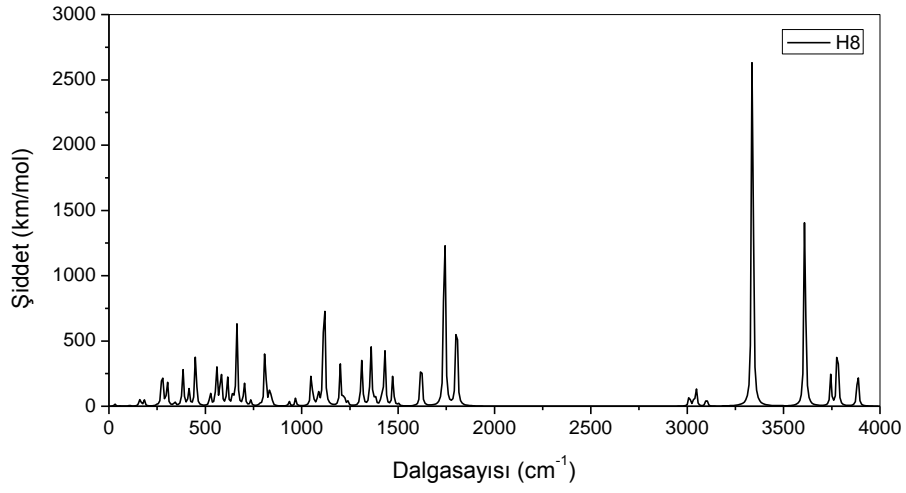


Şekil 6.19 AA için Yadav ve arkadaşlarının yaptığı çalışmadan alınan kızılötesi spektrumun deneysel ve hesaplanan değerlerinin korelasyonunun doğrusallığa uydurulması.

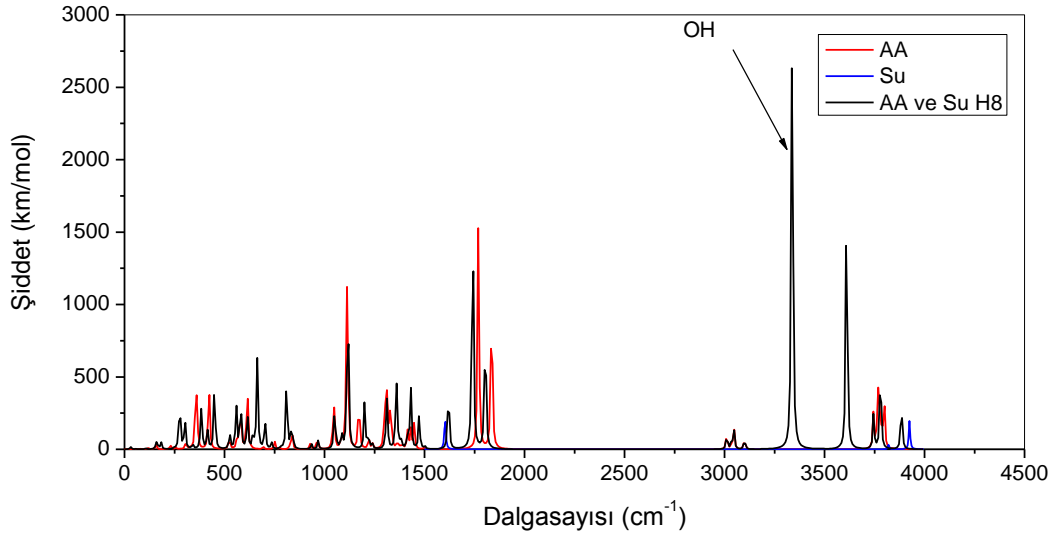
## 6.8 ASKORBİK ASİT SU ETKİLEŞİMİNİN KIZILÖTESİ SPEKTRUM ANALİZİ

### 6.8.1 H8 Kodlu Etkileşimin Kızılötesi Spektrum Analizi

H8 kodlu etkileşimde en belirgin kaymanın görüldüğü H8-O7 bağının gerilme titreşiminin dalgasayısı  $3767\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $3339\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti  $118\text{ km/mol}$  değerinden  $1070\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir (Şekil 6.20,21). Buradaki H8-O7 bağının kipe bağlı katkısı %87.6 iken %37.5 değerine düşmüştür ve ek olarak H8 atomunun suyun oksijeni ile gerilme titreşiminin katkısı %34.7 olmuştur. Bu etkileşim sonrası da ürik asidin toplam kipe sayısı 54'den 63'e yükselmiştir.



Şekil 6.20 H8 kodlu etkileşimin, askorbik asidin ve suyun ayrı ayrı kızılötesi spektrumu.



Şekil 6.21 H8 kodlu etkileşimin, askorbik asidin ve suyun aynı şiddet ve frekans eksenlerinde kızılötesi spektrumunun gösterimi.

### i. C=O gerilme titreşimi

Etkileşimden önce C=O gerilme titreşimini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 45. normal kipinde C3-O6 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %6.1'dir. Bu kip etkileşimden sonra 52. normal kipi kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı yine %6.1 değerinde olmuştur. Bu kipi dalgasayısı  $1769 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1741 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $478 \text{ km/mol}$  değerinden  $573 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

### ii. C-O Titreşimleri

#### a. Gerilme Titreşimleri

Etkileşimden önce C-O gerilme titreşimini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 31. normal kipinde C12-O14 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %6.1'dir. Bu kip etkileşimden sonra 37. normal kipi kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %5'in altında olmuştur değerinde olmuştur. Bu kipi dalgasayısı  $1116 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1117 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $114 \text{ km/mol}$  değerinden  $197 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.



C-O gerilme titreşimini içeren 45. normal kipi ise etkileşimden sonra  $1769\text{ cm}^{-1}$  dalgasayısından  $1741\text{ cm}^{-1}$  dalgasayılı 52. normal kipine kaymıştır. Kipin şiddeti ise  $478\text{ km/mol}$  değerinden  $573\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. C4-O7 bağının gerilme titreşiminin bu kipe katkısı %5.5 iken etkileşimden sonra %5'in altına düşmüştür. C5-O9 bağının gerilme titreşiminin katkısı da %5.3 iken %5'in altına inmiştir.

### **b. Düzlem içi bükülme titreşimleri**

C-O bağı içeren C3-C4-O7 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin 45. normal kipe katkısı %5.4 iken %5'in altına inmiştir. 45. normal kip etkileşimden sonra  $1769\text{ cm}^{-1}$  dalgasayısından  $1741\text{ cm}^{-1}$  dalgasayılı 52. normal kipine kaymıştır. Şiddeti ise  $478\text{ km/mol}$  değerinden  $573\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

### **iii. C-C Titreşimleri**

#### **a. Düzlem içi bükülme titreşimleri**

C-C bağı içeren H11-C1-C12 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin 37. normal kipe katkısı %5.5 iken %7 olmuştur. 37. normal kip etkileşimden sonra  $1331\text{ cm}^{-1}$  dalgasayısından  $1318\text{ cm}^{-1}$  dalgasayılı 42. normal kipine kaymıştır. Şiddeti ise  $101\text{ km/mol}$  değerinden  $10\text{ km/mol}$  değerine düşmüştür.

C-C bağı içeren C1-C12-H13 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin 38. normal kipe katkısı %6.1 iken etkileşimden sonra %5'in altına inmiştir. 38. normal kip etkileşimden sonra  $1364\text{ cm}^{-1}$  dalgasayısından  $1358\text{ cm}^{-1}$  dalgasayılı 43. normal kipine kaymıştır. Şiddeti ise  $15\text{ km/mol}$  değerinden  $146\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

#### **b. Burulma Titreşimleri**

C12-C16 bağı merkezli burulma titreşimlerini içeren  $1364\text{ cm}^{-1}$  dalgasayılı ve  $15\text{ km/mol}$  şiddetli 38. normal kipi  $1358\text{ cm}^{-1}$  dalgasayılı  $146\text{ km/mol}$  şiddetli 43. normal kipine kaymıştır. H13-C12-C16-H17 dihedralinin burulma titreşiminin katkısı %5.7 ve H13-C12-C16-H18 dihedralinin burulma titreşiminin katkısı %5.3 iken %5 değerinin altına inmiştir.

#### **iv. O-H Titreşimleri**

##### **a. Gerilme Titreşimleri**

Etkileşimden önce O-H gerilme titreşimini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 52. normal kipinde O7-H8 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %87.6'dır. Bu kip etkileşimden sonra 58. normal kipine kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %37.5 olmuştur. Bu kipi dalgasayısı  $3767\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $3339\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $118\text{ km/mol}$  değerinden  $1070\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipte etkileşimden sonra H8-O21 hidrojen bağının katkısı da %34.7 olmuştur.

##### **b. Düzlem içi bükülme titreşimleri**

O-H bağını içeren C5-O9-H10 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin 30. normal kipe katkısı %6.6 iken %5'in altına inmiştir. 30. normal kip etkileşimden sonra  $1112\text{ cm}^{-1}$  dalgasayısından  $1116\text{ cm}^{-1}$  dalgasayılı 36. normal kipine kaymıştır. Şiddeti ise  $274\text{ km/mol}$  değerinden  $170\text{ km/mol}$  değerine düşmüştür.

##### **c. Düzlem dışı bükülme titreşimleri**

O14-H15 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin 38. normal kipe katkısı %5.3 iken %5'in altına inmiştir. 38. normal kip etkileşimden sonra  $1364\text{ cm}^{-1}$  dalgasayısından  $1358\text{ cm}^{-1}$  dalgasayılı 43. normal kipine kaymıştır. Şiddeti ise  $15\text{ km/mol}$  değerinden  $146\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

#### **v. Halka titreşimleri**

##### **a. Gerilme Titreşimleri**

Askorbik asit molekülünün halka yapısı içindeki gerilme titreşimlerinden C-O bağına ait olan ve titreşim kipinin frekansında en belirgin kayma ya da şiddetinde değişiklik gözlenen kiplerden 30. normal kip etkileşimden sonra 36. normal kipe kaymıştır. Dalgasayısı  $1112\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1116\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti de  $274\text{ km/mol}$  değerinden  $170\text{ km/mol}$

değerine düşmüştür. C3-O2 gerilme titreşiminin katkısı %7 iken etkileşimden sonra %5 değerinin üstünde olmamıştır.

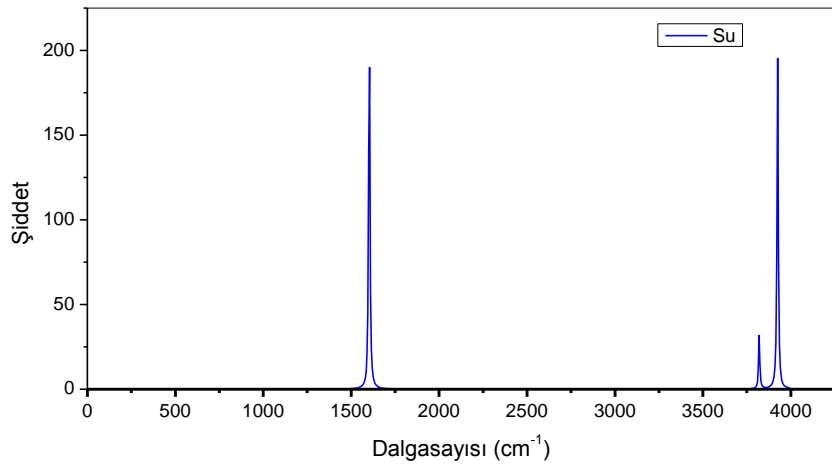
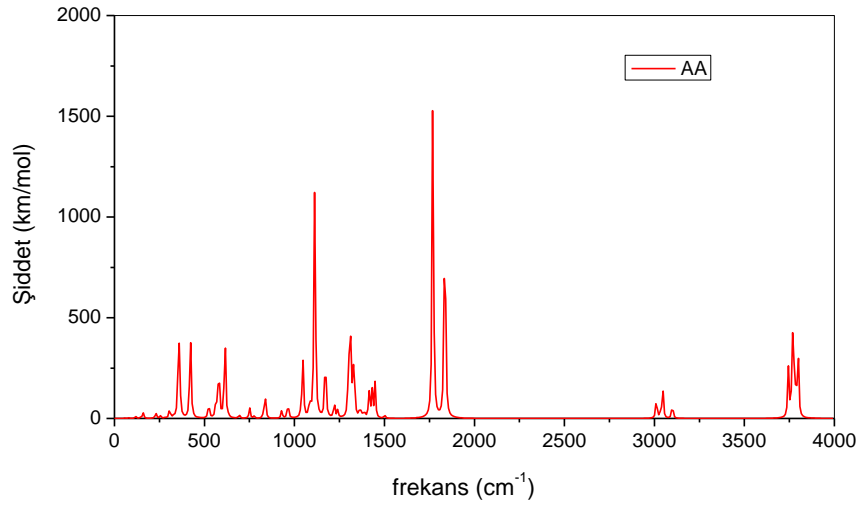
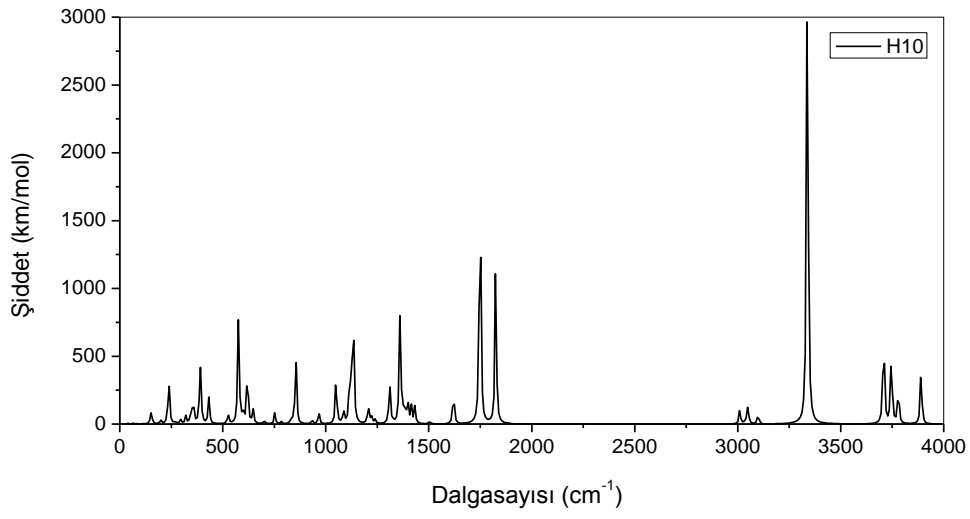
Askorbik asit molekülünün halka yapısı içindeki gerilme titreşimlerinden C=C bağına ait olan ve titreşim kipi nin frekansında en belirgin kayma ya da şiddetinde değişiklik gözlenen kiplerden 45. normal kip etkileşimden sonra 52. normal kipe kaymıştır. Dalgasayısı  $1769\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1741\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti de  $478\text{ km/mol}$  değerinden  $573\text{ km/mol}$  değerine düşmüştür. C4-C5 gerilme titreşiminin katkısı %12.2 iken etkileşimden sonra %8.7 değerinde olmuştur.

### **b. Burulma titreşimleri**

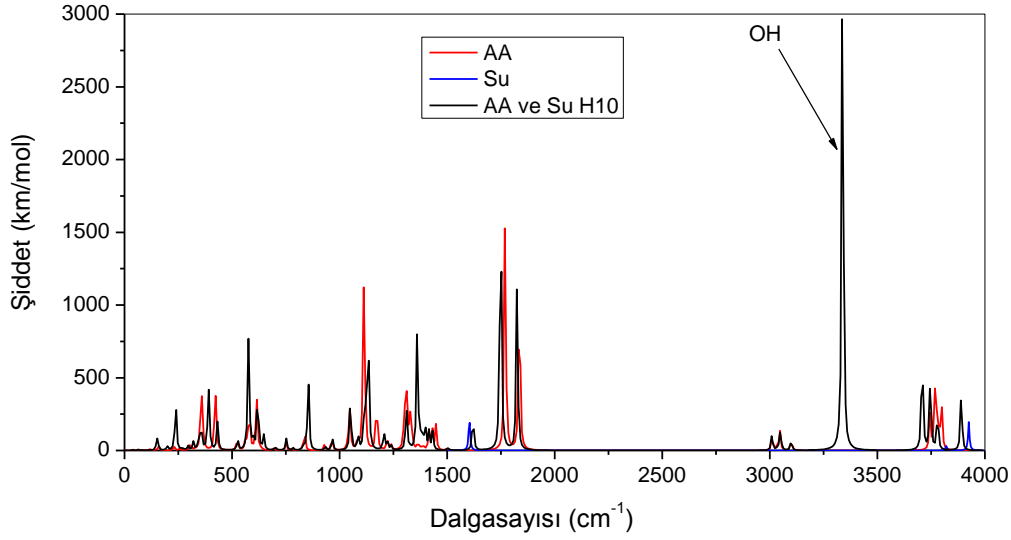
Askorbik asit molekülünün halka yapısı içindeki C1-C5 bağı merkezli burulma titreşimlerini içeren  $1331\text{ cm}^{-1}$  dalgasayılı ve  $101\text{ km/mol}$  şiddetli 37. normal kipi  $1318\text{ cm}^{-1}$  dalgasayılı  $10\text{ km/mol}$  şiddetli 42. normal kipi ne kaymıştır. H11-C1-C5-C4 dihedralinin burulma titreşiminin katkısı %6 iken %7.2, H11-C1-C5-O9 dihedralinin burulma titreşiminin katkısı %6.5 iken %7.9 olmuştur.

### **6.8.2 H10 Kodlu Etkileşimin Kızılötesi Spektrum Analizi**

H10 kodlu etkileşimde en belirgin kaymanın görüldüğü H10-O9 bağına gerilme titreşiminin dalgasayısı  $3798\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $3338\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti  $109\text{ km/mol}$  değerinden  $1149\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir (Şekil 6.22, 23). Buradaki H10-O9 bağına kipe bağılı katkısı %86.6 iken %39.2 değerine düşmüştür ve ek olarak H10 atomunun suyun oksijeni ile gerilme titreşiminin katkısı %36.1 olmuştur. Bu etkileşim sonrası da ürik asidin toplam kip sayısı 54'den 63'e yükselmiştir.



Şekil 6.22 H10 kodlu etkileşimin, askorbik asidin ve suyun ayrı ayrı kızılötesi spektrumu.



Şekil 6.23 H10 kodlu etkileşimin, Askorbik asidin ve suyun aynı şiddet ve frekans eksenlerinde kızılötesi spektrumunun gösterimi.

### i. C=O gerilme titreşimi

Etkileşimden önce C=O gerilme titreşimini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 45. normal kipinde C3-O6 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %6.1'dir. Bu kip etkileşimden sonra 52. normal kipiye kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %5.2 değerinde olmuştur. Bu kipi dalga sayısı 1769 cm<sup>-1</sup> değerinden 1749 cm<sup>-1</sup> değerine kaymıştır ve şiddet değeri 478km/mol değerinden 594km/mol değerine yükselmiştir.

### ii. C-O Titreşimleri

#### a. Gerilme Titreşimleri

C-O gerilme titreşimini içeren 45. normal kipi ise etkileşimden sonra 1769 cm<sup>-1</sup> dalga sayısından 1749 cm<sup>-1</sup> dalga sayılı 52. normal kipiye kaymıştır. Kipi şiddeti ise 478km/mol değerinden 594km/mol değerine yükselmiştir. C4-O7 bağının gerilme titreşiminin bu kipe katkısı %5.5 iken etkileşimden sonra %5'in altına düşmüştür. C5-O9 bağının gerilme titreşiminin katkısı da %5.3 iken etkileşimden sonra %5.4 olmuştur.

### **b. Düzlem içi bükülme titreşimleri**

C-O bağı içeren C3-C4-O7 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin 45. normal kipe katkısı %5.4 iken %5'in altına inmiştir. 45. normal kip etkileşimden sonra 1769 cm<sup>-1</sup> dalgasayısından 1749 cm<sup>-1</sup> dalgasayılı 52. normal kipine kaymıştır. Şiddeti ise 478km/mol değerinden 594km/mol değerine yükselmiştir.

### **c. Burulma Titreşimleri**

C4-O7 bağı merkezli burulma titreşimlerini içeren 357 cm<sup>-1</sup> dalgasayılı ve 162km/mol şiddetli 11. normal kipi 388 cm<sup>-1</sup> dalgasayılı 60km/mol şiddetli 16. normal kipine kaymıştır. C3-C4-O7-H8 ve C5-C4-O7-H8 dihedrallerinin kipe katkıları sırasıyla etkileşimden önce %33.2 ve %29.7 iken etkileşimden sonra %11.9 ve %11 olmuştur. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla su molekülü ile kurulan hidrojen bağlarını içeren burulma titreşimleri katkı sağlamaktadır.

C4-O7 bağı merkezli burulma titreşimlerini içeren 420 cm<sup>-1</sup> dalgasayılı ve 49km/mol şiddetli 13. normal kipi 854 cm<sup>-1</sup> dalgasayılı 154km/mol şiddetli 30. normal kipine kaymıştır. C5-C4-O7-H8 dihedrallerinin kipe katkısı etkileşimden önce %6 iken etkileşimden sonra %5'in altında olmuştur. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla su molekülü ile kurulan hidrojen bağlarını içeren burulma titreşimleri katkı sağlamaktadır.

### **iii. C-C Titreşimleri**

#### **a. Düzlem içi bükülme titreşimleri**

C-C bağı içeren H11-C1-C12 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin 36. normal kipe katkısı %7 iken %8.2 olmuştur. 36. normal kip etkileşimden sonra 1314 cm<sup>-1</sup> dalgasayısından 1326 cm<sup>-1</sup> dalgasayılı 42. normal kipine kaymıştır. Şiddeti ise 119km/mol değerinden 5km/mol değerine düşmüştür.

C-C bağı içeren C1-C12-H13 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin 38. normal kipe katkısı %6.1 iken etkileşimden sonra %5'in altına inmiştir. 38. normal kip etkileşimden sonra 1364 cm<sup>-1</sup> dalgasayısından 1360 cm<sup>-1</sup> dalgasayılı 43. normal kipine kaymıştır. Şiddeti ise

15km/mol değerinden 225km/mol değerine yükselmiştir. Etkileşimden sonra sadece H10-O21 hidrojen bağına içeren düzlem içi bükülme titreşiminin katkısı %5.1 olmuştur.

### **b. Burulma Titreşimleri**

C1-C12 bağı merkezli burulma titreşimlerini içeren 1172  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayılı ve 113 km/mol şiddetli 32. normal kipi 1206  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayılı 40km/mol şiddetli 38. normal kipine kaymıştır. H11-C1-C12-O14 dihedralinin burulma titreşiminin katkısı %5 iken etkileşimden sonra %5 değerinin altına inmiştir.

C12-C16 bağı merkezli burulma titreşimlerini içeren 1364  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayılı ve 15km/mol şiddetli 38. normal kipi 1360  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayılı 225km/mol şiddetli 43. normal kipine kaymıştır. H13-C12-C16-H17 dihedralinin burulma titreşiminin katkısı %5.7 ve H13-C12-C16-H18 dihedralinin burulma titreşiminin katkısı %5.3 iken etkileşimden sonra %5 değerinin altına inmiştir. Etkileşimden sonra sadece H10-O21 hidrojen bağına içeren düzlem içi bükülme titreşiminin katkısı %5.1 olmuştur.

### **iv. O-H Titreşimleri**

#### **a. Gerilme Titreşimleri**

Etkileşimden önce O-H gerilme titreşimini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 54. normal kipinde O9-H10 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %86.6'dır. Bu kip etkileşimden sonra 58. normal kipine kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %39.2 olmuştur. Bu kipi dalgasayısı 3798  $\text{cm}^{-1}$  değerinden 3338  $\text{cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri 109km/mol değerinden 1149km/mol değerine yükselmiştir. Bu kipte etkileşimden sonra H10-O21 hidrojen bağının katkısı da %36.1 olmuştur.

#### **b. Düzlem içi bükülme titreşimleri**

O-H bağını içeren C5-O9-H10 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin 32. normal kipe katkısı %8.3 iken %5'in altına inmiştir. 32. normal kip etkileşimden sonra 1172  $\text{cm}^{-1}$

dalgasayısından  $1206\text{ cm}^{-1}$  dalgasayılı 38. normal kipine kaymıştır. Şiddeti ise  $113\text{km/mol}$  değerinden  $40\text{km/mol}$  değerine düşmüştür.

O-H bağınyı içeren C5-O9-H10 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin 36. normal kipe katkısı %8.3 iken %5'in altına inmiştir. 36. normal kip etkileşimden sonra  $1314\text{ cm}^{-1}$  dalgasayısından  $1326\text{ cm}^{-1}$  dalgasayılı 42. normal kipine kaymıştır. Şiddeti ise  $119\text{km/mol}$  değerinden  $5\text{km/mol}$  değerine düşmüştür.

### **c. Düzlem dışı bükülme titreşimleri**

O9-H10 bağınyın düzlem dışı bükülme titreşiminin 11. normal kipe katkısı %12.7 iken %5'in altına inmiştir. 11. normal kip etkileşimden sonra  $357\text{ cm}^{-1}$  dalgasayısından  $388\text{ cm}^{-1}$  dalgasayılı 16. normal kipine kaymıştır. Şiddeti ise  $162\text{km/mol}$  değerinden  $60\text{km/mol}$  değerine düşmüştür. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla su molekülü ile kurulan hidrojen bağlarını içeren burulma titreşimleri katkı sağlamaktadır.

O9-H10 bağınyın düzlem dışı bükülme titreşiminin 13. normal kipe toplam katkısı %43.3 iken %5'in altına inmiştir. 13. normal kip etkileşimden sonra  $420\text{ cm}^{-1}$  dalgasayısından  $854\text{ cm}^{-1}$  dalgasayılı 30. normal kipine kaymıştır. Şiddeti ise  $49\text{km/mol}$  değerinden  $154\text{km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipe de etkileşimden sonra en fazla su molekülü ile kurulan hidrojen bağlarını içeren burulma titreşimleri katkı sağlamaktadır.

