

**T.C.**  
**KAFKAS ÜNİVERSİTESİ**  
**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**  
**KİMYA ANABİLİM DALI**

**BAZI TRİFENİL AMİN TÜREVLERİNİN IR, UV VE NMR  
SPEKTRUMLARININ DENEYSEL VE TEORİK OLARAK İNCELENMESİ**

**Ertuğrul ÇİFTÇİ**  
**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**Danışman**  
**Prof. Dr. İsmail ÇAKMAK**

**HAZİRAN-2019**

**KARS**



T.C.  
KAFKAS ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ  
KİMYA ANABİLİM DALI



**BAZI TRİFENİL AMİN TÜREVLERİNİN IR, UV VE NMR  
SPEKTRUMLARININ DENEYSEL VE TEORİK OLARAK İNCELENMESİ**

**Ertuğrul ÇİFTÇİ**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**Danışman**

**Prof. Dr. İsmail ÇAKMAK**

**Haziran-2019**

**KARS**

T.C. Kafkas Üniversitesi Fen Bilimler Enstitüsü Kimya Anabilim Dalı Yüksek Lisans öğrencisi Ertuğrul ÇİFTÇİ'nin Prof. Dr. İsmail ÇAKMAK'ın danışmanlığında yüksek lisans tezi olarak hazırladığı " Bazı Trifenil Amin Türevlerinin IR, UV ve NMR Spektrumlarının Deneysel ve Teorik Olarak İncelenmesi " adlı bu çalışma, yapılan tez savunması sınavı sonunda jüri tarafından Lisansüstü Eğitim Yönetmeliği uyarınca değerlendirilerek 03.12.2019 ile kabul edilmiştir.

.... / ..... /2019

**Adı ve Soyadı**

**İmza**

**Başkan** : Prof. Dr. İsmail ÇAKMAK  
(Tez danışmanı)

**Üye** : Dr. Öğr. Üy. Ümit YILDIKO

**Üye** : Dr. Öğr. Üy. Melahat GÖKTAŞ

Bu tezin kabulü, Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulunun .... / ..... /2019 gün ve .... / ..... sayılı kararı ile onaylanmıştır.

Doç. Dr. Fikret AKDENİZ

**Enstitü Müdürü**

## ETİK BEYAN

Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım Kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmada;

- Tez içinde sunduğum verileri, bilgileri ve dokümanları akademik ve etik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- Tüm bilgi, belge, değerlendirme ve sonuçları bilimsel etik ve ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu,
- Tez çalışmada yararlandığım eserlerin tümüne uygun atıfta bulunarak kaynak gösterdiğimi,
- Kullanılan verilerde herhangi bir değişiklik yapmadığımı,
- Bu tezde sunduğum çalışmanın özgün olduğunu,

bildirir, aksi bir durumda aleyhime doğabilecek tüm hak kayıplarını kabullendiğimi beyan ederim.

**İmza**

**Ertuğrul ÇİFTÇİ**

**Tarih**

## ÖZET

(Yüksek Lisans Tezi)

### BAZI TRİFENİL AMİN TÜREVLERİNİN IR, UV VE NMR SPEKTRUMLARININ DENEYSEL VE TEORİK OLARAK İNCELENMESİ

Öğrenci Adı ve SOYADI

Ertuğrul ÇİFTÇİ

Kafkas Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Kimya Anabilim Dalı

**Danışman: Prof. Dr. İsmail ÇAKMAK**

Bu çalışmada Bazı Trifenil aminler hesaplamalı kimya programında çizilerek teorik hesaplamaları yapılmıştır. 4-Nitro-N-(4-Nitro Fenil)-N-Fenil, Anilin, 4-izopropil-N,N-Bis(4-Nitro Fenil)Anilin, 4-izopropil-N,N-Bis(4-Aminofenil)Anilin, 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin ve 4-Azido-N-(4-Azidofenil)-N-Fenilanilin moleküllerinin geometrik parametreleri, FTIR, <sup>1</sup>H-NMR ve <sup>13</sup>C-NMR'ları hesaplanmıştır. Hesaplamada BYLY6-31G yöntemi kullanılmıştır. Deneysel ve teorik verilerin uyumlu olduğu görülmüştür.