### **v. Halka titreşimleri**

#### **a. Gerilme Titreşimleri**

Askorbik asit molekülünün halka yapısı içindeki gerilme titreşimlerinden C=C bağına ait olan ve titreşim kipinin frekansında en belirgin kayma ya da şiddetinde değişiklik gözlenen kiplerden 45. normal kip etkileşimden sonra 52. normal kipe kaymıştır. Dalgasayısı  $1769\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1749\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti de  $478\text{km/mol}$  değerinden  $594\text{km/mol}$  değerine yükselmiştir. C4-C5 gerilme titreşiminin katkısı %12.2 iken etkileşimden sonra %11 olmuştur.



## **b. Düzlem içi Bükülme Titreşimleri**

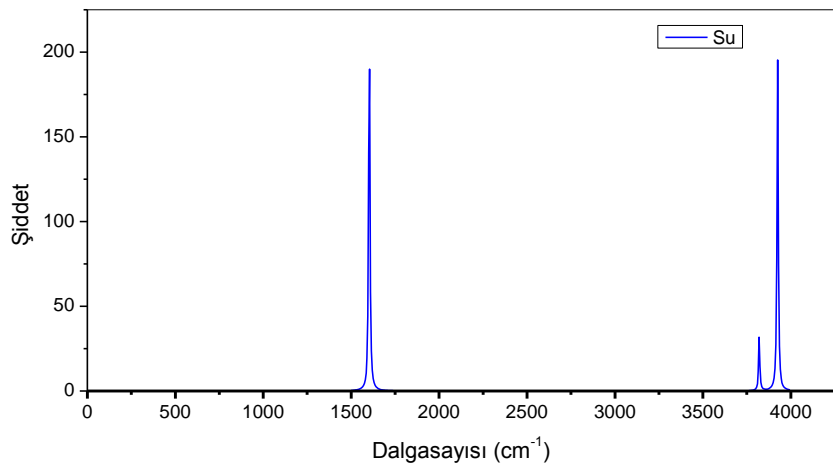
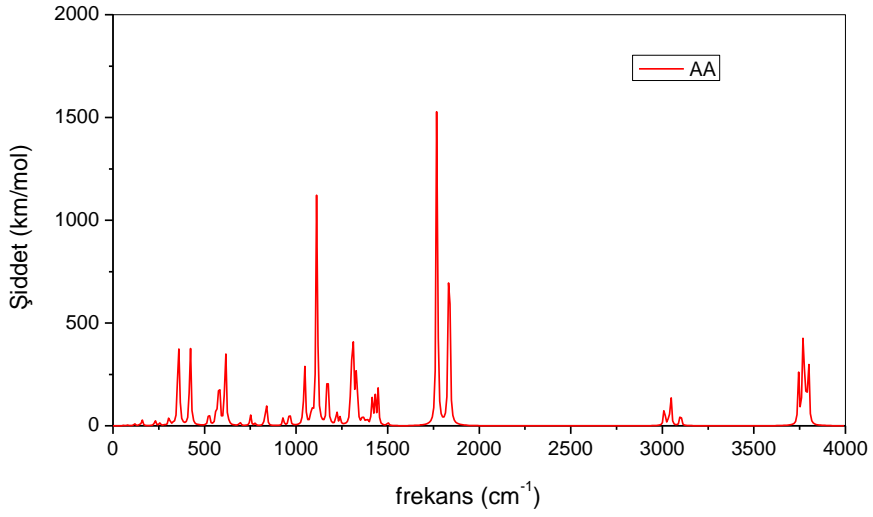
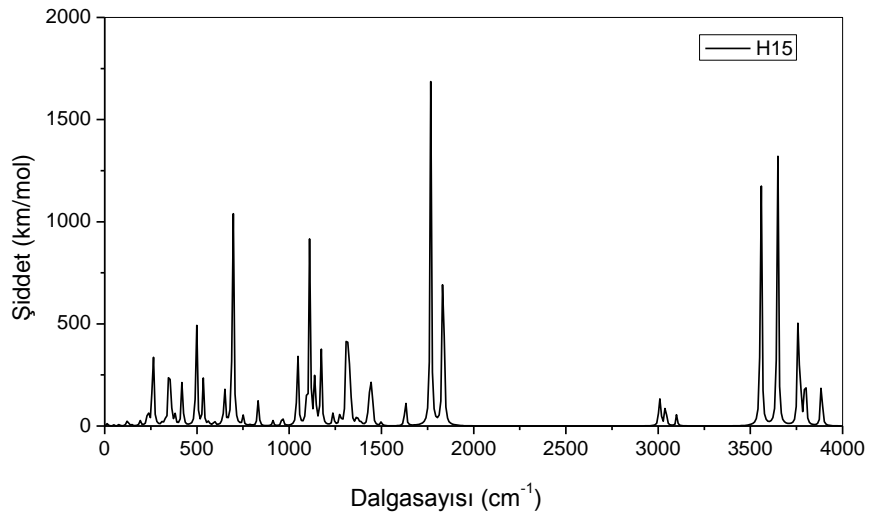
C5-C1 bağıını içeren C5-C1-H11 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin 36. normal kipe katkısı %5.3 iken %5'in altına inmiştir. 36. normal kip etkileşimden sonra 1314  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayısından 1326  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayılı 42. normal kipine kaymıştır. Şiddeti ise 119km/mol değerinden 5km/mol değerine düşmüştür.

## **c. Burulma titreşimleri**

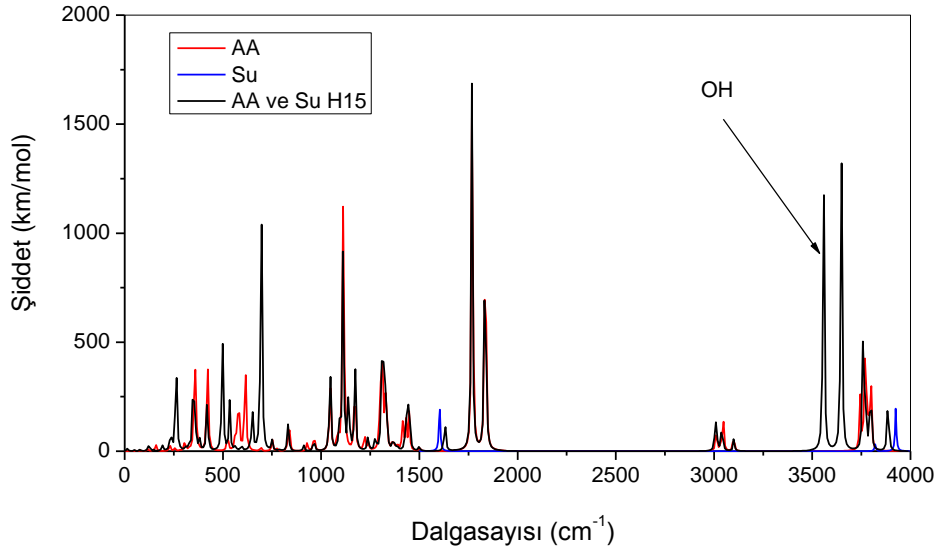
Askorbik asit molekülünün halka yapısı içindeki C1-O2 ve C1-C5 bağı merkezli burulma titreşimlerini içeren 1314  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayılı ve 119km/mol şiddetli 36. normal kipi 1326  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayılı 5km/mol şiddetli 42. normal kipine kaymıştır. H11-C1-O2-C3 dihedralinin burulma titreşiminin katkısı %6.3 iken %6.9, H11-C1-C5-O9 dihedralinin burulma titreşiminin katkısı %5.3 iken %6.9 olmuştur. C1-C5 merkezli H11-C1-C5-C4 dihedralinin burulma titreşiminin etkileşimden önce %5'in üstünde katkısı yokken, etkileşimden sonra %6 değerinde katkı vermiştir.

## **6.8.3 H15 Kodlu Etkileşimin Kızılötesi Spektrum Analizi**

H15 kodlu etkileşimde en belirgin kaymanın görüldüğü O14-H15 bağıının gerilme titreşiminin dalgasayısı 3745  $\text{cm}^{-1}$  değerinden 3557  $\text{cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti 188 km/mol değerinden 408 km/mol değerine yükselmiştir (Şekil 6.24, 25). Buradaki O14-H15 bağıının kipe bağıl katkısı %71.6 iken %29.5 değerine düşmüştür ve ek olarak H15 atomunun suyun oksijeni ile gerilme titreşiminin katkısı %27.6 olmuştur. Bu etkileşim sonrası da ürik asidin toplam kip sayısı 54'den 63'e yükselmiştir.



Şekil 6.24 H15 kodlu etkileşimin, askorbik asidin ve suyun ayrı ayrı kızılötesi spektrumu.



Şekil 6.25 H15 kodlu etkileşimin, Askorbik asidin ve suyun aynı şiddet ve frekans eksenlerinde kızılötesi spektrumunun gösterimi.

## i. O-H Titreşimleri

### a. Gerilme Titreşimleri

Etkileşimden önce O-H gerilme titreşimini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 51. normal kipinde O14-H15 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %71.6'dır. O19-H20 bağının gerilim titreşiminin katkısı ise %9.9'dur. Bu kip etkileşimden sonra 58. normal kipiye kaymıştır ve O14-H15 bağının titreşime katkısı %29.5, O19-H20 bağının katkısı ise %5 değerinin altında olmuştur. Bu kipi dalgasayısı 3745 cm<sup>-1</sup> değerinden 3557 cm<sup>-1</sup> değerine kaymıştır ve şiddet değeri 72km/mol değerinden 408km/mol değerine yükselmiştir. Bu kipte etkileşimden sonra H15-O21 hidrojen bağının katkısı da %27.6 olmuştur.

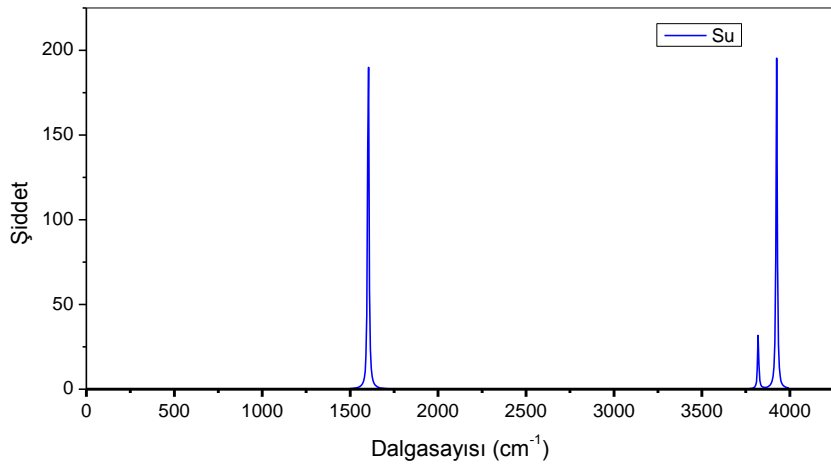
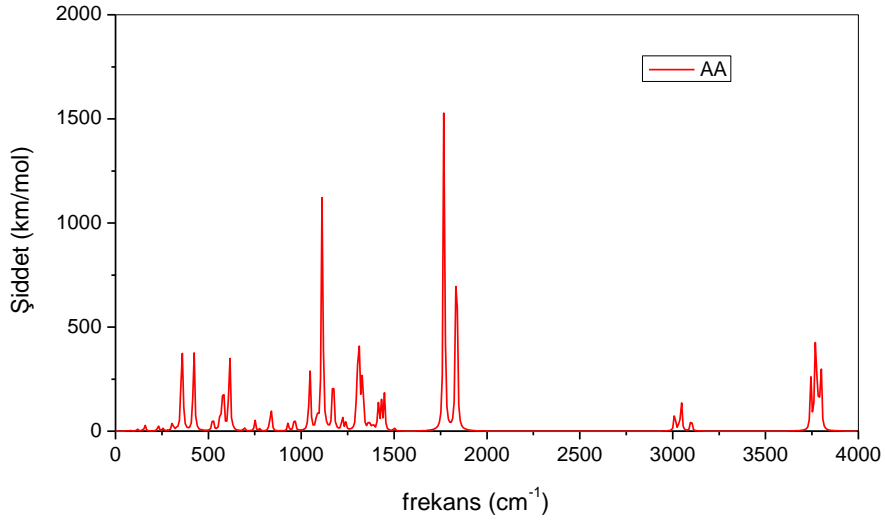
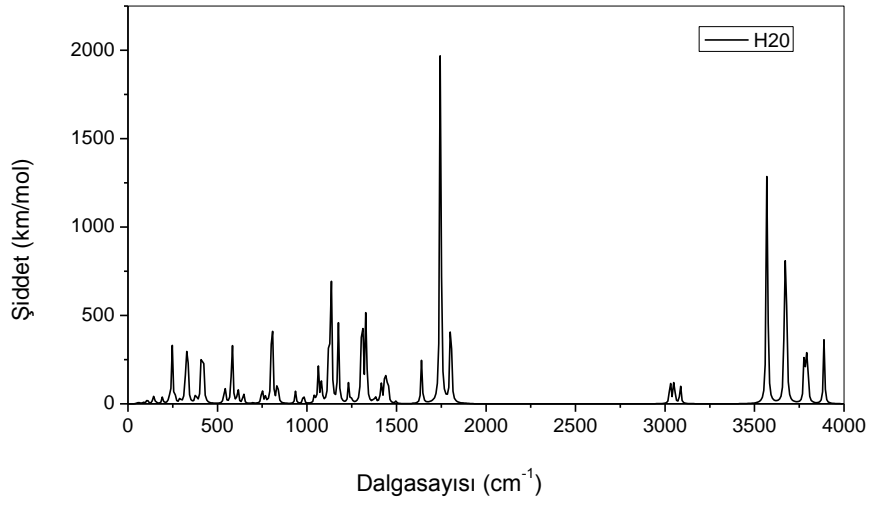
### b. Düzlem dışı bükülme titreşimleri

O14-H15 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin 14. normal kipe katkısı %40.7 iken %5.2 olmuştur. O19-H20 bağının düzlem dışı bükülme titreşiminin bu kipe katkısı ise %26.9 iken %17 olmuştur. 14. normal kip etkileşimden sonra 424 cm<sup>-1</sup> dalgasayısından 497 cm<sup>-1</sup> dalgasayılı 19. normal kipiye kaymıştır. Şiddeti ise 86km/mol değerinden 163km/mol

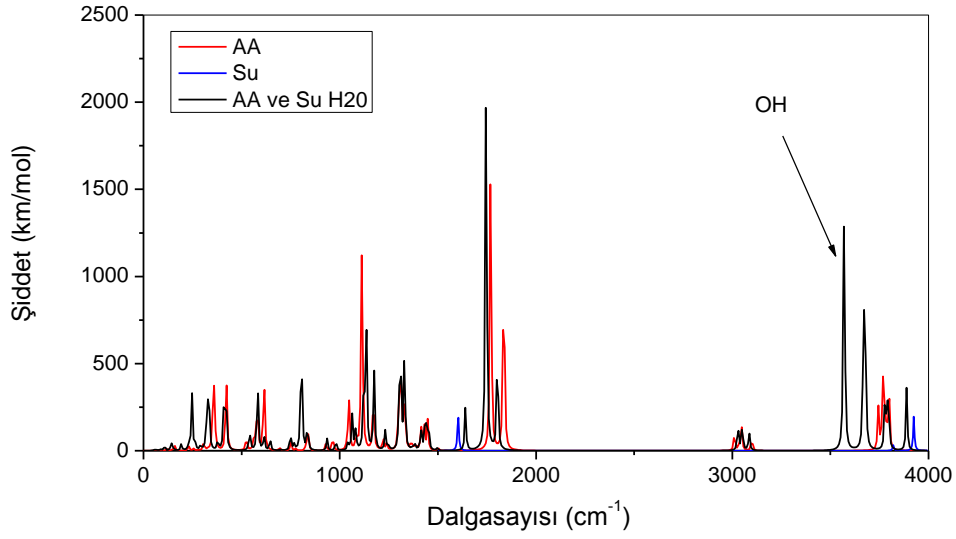
değerine yükselmiştir. Bu kipe etkileşimden sonra su molekülü ile kurulan hidrojen bağlarını içeren burulma titreşimleri katkısı ise %22.2 olmuştur.

#### **6.8.4 H<sub>2</sub>O Kodlu Etkileşimin Kızılötesi Spektrum Analizi**

H<sub>2</sub>O kodlu etkileşimde en belirgin kaymanın görüldüğü O19-H<sub>2</sub>O bağının gerilme titreşiminin dalgasayısı 3779 cm<sup>-1</sup> değerinden 3570 cm<sup>-1</sup> değerine kaymıştır ve şiddeti 87 km/mol değerinden 447 km/mol değerine yükselmiştir (Şekil 6.26, 27). Buradaki O19-H<sub>2</sub>O bağının kipe bağıl katkısı %72.5 iken %33.4 değerine düşmüştür ve ek olarak H<sub>2</sub>O atomunun suyun oksijeni ile gerilme titreşiminin katkısı %30.3 olmuştur. Bu etkileşim sonrası da ürik asidin toplam kip sayısı 54'den 63'e yükselmiştir.



Şekil 6.26 H<sub>2</sub>O kodlu etkileşimin, askorbik asidin ve suyun ayrı ayrı kızılötesi spektrumu.



Şekil 6.27 H2O kodlu etkileşimin, askorbik asidin ve suyun aynı şiddet ve frekans eksenlerinde kızılötesi spektrumunun gösterimi.

## i. C=O titreşimleri

### a. Gerilme Titreşimleri

Etkileşimden önce C=O gerilme titreşimini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 45. normal kipinde C3-O6 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %6.1'dir. Bu kip etkileşimden sonra 52. normal kipi kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %8 değerinde olmuştur. Bu kipi dalgasayısı  $1769\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1746\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $478\text{ km/mol}$  değerinden  $692\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

46. normal kipinde C3-O6 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %18.1'dir. Bu kip etkileşimden sonra 53. normal kipi kaymıştır ve bu bağın titreşime katkısı %11.8 değerinde olmuştur. Bu kipi dalgasayısı  $1836\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $1803\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $368\text{ km/mol}$  değerinden  $199\text{ km/mol}$  değerine düşmüştür.

## **b. Düzlem içi bükülme titreşimleri**

C=O bağıını içeren O2-C3-O6 açısının düzlem içi bükülme titreşimi etkileşimden önce en fazla değişim olan kiplerden 46. normal kipine %5 katkı verirken etkileşimden sonra 53. normal kipinde %5 değerinin altında olmuştur. 1836  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayısından 1803  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayısına kayan kipiın şiddeti 368  $\text{km/mol}$  değerinden 199  $\text{km/mol}$  değerine düşmüştür.

## **ii. C-O Titreşimleri**

### **a. Gerilme Titreşimleri**

C-O gerilme titreşimini içeren 31. normal kipi ise etkileşimden sonra 1112  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayısından 1233  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayılı 39. normal kipine kaymıştır. Kipiın şiddeti ise 114  $\text{km/mol}$  değerinden 34  $\text{km/mol}$  değerine düşmüştür. C12-O14 bağıının gerilme titreşiminin bu kipe katkısı %6.1 iken etkileşimden sonra %5'in altına düşmüştür.

45. normal kipinde C4-O7 ve C5-O9 bağılarının gerilme titreşiminin kipe katkıları %5.5 ve %5.3'tür. Bu kip etkileşimden sonra 52. normal kipine kaymıştır ve bu bağıların titreşime katkıları %5 değerinin altında olmuştur. Bu kipiın dalgasayısı 1769  $\text{cm}^{-1}$  değerinden 1746  $\text{cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri 478  $\text{km/mol}$  değerinden 692  $\text{km/mol}$  değerine yükselmiştir.

46. normal kipinde C4-O7 ve C5-O9 bağılarının gerilme titreşiminin kipe katkıları %5.6 ve %5.1'dir. Bu kip etkileşimden sonra 53. normal kipine kaymıştır ve bu bağıların titreşime katkıları %5.9 ve %5.5 değerinde olmuştur. Bu kipiın dalgasayısı 1836  $\text{cm}^{-1}$  değerinden 1803  $\text{cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri 368  $\text{km/mol}$  değerinden 199  $\text{km/mol}$  değerine düşmüştür.

### **b. Düzlem içi bükülme titreşimleri**

C-O bağıını içeren C3-C4-O7 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin 45. normal kipe katkısı %5.4 iken %5 olmuştur. 45. normal kip etkileşimden sonra 1769  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayısından 1746  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayılı 52. normal kipine kaymıştır. Şiddeti ise 478  $\text{km/mol}$  değerinden 692  $\text{km/mol}$  değerine yükselmiştir.

### iii. C-C Titreşimleri

#### a. Düzlem içi bükülme titreşimleri

C-C bağı içeren H13-C12-C16 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin 34. normal kipe katkısı %6.6 iken etkileşimden sonra %5 değerinin altında olmuştur. 34. normal kip etkileşimden sonra  $1240\text{ cm}^{-1}$  dalgasayısından  $1303\text{ cm}^{-1}$  dalgasayılı 41. normal kipe kaymıştır. Şiddeti ise  $10\text{ km/mol}$  değerinden  $85\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Etkileşimden sonra C5-C1-H11 düzlem içi bükülme titreşiminin katkısı %5 değerini aşarak %5.7 olmuştur.

#### b. Burulma Titreşimleri

C1-C12 bağı merkezli burulma titreşimlerini içeren  $1240\text{ cm}^{-1}$  dalgasayılı ve  $10\text{ km/mol}$  şiddetli 34. normal kipi  $1303\text{ cm}^{-1}$  dalgasayılı  $85\text{ km/mol}$  şiddetli 41. normal kipe kaymıştır. O2-C1-C12-H13 dihedralinin burulma titreşiminin katkısı %6.4 iken etkileşimden sonra %5 değerinin altına inmiştir. C5-C1-C12-H13 dihedralinin burulma titreşiminin katkısı da %6.6 iken etkileşimden sonra %5 değerinin altına inmiştir. H11-C1-O2-C3 ve H11 C1-C12-H13 dihedrallerinin katkıları %5 değerinin üstüne çıkarak %5.6 ve %6.7 olmuştur.

### iv. O-H Titreşimleri

#### a. Gerilme Titreşimleri

Etkileşimden önce O-H gerilme titreşimini içeren ve etkileşimden sonra titreşim kipinde önemli değişiklikler gözlenen kiplerden 53. normal kipinde O19-H20 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %72.5'dir. O14-H15 bağının gerilim titreşiminin katkısı ise %10'dur. Bu kip etkileşimden sonra 58. normal kipe kaymıştır ve O19-H20 bağının titreşime katkısı %33.4, O14-H15 bağının katkısı ise %5 değerinin altında olmuştur. Bu kipi dalgasayısı  $3779\text{ cm}^{-1}$  değerinden  $3570\text{ cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddet değeri  $87\text{ km/mol}$  değerinden  $447\text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir. Bu kipte etkileşimden sonra H20-O21 hidrojen bağının katkısı da %30.3 olmuştur.



## **b. Düzlem içi bükülme titreşimleri**

O-H bağınyı içeren C5-O9-H10 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin 30. normal kipe katkısı etkileşimden önce ve sonra da %6.6 olmuştur. 30. normal kip etkileşimden sonra 1112  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayısından 1135  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayılı 37. normal kipine kaymıştır. Şiddeti ise 274  $\text{km/mol}$  değerinden 202  $\text{km/mol}$  değerine düşmüştür.

## **c. Düzlem dışı bükülme titreşimleri**

O19-H20 bağınyın düzlem dışı bükülme titreşiminin 14. normal kipe katkısı %26.9 iken %5'in altına inmiştir. O14-H15 bağınyın düzlem dışı bükülme titreşiminin bu kipe katkısı ise %40.7 iken %5.2 olmuştur. 14. normal kip etkileşimden sonra 424  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayısından 542  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayılı 20. normal kipine kaymıştır. Şiddeti ise 86  $\text{km/mol}$  değerinden 28  $\text{km/mol}$  değerine düşmüştür. Bu kipe etkileşimden sonra en fazla su molekülü ile kurulan hidrojen bağlarını içeren burulma titreşimleri katkı sağlamaktadır.

## **v. Halka titreşimleri**

### **a. Gerilme Titreşimleri**

Askorbik asit molekölünün halka yapısı içindeki gerilme titreşimlerinden C=C bağına ait olan ve titreşim kipinin frekansında en belirgin kayma ya da şiddetinde değişiklik gözlenen kiplerden 45. normal kip etkileşimden sonra 52. normal kipe kaymıştır. Dalgasayısı 1769  $\text{cm}^{-1}$  değerinden 1746  $\text{cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti de 478  $\text{km/mol}$  değerinden 692  $\text{km/mol}$  değerine yükselmiştir. C4-C5 gerilme titreşiminin katkısı %12.2 iken etkileşimden sonra %9.7 olmuştur. 1836  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayılı ve 368  $\text{km/mol}$  şiddetli 46. normal kipinde ise katkısı %9.2 iken etkileşimden sonra 1803  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayılı ve 199  $\text{km/mol}$  şiddetli 53. normal kipinde %10.2'dir.

Halka yapısındaki O-C bağınyın gerilme titreşimlerinin katkı verdiği 30. normal kipinde O2-C3 bağınyın katkısı %7 iken etkileşimden sonra 37. normal kipinde %6.9 olmuştur. 30. normal kip etkileşimden sonra 1112  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayısından 1135  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayılı 37. normal kipine kaymıştır. Şiddeti ise 274  $\text{km/mol}$  değerinden 202  $\text{km/mol}$  değerine düşmüştür.

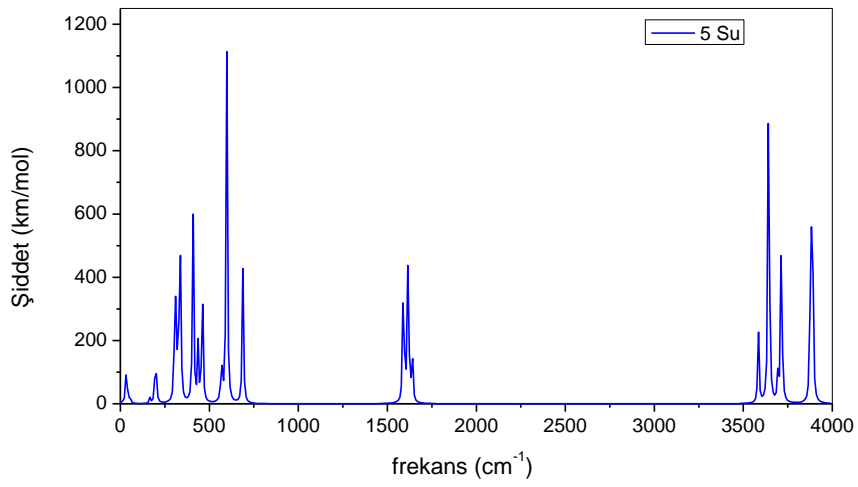
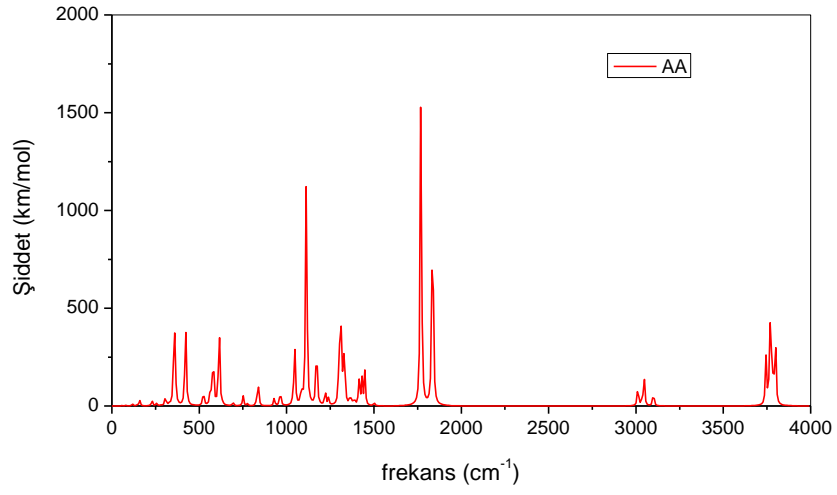
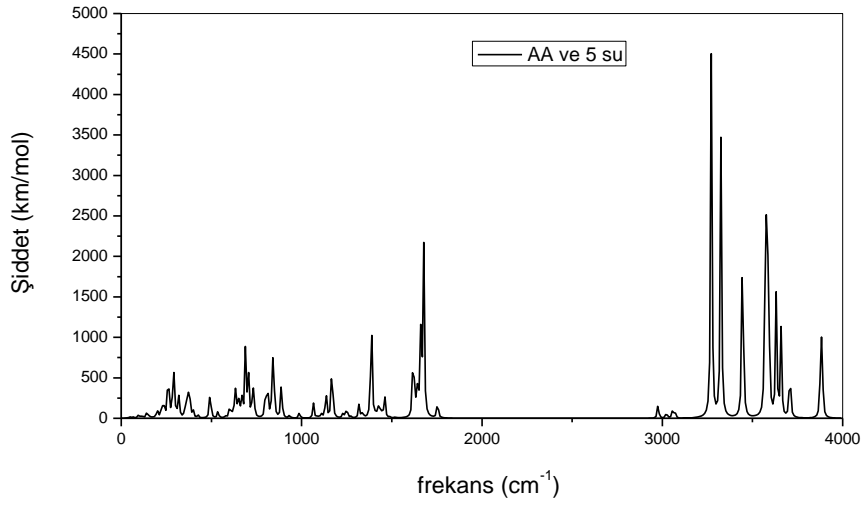
Halka yapısındaki C-C bağının gerilme titreşimlerinin katkı verdiği 46. normal kipinde C3-C4 bağının katkısı %9.2 iken etkileşimden sonra 53. normal kipinde %6.4 olmuştur. 46. normal kip etkileşimden sonra 1836  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayısından 1803  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayılı 53. normal kipiye kaymıştır. Şiddeti ise 368  $\text{km/mol}$  değerinden 199  $\text{km/mol}$  değerine düşmüştür.

#### **b. Düzlem içi Bükülme Titreşimleri**

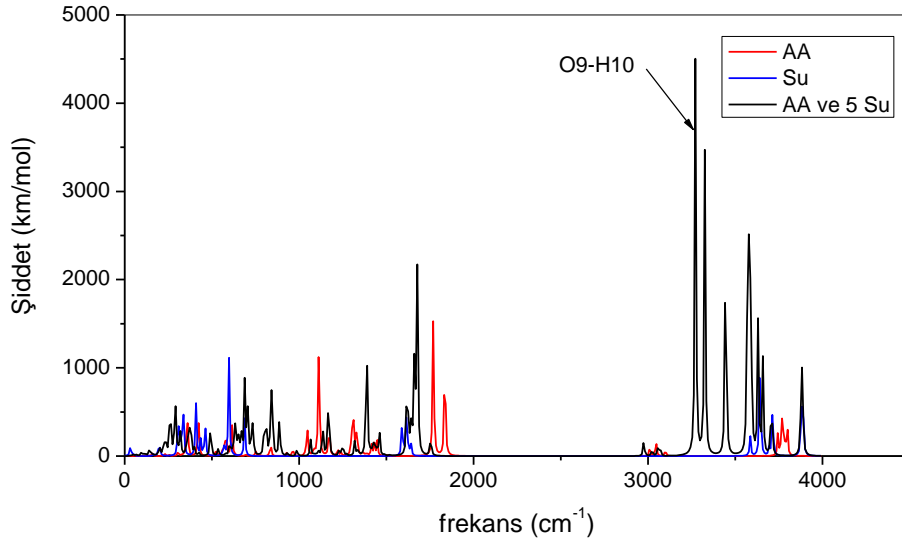
C3-C4 bağını içeren O2-C3-C4 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin 46. normal kipe katkısı %5.1 iken %5'in altına inmiştir. 46. normal kip etkileşimden sonra 1836  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayısından 1803  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayılı 53. normal kipiye kaymıştır. Şiddeti ise 368  $\text{km/mol}$  değerinden 199  $\text{km/mol}$  değerine düşmüştür.

#### **6.8.5 AA ve 5 Su Molekülünün Etkileşimin Kızılötesi Spektrum Analizi**

AA ve 5 Su molekülünün Etkileşimin en belirgin kaymanın görüldüğü O9-H10 bağının gerilme titreşiminin dalgasayısı 3798  $\text{cm}^{-1}$  değerinden 3272  $\text{cm}^{-1}$  değerine kaymıştır ve şiddeti 109  $\text{km/mol}$  değerinden 1329  $\text{km/mol}$  değerine yükselmiştir (Şekil 6.28, 29). Buradaki O9-H10 bağının kipe bağıl katkısı %86.6 iken %35.5 değerine düşmüştür ve ek olarak H10 atomunun suyun oksijeni ile gerilme titreşiminin katkısı %32.9 olmuştur. Bu etkileşim sonrası da askorbik asidin toplam kip sayısı 54'ten 99'a yükselmiştir. Bu etkileşimde birden fazla belirgin kayma vardır. Diğer kaymalar ayrıntılarıyla aşağıda belirtilmiştir.



Şekil 6.28 AA ve 5 su etkileşiminin, ürik asidin ve suyun ayrı ayrı kızılötesi spektrumu.



Şekil 6.29 AA ve 5 su etkileşiminin, ürik asidin ve suyun aynı şiddet ve frekans eksenlerinde kızılötesi spektrumunun gösterimi.

## i. C=O titreşimleri

### a. Düzlem içi bükülme titreşimleri

C=O titreşimlerini içeren normal kiplerden en fazla etkileşimin görüldüğü, dolayısıyla da dalgasayısında ve şiddetinde en fazla değişiklik olan kipler ele alındığında çift bağlı tek C=O bağı olan C3-O6 bağına içeren düzlem içi bükülme titreşimi etkileşimden önce 46. normal kipte %5 katkı verirken etkileşimden sonra 80. normal kipe kayan kipte %5 değerinin altında oluşmuştur. Bu titreşim kipi 1836 cm<sup>-1</sup> dalgasayısı değerinden 1754 cm<sup>-1</sup> dalgasayısı değerine kaymıştır ve şiddeti de 368 km/mol değerinden 74 km/mol değerine düşmüştür.

### b. Gerilme Titreşimleri

C3-O6 bağına gerilme titreşimlerini içeren 45. normal kipinde bu titreşimin etkisi etkileşimden önce %6.1 değerinde oluşurken, etkileşimden sonra 80. normal kipe kayan kipte %5 değerinin altında oluşmuştur. Etkileşmeden önce dalgasayısı 1769 cm<sup>-1</sup> iken etkileşmeden sonra 1677 cm<sup>-1</sup> değerine kaymıştır. Şiddet ise 478 km/mol değerinden 684 km/mol değerine yükselmiştir.

46. normal kipte ise bu bağı gerilme titreşiminin kipe etkisi %18.1 değerinde iken etkileşmeden sonra 81. normal kipe kayan kipte %5 değerinin üstünde bir etkisi kalmamıştır. Bu titreşim kipi de  $1836 \text{ cm}^{-1}$  dalgasayısı değerinden  $1754 \text{ cm}^{-1}$  dalgasayısı değerine kaymıştır ve şiddeti de  $368 \text{ km/mol}$  değerinden  $74 \text{ km/mol}$  değerine düşmüştür.

### **i.C-O Titreşimleri**

#### **a. Gerilme Titreşimleri.**

C-O titreşimlerini içeren normal kiplerden en fazla etkileşimin görüldüğü 45. normal kipinde C4-O7 ve C5-O9 bağlarının gerilme titreşimlerinin bu kipe etkileri sırasıyla % 5.5 ve %5.3 değerindedir. Etkileşimden sonra bu kip 80. normal kipe kaymıştır ve bu gerilme titreşimlerinin %5 değerinin üstünde bir etkisi görülmemiştir.

46. normal kipinde ise C4-O7 ve C5-O9 bağlarının gerilme titreşimlerinin etkileşmeden önce normal kipe etkileri sırasıyla %5.6 ve %5.1 iken etkileşmeden sonra 81. normal kipe kayan kipte %5 değerinin üstünde bir etkileri görünmemiştir.

#### **b. Düzlem içi bükülme titreşimleri**

O-C bağı içeren düzlem içi bükülme titreşimi yapan titreşim hareketlerine bakacak olursak yine 45. normal kipinde C3-C4-O7 açısının düzlem içi gerilme titreşiminin bu kipe katkısı etkileşimden önce %5.4 iken etkileşimden sonra 80. normal kipe kayan kipte %5 değerinin üstünde bir katkısı yoktur.

### **iv. Halka titreşimleri**

#### **a. Gerilme Titreşimleri**

Çift bağla bağlı karbon atomlarının oluşturduğu ve C vitamininin beşli halkası içerisinde yer alan C=C bağlarının en fazla etkileşimin görüldüğü normal kiplerdeki katkılarına bakacak olursak, 45. normal kipinde %12.2 değerinde bir katkısı olan C4-C5 çift bağının gerilme titreşiminin etkileşimden sonra 80. normal kipinde %5 değerinin üstünde bir etkisi görünmemektedir.

46. normal kipinde de aynı bağın gerilme titreşiminin kipe katkısı %9.2 iken etkileşimden sonra 81. normal kipinde %6.6 değerinde bir katkısı görünmektedir. Bu kip  $1836 \text{ cm}^{-1}$  dalgasayısından  $1753 \text{ cm}^{-1}$  dalgasayısına kaymıştır ve şiddeti de  $368 \text{ km/mol}$  değerinden  $74 \text{ km/mol}$  değerine düşmüştür.

Tek bağla bağlı karbon atomlarının oluşturduğu ve C vitamininin beşli halkasında bulunan C3-C4 bağlarının gerilme titreşiminin bulunduğu 46. normal kipte bu titreşimin kipe katkısı %6.1 iken etkileşimden sonra 81. normal kipinde %5 değerinin üstünde bir etkisi yoktur.

### **b. Düzlem içi bükülme titreşimleri**

C vitamininin beşli halkası üzerinde O2-C3-O6 açısının düzlem içi bükülme titreşiminin 46. normal kipine etkileşimden önce etkisi %5 iken etkileşimden sonra 81. normal kipinde %5 değerinin üstünde değildir.

### **v. O-H titreşimleri**

#### **a. Gerilme Titreşimleri**

O-H bağlarını içeren ve etkileşimin fazla olduğu kiplerden 51. normal kipinde O19-H15 bağının gerilme titreşiminin bu kipe katkısı %71.6 , O19-H20 bağının gerilme titreşiminin katkısı ise % 9.9 değerindedir. Etkileşimden sonra 89. normal kipinde O14-H15 bağının gerilme titreşiminin katkısı %24.1 değerine düşmüştür ve H15 suyun O30 atomuyla yaptığı hidrojen bağının gerilme titreşiminin katkısı da %21.3 olmuştur. O19-H20 bağının etkileşimden sonra 55 değerinin üstünde bir etkisi olmamıştır. Bu kip  $3745 \text{ cm}^{-1}$  dalgasayısından  $3567 \text{ cm}^{-1}$  dalgasayısına kaymıştır ve kiplin şiddeti de  $72 \text{ km/mol}$  değerinden  $327 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

52. normal kipte O7-H8 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı %87.6 iken etkileşmeden sonra 87. normal kipte %30.9 değerine düşmüştür. Fakat H8 atomunun su molekülünün O24 atomu ile yaptığı hidrojen bağının katkısı %28.8 olmuştur. Su moleküllerinin O24-H26 bağlarının gerilme titreşimlerin katkısı da %5.4 olmuştur. Bu kiplin dalgasayısı  $3767 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $3325 \text{ cm}^{-1}$  değerine kaymış, şiddeti de  $118 \text{ km/mol}$  değerinden  $1001 \text{ km/mol}$  değerine yükselmiştir.

53. normal kipte ise O14-H15 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı % 10, O19-H20 bağının gerilme titreşiminin kipe katkısı ise % 72.5 olmuştur. Bu kip etkileşmeden sonra 91. ve 92. normal kip olmak üzere iki farklı kipe ayrılmıştır. 91. normal kipte O19-H20 bağının gerilme titreşiminin normal kipe katkısı %15.6 olmuştur. 92. normal kipte ise aynı bağın katkısı %15.3 olmuştur. Her iki kipte de H20 atomunun su molekülünün O33 atomuyla yaptığı hidrojen bağının katkısı vardır. 91. normal kipte bu hidrojen bağının katkısı %14.2, 92. normal kipinde ise %13.6 değerindedir. bu kipe 3779  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayısı değerinden 91. normal kipte 3589  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayısı değerine 92. normal kipte ise 3632  $\text{cm}^{-1}$  dalgasayısı değerine kaymıştır. Şiddet ise 87  $\text{km/mol}$  değerinden 91. Kipte 714  $\text{km/mol}$  değerine 92. Kipe 444  $\text{km/mol}$  değerine yükselmiştir.

Son olarak 54. normal kipinde %86.6 katkı sağlayan O9-H10 bağının gerilme titreşimi etkileşmeden sonra 86. normal kipinde %35.5 katkı sağlamıştır. H10 atomunun su molekülünün O27 atomu ile yaptığı hidrojen bağının katkısı ise %32.9 değerinde olmuştur. Frekans değeri ise 3798  $\text{cm}^{-1}$  değerinden 3272  $\text{cm}^{-1}$  değerine kaymıştır. Şiddeti ise 109  $\text{km/mol}$  değerinden 1329  $\text{km/mol}$  değerine çıkmıştır. Bu şiddet ve frekans kayması değerleri en yüksek değerlerdir.

## BÖLÜM 7

### SONUÇ

Ürik asidin proton alma ve verme enerjilerine bakacak olursak en bazik ucu proton afinitesi en yüksek olan (852.29 kJ/mol) O15 atomunun N10 tarafı en asidik ucu da deprotonasyon entalpisi en az olan (1332.75 kJ/mol) H7 bağlı olan ucudur.

Teker teker etkileşimler göz önünde bulundurulduğunda hidrojen bağı enerjilerine göre en kuvvetli hidrojen bağı kuran etkileşim -36.19 kJ/mol enerjili hidrojen bağı kuran 169 kodlu etkileşimdir. İkinci olarak -35.12 kJ/mol enerjili hidrojen bağı kuran 147 kodlu etkileşimdir.

Hidrojen bağı uzunluklarına dikkate aldığımızda, teker teker etkileşen etkileşimlerde en kısa hidrojen bağı 1.884 Å uzunluğunda hidrojen bağı kuran 147 kodlu etkileşimde H7 ile su molekülünün oksijeni arasındaki bağıdır. Aynı anda 5 su molekülü ile olan etkileşime göre ise en kısa hidrojen bağı yine 1.795 Å bağı uzunluğu ile H6 atomu ile su molekülünün oksijeni arasındaki hidrojen bağıdır. O15 atomu ise 1.810 Å uzunluğunda bir hidrojen bağı kurmuştur.

Ürik asidin su molekülleri ile teker teker ve 5 su molekülüyle aynı anda etkileşmesi sonucu bağı uzunluklarındaki değişimlere göre en fazla uzama 147 kodlu etkileşimde H7-N11 bağında 0.0147 Å değerinde olmuştur. Aynı anda 5 su molekülüyle olan etkileşimde ise en fazla uzama 0.0262 Å ile C5-O16 bağında ikinci olarak da 0.0242 Å ile H6-N10 bağında olmuştur.

Etkileşim sonrası molekülün atomları üzerindeki yüklerin ve elektriksel potansiyelin değişimlerine göre teker teker etkileşimlerde en fazla değişim Mulliken yük dağılımına göre -0.200 e ile 168 kodlu etkileşimde C2 üzerinde, APT yük dağılımına göre 0.166e değişim ile 147 kodlu etkileşimde H7 üzerinde, NBO yük dağılımına göre -0.051 e ile 147 kodlu etkileşimde O14 üzerinde olmuştur. Elektriksel potansiyel değişimi ise -0.013eV ile 147 kodlu etkileşimde H7 üzerinde, 169 kodlu etkileşimde H9 üzerinde olmuştur. 5 su molekülünün aynı anda etkileştiği durumda ise Mulliken yük dağılımına göre -0.468e ile C3 atomunda, APT yük dağılımına göre 0.251e ile H6 atomunda, NBO yük dağılımına göre -



0.051 e ile O16 atomunda olmuştur. Elektriksel potansiyel değişimi ise -0.023 eV ile H7 atomunda olmuştur.

HOMO-LUMO enerji aralığındaki değişime göre en kararlı etkileşim en azalma HOMO-LUMO enerji aralıklı (0.24026 eV) 147 kodlu etkileşimdir.

Kızılötesi titreşim spektrumu analizine göre teker teker su ile etkileşen ürik asidin en fazla dalgasayısı kayması 147 kodlu etkileşimde 40. Titreşim kipinden 46. Titreşim kipine kayan ve dalgasayısı  $3637 \text{ cm}^{-1}$  değerinden  $3379 \text{ cm}^{-1}$  değerine kayan, şiddeti de 104 km/mol değerinden 607 km/mol değerine yükselen kiptir. Bu kip hidrojen bağı kuran N11 atomuna bağlı H7 atomunun gerilme titreşimine karşılık gelmektedir. Dolayısıyla buradaki etkileşim kızılötesi titreşim spektrumu analizinde baskın olarak hissedilir. 5 su molekülüyle aynı anda etkileşimde ise 34. normal kipten 74. normal kipe kayan N10 ile H6 arasındaki bağın gerilme titreşiminde meydana gelen değişimdir. Etkileşimden sonra bu kipin dalgasayısı  $430 \text{ cm}^{-1}$  azalmış şiddeti de 1087 km/mol değerinde artmıştır. N11-H7 titreşiminde ise  $265 \text{ cm}^{-1}$  bir dalgasayısı kayması ve 462 km/mol bir şiddet değişimi gözlenmiştir. H6-N10 tarafında iki su molekülünün kendi aralarındaki etkileşim de bu farklılığa sebep olabilir.

Askorbik asidin proton alma ve verme enerjilerine bakacak olursak en bazik ucu proton afinitesi en yüksek olan (859.45 kJ/mol) O6 atomunun O2 tarafı, en asidik ucu da deprotonasyon entalpisi en az olan (1345.05 kJ/mol) H10 bağlı olan ucudur.

Teker teker etkileşimler göz önünde bulundurulduğunda hidrojen bağı enerjilerine göre en kuvvetli hidrojen bağı kuran etkileşim -35.70 kJ/mol enerjili hidrojen bağı kuran H8 kodlu etkileşimdir. İkinci olarak -33.82 kJ/mol enerjili hidrojen bağı kuran H10 kodlu etkileşimdir.

Hidrojen bağ uzunluklarına dikkate aldığımızda, teker teker etkileşen etkileşimlerde en kısa hidrojen bağı  $1.696 \text{ \AA}$  uzunluğunda hidrojen bağı kuran H10 kodlu etkileşimde H10 ile su molekülünün oksijeni arasındaki bağıdır. Aynı anda 5 su molekülü ile olan etkileşime göre ise en kısa hidrojen bağı yine  $1.721 \text{ \AA}$  bağ uzunluğu ile H10 atomu ile su molekülünün oksijeni arasındaki hidrojen bağıdır. H8 atomu ise  $1.724 \text{ \AA}$  uzunluğunda bir hidrojen bağı kurmuştur.

Sonuç olarak teker teker etkileşimde en baskın etkileşim O14 ve H7 tarafından olurken, 5 su molekülü aynı anda etkileşirken H6 ve N10 tarafından olmuştur.

Askorbik asidin su molekülleri ile teker teker ve 5 su molekülüyle aynı anda etkileşmesi sonucu bağ uzunluklarındaki değişimlere göre en fazla uzama H10 kodlu etkileşimde O9-H10 bağında 0.0228 Å değerinde olmuştur. Aynı anda 5 su molekülüyle olan etkileşimde ise en fazla uzama 0.0323 Å ile C3-O6 bağında ikinci olarak da 0.0311 Å değerinde kısalma ile O2-C3 bağında olmuştur. Üçüncü en fazla etkilenen bağ 0.020 Å uzayan O9-H10 bağıdır.

Etkileşim sonrası molekülün atomları üzerindeki yüklerin ve elektriksel potansiyelin değişimlerine göre teker teker etkileşimlerde en fazla değişim Mulliken yük dağılımına göre -0.301e ile H10 kodlu etkileşimde C5 üzerinde, APT yük dağılımına göre 0.219e değişim ile H10 kodlu etkileşimde H10 üzerinde, NBO yük dağılımına göre -0.051 e ile H20 kodlu etkileşimde O6 üzerinde olmuştur. Elektriksel potansiyel değişimi ise -0.025eV ile H10 kodlu etkileşimde O9 üzerinde, -0.023 eV ile olmuştur. 5 su molekülünün aynı anda etkileştiği durumda ise Mulliken yük dağılımına göre -0.198e ile C4 atomunda, APT yük dağılımına göre -0.265e ile O6 atomunda, NBO yük dağılımına göre -0.136e ile O6 atomunda olmuştur. Elektriksel potansiyel değişimi ise -0.045 eV ile H18 atomunda olmuştur.

HOMO-LUMO enerji aralığındaki değişime göre en kararlı etkileşim HOMO-LUMO enerji aralığı en az olan (0.2746 eV) H10 kodlu etkileşimdir.

Kızılötesi titreşim spektrumu analizine göre teker teker su ile etkileşen askorbik asidin en fazla dalgasayısı kayması H10 kodlu etkileşimde 54. titreşim kipinden 58. titreşim kipine kayan ve dalgasayısı 3798 cm<sup>-1</sup> değerinden 3338 cm<sup>-1</sup> değerine kayan, şiddeti de 109 km/mol değerinden 1149 km/mol değerine yükselen kiptir. Bu kip hidrojen bağı kuran O9 atomuna bağlı H10 atomunun gerilme titreşimine karşılık gelmektedir. Dolayısıyla buradaki etkileşim kızılötesi titreşim spektrumu analizinde baskın olarak hissedilir. 5 su molekülüyle aynı anda etkileşimde ise 54. normal kipten 86. normal kipe kayan yine O9 ile H10 arasındaki bağın gerilme titreşiminde meydana gelen değişimdir. Etkileşimden sonra bu kipin dalgasayısı 526 cm<sup>-1</sup> azalmış şiddeti de 1220 km/mol değerinde artmıştır. O7-H8 titreşiminde ise 441 cm<sup>-1</sup> bir dalgasayısı kayması ve 882 km/mol bir şiddet değişimi gözlenmiştir.

Sonuç olarak teker teker etkileşimde en baskın etkileşim H10 ve O7 tarafından olurken, 5 su molekülü aynı anda etkileşirken de H10 ve O7 tarafından olmuştur.

Ürik asit ve askorbik asit gibi antioksidan maddelerin insan vücudunda farklı ortamlarda nasıl etkileştikleri ve etkilerinin nasıl değiştiğinin anlaşılması için önemlidir. Çeşitli hastalıkların tedavisi için geliştirilen ilaçların da aynı şekilde insan vücudundaki moleküler etkileşimleri, etkileri ve yan etkilerinin anlaşılması önemlidir. Kuantum kimyasal modellemeler bu tür etkileşmeleri inceleyerek hem maddi avantaj sağlamakta hem de zaman kaybını önlemektedir. Dolayısıyla, ileriki aşamalarda kuantum kimyasal hesaplamalar kullanılarak ilaç etkileşmeleri gibi çalışmalar yapılabilir.