**Anahtar Kelimeler:** Trifenil Amin, Gabedit 2.4.0., BYLY6-31G.

**2019, 80 Sayfa**

## ABSTRAT

(M. Sc. Thesis)

### EXPERIMENTAL AND THEORETICAL INVESTIGATION OF IR, UV AND NMR SPECTRUMS OF SOME TRIFENYL AMIN DERIVATIVES

Öğrenci Adı ve SOYADI

Ertuğrul ÇİFTÇİ

Kafkas University

Graduate School of Applied and Natural Sciences

Department of Chemistry

**Supervisor: Prof. Dr. İsmail ÇAKMAK**

In this study, some triphenyl amines were drawn in the computational chemistry program and their theoretical calculations were made. 4-Nitro-N- (4-Nitro-phenyl) -N-Phenyl, Aniline, 4-isopropyl-N, N-Bis (4-Nitro Phenyl) Aniline, 4-isopropyl-N, N-Bis (4-Aminophenyl) The geometric parameters of the aniline, 4-isopropyl-N, N-Bis (4-azidophenyl) aniline and 4-azido-N- (4-azidophenyl) -N-phenyl aniline molecules, FTIR, <sup>1</sup>H-NMR and <sup>13</sup>C-NMR are calculated. The BYLY6-31G method was used in the calculation. Experimental and theoretical values were in harmony.

**Key Words:** Triphenyl Amine, Gabedit 2.4.0., BYLY6-31G.

**2019, 80 pages**

## ÖNSÖZ

Bu çalışma Kafkas Üniversitesi, Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü öğretim üyesi Prof. Dr. İsmail ÇAKMAK danışmanlığında hazırlanarak Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü'ne Yüksek Lisans Tezi olarak sunulmuştur.

Bilgi ve tecrübeleriyle beni yönlendiren, yüksek lisans öğrenimim boyunca her konuda desteğini gördüğüm değerli hocam Sayın Prof. Dr. İsmail ÇAKMAK'a ve tez çalışmam süresince sorunların aşılmasında bana yol gösterip yardımlarını esirgemeyen arkadaşım Doktora Öğrencisi Ahmet Çağrı ATA'ya teşekkürlerimi sunarım.

Öğrenim hayatım boyunca bana destek veren aileme teşekkür ederim.

**İmza**

**Ertuğrul ÇİFTÇİ**

# İÇİNDEKİLER

	<b>Sayfa</b>
<b>ÖZET</b>	iv
<b>ABSTRACT</b>	v
<b>ÖNSÖZ</b>	vi
<b>İÇİNDEKİLER</b>	vii
<b>ŞEKİLLER DİZİNİ</b>	viii
<b>TABLolar DİZİNİ</b>	xii
<b>SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ</b>	xiii
<b>1. GENEL BİLGİLER</b>	1
1.1. Giriş	1
1.1.1. Hesapsal Kimya	1
1.1.2. Hesapsal Kimyanın Tarihçesi	4
1.1.3. Hesapsal Kimyada Kavramlar	5
1.1.4. Hesapsal Kimyada Kullanılan Yöntemler	6
<b>2. TEORİK HESAPLAMA YÖNTEMLERİ</b>	8
2.1. Moleküler Mekanik Yöntem	8
2.2. Elektronik Yapı Yöntemleri	9
2.2.1. Yarı-deneysel Yöntemler	9
2.2.2. Ab-Initio Yöntemleri	12
2.3. Hartree-Fock (HF) Yöntemi	14
<b>3. GABEDİT</b>	15
<b>4. YÖNTEM VE TEKNİKLER</b>	19
<b>5. BULGULAR</b>	20
<b>6. SONUÇ VE TARTIŞMA</b>	49
<b>7. KAYNAKLAR</b>	50
<b>8. EKLER</b>	52
<b>ÖZGEÇMİŞ</b>	65