## KAYNAKLAR

- Allaham M A, Petersson G A and Haake P** (1991) Abinitio Study of Ascorbic-Acid Conformations. *Journal of Computational Chemistry*, 12 (1): 113-118.
- Allen R N, Shukla M K and Leszczynski J** (2004) A theoretical study of the structure and properties of uric acid: A potent antioxidant. *International Journal of Quantum Chemistry*, 100 (5): 801-809.
- Allen R N, Shukla M K, Reed D and Leszczynski J** (2006) Ab initio study of the structural properties of ascorbic acid (vitamin C). *International Journal of Quantum Chemistry*, 106 (14): 2934-2943.
- Ames B N** (1983) Dietary Carcinogens and Anticarcinogens - Oxygen Radicals and Degenerative Diseases. *Science*, 221 (4617): 1256-1264.
- Ames B N, Cathcart R, Schwiers E and Hochstein P** (1981) Uric-Acid Provides an Antioxidant Defense in Humans against Oxidant-Caused and Radical-Caused Aging and Cancer - a Hypothesis. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America-Biological Sciences*, 78 (11): 6858-6862.
- Arivazhagan M and Jeyavijayan S** (2011) Vibrational spectroscopic, first-order hyperpolarizability and HOMO, LUMO studies of 1,2-dichloro-4-nitrobenzene based on Hartree-Fock and DFT calculations. *Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc*, 79 (2): 376-383.
- Arunagiri C, Arivazhagan M and Subashini A** (2011) Vibrational spectroscopic (FT-IR and FT-Raman), first-order hyperpolarizability, HOMO, LUMO, NBO, Mulliken charges and structure determination of 2-bromo-4-chlorotoluene. *Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc*, 79 (5): 1747-1756.
- Atkins P W and de Paula J** (2006) *Physical Chemistry*, Oxford, Oxford University Press.
- Atkins P W and Friedman R S** (1997) *Molecular Quantum Mechanics* (3 ed.), New York, Oxford University Press.
- Başköşe Ü C** (2011) *Rasajilin Molekülünün Moleküler Yapısının Ve Titreşimsel Spektrumunun Teorik Olarak İncelenmesi*. Yüksek Lisans, Gazi Üniversitesi, Ankara.
- Besler B H, Merz K M and Kollman P A** (1990) Atomic Charges Derived from Semiempirical Methods. *Journal of Computational Chemistry*, 11 (4): 431-439.

## KAYNAKLAR (devam ediyor)

- Bichara L C, Lanus H E, Nieto C G and Brandan S A** (2010) Density Functional Theory Calculations of the Molecular Force Field of L-Ascorbic Acid, Vitamin C. *Journal of Physical Chemistry A*, 114 (14): 4997-5004.
- Boys S F and Bernardi F** (1970) The calculation of small molecular interactions by the differences of separate total energies. Some procedures with reduced errors. *Molecular Physics*, 19 (4): 553-566.
- Buettner G R and Moseley P L** (1993) Epr Spin-Trapping of Free-Radicals Produced by Bleomycin and Ascorbate. *Free Radical Research Communications*, 19: S89-S93.
- Chandra A K and Zeegers-Huyskens T** (2007) Theoretical study of the acidity and basicity of uric acid and its interaction with water. *Journal of Molecular Structure-Theochem*, 811 (1-3): 215-221.
- Cohen A M, Aberdroth R E and Hochstein P** (1984) Inhibition of Free Radical-Induced DNA Damage by Uric-Acid. *Febs Letters*, 174 (1): 147-150.
- Davies K J A, Sevanian A, Muakkassahkelly S F and Hochstein P** (1986) Uric-Acid Iron-Ion Complexes - a New Aspect of the Antioxidant Functions of Uric-Acid. *Biochemical Journal*, 235 (3): 747-754.
- Demir T A, Ogretir C, Gorgun K and Yaman A** (2004) Quantum chemical studies on tautomerization of uric acid. *Journal of Molecular Structure-Theochem*, 684 (1-3): 149-157.
- Dimitrova Y** (2006) Theoretical study of the changes in the vibrational characteristics arising from the hydrogen bonding between Vitamin C (L-ascorbic acid) and H<sub>2</sub>O. *Spectrochimica Acta Part a-Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 63 (2): 427-437.
- Edsall J T, Sagall, E. L.** (1943) Raman spectra of l-ascorbic acid, tectronic acid and related compounds. *J. Am. Chem. Soc.*, 65: 1312-1316.
- Foresman J B, Frisch, A.** (1996) *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods* (2 ed.), USA, Gaussian Inc.
- Foster J P and Weinhold F** (1980) Natural Hybrid Orbitals. *Journal of the American Chemical Society*, 102 (24): 7211-7218.
- Frisch A, Frisch M J, Clemente F R and Trucks G W** (2009) *Gaussian 09 User's Reference*, Wallington USA, Gaussian Inc.

## KAYNAKLAR (devam ediyor)

- Frisch M J, Trucks G W, Schlegel H B, Scuseria G E, Robb M A, Cheeseman J R, Scalmani G, Barone V, Mennucci B, Petersson G A, Nakatsuji H, Caricato M, Li X, Hratchian H P, Izmaylov A F, Bloino J, Zheng G, Sonnenberg J L, Hada M, Ehara M, Toyota K, Fukuda R, Hasegawa J, Ishida M, Nakajima T, Honda Y, Kitao O, Nakai H, Vreven T, Montgomery J J A, Peralta J E, Ogliaro F, Bearpark M, Heyd J J, Brothers E, Kudin K N, Staroverov V N, Kobayashi R, Normand J, Raghavachari K, Rendell A, Burant J C, Iyengar S S, Tomasi J, Cossi M, Rega N, Millam J M, Klene M, Knox J E, Cross J B, Bakken V, Adamo C, Jaramillo J, Gomperts R, Stratmann R E, Yazyev O, Austin A J, Cammi R, Pomelli C, Ochterski J W, Martin R L, Morokuma K, Zakrzewski V G, Voth G A, Salvador P, Dannenberg J J, Dapprich S, Daniels A D, Farkas Ö, Foresman J B, Ortiz J V, Cioslowski J and Fox D J.** (2009). Gaussian 09. Wallingford CT: Gaussian, Inc.
- Gagliardi A C, Miname M H and Santos R D** (2009) Uric acid: A marker of increased cardiovascular risk [Review]. *Atherosclerosis*, 202 (1): 11-17.
- Grases F, Sanchis P, Perello J and Costa-Bauza A** (2006) Role of uric acid in different types of calcium oxalate renal calculi. *International Journal of Urology*, 13 (3): 252-256.
- Grases F, Villacampa A I, Costa-Bauza A and Sohnel O** (2000) Uric acid calculi: types, etiology and mechanisms of formation. *Clinica Chimica Acta*, 302 (1-2): 89-104.
- Haken H and Wolf H C** (2004) *Molekül Fiziği ve Kuantum Kimyası* (O İ., Trans.), Heidelberg, Springer.
- Halliwell B and Aruoma O I** (1991) DNA Damage by Oxygen-Derived Species - Its Mechanism and Measurement in Mammalian Systems. *Febs Letters*, 281 (1-2): 9-19.
- Harman D** (1981) The Aging Process. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America-Biological Sciences*, 78 (11): 7124-7128.
- Henson D E, Block G and Levine M** (1991) Ascorbic-Acid - Biologic Functions and Relation to Cancer. *Journal of the National Cancer Institute*, 83 (8): 547-550.
- Higdon J V and Frei B** (2002) Vitamin C: An Introduction *The Antioxidant Vitamins C and E*. AOCS Press, Champaign, Illinois.
- Hohenberg P and Kohn W** (1964) Inhomogeneous Electron Gas. *Physical Review B*, 136 (3B): 864-871.
- Hvoslef J** (1968) The Crystal Structure of L-Ascorbic Acid, 'Vitamin C'. II. The Neutron Diffraction Analysis\* *Acta Cryst.*, B24: 1431.
- Isoda H, Akagi K, Murata T, Aoki Y, Ikeda S, Tanaka Y, Kihara T and Ikeda M** (1996) Change in ascorbate radical production in an irradiated experimental tumor with increased tumor size. *Cancer Research*, 56 (24): 5741-5744.

## KAYNAKLAR (devam ediyor)

- Jimenez V and Alderete J B** (2005) Theoretical calculations on the tautomerism of uric acid in gas phase and aqueous solution. *Journal of Molecular Structure-Theochem*, 755 (1-3): 209-214.
- Karthick T, Balachandran V, Perumal S and Nataraj A** (2011) Spectroscopic studies, HOMO–LUMO and NBO calculations on monomer and dimer conformer of 5-nitrosalicylic acid. *Journal of Molecular Structure*, 1005 (1-3): 192-201.
- Klotz I M** (1994) Gout and Genius - a Chemical Connection. *Journal of Chemical Education*, 71 (12): 1015-1018.
- Kohn W, Becke A D and Parr R G** (1996) Density functional theory of electronic structure. *Journal of Physical Chemistry*, 100 (31): 12974-12980.
- Kohn W and Sham L J** (1965) Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Physical Review*, 140 (4A): 1133-1138.
- Laarej K, Bouachrine M, Radi S, Kertit S and Hammouti B** (2010) Quantum Chemical Studies on the Inhibiting Effect of Bipyrazoles on Steel Corrosion in HCl. *E-Journal of Chemistry*, 7 (2): 419-424.
- Lee C T, Yang W T and Parr R G** (1988) Development of the Colle-Salvetti Correlation-Energy Formula into a Functional of the Electron-Density. *Physical Review B*, 37 (2): 785-789.
- Lee I M** (1999) Antioxidant vitamins in the prevention of cancer. *Proceedings of the Association of American Physicians*, 111 (1): 10-15.
- Lehninger A L** (1982) *Principles of Biochemistry*, New York, Worth.
- Lohmann W, Pagel D and Penka V** (1984) Structure of Ascorbic-Acid and Its Biological Function - Determination of the Conformation of Ascorbic-Acid and Isoascorbic Acid by Infrared and Ultraviolet Investigations. *European Journal of Biochemistry*, 138 (3): 479-480.
- Majoube M and Vergoten G** (1993) Vibrational-Spectra for Uric-Acid and Its D-Substituted and N-15-Substituted Analogs - Assignments for Its Normal-Modes from Abinitio 3-21g Force-Field. *Journal of Molecular Structure*, 294: 41-44.
- Maples K R and Mason R P** (1988) Free-Radical Metabolite of Uric-Acid. *Journal of Biological Chemistry*, 263 (4): 1709-1712.
- Meadows J and Smith R C** (1986) Uric-Acid Protection of Nucleobases from Ozone-Induced Degradation. *Archives of Biochemistry and Biophysics*, 246 (2): 838-845.
- Milani A and Castiglioni C** (2010) Atomic charges from atomic polar tensors: A comparison of methods. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 955 (1-3): 158-164.

## KAYNAKLAR (devam ediyor)

- Moors M, Amara H, de Bocarme T V, Bichara C, Ducastelle F, Kruse N and Charlier J C** (2009) Early Stages in the Nucleation Process of Carbon Nanotubes. *ACS Nano*, 3 (3): 511-516.
- Mora M A and Melendez F J** (1998) Conformational ab initio study of ascorbic acid. *Journal of Molecular Structure-Theochem*, 454 (2-3): 175-185.
- Moss R W** (2000) *Antioxidants Against Cancer*, New York, Equinox Press, Inc.
- Mulliken R S** (1955) Electronic Population Analysis on LCAO-MO Molecular Wave Functions. *J. Chem. Phys.*, 23: 1833-1840.
- Nagabalasubramanian P B, Karabacak M and Periandy S** (2011) FT-IR, FT-Raman, ab initio and DFT structural, vibrational frequency and HOMO-LUMO analysis of 1-naphthaleneacetic acid methyl ester. *Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc*, 82 (1): 169-180.
- Nguyen M T, Chandra A K and Zeegers-Huyskens T** (1998) Protonation and deprotonation energies of uracil - Implications for the uracil-water complex. *Journal of the Chemical Society-Faraday Transactions*, 94 (9): 1277-1280.
- Nieto F J, Iribarren C, Gross M D, Comstock G W and Cutler R G** (2000) Uric acid and serum antioxidant capacity: a reaction to atherosclerosis? *Atherosclerosis*, 148 (1): 131-139.
- Parr R G, Yang, W.** (1989) *Density functional theory of atoms and molecules*, Oxford University Press.
- Person W B and Newton J** (1974) Dipole moment derivatives and infrared intensities. I. Polar tensors. *J. Chem. Phys.*, 61: 1040.
- Petersson G A and Allaham M A** (1991) A Complete Basis Set Model Chemistry .2. Open-Shell Systems and the Total Energies of the 1st-Row Atoms. *Journal of Chemical Physics*, 94 (9): 6081-6090.
- Petersson G A, Bennett A, Tensfeldt T G, Allaham M A, Shirley W A and Mantzaris J** (1988) A Complete Basis Set Model Chemistry .1. The Total Energies of Closed-Shell Atoms and Hydrides of the 1st-Row Elements. *Journal of Chemical Physics*, 89 (4): 2193-2218.
- Pütün A E, Kanışkan N, Türk H, Güven A and Berber H** (1999) *Kimya*, Eskişehir, Anadolu Üniversitesi.
- Raczynska E D, Makowski M, Szelag M, Kaminska B and Zientara K** (2010) Importance of CH tautomers in the tautomeric mixture of uric acid. *Journal of Molecular Structure-Theochem*, 947 (1-3): 83-91.
- Reed A E, Curtiss L A and Weinhold F** (1988) Intermolecular Interactions from a Natural Bond Orbital, Donor-Acceptor Viewpoint. *Chemical Reviews*, 88 (6): 899-926.



## KAYNAKLAR (devam ediyor)

- Reed A E and Weinhold F** (1985) Natural Localized Molecular-Orbitals. *Journal of Chemical Physics*, 83 (4): 1736-1740.
- Reed A E, Weinstock R B and Weinhold F** (1985) Natural-Population Analysis. *Journal of Chemical Physics*, 83 (2): 735-746.
- Ringertz H** (1966) The Molecular and Crystal Structure of Uric Acid. *Acta Cryst.*, 20: 397.
- Saraiva G D, Lima J A, de Sousa F F, Freire P T C, Mendes J and Souza A G** (2011) Temperature dependent Raman scattering study of L-ascorbic acid. *Vibrational Spectroscopy*, 55 (1): 101-106.
- Sautin Y Y and Johnson R J** (2008) Uric acid: the oxidant-antioxidant paradox [Research Support, N.I.H., Extramural Research Support, Non-U.S. Gov't]. *Nucleosides Nucleotides Nucleic Acids*, 27 (6): 608-619.
- Shimada H, Nibu Y and Shimada R** (2008) Pressure effects on inter- and intramolecular vibrations in hydrogen-bonded L-ascorbic acid crystal. *Journal of Raman Spectroscopy*, 39 (1): 32-39.
- Shukla M K and Mishra P C** (1996) Electronic structures and spectra of two antioxidants: Uric acid and ascorbic acid. *Journal of Molecular Structure*, 377 (3): 247-259.
- Smith R C and Lawing L** (1983) Antioxidant Activity of Uric-Acid and 3-N-Ribosyluric Acid with Unsaturated Fatty-Acids and Erythrocyte-Membranes. *Archives of Biochemistry and Biophysics*, 223 (1): 166-172.
- Spitsin S V, Scott G S, Mikheeva T, Zborek A, Kean R B, Brimer C M, Koprowski H and Hooper D C** (2002) Comparison of uric acid and ascorbic acid in protection against EAE. *Free Radical Biology and Medicine*, 33 (10): 1363-1371.
- Szabo A, Ostlund, N.S.** (1982) *Modern Quantum Chemistry*, New York, Macmillan.
- Tolmasoff J M, Ono T and Cutler R G** (1980) Superoxide-Dismutase - Correlation with Life-Span and Specific Metabolic-Rate in Primate Species. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America-Biological Sciences*, 77 (5): 2777-2781.
- Totter J R** (1980) Spontaneous Cancer and Its Possible Relationship to Oxygen-Metabolism. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America-Biological Sciences*, 77 (4): 1763-1767.
- Udayakumar V, Periandy S, Karabacak M and Ramalingam S** (2011) Experimental (FT-IR, FT-Raman) and theoretical (HF and DFT) investigation and HOMO and LUMO analysis on the structure of p-fluoronitrobenzene. *Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc*, 83 (1): 575-586.
- URL-1** (2011) <http://carbon.ucdenver.edu/~hlin/course5510.html> Computational Chemistry Lecture Notes, Denver.

## KAYNAKLAR (devam ediyor)

- URL-2** (2011) [http://en.wikipedia.org/wiki/Gaussian\\_\(software\)](http://en.wikipedia.org/wiki/Gaussian_(software)), Gaussian (software).
- Vijayakumar T, Joe I H, Nair C P R and Jayakumar V S** (2008) Efficient pi electrons delocalization in prospective push-pull non-linear optical chromophore 4-[NN-dimethylamino]-4'-nitro stilbene (DANS): A vibrational spectroscopic study. *Chemical Physics*, 343 (1): 83-99.
- Whitten K W, Davis R E, Peck L and Stanley G G** (2003) *General Chemistry*, Belmont, USA, Brooks Cole.
- Yadav R A, Rani P, Kumar M, Singh R, Singh P and Singh N P** (2011) Experimental IR and Raman spectra and quantum chemical studies of molecular structures, conformers and vibrational characteristics of L-ascorbic acid and its anion and cation. *Spectrochimica Acta Part a-Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 84 (1): 6-21.
- Yıldız A, Genç Ö and Bektaş S** (1997) *Enstrümantal Analiz Yöntemleri* (2 ed.), Ankara, Hacettepe Üniversitesi Yayınları.



## **EK AÇIKLAMALAR A**

### **ÜRİK ASİT PARAMETRE DEĞİŞİMLERİ**



Çizelge A.1 UA ve 146 bağ ve açılı değerleri.

UA	Tanımı	Değeri	146	Tanımı	Değeri
R1	R(C1,N10)	1.3862	R1	R(C1,N10)	1.3771
R2	R(C1,N11)	1.4015	R2	R(C1,N11)	1.3963
R3	R(C1,O14)	1.2115	R3	R(C1,O14)	1.2228
R4	R(C2,C3)	1.3634	R4	R(C2,C3)	1.3617
R5	R(C2,N11)	1.3678	R5	R(C2,N11)	1.3686
R6	R(C2,N13)	1.3684	R6	R(C2,N13)	1.3692
R7	R(C3,C4)	1.4304	R7	R(C3,C4)	1.4327
R8	R(C3,N12)	1.3988	R8	R(C3,N12)	1.3982
R9	R(C4,N10)	1.4222	R9	R(C4,N10)	1.421
R10	R(C4,O15)	1.2173	R10	R(C4,O15)	1.2168
R11	R(C5,N12)	1.3791	R11	R(C5,N12)	1.3794
R12	R(C5,N13)	1.4244	R12	R(C5,N13)	1.4239
R13	R(C5,O16)	1.2091	R13	R(C5,O16)	1.2095
R14	R(H6,N10)	1.0125	R14	R(H6,N10)	1.0247
			R15	R(H6,O17su)	1.9672
R15	R(H7,N11)	1.0092	R16	R(H7,N11)	1.0091
R16	R(H8,N12)	1.0073	R17	R(H8,N12)	1.0074
R17	R(H9,N13)	1.0077	R18	R(H9,N13)	1.0077
			R19	R(O14,H18su)	2.0085
			R20	R(O17su,H18su)	0.9715
			R21	R(O17su,H19su)	0.9612
A1	A(N10,C1,N11)	113.8007	A1	A(N10,C1,N11)	114.906
A2	A(N10,C1,O14)	124.2	A2	A(N10,C1,O14)	124.3244
A3	A(N11,C1,O14)	121.9993	A3	A(N11,C1,O14)	120.7695
A4	A(C3,C2,N11)	122.9461	A4	A(C3,C2,N11)	122.6722
A5	A(C3,C2,N13)	108.4028	A5	A(C3,C2,N13)	108.4996
A6	A(N11,C2,N13)	128.651	A6	A(N11,C2,N13)	128.8278
A7	A(C2,C3,C4)	121.8734	A7	A(C2,C3,C4)	121.9124
A8	A(C2,C3,N12)	107.012	A8	A(C2,C3,N12)	106.9892
A9	A(C4,C3,N12)	131.1145	A9	A(C4,C3,N12)	131.098
A10	A(C3,C4,N10)	110.9589	A10	A(C3,C4,N10)	111.2356
A11	A(C3,C4,O15)	127.7655	A11	A(C3,C4,O15)	127.2244
A12	A(N10,C4,O15)	121.2755	A12	A(N10,C4,O15)	121.5399
A13	A(N12,C5,N13)	103.7126	A13	A(N12,C5,N13)	103.7239
A14	A(N12,C5,O16)	130.1336	A14	A(N12,C5,O16)	130.1124
A15	A(N13,C5,O16)	126.1538	A15	A(N13,C5,O16)	126.1637

Çizelge A.1 (devam ediyor)

			A16	A(N10,H6,O17su)	144.2849
A16	A(C1,N10,C4)	129.547	A17	A(C1,N10,C4)	128.7352
A17	A(C1,N10,H6)	114.9089	A18	A(C1,N10,H6)	114.4424
A18	A(C4,N10,H6)	115.544	A19	A(C4,N10,H6)	116.8214
A19	A(C1,N11,C2)	120.8737	A20	A(C1,N11,C2)	120.5378
A20	A(C1,N11,H7)	115.9086	A21	A(C1,N11,H7)	116.0734
A21	A(C2,N11,H7)	123.2176	A22	A(C2,N11,H7)	123.3872
A22	A(C3,N12,C5)	110.842	A23	A(C3,N12,C5)	110.8572
A23	A(C3,N12,H8)	125.7521	A24	A(C3,N12,H8)	125.7089
A24	A(C5,N12,H8)	123.4059	A25	A(C5,N12,H8)	123.4327
A25	A(C2,N13,C5)	110.0306	A26	A(C2,N13,C5)	109.93
A26	A(C2,N13,H9)	128.3541	A27	A(C2,N13,H9)	128.4447
A27	A(C5,N13,H9)	121.6149	A28	A(C5,N13,H9)	121.625
			A29	A(C1,O14,H18su)	110.1431
			A30	A(H6,O17su,H18su)	88.0369
			A31	A(H6,O17su,H19su)	136.2507
			A32	A(H18su,O17su,H19su)	107.1855
			A33	A(O14,H18su,O17su)	138.3041
D1	D(N11,C1,N10,C4)	0.0259	D1	D(N11,C1,N10,C4)	0.0898
D2	D(N11,C1,N10,H6)	179.9601	D2	D(N11,C1,N10,H6)	179.5412
D3	D(O14,C1,N10,C4)	-179.9156	D3	D(O14,C1,N10,C4)	-179.823
D4	D(O14,C1,N10,H6)	0.0185	D4	D(O14,C1,N10,H6)	0.5458
D5	D(N10,C1,N11,C2)	0.0347	D5	D(N10,C1,N11,C2)	0.1511
D6	D(N10,C1,N11,H7)	180.0227	D6	D(N10,C1,N11,H7)	179.7107
D7	D(O14,C1,N11,C2)	179.9777	D7	D(O14,C1,N11,C2)	179.9325
D8	D(O14,C1,N11,H7)	-0.0343	D8	D(O14,C1,N11,H7)	-0.3729
			D9	D(N10,C1,O14,H18su)	-1.6702
			D10	D(N11,C1,O14,H18su)	178.4216
D9	D(N11,C2,C3,C4)	-0.0609	D11	D(N11,C2,C3,C4)	0.0146
D10	D(N11,C2,C3,N12)	-179.9791	D12	D(N11,C2,C3,N12)	-179.785
D11	D(N13,C2,C3,C4)	179.8784	D13	D(N13,C2,C3,C4)	179.8212
D12	D(N13,C2,C3,N12)	-0.0397	D14	D(N13,C2,C3,N12)	0.022
D13	D(C3,C2,N11,C1)	-0.0174	D15	D(C3,C2,N11,C1)	-0.2042
D14	D(C3,C2,N11,H7)	-180.0046	D16	D(C3,C2,N11,H7)	-179.731
D15	D(N13,C2,N11,C1)	-179.9437	D17	D(N13,C2,N11,C1)	-179.969
D16	D(N13,C2,N11,H7)	0.0692	D18	D(N13,C2,N11,H7)	0.505
D17	D(C3,C2,N13,C5)	0.0698	D19	D(C3,C2,N13,C5)	0.0465

Çizelge A.1 (devam ediyor)

D18	D(C3,C2,N13,H9)	179.8412	D20	D(C3,C2,N13,H9)	179.8255
D19	D(N11,C2,N13,C5)	180.0045	D21	D(N11,C2,N13,C5)	179.8375
D20	D(N11,C2,N13,H9)	-0.224	D22	D(N11,C2,N13,H9)	-0.3835
D21	D(C2,C3,C4,N10)	0.1052	D23	D(C2,C3,C4,N10)	0.1919
D22	D(C2,C3,C4,O15)	-180.0153	D24	D(C2,C3,C4,O15)	-179.72
D23	D(N12,C3,C4,N10)	180.0013	D25	D(N12,C3,C4,N10)	179.937
D24	D(N12,C3,C4,O15)	-0.1192	D26	D(N12,C3,C4,O15)	0.0257
D25	D(C2,C3,N12,C5)	-0.0051	D27	D(C2,C3,N12,C5)	-0.0856
D26	D(C2,C3,N12,H8)	179.9616	D28	D(C2,C3,N12,H8)	179.7041
D27	D(C4,C3,N12,C5)	-179.9128	D29	D(C4,C3,N12,C5)	-179.859
D28	D(C4,C3,N12,H8)	0.0538	D30	D(C4,C3,N12,H8)	0.5221
D29	D(C3,C4,N10,C1)	-0.0928	D31	D(C3,C4,N10,C1)	-0.2536
D30	D(C3,C4,N10,H6)	-180.0265	D32	D(C3,C4,N10,H6)	-179.37
D31	D(O15,C4,N10,C1)	180.0187	D33	D(O15,C4,N10,C1)	179.6636
D32	D(O15,C4,N10,H6)	0.0849	D34	D(O15,C4,N10,H6)	-0.7128
D33	D(N13,C5,N12,C3)	0.045	D35	D(N13,C5,N12,C3)	0.1091
D34	D(N13,C5,N12,H8)	-179.9226	D36	D(N13,C5,N12,H8)	-179.738
D35	D(O16,C5,N12,C3)	-180.0032	D37	D(O16,C5,N12,C3)	-179.903
D36	D(O16,C5,N12,H8)	0.0292	D38	D(O16,C5,N12,H8)	-0.2743
D37	D(N12,C5,N13,C2)	-0.0699	D39	D(N12,C5,N13,C2)	-0.095
D38	D(N12,C5,N13,H9)	-179.8594	D40	D(N12,C5,N13,H9)	-179.892
D39	D(O16,C5,N13,C2)	179.9758	D41	D(O16,C5,N13,C2)	179.9167
D40	D(O16,C5,N13,H9)	0.1862	D42	D(O16,C5,N13,H9)	0.1199
			D43	D(O17su,H6,N10,C1)	5.3852
			D44	D(O17su,H6,N10,C4)	-174.292
			D45	D(N10,H6,O17su,H18su)	-8.8838
			D46	D(N10,H6,O17su,H19su)	-121.946
			D47	D(C1,O14,H18su,O17su)	-4.7727
			D48	D(H6,O17su,H18su,O14)	6.4825
			D49	D(H19su,O17su,H18su,O14)	144.7255



Çizelge A.2 UA ve 147 bağ ve açılı değerleri.