## ŞEKİLLER DİZİNİ

### Sayfa

- Şekil 3.1.** Gabedit programında örnek bir molekülün yapısı gösterilmiştir. 18
- Şekil 5.1.** 4-Nitro-N-(4-Nitro Fenil)-N-Fenil Anilin molekülünün üç boyutlu atom yapısı gösterilmiştir. 22
- Şekil 5.2.** 4-Nitro-N-(4-Nitro Fenil)-N-Fenil Anilin molekülünün  $^1\text{H-NMR}$  -  $^{13}\text{C-NMR}$  Deneysel ve Teorik kimyasal kayma grafiği. 23
- Şekil 5.3.** 4-Nitro-N-(4-Nitro Fenil)-N-Fenil Anilin molekülünün  $^1\text{H-NMR}$ -  $^{13}\text{C-NMR}$  Deneysel ve Teorik Hesaplamaları verileri grafikte gösterilmiştir. 23
- Şekil 5.4.** 4-izopropil-N,N-Bis(4-Nitro Fenil)Anilin molekülünün üç boyutlu atom yapısı gösterilmiştir. 24
- Şekil 5.5.** 4-Nitro-N-(4-Nitro Fenil)-N-Fenil Anilin molekülünün  $^1\text{H-NMR}$  –  $^{13}\text{C-NMR}$  Deneysel ve Teorik kimyasal kayma grafiği. 26
- Şekil 5.6.** 4-izopropil-N,N-Bis(4-Nitro Fenil)Anilin molekülünün  $^1\text{H-NMR}$ -  $^{13}\text{C-NMR}$  Deneysel ve Teorik Hesaplamaları verileri grafikte gösterilmiştir. 26
- Şekil 5.7.** 4-izopropil-N,N-Bis(4-Aminofenil)Anilin molekülünün üç boyutlu atom yapısı gösterilmiştir. 27
- Şekil 5.8.** 4-izopropil-N,N-Bis(4-Aminofenil)Anilin molekülünün  $^1\text{H-NMR}$ -  $^{13}\text{C-NMR}$  Deneysel ve Teorik kimyasal kayma grafiği. 29

<b>Şekil 5.9.</b>	4-izopropil-N,N-Bis(4-Aminofenil)Anilin molekülünün $^1\text{H-NMR-}^{13}\text{C-NMR}$ Deneysel ve Teorik Hesaplamaları verileri grafikte gösterilmiştir.	29
<b>Şekil 5.10.</b>	4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün üç boyutlu atom yapısı gösterilmiştir.	31
<b>Şekil 5.11.</b>	4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün $^1\text{H-NMR}$ Deneysel ve Teorik kimyasal kayma grafiği.	35
<b>Şekil 5.12.</b>	4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün $^1\text{H-NMR}$ Deneysel ve Teorik Hesaplamaları verileri grafikte gösterilmiştir.	35
<b>Şekil 5.13.</b>	4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün $\text{DFT}_{\text{HOMO}-1}$ molekülünün atomik orbital bileşimi.	37
<b>Şekil 5.14.</b>	4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün $\text{DFT}_{\text{HOMO}}$ molekülünün atomik orbital bileşimi.	37
<b>Şekil 5.15.</b>	4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün $\text{DFT}_{\text{LUMO}}$ molekülünün atomik orbital bileşimi.	38
<b>Şekil 5.16.</b>	4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün $\text{DFT}_{\text{LUMO}+1}$ molekülünün atomik orbital bileşimi.	38
<b>Şekil 5.17.</b>	4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün $\text{CAM}_{\text{HOMO}-1}$ molekülünün atomik orbital bileşimi.	40
<b>Şekil 5.18.</b>	4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün $\text{CAM}_{\text{HOMO}}$ molekülünün atomik orbital bileşimi.	40
<b>Şekil 5.19.</b>	4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün $\text{CAM}_{\text{LUMO}}$ molekülünün atomik orbital bileşimi.	41