UA	Tanımı	Değeri	147	Tanımı	Değeri
R1	R(C1,N10)	1.3862	R1	R(C1,N10)	1.3806
R2	R(C1,N11)	1.4015	R2	R(C1,N11)	1.39
R3	R(C1,O14)	1.2115	R3	R(C1,O14)	1.224
R4	R(C2,C3)	1.3634	R4	R(C2,C3)	1.3655
R5	R(C2,N11)	1.3678	R5	R(C2,N11)	1.3642
R6	R(C2,N13)	1.3684	R6	R(C2,N13)	1.3679
R7	R(C3,C4)	1.4304	R7	R(C3,C4)	1.4281
R8	R(C3,N12)	1.3988	R8	R(C3,N12)	1.3985
R9	R(C4,N10)	1.4222	R9	R(C4,N10)	1.4248
R10	R(C4,O15)	1.2173	R10	R(C4,O15)	1.2177
R11	R(C5,N12)	1.3791	R11	R(C5,N12)	1.38
R12	R(C5,N13)	1.4244	R12	R(C5,N13)	1.4227
R13	R(C5,O16)	1.2091	R13	R(C5,O16)	1.2094
R14	R(H6,N10)	1.0125	R14	R(H6,N10)	1.0124
R15	R(H7,N11)	1.0092	R15	R(H7,N11)	1.0239
			R16	R(H7,O17su)	1.8844
R16	R(H8,N12)	1.0073	R17	R(H8,N12)	1.0072
R17	R(H9,N13)	1.0077	R18	R(H9,N13)	1.0079
			R19	R(O14,H19su)	1.9772
			R20	R(O17su,H18su)	0.9613
			R21	R(O17su,H19su)	0.9747
A1	A(N10,C1,N11)	113.8007	A1	A(N10,C1,N11)	114.7912
A2	A(N10,C1,O14)	124.2	A2	A(N10,C1,O14)	123.0528
A3	A(N11,C1,O14)	121.9993	A3	A(N11,C1,O14)	122.1561
A4	A(C3,C2,N11)	122.9461	A4	A(C3,C2,N11)	123.4036
A5	A(C3,C2,N13)	108.4028	A5	A(C3,C2,N13)	108.3472
A6	A(N11,C2,N13)	128.651	A6	A(N11,C2,N13)	128.2488
A7	A(C2,C3,C4)	121.8734	A7	A(C2,C3,C4)	121.6938
A8	A(C2,C3,N12)	107.012	A8	A(C2,C3,N12)	106.9933
A9	A(C4,C3,N12)	131.1145	A9	A(C4,C3,N12)	131.3129
A10	A(C3,C4,N10)	110.9589	A10	A(C3,C4,N10)	110.7539
A11	A(C3,C4,O15)	127.7655	A11	A(C3,C4,O15)	128.1629
A12	A(N10,C4,O15)	121.2755	A12	A(N10,C4,O15)	121.0831
A13	A(N12,C5,N13)	103.7126	A13	A(N12,C5,N13)	103.7633
A14	A(N12,C5,O16)	130.1336	A14	A(N12,C5,O16)	129.9662
A15	A(N13,C5,O16)	126.1538	A15	A(N13,C5,O16)	126.2705

Çizelge A.2 (devam ediyor)

			A16	A(N11,H7,O17su)	145.0046
A16	A(C1,N10,C4)	129.547	A17	A(C1,N10,C4)	129.1716
A17	A(C1,N10,H6)	114.9089	A18	A(C1,N10,H6)	115.2149
A18	A(C4,N10,H6)	115.544	A19	A(C4,N10,H6)	115.612
A19	A(C1,N11,C2)	120.8737	A20	A(C1,N11,C2)	120.1835
A20	A(C1,N11,H7)	115.9086	A21	A(C1,N11,H7)	115.5491
A21	A(C2,N11,H7)	123.2176	A22	A(C2,N11,H7)	124.2669
A22	A(C3,N12,C5)	110.842	A23	A(C3,N12,C5)	110.794
A23	A(C3,N12,H8)	125.7521	A24	A(C3,N12,H8)	125.8575
A24	A(C5,N12,H8)	123.4059	A25	A(C5,N12,H8)	123.3464
A25	A(C2,N13,C5)	110.0306	A26	A(C2,N13,C5)	110.1016
A26	A(C2,N13,H9)	128.3541	A27	A(C2,N13,H9)	127.9881
A27	A(C5,N13,H9)	121.6149	A28	A(C5,N13,H9)	121.8954
			A29	A(C1,O14,H19su)	109.5057
			A30	A(H7,O17su,H18su)	140.978
			A31	A(H7,O17su,H19su)	87.6594
			A32	A(H18su,O17su,H19su)	107.3135
			A33	A(O14,H19su,O17su)	139.824
D1	D(N11,C1,N10,C4)	0.0259	D1	D(N11,C1,N10,C4)	0.3618
D2	D(N11,C1,N10,H6)	179.9601	D2	D(N11,C1,N10,H6)	179.8965
D3	D(O14,C1,N10,C4)	-179.9156	D3	D(O14,C1,N10,C4)	-179.667
D4	D(O14,C1,N10,H6)	0.0185	D4	D(O14,C1,N10,H6)	-0.1327
D5	D(N10,C1,N11,C2)	0.0347	D5	D(N10,C1,N11,C2)	-0.5753
D6	D(N10,C1,N11,H7)	180.0227	D6	D(N10,C1,N11,H7)	179.6841
D7	D(O14,C1,N11,C2)	179.9777	D7	D(O14,C1,N11,C2)	179.4536
D8	D(O14,C1,N11,H7)	-0.0343	D8	D(O14,C1,N11,H7)	-0.287
			D9	D(N10,C1,O14,H19su)	178.0777
			D10	D(N11,C1,O14,H19su)	-1.9536
D9	D(N11,C2,C3,C4)	-0.0609	D11	D(N11,C2,C3,C4)	-0.2015
D10	D(N11,C2,C3,N12)	-179.9791	D12	D(N11,C2,C3,N12)	179.8326
D11	D(N13,C2,C3,C4)	179.8784	D13	D(N13,C2,C3,C4)	-179.969
D12	D(N13,C2,C3,N12)	-0.0397	D14	D(N13,C2,C3,N12)	0.0651
D13	D(C3,C2,N11,C1)	-0.0174	D15	D(C3,C2,N11,C1)	0.5349
D14	D(C3,C2,N11,H7)	-180.0046	D16	D(C3,C2,N11,H7)	-179.748
D15	D(N13,C2,N11,C1)	-179.9437	D17	D(N13,C2,N11,C1)	-179.746
D16	D(N13,C2,N11,H7)	0.0692	D18	D(N13,C2,N11,H7)	-0.0293
D17	D(C3,C2,N13,C5)	0.0698	D19	D(C3,C2,N13,C5)	-0.2118

Çizelge A.2 (devam ediyor)

D18	D(C3,C2,N13,H9)	179.8412	D20	D(C3,C2,N13,H9)	-178.811
D19	D(N11,C2,N13,C5)	180.0045	D21	D(N11,C2,N13,C5)	-179.965
D20	D(N11,C2,N13,H9)	-0.224	D22	D(N11,C2,N13,H9)	1.4362
D21	D(C2,C3,C4,N10)	0.1052	D23	D(C2,C3,C4,N10)	-0.0406
D22	D(C2,C3,C4,O15)	-180.0153	D24	D(C2,C3,C4,O15)	-179.977
D23	D(N12,C3,C4,N10)	180.0013	D25	D(N12,C3,C4,N10)	179.916
D24	D(N12,C3,C4,O15)	-0.1192	D26	D(N12,C3,C4,O15)	-0.0201
D25	D(C2,C3,N12,C5)	-0.0051	D27	D(C2,C3,N12,C5)	0.1093
D26	D(C2,C3,N12,H8)	179.9616	D28	D(C2,C3,N12,H8)	179.5962
D27	D(C4,C3,N12,C5)	-179.9128	D29	D(C4,C3,N12,C5)	-179.852
D28	D(C4,C3,N12,H8)	0.0538	D30	D(C4,C3,N12,H8)	-0.3653
D29	D(C3,C4,N10,C1)	-0.0928	D31	D(C3,C4,N10,C1)	-0.056
D30	D(C3,C4,N10,H6)	-180.0265	D32	D(C3,C4,N10,H6)	-179.589
D31	D(O15,C4,N10,C1)	180.0187	D33	D(O15,C4,N10,C1)	179.8855
D32	D(O15,C4,N10,H6)	0.0849	D34	D(O15,C4,N10,H6)	0.3523
D33	D(N13,C5,N12,C3)	0.045	D35	D(N13,C5,N12,C3)	-0.227
D34	D(N13,C5,N12,H8)	-179.9226	D36	D(N13,C5,N12,H8)	-179.729
D35	D(O16,C5,N12,C3)	-180.0032	D37	D(O16,C5,N12,C3)	179.7941
D36	D(O16,C5,N12,H8)	0.0292	D38	D(O16,C5,N12,H8)	0.2919
D37	D(N12,C5,N13,C2)	-0.0699	D39	D(N12,C5,N13,C2)	0.2678
D38	D(N12,C5,N13,H9)	-179.8594	D40	D(N12,C5,N13,H9)	178.9674
D39	D(O16,C5,N13,C2)	179.9758	D41	D(O16,C5,N13,C2)	-179.752
D40	D(O16,C5,N13,H9)	0.1862	D42	D(O16,C5,N13,H9)	-1.0527
			D43	D(O17su,H7,N11,C1)	6.4098
			D44	D(O17su,H7,N11,C2)	-173.319
			D45	D(N11,H7,O17su,H18su)	-122.712
			D46	D(N11,H7,O17su,H19su)	-7.7118
			D47	D(C1,O14,H19su,O17su)	-1.1032
			D48	D(H7,O17su,H19su,O14)	3.4428
			D49	D(H18su,O17su,H19su,O14)	146.7369

Çizelge A.3 UA ve 156 bağ ve açılı değerleri.

UA	Tanımı	Değeri	156	Tanımı	Değeri
R1	R(C1,N10)	1.3862	R1	R(C1,N10)	1.3848
R2	R(C1,N11)	1.4015	R2	R(C1,N11)	1.4061
R3	R(C1,O14)	1.2115	R3	R(C1,O14)	1.2109
R4	R(C2,C3)	1.3634	R4	R(C2,C3)	1.3645
R5	R(C2,N11)	1.3678	R5	R(C2,N11)	1.3644
R6	R(C2,N13)	1.3684	R6	R(C2,N13)	1.3677
R7	R(C3,C4)	1.4304	R7	R(C3,C4)	1.4257
R8	R(C3,N12)	1.3988	R8	R(C3,N12)	1.3992
R9	R(C4,N10)	1.4222	R9	R(C4,N10)	1.4108
R10	R(C4,O15)	1.2173	R10	R(C4,O15)	1.2292
R11	R(C5,N12)	1.3791	R11	R(C5,N12)	1.3787
R12	R(C5,N13)	1.4244	R12	R(C5,N13)	1.4251
R13	R(C5,O16)	1.2091	R13	R(C5,O16)	1.2091
R14	R(H6,N10)	1.0125	R14	R(H6,N10)	1.0249
			R15	R(H6,O17su)	1.9538
R15	R(H7,N11)	1.0092	R16	R(H7,N11)	1.0093
R16	R(H8,N12)	1.0073	R17	R(H8,N12)	1.0072
R17	R(H9,N13)	1.0077	R18	R(H9,N13)	1.0078
			R19	R(O15,H18su)	1.9607
			R20	R(O17su,H18su)	0.9736
			R21	R(O17su,H19su)	0.9611
A1	A(N10,C1,N11)	113.8007	A1	A(N10,C1,N11)	114.1251
A2	A(N10,C1,O14)	124.2	A2	A(N10,C1,O14)	124.4379
A3	A(N11,C1,O14)	121.9993	A3	A(N11,C1,O14)	121.437
A4	A(C3,C2,N11)	122.9461	A4	A(C3,C2,N11)	122.6283
A5	A(C3,C2,N13)	108.4028	A5	A(C3,C2,N13)	108.3805
A6	A(N11,C2,N13)	128.651	A6	A(N11,C2,N13)	128.9912
A7	A(C2,C3,C4)	121.8734	A7	A(C2,C3,C4)	121.5562
A8	A(C2,C3,N12)	107.012	A8	A(C2,C3,N12)	107.0253
A9	A(C4,C3,N12)	131.1145	A9	A(C4,C3,N12)	131.4185
A10	A(C3,C4,N10)	110.9589	A10	A(C3,C4,N10)	112.1041
A11	A(C3,C4,O15)	127.7655	A11	A(C3,C4,O15)	126.2532
A12	A(N10,C4,O15)	121.2755	A12	A(N10,C4,O15)	121.6426
A13	A(N12,C5,N13)	103.7126	A13	A(N12,C5,N13)	103.7485
A14	A(N12,C5,O16)	130.1336	A14	A(N12,C5,O16)	130.1401
A15	A(N13,C5,O16)	126.1538	A15	A(N13,C5,O16)	126.1114

Çizelge A.3 (devam ediyor).

			A16	A(N10,H6,O17su)	143.7556
A16	A(C1,N10,C4)	129.547	A17	A(C1,N10,C4)	128.6803
A17	A(C1,N10,H6)	114.9089	A18	A(C1,N10,H6)	115.9928
A18	A(C4,N10,H6)	115.544	A19	A(C4,N10,H6)	115.3263
A19	A(C1,N11,C2)	120.8737	A20	A(C1,N11,C2)	120.9056
A20	A(C1,N11,H7)	115.9086	A21	A(C1,N11,H7)	115.8051
A21	A(C2,N11,H7)	123.2176	A22	A(C2,N11,H7)	123.2892
A22	A(C3,N12,C5)	110.842	A23	A(C3,N12,C5)	110.8079
A23	A(C3,N12,H8)	125.7521	A24	A(C3,N12,H8)	125.7703
A24	A(C5,N12,H8)	123.4059	A25	A(C5,N12,H8)	123.4187
A25	A(C2,N13,C5)	110.0306	A26	A(C2,N13,C5)	110.0376
A26	A(C2,N13,H9)	128.3541	A27	A(C2,N13,H9)	128.337
A27	A(C5,N13,H9)	121.6149	A28	A(C5,N13,H9)	121.6246
			A29	A(C4,O15,H18su)	111.0528
			A30	A(H6,O17su,H18su)	86.4472
			A31	A(H6,O17su,H19su)	136.7896
			A32	A(H18su,O17su,H19su)	107.2413
			A33	A(O15,H18su,O17su)	141.3436
D1	D(N11,C1,N10,C4)	0.0259	D1	D(N11,C1,N10,C4)	0.2092
D2	D(N11,C1,N10,H6)	179.9601	D2	D(N11,C1,N10,H6)	-179.503
D3	D(O14,C1,N10,C4)	-179.9156	D3	D(O14,C1,N10,C4)	-179.702
D4	D(O14,C1,N10,H6)	0.0185	D4	D(O14,C1,N10,H6)	0.5856
D5	D(N10,C1,N11,C2)	0.0347	D5	D(N10,C1,N11,C2)	-0.1188
D6	D(N10,C1,N11,H7)	180.0227	D6	D(N10,C1,N11,H7)	179.9584
D7	D(O14,C1,N11,C2)	179.9777	D7	D(O14,C1,N11,C2)	179.7953
D8	D(O14,C1,N11,H7)	-0.0343	D8	D(O14,C1,N11,H7)	-0.1275
D9	D(N11,C2,C3,C4)	-0.0609	D9	D(N11,C2,C3,C4)	0.1114
D10	D(N11,C2,C3,N12)	-179.9791	D10	D(N11,C2,C3,N12)	-179.927
D11	D(N13,C2,C3,C4)	179.8784	D11	D(N13,C2,C3,C4)	-179.953
D12	D(N13,C2,C3,N12)	-0.0397	D12	D(N13,C2,C3,N12)	0.0088
D13	D(C3,C2,N11,C1)	-0.0174	D13	D(C3,C2,N11,C1)	-0.0273
D14	D(C3,C2,N11,H7)	-180.0046	D14	D(C3,C2,N11,H7)	179.8895
D15	D(N13,C2,N11,C1)	-179.9437	D15	D(N13,C2,N11,C1)	-179.949
D16	D(N13,C2,N11,H7)	0.0692	D16	D(N13,C2,N11,H7)	-0.0321
D17	D(C3,C2,N13,C5)	0.0698	D17	D(C3,C2,N13,C5)	0.0815
D18	D(C3,C2,N13,H9)	179.8412	D18	D(C3,C2,N13,H9)	179.7432
D19	D(N11,C2,N13,C5)	180.0045	D19	D(N11,C2,N13,C5)	-179.988

Çizelge A.3 (devam ediyor).

D20	D(N11,C2,N13,H9)	-0.224	D20	D(N11,C2,N13,H9)	-0.3264
D21	D(C2,C3,C4,N10)	0.1052	D21	D(C2,C3,C4,N10)	-0.0366
D22	D(C2,C3,C4,O15)	-180.0153	D22	D(C2,C3,C4,O15)	179.9828
D23	D(N12,C3,C4,N10)	180.0013	D23	D(N12,C3,C4,N10)	-179.988
D24	D(N12,C3,C4,O15)	-0.1192	D24	D(N12,C3,C4,O15)	0.0317
D25	D(C2,C3,N12,C5)	-0.0051	D25	D(C2,C3,N12,C5)	-0.0996
D26	D(C2,C3,N12,H8)	179.9616	D26	D(C2,C3,N12,H8)	-179.468
D27	D(C4,C3,N12,C5)	-179.9128	D27	D(C4,C3,N12,C5)	179.8568
D28	D(C4,C3,N12,H8)	0.0538	D28	D(C4,C3,N12,H8)	0.4888
D29	D(C3,C4,N10,C1)	-0.0928	D29	D(C3,C4,N10,C1)	-0.1326
D30	D(C3,C4,N10,H6)	-180.0265	D30	D(C3,C4,N10,H6)	179.5815
D31	D(O15,C4,N10,C1)	180.0187	D31	D(O15,C4,N10,C1)	179.8491
D32	D(O15,C4,N10,H6)	0.0849	D32	D(O15,C4,N10,H6)	-0.4368
			D33	D(C3,C4,O15,H18su)	-178.087
			D34	D(N10,C4,O15,H18su)	1.9336
D33	D(N13,C5,N12,C3)	0.045	D35	D(N13,C5,N12,C3)	0.1426
D34	D(N13,C5,N12,H8)	-179.9226	D36	D(N13,C5,N12,H8)	179.5283
D35	D(O16,C5,N12,C3)	-180.0032	D37	D(O16,C5,N12,C3)	-179.879
D36	D(O16,C5,N12,H8)	0.0292	D38	D(O16,C5,N12,H8)	-0.4936
D37	D(N12,C5,N13,C2)	-0.0699	D39	D(N12,C5,N13,C2)	-0.1369
D38	D(N12,C5,N13,H9)	-179.8594	D40	D(N12,C5,N13,H9)	-179.825
D39	D(O16,C5,N13,C2)	179.9758	D41	D(O16,C5,N13,C2)	179.8838
D40	D(O16,C5,N13,H9)	0.1862	D42	D(O16,C5,N13,H9)	0.1954
			D43	D(O17su,H6,N10,C1)	174.0924
			D44	D(O17su,H6,N10,C4)	-5.6592
			D45	D(N10,H6,O17su,H18su)	8.6195
			D46	D(N10,H6,O17su,H19su)	120.1897
			D47	D(C4,O15,H18su,O17su)	4.0134
			D48	D(H6,O17su,H18su,O15)	-6.0705
			D49	D(H19su,O17su,H18su,O15)	-144.259

Çizelge A.4 UA ve 168 bağ ve açılı değerleri.

UA	Tanımı	Değeri	168	Tanımı	Değeri
R1	R(C1,N10)	1.3862	R1	R(C1,N10)	1.3857
R2	R(C1,N11)	1.4015	R2	R(C1,N11)	1.4007
R3	R(C1,O14)	1.2115	R3	R(C1,O14)	1.212
R4	R(C2,C3)	1.3634	R4	R(C2,C3)	1.3642
R5	R(C2,N11)	1.3678	R5	R(C2,N11)	1.3681
R6	R(C2,N13)	1.3684	R6	R(C2,N13)	1.3701
R7	R(C3,C4)	1.4304	R7	R(C3,C4)	1.4334
R8	R(C3,N12)	1.3988	R8	R(C3,N12)	1.3969
R9	R(C4,N10)	1.4222	R9	R(C4,N10)	1.4237
R10	R(C4,O15)	1.2173	R10	R(C4,O15)	1.2156
R11	R(C5,N12)	1.3791	R11	R(C5,N12)	1.3696
R12	R(C5,N13)	1.4244	R12	R(C5,N13)	1.4157
R13	R(C5,O16)	1.2091	R13	R(C5,O16)	1.2212
			R14	R(C5,H18su)	2.5857
R14	R(H6,N10)	1.0125	R15	R(H6,N10)	1.0125
R15	R(H7,N11)	1.0092	R16	R(H7,N11)	1.0091
R16	R(H8,N12)	1.0073	R17	R(H8,N12)	1.018
			R18	R(H8,O17su)	2.016
R17	R(H9,N13)	1.0077	R19	R(H9,N13)	1.0077
			R20	R(O16,H18su)	2.0009
			R21	R(O17su,H18su)	0.973
			R22	R(O17su,H19su)	0.9609
A1	A(N10,C1,N11)	113.8007	A1	A(N10,C1,N11)	113.7443
A2	A(N10,C1,O14)	124.2	A2	A(N10,C1,O14)	124.2358
A3	A(N11,C1,O14)	121.9993	A3	A(N11,C1,O14)	122.0199
A4	A(C3,C2,N11)	122.9461	A4	A(C3,C2,N11)	123.2956
A5	A(C3,C2,N13)	108.4028	A5	A(C3,C2,N13)	108.2434
A6	A(N11,C2,N13)	128.651	A6	A(N11,C2,N13)	128.4603
A7	A(C2,C3,C4)	121.8734	A7	A(C2,C3,C4)	121.5468
A8	A(C2,C3,N12)	107.012	A8	A(C2,C3,N12)	107.1228
A9	A(C4,C3,N12)	131.1145	A9	A(C4,C3,N12)	131.3259
A10	A(C3,C4,N10)	110.9589	A10	A(C3,C4,N10)	110.8903
A11	A(C3,C4,O15)	127.7655	A11	A(C3,C4,O15)	128.0687
A12	A(N10,C4,O15)	121.2755	A12	A(N10,C4,O15)	121.041
A13	A(N12,C5,N13)	103.7126	A13	A(N12,C5,N13)	104.6461
A14	A(N12,C5,O16)	130.1336	A14	A(N12,C5,O16)	129.7239

Çizelge A.4 (devam ediyor)