<b>Şekil 5.20.</b>	4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün CAM <sub>LUMO +1</sub> molekülünün atomik orbital bileşimi.	41
<b>Şekil 5.21.</b>	4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin'in moleküler elektrostatik potansiyeli (kotur).	43
<b>Şekil 5.22.</b>	4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin'in moleküler elektrostatik potansiyeli.	44
<b>Şekil 5.23.</b>	4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin Mulliken atomik yükleri.	45
<b>Şekil 5.24.</b>	4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin Mulliken atomik yüklerini karşılaştırılması.	47
<b>Şekil 5.25.</b>	4-Azido-N-(4-Azidofenil)-N-Fenilanilin molekülünün üç boyutlu atom yapısı gösterilmiştir.	48
<b>Şekil 5.26.</b>	4-Azido-N-(4-Azidofenil)-N-Fenilanilin molekülünün <sup>1</sup> H-NMR Deneysel ve Teorik kimyasal kayma grafiği.	50
<b>Şekil 5.27.</b>	4-Azido-N-(4-Azidofenil)-N-Fenilanilin molekülünün <sup>1</sup> H-NMR Deneysel ve Teorik Hesaplamaları verileri grafikte gösterilmiştir.	50
<b>Ek Şekil 1.</b>	4-Nitro-N-(4-Nitrofenil)-N-Fenil Anilin FT-IR Spektrumu.	55
<b>Ek Şekil 2.</b>	4-İzopropil-N,N-Bis(4-Aminofenil)Anilin FT-IR Spektrumu.	56
<b>Ek Şekil 3.</b>	4-İzopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin FT-IR Spektrumu.	57
<b>Ek Şekil 4.</b>	4-Azido-N-(4-Azidofenil)-N-Fenil Anilin FT-IR Spektrumu.	58
<b>Ek Şekil 5.</b>	4-Nitro-N-(4-Nitrofenil)-N-Fenil Anilin <sup>1</sup> H-NMR Spektrumu.	59
<b>Ek Şekil 6.</b>	4-İzopropil-N,N-Bis(4-Aminofenil)Anilin <sup>1</sup> H-NMR Spektrumu.	60
<b>Ek Şekil 7.</b>	4-İzopropil-N,N-Bis(4-Nitrofenil)Anilin <sup>1</sup> H-NMR Spektrumu.	61
<b>Ek Şekil 8.</b>	4-İzopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin <sup>1</sup> H-NMR Spektrumu.	62
<b>Ek Şekil 9.</b>	4-Azido-N-(4-Azidofenil)-N-Fenil Anilin <sup>1</sup> H-NMR Spektrumu.	63

<b>Ek Şekil 10.</b>	4-Nitro-N-(4-Nitrofenil)-N-Fenil Anilin <sup>13</sup> C-NMR Spektrumu.	64
<b>Ek Şekil 11.</b>	4-İzopropil-N,N-Bis(4-Nitrofenil)Anilin <sup>13</sup> C-NMR Spektrumu.	65
<b>Ek Şekil 12.</b>	4-İzopropil-N,N-Bis(4-Aminofenil)Anilin <sup>13</sup> C-NMR Spektrumu.	66