			A15	A(N12,C5,H18su)	81.1053
A15	A(N13,C5,O16)	126.1538	A16	A(N13,C5,O16)	125.63
			A17	A(N13,C5,H18su)	174.1064
			A18	A(N12,H8,O17su)	132.6444
A16	A(C1,N10,C4)	129.547	A19	A(C1,N10,C4)	129.7541
A17	A(C1,N10,H6)	114.9089	A20	A(C1,N10,H6)	114.8718
A18	A(C4,N10,H6)	115.544	A21	A(C4,N10,H6)	115.3736
A19	A(C1,N11,C2)	120.8737	A22	A(C1,N11,C2)	120.7669
A20	A(C1,N11,H7)	115.9086	A23	A(C1,N11,H7)	115.9528
A21	A(C2,N11,H7)	123.2176	A24	A(C2,N11,H7)	123.2801
A22	A(C3,N12,C5)	110.842	A25	A(C3,N12,C5)	110.4114
A23	A(C3,N12,H8)	125.7521	A26	A(C3,N12,H8)	128.3843
A24	A(C5,N12,H8)	123.4059	A27	A(C5,N12,H8)	121.1925
A25	A(C2,N13,C5)	110.0306	A28	A(C2,N13,C5)	109.5754
A26	A(C2,N13,H9)	128.3541	A29	A(C2,N13,H9)	128.4385
A27	A(C5,N13,H9)	121.6149	A30	A(C5,N13,H9)	121.9802
			A31	A(H8,O17su,H18su)	90.9516
			A32	A(H8,O17su,H19su)	139.8244
			A33	A(H18su,O17su,H19su)	107.0928
			A34	A(C5,H18su,O17su)	113.8833
			A35	A(O16,H18su,O17su)	141.1093
D1	D(N11,C1,N10,C4)	0.0259	D1	D(N11,C1,N10,C4)	0.1022
D2	D(N11,C1,N10,H6)	179.9601	D2	D(N11,C1,N10,H6)	179.8303
D3	D(O14,C1,N10,C4)	-179.9156	D3	D(O14,C1,N10,C4)	-179.866
D4	D(O14,C1,N10,H6)	0.0185	D4	D(O14,C1,N10,H6)	-0.1383
D5	D(N10,C1,N11,C2)	0.0347	D5	D(N10,C1,N11,C2)	0.1409
D6	D(N10,C1,N11,H7)	180.0227	D6	D(N10,C1,N11,H7)	179.9503
D7	D(O14,C1,N11,C2)	179.9777	D7	D(O14,C1,N11,C2)	-179.89
D8	D(O14,C1,N11,H7)	-0.0343	D8	D(O14,C1,N11,H7)	-0.0803
D9	D(N11,C2,C3,C4)	-0.0609	D9	D(N11,C2,C3,C4)	-0.3592
D10	D(N11,C2,C3,N12)	-179.9791	D10	D(N11,C2,C3,N12)	-179.667
D11	D(N13,C2,C3,C4)	179.8784	D11	D(N13,C2,C3,C4)	179.3371
D12	D(N13,C2,C3,N12)	-0.0397	D12	D(N13,C2,C3,N12)	0.0295
D13	D(C3,C2,N11,C1)	-0.0174	D13	D(C3,C2,N11,C1)	-0.0128
D14	D(C3,C2,N11,H7)	-180.0046	D14	D(C3,C2,N11,H7)	-179.808
D15	D(N13,C2,N11,C1)	-179.9437	D15	D(N13,C2,N11,C1)	-179.644
D16	D(N13,C2,N11,H7)	0.0692	D16	D(N13,C2,N11,H7)	0.5605



Çizelge A.4 (devam ediyor)

D17	D(C3,C2,N13,C5)	0.0698	D17	D(C3,C2,N13,C5)	0.162
D18	D(C3,C2,N13,H9)	179.8412	D18	D(C3,C2,N13,H9)	179.2807
D19	D(N11,C2,N13,C5)	180.0045	D19	D(N11,C2,N13,C5)	179.8378
D20	D(N11,C2,N13,H9)	-0.224	D20	D(N11,C2,N13,H9)	-1.0435
D21	D(C2,C3,C4,N10)	0.1052	D21	D(C2,C3,C4,N10)	0.5228
D22	D(C2,C3,C4,O15)	-180.0153	D22	D(C2,C3,C4,O15)	-179.447
D23	D(N12,C3,C4,N10)	180.0013	D23	D(N12,C3,C4,N10)	179.6416
D24	D(N12,C3,C4,O15)	-0.1192	D24	D(N12,C3,C4,O15)	-0.3277
D25	D(C2,C3,N12,C5)	-0.0051	D25	D(C2,C3,N12,C5)	-0.2183
D26	D(C2,C3,N12,H8)	179.9616	D26	D(C2,C3,N12,H8)	-178.963
D27	D(C4,C3,N12,C5)	-179.9128	D27	D(C4,C3,N12,C5)	-179.433
D28	D(C4,C3,N12,H8)	0.0538	D28	D(C4,C3,N12,H8)	1.8224
D29	D(C3,C4,N10,C1)	-0.0928	D29	D(C3,C4,N10,C1)	-0.4207
D30	D(C3,C4,N10,H6)	-180.0265	D30	D(C3,C4,N10,H6)	179.8524
D31	D(O15,C4,N10,C1)	180.0187	D31	D(O15,C4,N10,C1)	179.5511
D32	D(O15,C4,N10,H6)	0.0849	D32	D(O15,C4,N10,H6)	-0.1759
D33	D(N13,C5,N12,C3)	0.045	D33	D(N13,C5,N12,C3)	0.3061
D34	D(N13,C5,N12,H8)	-179.9226	D34	D(N13,C5,N12,H8)	179.1562
D35	D(O16,C5,N12,C3)	-180.0032	D35	D(O16,C5,N12,C3)	-179.722
D36	D(O16,C5,N12,H8)	0.0292	D36	D(O16,C5,N12,H8)	-0.8722
			D37	D(H18su,C5,N12,C3)	-178.379
			D38	D(H18su,C5,N12,H8)	0.4709
D37	D(N12,C5,N13,C2)	-0.0699	D39	D(N12,C5,N13,C2)	-0.287
D38	D(N12,C5,N13,H9)	-179.8594	D40	D(N12,C5,N13,H9)	-179.473
D39	D(O16,C5,N13,C2)	179.9758	D41	D(O16,C5,N13,C2)	179.7399
D40	D(O16,C5,N13,H9)	0.1862	D42	D(O16,C5,N13,H9)	0.5537
			D43	D(H18su,C5,N13,C2)	166.9587
			D44	D(H18su,C5,N13,H9)	-12.2275
			D45	D(N12,C5,H18su,O17su)	3.9107
			D46	D(N13,C5,H18su,O17su)	-163.604
			D47	D(O17su,H8,N12,C3)	175.3878
			D48	D(O17su,H8,N12,C5)	-3.2373
			D49	D(N12,H8,O17su,H18su)	5.9352
			D50	D(N12,H8,O17su,H19su)	124.3161
			D51	D(H8,O17su,H18su,C5)	-3.5772
			D52	D(H8,O17su,H18su,O16)	-5.4259
			D53	D(H19su,O17su,H18su,C5)	-147.149
			D54	D(H19su,O17su,H18su,O16)	-148.997

Çizelge A.5 UA ve 169 bağ ve açılı değerleri.

UA	Tanımı	Değeri	169	Tanımı	Değeri
R1	R(C1,N10)	1.3862	R1	R(C1,N10)	1.3873
R2	R(C1,N11)	1.4015	R2	R(C1,N11)	1.4005
R3	R(C1,O14)	1.2115	R3	R(C1,O14)	1.2117
R4	R(C2,C3)	1.3634	R4	R(C2,C3)	1.3652
R5	R(C2,N11)	1.3678	R5	R(C2,N11)	1.3673
R6	R(C2,N13)	1.3684	R6	R(C2,N13)	1.365
R7	R(C3,C4)	1.4304	R7	R(C3,C4)	1.4294
R8	R(C3,N12)	1.3988	R8	R(C3,N12)	1.3996
R9	R(C4,N10)	1.4222	R9	R(C4,N10)	1.4218
R10	R(C4,O15)	1.2173	R10	R(C4,O15)	1.2178
R11	R(C5,N12)	1.3791	R11	R(C5,N12)	1.373
R12	R(C5,N13)	1.4244	R12	R(C5,N13)	1.4109
R13	R(C5,O16)	1.2091	R13	R(C5,O16)	1.222
R14	R(H6,N10)	1.0125	R14	R(H6,N10)	1.0124
R15	R(H7,N11)	1.0092	R15	R(H7,N11)	1.0094
R16	R(H8,N12)	1.0073	R16	R(H8,N12)	1.0074
R17	R(H9,N13)	1.0077	R17	R(H9,N13)	1.0206
			R18	R(H9,O17su)	1.9357
			R19	R(O16,H19su)	1.9602
			R20	R(O17su,H18su)	0.961
			R21	R(O17su,H19su)	0.9758
A1	A(N10,C1,N11)	113.8007	A1	A(N10,C1,N11)	113.8581
A2	A(N10,C1,O14)	124.2	A2	A(N10,C1,O14)	124.0465
A3	A(N11,C1,O14)	121.9993	A3	A(N11,C1,O14)	122.0954
A4	A(C3,C2,N11)	122.9461	A4	A(C3,C2,N11)	122.8209
A5	A(C3,C2,N13)	108.4028	A5	A(C3,C2,N13)	108.6847
A6	A(N11,C2,N13)	128.651	A6	A(N11,C2,N13)	128.4941
A7	A(C2,C3,C4)	121.8734	A7	A(C2,C3,C4)	122.046
A8	A(C2,C3,N12)	107.012	A8	A(C2,C3,N12)	106.6956
A9	A(C4,C3,N12)	131.1145	A9	A(C4,C3,N12)	131.2582
A10	A(C3,C4,N10)	110.9589	A10	A(C3,C4,N10)	110.8338
A11	A(C3,C4,O15)	127.7655	A11	A(C3,C4,O15)	127.8653
A12	A(N10,C4,O15)	121.2755	A12	A(N10,C4,O15)	121.3009
A13	A(N12,C5,N13)	103.7126	A13	A(N12,C5,N13)	104.753
A14	A(N12,C5,O16)	130.1336	A14	A(N12,C5,O16)	129.3087

Çizelge A.5 (devam ediyor)

A15	A(N13,C5,O16)	126.1538	A15	A(N13,C5,O16)	125.9383
			A16	A(N13,H9,O17su)	136.1245
A16	A(C1,N10,C4)	129.547	A17	A(C1,N10,C4)	129.5682
A17	A(C1,N10,H6)	114.9089	A18	A(C1,N10,H6)	114.8618
A18	A(C4,N10,H6)	115.544	A19	A(C4,N10,H6)	115.5697
A19	A(C1,N11,C2)	120.8737	A20	A(C1,N11,C2)	120.8722
A20	A(C1,N11,H7)	115.9086	A21	A(C1,N11,H7)	116.1665
A21	A(C2,N11,H7)	123.2176	A22	A(C2,N11,H7)	122.9539
A22	A(C3,N12,C5)	110.842	A23	A(C3,N12,C5)	110.2926
A23	A(C3,N12,H8)	125.7521	A24	A(C3,N12,H8)	125.9077
A24	A(C5,N12,H8)	123.4059	A25	A(C5,N12,H8)	123.7948
A25	A(C2,N13,C5)	110.0306	A26	A(C2,N13,C5)	109.5733
A26	A(C2,N13,H9)	128.3541	A27	A(C2,N13,H9)	130.6972
A27	A(C5,N13,H9)	121.6149	A28	A(C5,N13,H9)	119.7293
			A29	A(C5,O16,H19su)	105.5611
			A30	A(H9,O17su,H18su)	143.2446
			A31	A(H9,O17su,H19su)	89.7689
			A32	A(H18su,O17su,H19su)	107.2239
			A33	A(O16,H19su,O17su)	142.6773
D1	D(N11,C1,N10,C4)	0.0259	D1	D(N11,C1,N10,C4)	0.2829
D2	D(N11,C1,N10,H6)	179.9601	D2	D(N11,C1,N10,H6)	-179.955
D3	D(O14,C1,N10,C4)	-179.9156	D3	D(O14,C1,N10,C4)	-179.759
D4	D(O14,C1,N10,H6)	0.0185	D4	D(O14,C1,N10,H6)	0.0031
D5	D(N10,C1,N11,C2)	0.0347	D5	D(N10,C1,N11,C2)	-0.3272
D6	D(N10,C1,N11,H7)	180.0227	D6	D(N10,C1,N11,H7)	-179.364
D7	D(O14,C1,N11,C2)	179.9777	D7	D(O14,C1,N11,C2)	179.714
D8	D(O14,C1,N11,H7)	-0.0343	D8	D(O14,C1,N11,H7)	0.6771
D9	D(N11,C2,C3,C4)	-0.0609	D9	D(N11,C2,C3,C4)	-0.0178
D10	D(N11,C2,C3,N12)	-179.9791	D10	D(N11,C2,C3,N12)	179.841
D11	D(N13,C2,C3,C4)	179.8784	D11	D(N13,C2,C3,C4)	-179.83
D12	D(N13,C2,C3,N12)	-0.0397	D12	D(N13,C2,C3,N12)	0.0285
D13	D(C3,C2,N11,C1)	-0.0174	D13	D(C3,C2,N11,C1)	0.2223
D14	D(C3,C2,N11,H7)	-180.0046	D14	D(C3,C2,N11,H7)	179.1921
D15	D(N13,C2,N11,C1)	-179.9437	D15	D(N13,C2,N11,C1)	-180.005
D16	D(N13,C2,N11,H7)	0.0692	D16	D(N13,C2,N11,H7)	-1.0349
D17	D(C3,C2,N13,C5)	0.0698	D17	D(C3,C2,N13,C5)	-0.1884
D18	D(C3,C2,N13,H9)	179.8412	D18	D(C3,C2,N13,H9)	179.9627
D19	D(N11,C2,N13,C5)	180.0045	D19	D(N11,C2,N13,C5)	-179.987

Çizelge A.5 (devam ediyor)

D20	D(N11,C2,N13,H9)	-0.224	D20	D(N11,C2,N13,H9)	0.164
D21	D(C2,C3,C4,N10)	0.1052	D21	D(C2,C3,C4,N10)	-0.0468
D22	D(C2,C3,C4,O15)	-180.0153	D22	D(C2,C3,C4,O15)	179.9441
D23	D(N12,C3,C4,N10)	180.0013	D23	D(N12,C3,C4,N10)	-179.867
D24	D(N12,C3,C4,O15)	-0.1192	D24	D(N12,C3,C4,O15)	0.1241
D25	D(C2,C3,N12,C5)	-0.0051	D25	D(C2,C3,N12,C5)	0.1466
D26	D(C2,C3,N12,H8)	179.9616	D26	D(C2,C3,N12,H8)	179.3683
D27	D(C4,C3,N12,C5)	-179.9128	D27	D(C4,C3,N12,C5)	179.9873
D28	D(C4,C3,N12,H8)	0.0538	D28	D(C4,C3,N12,H8)	-0.791
D29	D(C3,C4,N10,C1)	-0.0928	D29	D(C3,C4,N10,C1)	-0.099
D30	D(C3,C4,N10,H6)	-180.0265	D30	D(C3,C4,N10,H6)	-179.86
D31	D(O15,C4,N10,C1)	180.0187	D31	D(O15,C4,N10,C1)	179.9094
D32	D(O15,C4,N10,H6)	0.0849	D32	D(O15,C4,N10,H6)	0.1485
D33	D(N13,C5,N12,C3)	0.045	D33	D(N13,C5,N12,C3)	-0.2524
D34	D(N13,C5,N12,H8)	-179.9226	D34	D(N13,C5,N12,H8)	-179.494
D35	D(O16,C5,N12,C3)	-180.0032	D35	D(O16,C5,N12,C3)	179.6961
D36	D(O16,C5,N12,H8)	0.0292	D36	D(O16,C5,N12,H8)	0.4547
D37	D(N12,C5,N13,C2)	-0.0699	D37	D(N12,C5,N13,C2)	0.2698
D38	D(N12,C5,N13,H9)	-179.8594	D38	D(N12,C5,N13,H9)	-179.862
D39	D(O16,C5,N13,C2)	179.9758	D39	D(O16,C5,N13,C2)	-179.681
D40	D(O16,C5,N13,H9)	0.1862	D40	D(O16,C5,N13,H9)	0.187
			D41	D(N12,C5,O16,H19su)	-178.079
			D42	D(N13,C5,O16,H19su)	1.8591
			D43	D(O17su,H9,N13,C2)	175.2015
			D44	D(O17su,H9,N13,C5)	-4.6345
			D45	D(N13,H9,O17su,H18su)	124.9233
			D46	D(N13,H9,O17su,H19su)	5.62
			D47	D(C5,O16,H19su,O17su)	0.8458
			D48	D(H9,O17su,H19su,O16)	-3.0052
			D49	D(H18su,O17su,H19su,O16)	-149.89
			D47	D(O17su,H8,N12,C3)	175.3878
			D48	D(O17su,H8,N12,C5)	-3.2373
			D49	D(N12,H8,O17su,H18su)	5.9352
			D50	D(N12,H8,O17su,H19su)	124.3161
			D51	D(H8,O17su,H18su,C5)	-3.5772
			D52	D(H8,O17su,H18su,O16)	-5.4259
			D53	D(H19su,O17su,H18su,C5)	-147.149
			D54	D(H19su,O17su,H18su,O16)	-148.997

Çizelge A.6 UA ve UA5 bağ ve açılı değerleri.

UA	Tanımı	Değeri	UA 5su	Tanımı	Değeri
R1	R(C1,N10)	1.3862	R1	R(C1,N10)	1.38
R2	R(C1,N11)	1.4015	R2	R(C1,N11)	1.3941
R3	R(C1,O14)	1.2115	R3	R(C1,O14)	1.2246
R4	R(C2,C3)	1.3634	R4	R(C2,C3)	1.3685
R5	R(C2,N11)	1.3678	R5	R(C2,N11)	1.3596
R6	R(C2,N13)	1.3684	R6	R(C2,N13)	1.3661
R7	R(C3,C4)	1.4304	R7	R(C3,C4)	1.4252
R8	R(C3,N12)	1.3988	R8	R(C3,N12)	1.3977
R9	R(C4,N10)	1.4222	R9	R(C4,N10)	1.4068
R10	R(C4,O15)	1.2173	R10	R(C4,O15)	1.2313
R11	R(C5,N12)	1.3791	R11	R(C5,N12)	1.3644
R12	R(C5,N13)	1.4244	R12	R(C5,N13)	1.4023
R13	R(C5,O16)	1.2091	R13	R(C5,O16)	1.2353
R14	R(H6,N10)	1.0125	R14	R(H6,N10)	1.0367
			R15	R(H6,O21su)	1.7953
R15	R(H7,N11)	1.0092	R16	R(H7,N11)	1.0244
			R17	R(H7,O20su)	1.8935
R16	R(H8,N12)	1.0073	R18	R(H8,N12)	1.0175
			R19	R(H8,O18su)	2.0308
R17	R(H9,N13)	1.0077	R20	R(H9,N13)	1.0207
			R21	R(H9,O19su)	1.9499
			R22	R(O14,H29su)	1.9427
			R23	R(O15,H23su)	1.8099
			R24	R(O16,H25su)	1.9743
			R25	R(O16,H27su)	1.9567
			R26	R(O17su,H22su)	1.7867
			R27	R(O17su,H23su)	0.9792
			R28	R(O17su,H24su)	0.9613
			R29	R(O18su,H25su)	0.9736
			R30	R(O18su,H26su)	0.9609
			R31	R(O19su,H27su)	0.9755
			R32	R(O19su,H28su)	0.9611
			R33	R(O20su,H29su)	0.9761
			R34	R(O20su,H30su)	0.9613
			R35	R(O21su,H22su)	0.9811
			R36	R(O21su,H31su)	0.9613

Çizelge A.6 (devam ediyor)

A1	A(N10,C1,N11)	113.8007	A1	A(N10,C1,N11)	115.5657
A2	A(N10,C1,O14)	124.2	A2	A(N10,C1,O14)	123.0505
A3	A(N11,C1,O14)	121.9993	A3	A(N11,C1,O14)	121.3838
A4	A(C3,C2,N11)	122.9461	A4	A(C3,C2,N11)	123.0012
A5	A(C3,C2,N13)	108.4028	A5	A(C3,C2,N13)	108.4442
A6	A(N11,C2,N13)	128.651	A6	A(N11,C2,N13)	128.5546
A7	A(C2,C3,C4)	121.8734	A7	A(C2,C3,C4)	121.2802
A8	A(C2,C3,N12)	107.012	A8	A(C2,C3,N12)	106.8496
A9	A(C4,C3,N12)	131.1145	A9	A(C4,C3,N12)	131.8702
A10	A(C3,C4,N10)	110.9589	A10	A(C3,C4,N10)	112.2076
A11	A(C3,C4,O15)	127.7655	A11	A(C3,C4,O15)	125.8536
A12	A(N10,C4,O15)	121.2755	A12	A(N10,C4,O15)	121.9388
A13	A(N12,C5,N13)	103.7126	A13	A(N12,C5,N13)	105.764
A14	A(N12,C5,O16)	130.1336	A14	A(N12,C5,O16)	128.7718
A15	A(N13,C5,O16)	126.1538	A15	A(N13,C5,O16)	125.4641
			A16	A(N10,H6,O21su)	174.1559
			A17	A(N11,H7,O20su)	144.6344
			A18	A(N12,H8,O18su)	132.3319
			A19	A(N13,H9,O19su)	135.8333
A16	A(C1,N10,C4)	129.547	A20	A(C1,N10,C4)	127.9193
A17	A(C1,N10,H6)	114.9089	A21	A(C1,N10,H6)	115.0303
A18	A(C4,N10,H6)	115.544	A22	A(C4,N10,H6)	117.0491
A19	A(C1,N11,C2)	120.8737	A23	A(C1,N11,C2)	120.0212
A20	A(C1,N11,H7)	115.9086	A24	A(C1,N11,H7)	115.6967
A21	A(C2,N11,H7)	123.2176	A25	A(C2,N11,H7)	124.2821
A22	A(C3,N12,C5)	110.842	A26	A(C3,N12,C5)	109.7775
A23	A(C3,N12,H8)	125.7521	A27	A(C3,N12,H8)	128.5281
A24	A(C5,N12,H8)	123.4059	A28	A(C5,N12,H8)	121.693
A25	A(C2,N13,C5)	110.0306	A29	A(C2,N13,C5)	109.1647
A26	A(C2,N13,H9)	128.3541	A30	A(C2,N13,H9)	130.5217
A27	A(C5,N13,H9)	121.6149	A31	A(C5,N13,H9)	120.3086
			A32	A(C1,O14,H29su)	109.9328
			A33	A(C4,O15,H23su)	136.4945
			A34	A(C5,O16,H25su)	104.4133
			A35	A(C5,O16,H27su)	105.6875
			A36	A(H25su,O16,H27su)	149.8992
			A37	A(H22su,O17su,H23su)	95.8503

Çizelge A.6 (devam ediyor)

			A38	A(H22su,O17su,H24su)	124.6697
			A39	A(H23su,O17su,H24su)	106.2898
			A40	A(H8,O18su,H25su)	89.4619
			A41	A(H8,O18su,H26su)	138.7914
			A42	A(H25su,O18su,H26su)	106.9893
			A43	A(H9,O19su,H27su)	89.1874
			A44	A(H9,O19su,H28su)	138.553
			A45	A(H27su,O19su,H28su)	107.0949
			A46	A(H7,O20su,H29su)	86.002
			A47	A(H7,O20su,H30su)	136.4559
			A48	A(H29su,O20su,H30su)	107.1277
			A49	A(H6,O21su,H22su)	106.8649
			A50	A(H6,O21su,H31su)	122.0749
			A51	A(H22su,O21su,H31su)	107.2721
			A52	A(O17su,H22su,O21su)	157.8254
			A53	A(O15,H23su,O17su)	168.0598
			A54	A(O16,H25su,O18su)	143.0704
			A55	A(O16,H27su,O19su)	143.2933
			A56	A(O14,H29su,O20su)	142.1253
D1	D(N11,C1,N10,C4)	0.0259	D1	D(N11,C1,N10,C4)	-0.8948
D2	D(N11,C1,N10,H6)	179.9601	D2	D(N11,C1,N10,H6)	178.6772
D3	D(O14,C1,N10,C4)	-179.9156	D3	D(O14,C1,N10,C4)	-179.039
D4	D(O14,C1,N10,H6)	0.0185	D4	D(O14,C1,N10,H6)	-1.3885
D5	D(N10,C1,N11,C2)	0.0347	D5	D(N10,C1,N11,C2)	0.6467
D6	D(N10,C1,N11,H7)	180.0227	D6	D(N10,C1,N11,H7)	179.3186
D7	D(O14,C1,N11,C2)	179.9777	D7	D(O14,C1,N11,C2)	179.2887
D8	D(O14,C1,N11,H7)	-0.0343	D8	D(O14,C1,N11,H7)	0.7459
			D9	D(N10,C1,O14,H29su)	-178.847
			D10	D(N11,C1,O14,H29su)	1.0831
D9	D(N11,C2,C3,C4)	-0.0609	D11	D(N11,C2,C3,C4)	-0.1467
D10	D(N11,C2,C3,N12)	-179.9791	D12	D(N11,C2,C3,N12)	-179.918
D11	D(N13,C2,C3,C4)	179.8784	D13	D(N13,C2,C3,C4)	179.9095
D12	D(N13,C2,C3,N12)	-0.0397	D14	D(N13,C2,C3,N12)	-0.0263
D13	D(C3,C2,N11,C1)	-0.0174	D15	D(C3,C2,N11,C1)	-0.184
D14	D(C3,C2,N11,H7)	-180.0046	D16	D(C3,C2,N11,H7)	-179.778
D15	D(N13,C2,N11,C1)	-179.9437	D17	D(N13,C2,N11,C1)	-179.748
D16	D(N13,C2,N11,H7)	0.0692	D18	D(N13,C2,N11,H7)	-0.29

Çizelge A.6 (devam ediyor)

D17	D(C3,C2,N13,C5)	0.0698	D19	D(C3,C2,N13,C5)	0.0554
D18	D(C3,C2,N13,H9)	179.8412	D20	D(C3,C2,N13,H9)	179.223
D19	D(N11,C2,N13,C5)	180.0045	D21	D(N11,C2,N13,C5)	179.8843
D20	D(N11,C2,N13,H9)	-0.224	D22	D(N11,C2,N13,H9)	-0.7167
D21	D(C2,C3,C4,N10)	0.1052	D23	D(C2,C3,C4,N10)	-0.0221
D22	D(C2,C3,C4,O15)	-180.0153	D24	D(C2,C3,C4,O15)	-179.988
D23	D(N12,C3,C4,N10)	180.0013	D25	D(N12,C3,C4,N10)	179.8953
D24	D(N12,C3,C4,O15)	-0.1192	D26	D(N12,C3,C4,O15)	-0.0948
D25	D(C2,C3,N12,C5)	-0.0051	D27	D(C2,C3,N12,C5)	-0.0131
D26	D(C2,C3,N12,H8)	179.9616	D28	D(C2,C3,N12,H8)	179.5747
D27	D(C4,C3,N12,C5)	-179.9128	D29	D(C4,C3,N12,C5)	-179.939
D28	D(C4,C3,N12,H8)	0.0538	D30	D(C4,C3,N12,H8)	0.499
D29	D(C3,C4,N10,C1)	-0.0928	D31	D(C3,C4,N10,C1)	0.576
D30	D(C3,C4,N10,H6)	-180.0265	D32	D(C3,C4,N10,H6)	-178.989
D31	D(O15,C4,N10,C1)	180.0187	D33	D(O15,C4,N10,C1)	179.4333
D32	D(O15,C4,N10,H6)	0.0849	D34	D(O15,C4,N10,H6)	1.002
			D35	D(C3,C4,O15,H23su)	-171.001
			D36	D(N10,C4,O15,H23su)	9.01
D33	D(N13,C5,N12,C3)	0.045	D37	D(N13,C5,N12,C3)	0.0456
D34	D(N13,C5,N12,H8)	-179.9226	D38	D(N13,C5,N12,H8)	-179.643
D35	D(O16,C5,N12,C3)	-180.0032	D39	D(O16,C5,N12,C3)	-179.999
D36	D(O16,C5,N12,H8)	0.0292	D40	D(O16,C5,N12,H8)	-0.4022
D37	D(N12,C5,N13,C2)	-0.0699	D41	D(N12,C5,N13,C2)	-0.0621
D38	D(N12,C5,N13,H9)	-179.8594	D42	D(N12,C5,N13,H9)	-179.329
D39	D(O16,C5,N13,C2)	179.9758	D43	D(O16,C5,N13,C2)	179.9807
D40	D(O16,C5,N13,H9)	0.1862	D44	D(O16,C5,N13,H9)	0.7137
			D45	D(N12,C5,O16,H25su)	1.0429
			D46	D(N12,C5,O16,H27su)	-179.024
			D47	D(N13,C5,O16,H25su)	-179.01
			D48	D(N13,C5,O16,H27su)	0.9236
			D49	D(O21su,H6,N10,C1)	-162.671
			D50	D(O21su,H6,N10,C4)	16.9502
			D51	D(N10,H6,O21su,H22su)	-26.7577
			D52	D(N10,H6,O21su,H31su)	-150.546
			D53	D(O20su,H7,N11,C1)	-5.5935
			D54	D(O20su,H7,N11,C2)	174.4427
			D55	D(N11,H7,O20su,H29su)	6.6361



Çizelge A.6 (devam ediyor)

			D56	D(N11,H7,O20su,H30su)	117.4292
			D57	D(O18su,H8,N12,C3)	176.5701
			D58	D(O18su,H8,N12,C5)	-2.9451
			D59	D(N12,H8,O18su,H25su)	5.5107
			D60	D(N12,H8,O18su,H26su)	121.1571
			D61	D(O19su,H9,N13,C2)	176.3637
			D62	D(O19su,H9,N13,C5)	-4.5471
			D63	D(N13,H9,O19su,H27su)	5.9174
			D64	D(N13,H9,O19su,H28su)	121.2628
			D65	D(C1,O14,H29su,O20su)	1.7646
			D66	D(C4,O15,H23su,O17su)	-12.9751
			D67	D(C5,O16,H25su,O18su)	4.4856
			D68	D(H27su,O16,H25su,O18su)	-175.387
			D69	D(C5,O16,H27su,O19su)	2.7656
			D70	D(H25su,O16,H27su,O19su)	-177.363
			D71	D(H23su,O17su,H22su,O21su)	1.8381
			D72	D(H24su,O17su,H22su,O21su)	116.276
			D73	D(H22su,O17su,H23su,O15)	-0.4794
			D74	D(H24su,O17su,H23su,O15)	-129.212
			D75	D(H8,O18su,H25su,O16)	-5.724
			D76	D(H26su,O18su,H25su,O16)	-147.335
			D77	D(H9,O19su,H27su,O16)	-4.3268
			D78	D(H28su,O19su,H27su,O16)	-145.581
			D79	D(H7,O20su,H29su,O14)	-3.4177
			D80	D(H30su,O20su,H29su,O14)	-141.047
			D81	D(H6,O21su,H22su,O17su)	5.9492
			D82	D(H31su,O21su,H22su,O17su)	138.431

**EK AÇIKLAMALAR B**

**ASKORBİK ASİT PARAMETRE DEĞİŞİMLERİ**



Çizelge B.1 AA ve H8 bağ ve açılar.

AA	Tanımı	Değeri	H8	Tanımı	Değeri
R1	R(1,2)	1.4503	R1	R(1,2)	1.449
R2	R(1,5)	1.499	R2	R(1,5)	1.4924
R3	R(1,11)	1.0961	R3	R(1,11)	1.0962
R4	R(1,12)	1.5427	R4	R(1,12)	1.5429
R5	R(2,3)	1.3772	R5	R(2,3)	1.3742
R6	R(3,4)	1.4574	R6	R(3,4)	1.4613
R7	R(3,6)	1.2037	R7	R(3,6)	1.2125
R8	R(4,5)	1.3398	R8	R(4,5)	1.3454
R9	R(4,7)	1.3553	R9	R(4,7)	1.3468
R10	R(5,9)	1.3429	R10	R(5,9)	1.3412
R11	R(7,8)	0.9679	R11	R(7,8)	0.9883
R12	R(9,10)	0.9662	R13	R(9,10)	0.9675
R13	R(12,13)	1.0957	R14	R(12,13)	1.0957
R14	R(12,14)	1.4125	R15	R(12,14)	1.4122
R15	R(12,16)	1.5377	R16	R(12,16)	1.5378
R16	R(14,15)	0.9681	R17	R(14,15)	0.968
R17	R(16,17)	1.0972	R18	R(16,17)	1.0972
R18	R(16,18)	1.091	R19	R(16,18)	1.091
R19	R(16,19)	1.4236	R20	R(16,19)	1.4241
R20	R(19,20)	0.9665	R21	R(19,20)	0.9664
			R22	R(21,22)	0.9619
			R23	R(21,23)	0.9762
A1	A(2,1,5)	103.8706	A1	A(2,1,5)	103.3146
A2	A(2,1,11)	107.3903	A2	A(2,1,11)	107.3803
A3	A(2,1,12)	110.2647	A3	A(2,1,12)	110.1503
A4	A(5,1,11)	111.134	A4	A(5,1,11)	111.4002
A5	A(5,1,12)	114.8731	A5	A(5,1,12)	115.2925
A6	A(11,1,12)	108.9825	A6	A(11,1,12)	108.929
A7	A(1,2,3)	109.5341	A7	A(1,2,3)	109.9259
A8	A(2,3,4)	108.2765	A8	A(2,3,4)	108.5488
A9	A(2,3,6)	123.5798	A9	A(2,3,6)	121.008
A10	A(4,3,6)	128.1433	A10	A(4,3,6)	130.443
A11	A(3,4,5)	108.8313	A11	A(3,4,5)	107.6805
A12	A(3,4,7)	123.0822	A12	A(3,4,7)	127.3538
A13	A(5,4,7)	128.0862	A13	A(5,4,7)	124.9649
A14	A(1,5,4)	109.4628	A14	A(1,5,4)	110.5024
A15	A(1,5,9)	119.2584	A15	A(1,5,9)	120.0282
A16	A(4,5,9)	131.2774	A16	A(4,5,9)	129.4674
A17	A(4,7,8)	108.0078	A17	A(4,7,8)	112.1513
			A18	A(7,8,21)	170.8092
A18	A(5,9,10)	109.8153	A19	A(5,9,10)	109.0348
A19	A(1,12,13)	106.246	A20	A(1,12,13)	106.1852
A20	A(1,12,14)	111.5609	A21	A(1,12,14)	111.6162
A21	A(1,12,16)	111.8838	A22	A(1,12,16)	111.8481
A22	A(13,12,14)	107.5337	A23	A(13,12,14)	107.5664
A23	A(13,12,16)	109.0112	A24	A(13,12,16)	109.0031

Çizelge B.1 (devam ediyor)

A24	A(14,12,16)	110.3955	A25	A(14,12,16)	110.4106
A25	A(12,14,15)	106.8129	A26	A(12,14,15)	106.807
A26	A(12,16,17)	110.5946	A27	A(12,16,17)	110.5933
A27	A(12,16,18)	108.9891	A28	A(12,16,18)	109.0195
A28	A(12,16,19)	111.3815	A29	A(12,16,19)	111.4111
A29	A(17,16,18)	108.2759	A30	A(17,16,18)	108.2806
A30	A(17,16,19)	111.6841	A31	A(17,16,19)	111.647
A31	A(18,16,19)	105.7199	A32	A(18,16,19)	105.6937
A32	A(16,19,20)	108.2905	A33	A(16,19,20)	108.3512
			A34	A(8,21,22)	123.6903
			A35	A(8,21,23)	93.7557
			A36	A(22,21,23)	107.0984
D1	D(5,1,2,3)	-1.59	D1	D(5,1,2,3)	-1.686
D2	D(11,1,2,3)	-119.398	D2	D(11,1,2,3)	-119.524
D3	D(12,1,2,3)	121.983	D3	D(12,1,2,3)	121.9908
D4	D(2,1,5,4)	1.1684	D4	D(2,1,5,4)	1.2489
D5	D(2,1,5,9)	-179.21	D5	D(2,1,5,9)	-179.213
D6	D(11,1,5,4)	116.3511	D6	D(11,1,5,4)	116.2377
D7	D(11,1,5,9)	-64.0274	D7	D(11,1,5,9)	-64.2238
D8	D(12,1,5,4)	-119.344	D8	D(12,1,5,4)	-118.974
D9	D(12,1,5,9)	60.2778	D9	D(12,1,5,9)	60.5646
D10	D(2,1,12,13)	175.0218	D10	D(2,1,12,13)	175.7129
D11	D(2,1,12,14)	-68.0709	D11	D(2,1,12,14)	-67.3474
D12	D(2,1,12,16)	56.1603	D12	D(2,1,12,16)	56.9184
D13	D(5,1,12,13)	-68.0517	D13	D(5,1,12,13)	-67.8818
D14	D(5,1,12,14)	48.8557	D14	D(5,1,12,14)	49.0579
D15	D(5,1,12,16)	173.0868	D15	D(5,1,12,16)	173.3237
D16	D(11,1,12,13)	57.3811	D16	D(11,1,12,13)	58.1824
D17	D(11,1,12,14)	174.2884	D17	D(11,1,12,14)	175.1221
D18	D(11,1,12,16)	-61.4805	D18	D(11,1,12,16)	-60.6121
D19	D(1,2,3,4)	1.4516	D19	D(1,2,3,4)	1.5431
D20	D(1,2,3,6)	-178.736	D20	D(1,2,3,6)	-178.582
D21	D(2,3,4,5)	-0.685	D21	D(2,3,4,5)	-0.7148
D22	D(2,3,4,7)	179.4904	D22	D(2,3,4,7)	179.5959
D23	D(6,3,4,5)	179.514	D23	D(6,3,4,5)	179.4256
D24	D(6,3,4,7)	-0.3106	D24	D(6,3,4,7)	-0.2636
D25	D(3,4,5,1)	-0.339	D25	D(3,4,5,1)	-0.3763
D26	D(3,4,5,9)	-179.9	D26	D(3,4,5,9)	-179.859
D27	D(7,4,5,1)	179.4743	D27	D(7,4,5,1)	179.3223
D28	D(7,4,5,9)	-0.0862	D28	D(7,4,5,9)	-0.1601
D29	D(3,4,7,8)	1.3257	D29	D(3,4,7,8)	-0.334
D30	D(5,4,7,8)	-178.463	D30	D(5,4,7,8)	-179.973
D31	D(1,5,9,10)	-175.541	D31	D(1,5,9,10)	-176.736
D32	D(4,5,9,10)	3.9841	D32	D(4,5,9,10)	2.7041
			D33	D(4,7,8,21)	-6.2685

Çizelge B.1 (devam ediyor)

			D34	D(7,8,21,22)	121.9391
			D35	D(7,8,21,23)	8.4931
D33	D(1,12,14,15)	94.4104	D36	D(1,12,14,15)	94.3546
D34	D(13,12,14,15)	-149.466	D37	D(13,12,14,15)	-149.545
D35	D(16,12,14,15)	-30.6534	D38	D(16,12,14,15)	-30.7145
D36	D(1,12,16,17)	46.2633	D39	D(1,12,16,17)	46.1314
D37	D(1,12,16,18)	165.1834	D40	D(1,12,16,18)	165.0753
D38	D(1,12,16,19)	-78.5573	D41	D(1,12,16,19)	-78.6618
D39	D(13,12,16,17)	-70.9479	D42	D(13,12,16,17)	-70.9789
D40	D(13,12,16,18)	47.9721	D43	D(13,12,16,18)	47.965
D41	D(13,12,16,19)	164.2314	D44	D(13,12,16,19)	164.2279
D42	D(14,12,16,17)	171.1433	D45	D(14,12,16,17)	171.0685
D43	D(14,12,16,18)	-69.9367	D46	D(14,12,16,18)	-69.9876
D44	D(14,12,16,19)	46.3226	D47	D(14,12,16,19)	46.2753
D45	D(12,16,19,20)	65.4811	D48	D(12,16,19,20)	65.5996
D46	D(17,16,19,20)	-58.7269	D49	D(17,16,19,20)	-58.6014
D47	D(18,16,19,20)	-176.276	D50	D(18,16,19,20)	-176.121

Çizelge B.2 AA ve H10 bağ ve açıları.

AA	Tanımı	Değeri	H10	Tanımı	Değeri
R1	R(1,2)	1.4503	R1	R(1,2)	1.4494
R2	R(1,5)	1.499	R2	R(1,5)	1.5045
R3	R(1,11)	1.0961	R3	R(1,11)	1.0959
R4	R(1,12)	1.5427	R4	R(1,12)	1.5419
R5	R(2,3)	1.3772	R5	R(2,3)	1.3746
R6	R(3,4)	1.4574	R6	R(3,4)	1.4515
R7	R(3,6)	1.2037	R7	R(3,6)	1.2064
R8	R(4,5)	1.3398	R8	R(4,5)	1.3459
R9	R(4,7)	1.3553	R9	R(4,7)	1.3686
R10	R(5,9)	1.3429	R10	R(5,9)	1.3273
R11	R(7,8)	0.9679	R11	R(7,8)	0.9693
R12	R(9,10)	0.9662	R12	R(9,10)	0.989
			R13	R(10,23)	2.1259
R13	R(12,13)	1.0957	R14	R(12,13)	1.0954
R14	R(12,14)	1.4125	R15	R(12,14)	1.4128
R15	R(12,16)	1.5377	R16	R(12,16)	1.5375
R16	R(14,15)	0.9681	R17	R(14,15)	0.9679
R17	R(16,17)	1.0972	R18	R(16,17)	1.0973
R18	R(16,18)	1.091	R19	R(16,18)	1.0911
R19	R(16,19)	1.4236	R20	R(16,19)	1.4242
R20	R(19,20)	0.9665	R21	R(19,20)	0.9665
			R22	R(21,22)	0.9621
			R23	R(21,23)	0.9709
A1	A(2,1,5)	103.8706	A1	A(2,1,5)	104.6353
A2	A(2,1,11)	107.3903	A2	A(2,1,11)	107.5141
A3	A(2,1,12)	110.2647	A3	A(2,1,12)	110.1849

Çizelge B.2 (devam ediyor)

A4	A(5,1,11)	111.134	A4	A(5,1,11)	110.5945
A5	A(5,1,12)	114.8731	A5	A(5,1,12)	114.5796
A6	A(11,1,12)	108.9825	A6	A(11,1,12)	109.0542
A7	A(1,2,3)	109.5341	A7	A(1,2,3)	109.0616
A8	A(2,3,4)	108.2765	A8	A(2,3,4)	108.6117
A9	A(2,3,6)	123.5798	A9	A(2,3,6)	123.7364
A10	A(4,3,6)	128.1433	A10	A(4,3,6)	127.6515
A11	A(3,4,5)	108.8313	A11	A(3,4,5)	109.4195
A12	A(3,4,7)	123.0822	A12	A(3,4,7)	120.5222
A13	A(5,4,7)	128.0862	A13	A(5,4,7)	130.0581
A14	A(1,5,4)	109.4628	A14	A(1,5,4)	108.2447
A15	A(1,5,9)	119.2584	A15	A(1,5,9)	118.3605
A16	A(4,5,9)	131.2774	A16	A(4,5,9)	133.3948
A17	A(4,7,8)	108.0078	A17	A(4,7,8)	107.169
A18	A(5,9,10)	109.8153	A18	A(5,9,10)	111.203
			A19	A(9,10,23)	142.6775
A19	A(1,12,13)	106.246	A20	A(1,12,13)	106.2133
A20	A(1,12,14)	111.5609	A21	A(1,12,14)	111.5494
A21	A(1,12,16)	111.8838	A22	A(1,12,16)	111.8478
A22	A(13,12,14)	107.5337	A23	A(13,12,14)	107.5567
A23	A(13,12,16)	109.0112	A24	A(13,12,16)	109.0771
A24	A(14,12,16)	110.3955	A25	A(14,12,16)	110.3909
A25	A(12,14,15)	106.8129	A26	A(12,14,15)	106.8067
A26	A(12,16,17)	110.5946	A27	A(12,16,17)	110.5479
A27	A(12,16,18)	108.9891	A28	A(12,16,18)	109.0256
A28	A(12,16,19)	111.3815	A29	A(12,16,19)	111.4539
A29	A(17,16,18)	108.2759	A30	A(17,16,18)	108.2943
A30	A(17,16,19)	111.6841	A31	A(17,16,19)	111.6374
A31	A(18,16,19)	105.7199	A32	A(18,16,19)	105.688
A32	A(16,19,20)	108.2905	A33	A(16,19,20)	108.3194
			A34	A(22,21,23)	107.1217
			A35	A(10,23,21)	52.7146
D1	D(5,1,2,3)	-1.59	D1	D(5,1,2,3)	-1.651
D2	D(11,1,2,3)	-119.398	D2	D(11,1,2,3)	-119.272
D3	D(12,1,2,3)	121.983	D3	D(12,1,2,3)	121.9935
D4	D(2,1,5,4)	1.1684	D4	D(2,1,5,4)	1.1273
D5	D(2,1,5,9)	-179.21	D5	D(2,1,5,9)	-178.884
D6	D(11,1,5,4)	116.3511	D6	D(11,1,5,4)	116.6198
D7	D(11,1,5,9)	-64.0274	D7	D(11,1,5,9)	-63.391
D8	D(12,1,5,4)	-119.344	D8	D(12,1,5,4)	-119.643
D9	D(12,1,5,9)	60.2778	D9	D(12,1,5,9)	60.3457
D10	D(2,1,12,13)	175.0218	D10	D(2,1,12,13)	176.3641
D11	D(2,1,12,14)	-68.0709	D11	D(2,1,12,14)	-66.7264
D12	D(2,1,12,16)	56.1603	D12	D(2,1,12,16)	57.4629
D13	D(5,1,12,13)	-68.0517	D13	D(5,1,12,13)	-65.9788
D14	D(5,1,12,14)	48.8557	D14	D(5,1,12,14)	50.9307
D15	D(5,1,12,16)	173.0868	D15	D(5,1,12,16)	175.12
D16	D(11,1,12,13)	57.3811	D16	D(11,1,12,13)	58.5767
D17	D(11,1,12,14)	174.2884	D17	D(11,1,12,14)	175.4862

Çizelge B.2 (devam ediyor)

D18	D(11,1,12,16)	-61.4805	D18	D(11,1,12,16)	-60.3245
D19	D(1,2,3,4)	1.4516	D19	D(1,2,3,4)	1.5769
D20	D(1,2,3,6)	-178.736	D20	D(1,2,3,6)	-178.629
D21	D(2,3,4,5)	-0.685	D21	D(2,3,4,5)	-0.8458
D22	D(2,3,4,7)	179.4904	D22	D(2,3,4,7)	179.2795
D23	D(6,3,4,5)	179.514	D23	D(6,3,4,5)	179.37
D24	D(6,3,4,7)	-0.3106	D24	D(6,3,4,7)	-0.5047
D25	D(3,4,5,1)	-0.339	D25	D(3,4,5,1)	-0.2162
D26	D(3,4,5,9)	-179.9	D26	D(3,4,5,9)	-179.797
D27	D(7,4,5,1)	179.4743	D27	D(7,4,5,1)	179.6428
D28	D(7,4,5,9)	-0.0862	D28	D(7,4,5,9)	-0.3441
D29	D(3,4,7,8)	1.3257	D29	D(3,4,7,8)	2.9246
D30	D(5,4,7,8)	-178.463	D30	D(5,4,7,8)	-176.921
D31	D(1,5,9,10)	-175.541	D31	D(1,5,9,10)	-176.843
D32	D(4,5,9,10)	3.9841	D32	D(4,5,9,10)	3.1426
			D33	D(5,9,10,23)	-2.4185
			D34	D(9,10,23,21)	178.3483
D33	D(1,12,14,15)	94.4104	D35	D(1,12,14,15)	93.9807
D34	D(13,12,14,15)	-149.466	D36	D(13,12,14,15)	-149.928
D35	D(16,12,14,15)	-30.6534	D37	D(16,12,14,15)	-31.0246
D36	D(1,12,16,17)	46.2633	D38	D(1,12,16,17)	46.558
D37	D(1,12,16,18)	165.1834	D39	D(1,12,16,18)	165.4953
D38	D(1,12,16,19)	-78.5573	D40	D(1,12,16,19)	-78.2203
D39	D(13,12,16,17)	-70.9479	D41	D(13,12,16,17)	-70.633
D40	D(13,12,16,18)	47.9721	D42	D(13,12,16,18)	48.3042
D41	D(13,12,16,19)	164.2314	D43	D(13,12,16,19)	164.5886
D42	D(14,12,16,17)	171.1433	D44	D(14,12,16,17)	171.3931
D43	D(14,12,16,18)	-69.9367	D45	D(14,12,16,18)	-69.6696
D44	D(14,12,16,19)	46.3226	D46	D(14,12,16,19)	46.6148
D45	D(12,16,19,20)	65.4811	D47	D(12,16,19,20)	64.4592
D46	D(17,16,19,20)	-58.7269	D48	D(17,16,19,20)	-59.7071
D47	D(18,16,19,20)	-176.276	D49	D(18,16,19,20)	-177.235
			D50	D(22,21,23,10)	130.5343

Çizelge B.3 AA ve H15 bağ ve açılırları.

AA	Tanımı	Değeri	H15	Tanımı	Değeri
R1	R(1,2)	1.4503	R1	R(1,2)	1.4503
R2	R(1,5)	1.499	R2	R(1,5)	1.499
R3	R(1,11)	1.0961	R3	R(1,11)	1.0961
R4	R(1,12)	1.5427	R4	R(1,12)	1.5427
R5	R(2,3)	1.3772	R5	R(2,3)	1.3772
R6	R(3,4)	1.4574	R6	R(3,4)	1.4574
R7	R(3,6)	1.2037	R7	R(3,6)	1.2037
R8	R(4,5)	1.3398	R8	R(4,5)	1.3398
R9	R(4,7)	1.3553	R9	R(4,7)	1.3553
R10	R(5,9)	1.3429	R10	R(5,9)	1.3429
R11	R(7,8)	0.9679	R11	R(7,8)	0.9679
R12	R(9,10)	0.9662	R12	R(9,10)	0.9662



Çizelge B.3 (devam ediyor)

R13	R(12,13)	1.0957	R13	R(12,13)	1.0957
R14	R(12,14)	1.4125	R14	R(12,14)	1.4125
R15	R(12,16)	1.5377	R15	R(12,16)	1.5377
R16	R(14,15)	0.9681	R16	R(14,15)	0.9681
			R17	R(15,21)	1.7194
R17	R(16,17)	1.0972	R18	R(16,17)	1.0972
R18	R(16,18)	1.091	R19	R(16,18)	1.091
R19	R(16,19)	1.4236	R20	R(16,19)	1.4236
R20	R(19,20)	0.9665	R21	R(19,20)	0.9665
			R22	R(21,22)	0.96
			R23	R(21,23)	0.96
A1	A(2,1,5)	103.8706	A1	A(2,1,5)	103.8706
A2	A(2,1,11)	107.3903	A2	A(2,1,11)	107.3903
A3	A(2,1,12)	110.2647	A3	A(2,1,12)	110.2647
A4	A(5,1,11)	111.134	A4	A(5,1,11)	111.134
A5	A(5,1,12)	114.8731	A5	A(5,1,12)	114.8731
A6	A(11,1,12)	108.9825	A6	A(11,1,12)	108.9826
A7	A(1,2,3)	109.5341	A7	A(1,2,3)	109.5341
A8	A(2,3,4)	108.2765	A8	A(2,3,4)	108.2765
A9	A(2,3,6)	123.5798	A9	A(2,3,6)	123.5798
A10	A(4,3,6)	128.1433	A10	A(4,3,6)	128.1433
A11	A(3,4,5)	108.8313	A11	A(3,4,5)	108.8313
A12	A(3,4,7)	123.0822	A12	A(3,4,7)	123.0822
A13	A(5,4,7)	128.0862	A13	A(5,4,7)	128.0863
A14	A(1,5,4)	109.4628	A14	A(1,5,4)	109.4629
A15	A(1,5,9)	119.2584	A15	A(1,5,9)	119.2584
A16	A(4,5,9)	131.2774	A16	A(4,5,9)	131.2774
A17	A(4,7,8)	108.0078	A17	A(4,7,8)	108.0079
A18	A(5,9,10)	109.8153	A18	A(5,9,10)	109.8153
A19	A(1,12,13)	106.246	A19	A(1,12,13)	106.246
A20	A(1,12,14)	111.5609	A20	A(1,12,14)	111.561
A21	A(1,12,16)	111.8838	A21	A(1,12,16)	111.8837
A22	A(13,12,14)	107.5337	A22	A(13,12,14)	107.5337
A23	A(13,12,16)	109.0112	A23	A(13,12,16)	109.0112
A24	A(14,12,16)	110.3955	A24	A(14,12,16)	110.3955
A25	A(12,14,15)	106.8129	A25	A(12,14,15)	106.813
			A26	A(14,15,21)	125.3535
A26	A(12,16,17)	110.5946	A27	A(12,16,17)	110.5945
A27	A(12,16,18)	108.9891	A28	A(12,16,18)	108.989
A28	A(12,16,19)	111.3815	A29	A(12,16,19)	111.3815
A29	A(17,16,18)	108.2759	A30	A(17,16,18)	108.2759
A30	A(17,16,19)	111.6841	A31	A(17,16,19)	111.6841
A31	A(18,16,19)	105.7199	A32	A(18,16,19)	105.72
A32	A(16,19,20)	108.2905	A33	A(16,19,20)	108.2905
			A34	A(15,21,22)	122.5717
			A35	A(15,21,23)	124.6789
			A36	A(22,21,23)	109.5
D1	D(5,1,2,3)	-1.59	D1	D(5,1,2,3)	-1.59
D2	D(11,1,2,3)	-119.398	D2	D(11,1,2,3)	-119.398

Çizelge B.3 (devam ediyor)

D3	D(12,1,2,3)	121.983	D3	D(12,1,2,3)	121.983
D4	D(2,1,5,4)	1.1684	D4	D(2,1,5,4)	1.1683
D5	D(2,1,5,9)	-179.21	D5	D(2,1,5,9)	-179.21
D6	D(11,1,5,4)	116.3511	D6	D(11,1,5,4)	116.3511
D7	D(11,1,5,9)	-64.0274	D7	D(11,1,5,9)	-64.0274
D8	D(12,1,5,4)	-119.344	D8	D(12,1,5,4)	-119.344
D9	D(12,1,5,9)	60.2778	D9	D(12,1,5,9)	60.2779
D10	D(2,1,12,13)	175.0218	D10	D(2,1,12,13)	175.0218
D11	D(2,1,12,14)	-68.0709	D11	D(2,1,12,14)	-68.0708
D12	D(2,1,12,16)	56.1603	D12	D(2,1,12,16)	56.1603
D13	D(5,1,12,13)	-68.0517	D13	D(5,1,12,13)	-68.0517
D14	D(5,1,12,14)	48.8557	D14	D(5,1,12,14)	48.8556
D15	D(5,1,12,16)	173.0868	D15	D(5,1,12,16)	173.0867
D16	D(11,1,12,13)	57.3811	D16	D(11,1,12,13)	57.381
D17	D(11,1,12,14)	174.2884	D17	D(11,1,12,14)	174.2884
D18	D(11,1,12,16)	-61.4805	D18	D(11,1,12,16)	-61.4805
D19	D(1,2,3,4)	1.4516	D19	D(1,2,3,4)	1.4516
D20	D(1,2,3,6)	-178.736	D20	D(1,2,3,6)	-178.736
D21	D(2,3,4,5)	-0.685	D21	D(2,3,4,5)	-0.685
D22	D(2,3,4,7)	179.4904	D22	D(2,3,4,7)	179.4904
D23	D(6,3,4,5)	179.514	D23	D(6,3,4,5)	179.514
D24	D(6,3,4,7)	-0.3106	D24	D(6,3,4,7)	-0.3107
D25	D(3,4,5,1)	-0.339	D25	D(3,4,5,1)	-0.339
D26	D(3,4,5,9)	-179.9	D26	D(3,4,5,9)	-179.9
D27	D(7,4,5,1)	179.4743	D27	D(7,4,5,1)	179.4744
D28	D(7,4,5,9)	-0.0862	D28	D(7,4,5,9)	-0.0862
D29	D(3,4,7,8)	1.3257	D29	D(3,4,7,8)	1.3258
D30	D(5,4,7,8)	-178.463	D30	D(5,4,7,8)	-178.463
D31	D(1,5,9,10)	-175.541	D31	D(1,5,9,10)	-175.541
D32	D(4,5,9,10)	3.9841	D32	D(4,5,9,10)	3.9841
D33	D(1,12,14,15)	94.4104	D33	D(1,12,14,15)	94.4104
D34	D(13,12,14,15)	-149.466	D34	D(13,12,14,15)	-149.466
D35	D(16,12,14,15)	-30.6534	D35	D(16,12,14,15)	-30.6534
D36	D(1,12,16,17)	46.2633	D36	D(1,12,16,17)	46.2633
D37	D(1,12,16,18)	165.1834	D37	D(1,12,16,18)	165.1833
D38	D(1,12,16,19)	-78.5573	D38	D(1,12,16,19)	-78.5573
D39	D(13,12,16,17)	-70.9479	D39	D(13,12,16,17)	-70.948
D40	D(13,12,16,18)	47.9721	D40	D(13,12,16,18)	47.9721
D41	D(13,12,16,19)	164.2314	D41	D(13,12,16,19)	164.2314
D42	D(14,12,16,17)	171.1433	D42	D(14,12,16,17)	171.1433
D43	D(14,12,16,18)	-69.9367	D43	D(14,12,16,18)	-69.9367
D44	D(14,12,16,19)	46.3226	D44	D(14,12,16,19)	46.3227
			D45	D(12,14,15,21)	-110.695
			D46	D(14,15,21,22)	3.0034
			D47	D(14,15,21,23)	160.4726
D45	D(12,16,19,20)	65.4811	D48	D(12,16,19,20)	65.4811
D46	D(17,16,19,20)	-58.7269	D49	D(17,16,19,20)	-58.7268
D47	D(18,16,19,20)	-176.276	D50	D(18,16,19,20)	-176.276

Çizelge B.4 AA ve H20 bağ ve açıları.

AA	Tanımı	Değeri	H20	Tanımı	Değeri
R1	R(1,2)	1.4503	R1	R(1,2)	1.4459
R2	R(1,5)	1.499	R2	R(1,5)	1.4996
R3	R(1,11)	1.0961	R3	R(1,11)	1.0952
R4	R(1,12)	1.5427	R4	R(1,12)	1.5442
R5	R(2,3)	1.3772	R5	R(2,3)	1.3583
			R6	R(2,22)	2.5248
R6	R(3,4)	1.4574	R7	R(3,4)	1.4529
R7	R(3,6)	1.2037	R8	R(3,6)	1.2148
R8	R(4,5)	1.3398	R9	R(4,5)	1.3433
R9	R(4,7)	1.3553	R10	R(4,7)	1.3567
R10	R(5,9)	1.3429	R11	R(5,9)	1.3402
R11	R(7,8)	0.9679	R12	R(7,8)	0.9672
R12	R(9,10)	0.9662	R13	R(9,10)	0.9664
R13	R(12,13)	1.0957	R14	R(12,13)	1.096
R14	R(12,14)	1.4125	R15	R(12,14)	1.4099
R15	R(12,16)	1.5377	R16	R(12,16)	1.5533
R16	R(14,15)	0.9681	R17	R(14,15)	0.9723
R17	R(16,17)	1.0972	R18	R(16,17)	1.0953
R18	R(16,18)	1.091	R19	R(16,18)	1.0921
R19	R(16,19)	1.4236	R20	R(16,19)	1.4168
R20	R(19,20)	0.9665	R21	R(19,20)	0.9774
			R22	R(20,21)	1.8914
			R23	R(21,22)	0.9722
			R24	R(21,23)	0.9618
A1	A(2,1,5)	103.8706	A1	A(2,1,5)	103.519
A2	A(2,1,11)	107.3903	A2	A(2,1,11)	107.3715
A3	A(2,1,12)	110.2647	A3	A(2,1,12)	109.3816
A4	A(5,1,11)	111.134	A4	A(5,1,11)	111.815
A5	A(5,1,12)	114.8731	A5	A(5,1,12)	115.0804
A6	A(11,1,12)	108.9825	A6	A(11,1,12)	109.2596
A7	A(1,2,3)	109.5341	A7	A(1,2,3)	109.7717
			A8	A(1,2,22)	160.4321
			A9	A(3,2,22)	76.1014
A8	A(2,3,4)	108.2765	A10	A(2,3,4)	108.9206
A9	A(2,3,6)	123.5798	A11	A(2,3,6)	122.4217
A10	A(4,3,6)	128.1433	A12	A(4,3,6)	128.6552
A11	A(3,4,5)	108.8313	A13	A(3,4,5)	108.2036
A12	A(3,4,7)	123.0822	A14	A(3,4,7)	123.9875
A13	A(5,4,7)	128.0862	A15	A(5,4,7)	127.7925
A14	A(1,5,4)	109.4628	A16	A(1,5,4)	109.3538
A15	A(1,5,9)	119.2584	A17	A(1,5,9)	119.6827
A16	A(4,5,9)	131.2774	A18	A(4,5,9)	130.9418
A17	A(4,7,8)	108.0078	A19	A(4,7,8)	108.2737
A18	A(5,9,10)	109.8153	A20	A(5,9,10)	109.8662
A19	A(1,12,13)	106.246	A21	A(1,12,13)	106.3042
A20	A(1,12,14)	111.5609	A22	A(1,12,14)	111.3224
A21	A(1,12,16)	111.8838	A23	A(1,12,16)	111.7982
A22	A(13,12,14)	107.5337	A24	A(13,12,14)	108.2205
A23	A(13,12,16)	109.0112	A25	A(13,12,16)	109.4945
A24	A(14,12,16)	110.3955	A26	A(14,12,16)	109.5794

Çizelge B.4 (devam ediyor)

A25	A(12,14,15)	106.8129	A27	A(12,14,15)	105.5229
A26	A(12,16,17)	110.5946	A28	A(12,16,17)	110.8836
A27	A(12,16,18)	108.9891	A29	A(12,16,18)	108.4144
A28	A(12,16,19)	111.3815	A30	A(12,16,19)	110.9963
A29	A(17,16,18)	108.2759	A31	A(17,16,18)	108.2241
A30	A(17,16,19)	111.6841	A32	A(17,16,19)	111.9764
A31	A(18,16,19)	105.7199	A33	A(18,16,19)	106.1312
A32	A(16,19,20)	108.2905	A34	A(16,19,20)	112.1365
			A35	A(19,20,21)	164.8175
			A36	A(20,21,22)	111.7023
			A37	A(20,21,23)	121.3627
			A38	A(22,21,23)	106.2025
			A39	A(2,22,21)	104.046
D1	D(5,1,2,3)	-1.59	D1	D(5,1,2,3)	-4.8042
			D2	D(5,1,2,22)	-109.232
D2	D(11,1,2,3)	-119.398	D3	D(11,1,2,3)	-123.208
			D4	D(11,1,2,22)	132.3639
D3	D(12,1,2,3)	121.983	D5	D(12,1,2,3)	118.3396
			D6	D(12,1,2,22)	13.9115
D4	D(2,1,5,4)	1.1684	D7	D(2,1,5,4)	3.2273
D5	D(2,1,5,9)	-179.21	D8	D(2,1,5,9)	-178.283
D6	D(11,1,5,4)	116.3511	D9	D(11,1,5,4)	118.5046
D7	D(11,1,5,9)	-64.0274	D10	D(11,1,5,9)	-63.006
D8	D(12,1,5,4)	-119.344	D11	D(12,1,5,4)	-116.072
D9	D(12,1,5,9)	60.2778	D12	D(12,1,5,9)	62.4174
D10	D(2,1,12,13)	175.0218	D13	D(2,1,12,13)	168.1633
D11	D(2,1,12,14)	-68.0709	D14	D(2,1,12,14)	-74.1984
D12	D(2,1,12,16)	56.1603	D15	D(2,1,12,16)	48.7271
D13	D(5,1,12,13)	-68.0517	D16	D(5,1,12,13)	-75.8441
D14	D(5,1,12,14)	48.8557	D17	D(5,1,12,14)	41.7942
D15	D(5,1,12,16)	173.0868	D18	D(5,1,12,16)	164.7197
D16	D(11,1,12,13)	57.3811	D19	D(11,1,12,13)	50.8933
D17	D(11,1,12,14)	174.2884	D20	D(11,1,12,14)	168.5315
D18	D(11,1,12,16)	-61.4805	D21	D(11,1,12,16)	-68.543
D19	D(1,2,3,4)	1.4516	D22	D(1,2,3,4)	4.6757
D20	D(1,2,3,6)	-178.736	D23	D(1,2,3,6)	-174.799
			D24	D(22,2,3,4)	165.1552
			D25	D(22,2,3,6)	-14.3195
			D26	D(1,2,22,21)	-51.3523
			D27	D(3,2,22,21)	-161.492
D21	D(2,3,4,5)	-0.685	D28	D(2,3,4,5)	-2.5227
D22	D(2,3,4,7)	179.4904	D29	D(2,3,4,7)	178.8513
D23	D(6,3,4,5)	179.514	D30	D(6,3,4,5)	176.9095
D24	D(6,3,4,7)	-0.3106	D31	D(6,3,4,7)	-1.7165
D25	D(3,4,5,1)	-0.339	D32	D(3,4,5,1)	-0.5885
D26	D(3,4,5,9)	-179.9	D33	D(3,4,5,9)	-178.851
D27	D(7,4,5,1)	179.4743	D34	D(7,4,5,1)	177.9699
D28	D(7,4,5,9)	-0.0862	D35	D(7,4,5,9)	-0.2927
D29	D(3,4,7,8)	1.3257	D36	D(3,4,7,8)	1.5644

Çizelge B.4 (devam ediyor)

D30	D(5,4,7,8)	-178.463	D37	D(5,4,7,8)	-176.784
D31	D(1,5,9,10)	-175.541	D38	D(1,5,9,10)	-173.484
D32	D(4,5,9,10)	3.9841	D39	D(4,5,9,10)	4.6292
D33	D(1,12,14,15)	94.4104	D40	D(1,12,14,15)	102.8589
D34	D(13,12,14,15)	-149.466	D41	D(13,12,14,15)	-140.669
D35	D(16,12,14,15)	-30.6534	D42	D(16,12,14,15)	-21.3299
D36	D(1,12,16,17)	46.2633	D43	D(1,12,16,17)	33.8256
D37	D(1,12,16,18)	165.1834	D44	D(1,12,16,18)	152.4987
D38	D(1,12,16,19)	-78.5573	D45	D(1,12,16,19)	-91.3058
D39	D(13,12,16,17)	-70.9479	D46	D(13,12,16,17)	-83.7116
D40	D(13,12,16,18)	47.9721	D47	D(13,12,16,18)	34.9616
D41	D(13,12,16,19)	164.2314	D48	D(13,12,16,19)	151.157
D42	D(14,12,16,17)	171.1433	D49	D(14,12,16,17)	157.7362
D43	D(14,12,16,18)	-69.9367	D50	D(14,12,16,18)	-83.5906
D44	D(14,12,16,19)	46.3226	D51	D(14,12,16,19)	32.6048
D45	D(12,16,19,20)	65.4811	D52	D(12,16,19,20)	84.4425
D46	D(17,16,19,20)	-58.7269	D53	D(17,16,19,20)	-40.0722
D47	D(18,16,19,20)	-176.276	D54	D(18,16,19,20)	-157.962
			D55	D(16,19,20,21)	-172.028
			D56	D(19,20,21,22)	112.9126
			D57	D(19,20,21,23)	-13.5495
			D58	D(20,21,22,2)	23.5733
			D59	D(23,21,22,2)	157.9181

Çizelge B.5 AA ve AA 5 su bağ ve açıları.

AA	Tanımı	Değeri	O6	Tanımı	Değeri
R1	R(1,2)	1.4503	R1	R(1,2)	1.4492
R2	R(1,5)	1.499	R2	R(1,5)	1.4926
R3	R(1,11)	1.0961	R3	R(1,11)	1.0962
R4	R(1,12)	1.5427	R4	R(1,12)	1.543
R5	R(2,3)	1.3772	R5	R(2,3)	1.3741
R6	R(3,4)	1.4574	R6	R(3,4)	1.4612
R7	R(3,6)	1.2037	R7	R(3,6)	1.2125
R8	R(4,5)	1.3398	R8	R(4,5)	1.3454
R9	R(4,7)	1.3553	R9	R(4,7)	1.3471
R10	R(5,9)	1.3429	R10	R(5,9)	1.3411
			R11	R(6,21)	2.7486
R11	R(7,8)	0.9679	R12	R(7,8)	0.9881
R12	R(9,10)	0.9662	R13	R(9,10)	0.9675
R13	R(12,13)	1.0957	R14	R(12,13)	1.0958
R14	R(12,14)	1.4125	R15	R(12,14)	1.4118
R15	R(12,16)	1.5377	R16	R(12,16)	1.5378
R16	R(14,15)	0.9681	R17	R(14,15)	0.968
R17	R(16,17)	1.0972	R18	R(16,17)	1.0973
R18	R(16,18)	1.091	R19	R(16,18)	1.091
R19	R(16,19)	1.4236	R20	R(16,19)	1.4238
R20	R(19,20)	0.9665	R21	R(19,20)	0.9663
			R22	R(21,22)	0.9761

Çizelge B.5 (devam ediyor)

			R23	R(21,23)	0.9618
A1	A(2,1,5)	103.8706	A1	A(2,1,5)	103.306
A2	A(2,1,11)	107.3903	A2	A(2,1,11)	107.3641
A3	A(2,1,12)	110.2647	A3	A(2,1,12)	110.1854
A4	A(5,1,11)	111.134	A4	A(5,1,11)	111.4518
A5	A(5,1,12)	114.8731	A5	A(5,1,12)	115.2553
A6	A(11,1,12)	108.9825	A6	A(11,1,12)	108.9071
A7	A(1,2,3)	109.5341	A7	A(1,2,3)	109.9342
A8	A(2,3,4)	108.2765	A8	A(2,3,4)	108.5445
A9	A(2,3,6)	123.5798	A9	A(2,3,6)	121.0132
A10	A(4,3,6)	128.1433	A10	A(4,3,6)	130.442
A11	A(3,4,5)	108.8313	A11	A(3,4,5)	107.6955
A12	A(3,4,7)	123.0822	A12	A(3,4,7)	127.3176
A13	A(5,4,7)	128.0862	A13	A(5,4,7)	124.9845
A14	A(1,5,4)	109.4628	A14	A(1,5,4)	110.4974
A15	A(1,5,9)	119.2584	A15	A(1,5,9)	120.0481
A16	A(4,5,9)	131.2774	A16	A(4,5,9)	129.4531
			A17	A(3,6,21)	107.199
A17	A(4,7,8)	108.0078	A18	A(4,7,8)	112.1032
A18	A(5,9,10)	109.8153	A19	A(5,9,10)	109.0178
A19	A(1,12,13)	106.246	A20	A(1,12,13)	106.1477
A20	A(1,12,14)	111.5609	A21	A(1,12,14)	111.6435
A21	A(1,12,16)	111.8838	A22	A(1,12,16)	111.84
A22	A(13,12,14)	107.5337	A23	A(13,12,14)	107.5425
A23	A(13,12,16)	109.0112	A24	A(13,12,16)	108.986
A24	A(14,12,16)	110.3955	A25	A(14,12,16)	110.4641
A25	A(12,14,15)	106.8129	A26	A(12,14,15)	106.9052
A26	A(12,16,17)	110.5946	A27	A(12,16,17)	110.579
A27	A(12,16,18)	108.9891	A28	A(12,16,18)	109.0004
A28	A(12,16,19)	111.3815	A29	A(12,16,19)	111.4405
A29	A(17,16,18)	108.2759	A30	A(17,16,18)	108.2724
A30	A(17,16,19)	111.6841	A31	A(17,16,19)	111.6548
A31	A(18,16,19)	105.7199	A32	A(18,16,19)	105.6971
A32	A(16,19,20)	108.2905	A33	A(16,19,20)	108.3626
			A34	A(6,21,22)	22.106
			A35	A(6,21,23)	121.5283
			A36	A(22,21,23)	107.1834
D1	D(5,1,2,3)	-1.59	D1	D(5,1,2,3)	-1.5169
D2	D(11,1,2,3)	-119.398	D2	D(11,1,2,3)	-119.402
D3	D(12,1,2,3)	121.983	D3	D(12,1,2,3)	122.1289
D4	D(2,1,5,4)	1.1684	D4	D(2,1,5,4)	1.1316
D5	D(2,1,5,9)	-179.21	D5	D(2,1,5,9)	-179.255
D6	D(11,1,5,4)	116.3511	D6	D(11,1,5,4)	116.1197
D7	D(11,1,5,9)	-64.0274	D7	D(11,1,5,9)	-64.2667
D8	D(12,1,5,4)	-119.344	D8	D(12,1,5,4)	-119.108
D9	D(12,1,5,9)	60.2778	D9	D(12,1,5,9)	60.5054
D10	D(2,1,12,13)	175.0218	D10	D(2,1,12,13)	175.4176
D11	D(2,1,12,14)	-68.0709	D11	D(2,1,12,14)	-67.6792
D12	D(2,1,12,16)	56.1603	D12	D(2,1,12,16)	56.6715

Çizelge B.5 (devam ediyor)

D13	D(5,1,12,13)	-68.0517	D13	D(5,1,12,13)	-68.1873
D14	D(5,1,12,14)	48.8557	D14	D(5,1,12,14)	48.7159
D15	D(5,1,12,16)	173.0868	D15	D(5,1,12,16)	173.0666
D16	D(11,1,12,13)	57.3811	D16	D(11,1,12,13)	57.8995
D17	D(11,1,12,14)	174.2884	D17	D(11,1,12,14)	174.8027
D18	D(11,1,12,16)	-61.4805	D18	D(11,1,12,16)	-60.8466
D19	D(1,2,3,4)	1.4516	D19	D(1,2,3,4)	1.381
D20	D(1,2,3,6)	-178.736	D20	D(1,2,3,6)	-178.765
D21	D(2,3,4,5)	-0.685	D21	D(2,3,4,5)	-0.6306
D22	D(2,3,4,7)	179.4904	D22	D(2,3,4,7)	178.8287
D23	D(6,3,4,5)	179.514	D23	D(6,3,4,5)	179.5336
D24	D(6,3,4,7)	-0.3106	D24	D(6,3,4,7)	-1.0071
			D25	D(2,3,6,21)	175.2048
			D26	D(4,3,6,21)	-4.9768
D25	D(3,4,5,1)	-0.339	D27	D(3,4,5,1)	-0.3512
D26	D(3,4,5,9)	-179.9	D28	D(3,4,5,9)	-179.918
D27	D(7,4,5,1)	179.4743	D29	D(7,4,5,1)	-179.826
D28	D(7,4,5,9)	-0.0862	D30	D(7,4,5,9)	0.6068
D29	D(3,4,7,8)	1.3257	D31	D(3,4,7,8)	6.17
D30	D(5,4,7,8)	-178.463	D32	D(5,4,7,8)	-174.459
D31	D(1,5,9,10)	-175.541	D33	D(1,5,9,10)	-175.671
D32	D(4,5,9,10)	3.9841	D34	D(4,5,9,10)	3.8602
			D35	D(3,6,21,22)	179.2861
			D36	D(3,6,21,23)	125.3975
D33	D(1,12,14,15)	94.4104	D37	D(1,12,14,15)	94.1731
D34	D(13,12,14,15)	-149.466	D38	D(13,12,14,15)	-149.772
D35	D(16,12,14,15)	-30.6534	D39	D(16,12,14,15)	-30.9454
D36	D(1,12,16,17)	46.2633	D40	D(1,12,16,17)	46.1398
D37	D(1,12,16,18)	165.1834	D41	D(1,12,16,18)	165.0532
D38	D(1,12,16,19)	-78.5573	D42	D(1,12,16,19)	-78.6744
D39	D(13,12,16,17)	-70.9479	D43	D(13,12,16,17)	-70.9088
D40	D(13,12,16,18)	47.9721	D44	D(13,12,16,18)	48.0046
D41	D(13,12,16,19)	164.2314	D45	D(13,12,16,19)	164.277
D42	D(14,12,16,17)	171.1433	D46	D(14,12,16,17)	171.1467
D43	D(14,12,16,18)	-69.9367	D47	D(14,12,16,18)	-69.9399
D44	D(14,12,16,19)	46.3226	D48	D(14,12,16,19)	46.3325
D45	D(12,16,19,20)	65.4811	D49	D(12,16,19,20)	65.4532
D46	D(17,16,19,20)	-58.7269	D50	D(17,16,19,20)	-58.7567
D47	D(18,16,19,20)	-176.276	D51	D(18,16,19,20)	-176.272

## **ÖZGEÇMİŞ**

Sertan KURNALI, 1979 yılında ZONGULDAK'ta doğdu; İlk, orta ve lise öğrenimini Zonguldak'ta tamamladı; 1996 yılında girdiği Boğaziçi Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'nden 2001 yılında Fizikçi olarak mezun oldu; 2002 yılında Bülent Ecevit Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'nda Yüksek Lisans yapmaya hak kazandı ve 2006 yılında Bilim Uzmanı ünvanını aldı. 2002 yılından beri B.E.Ü. Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünde Araştırma Görevlisi olarak çalışmaktadır.

### **ADRES BİLGİLERİ**

Adres : Bülent Ecevit Üniversitesi  
Fen-Edebiyat Fak. Fiz. Böl.  
67100 ZONGULDAK

Tel : (372) 257 4010

Faks : (372) 257 4181

E-posta : sertankurnali@yahoo.com