## TABLolar DİZİNİ

	Sayfa
<b>Tablo 2.1.</b> Bazı yarı deneysel hesaplama yöntemleri.	11
<b>Tablo 2.2.</b> Enerji türevlerinden elde edilen fiziksel büyüklükler.	13
<b>Tablo 5.1.</b> 4-Nitro-N-(4-Nitro Fenil)-N-Fenil Anilin molekülünün <sup>1</sup> H-NMR – <sup>13</sup> C-NMR Deneysel ve Teorik Hesaplamalarının karşılaştırılması.	21
<b>Tablo 5.2.</b> 4-izopropil-N,N-Bis(4-Nitro Fenil)Anilin molekülünün <sup>1</sup> H-NMR – <sup>13</sup> C-NMR Deneysel ve Teorik Hesaplamalarının karşılaştırılması.	25
<b>Tablo 5.3.</b> 4-izopropil-N,N-Bis(4-Aminofenil)Anilin molekülünün <sup>1</sup> H-NMR – <sup>13</sup> C-NMR Deneysel ve Teorik Hesaplamalarının karşılaştırılması.	28
<b>Tablo 5.4.</b> 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün <sup>1</sup> H-NMR – <sup>13</sup> C-NMR Deneysel ve Teorik Hesaplamalarının karşılaştırılması.	32
<b>Tablo 5.5.</b> 4-Azido-N-(4-Azidofenil)-N-Fenilanilin molekülünün <sup>1</sup> H-NMR – <sup>13</sup> C-NMR Deneysel ve Teorik Hesaplamalarının karşılaştırılması.	33
<b>Tablo 5.6.</b> 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün <sup>1</sup> H-NMR Deneysel ve Teorik Hesaplamalarının karşılaştırılması.	34
<b>Tablo 5.7.</b> HOMO, LUMO, enerji boşlukları (HOMO – LUMO) ve ilgili 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin (au) moleküler özelliklerinin karşılaştırılması.	39
<b>Tablo 5.8.</b> DFT ile LanL2DZ ait temel set B3LYP / 6-31G (d, p), elektrik hesaplanan dipol momentleri (Debye), (au) polarisability, β bileşenleri ve β tot 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin değerini.	42
<b>Tablo 5.9.</b> Mulliken atomik yükleri DFT ile LanL2DZ B3LYP / 6-31G (d,p) ile hesaplanmıştır.	46
<b>Tablo 5.10.</b> 4-Azido-N-(4-Azidofenil)-N-Fenilanilin molekülünün <sup>1</sup> H-NMR Deneysel ve Teorik hesaplamalarının karşılaştırılması.	49

## SEMBOLLER ve KISALTMALAR DİZİNİ

AM1	:	Austin Model 1			
CCS	:	Hesaplamalı Kimya Yazılımı			
CNDO	:	Complete Neglect of Differential Overlap,			
GUI	:	Grafik Kullanıcı Arabirimi			
HF	:	Hartree-Fock			
INDO	:	Intermediate Neglect of Differential Overlap			
MM	:	Moleküler Mekanik			
MM2	:	Molekül Mekanik Metodu			
MNDO	:	Modified Neglect of Differential Overlap			
NDDO	:	Neglect of Diatomic Differential Overlap			
OM1-2	:	Orthogonalization Method 1-2			
PM3-5-6 :	:	Parametric Model 3-5-6			
QM	:	Kuantum Mekaniği			
QM/MM	:	Quantum Mechanics / Molecular Mechanics			
RM1	:	Recife Model 1			
SAM1	:	Semiempirical	Ab	Initio	Model

## 1. GENEL BİLGİLER

### 1.1. Giriş

#### 1.1.1. Hesapsal Kimya

Teorik kimya kimyanın matematiksel olarak tarifidir. Teorik kimyada hesapsal ve hesapsal olmayan olarak iki alanı vardır. Hesapsal teorik kimya moleküler elektronik yapılarının ve moleküler arası etkileşimi nümerik olarak hesaplaması ile ilgilenir. Hesapsal olmayan kuantum kimyası moleküler reaksiyonların analitik özellikleri ile ilgilenir. Hesapsal kimya teorik kimya yazılımları ile gerçekleştirilir.

Bu yazılımlardan;

- Elektronik yapı tayinleri
- Geometrik optimizasyonları
- Frekans hesaplamaları
- Geçiş yapıları ve reaksiyon yollarının belirlenmesi
- Proteinlerle ilgili hesaplamalar
- Elektron ve yük dağılımı hesaplamalar
- Potansiyel enerji yüzde hesaplamalar
- Kimyasal reaksiyonlarının hız sabiti hesaplaması
- Termodinamik hesaplamalar ( Reaksiyon ısısı, Aktivasyon enerjisi, vs...)

Yukarıda belirtilen hesaplamalar için ab-initio, semi empirical, moleküler mekanik metotları kullanılır. Günümüzde kullanılan teorik hesaplama yöntemleri laboratuvar ortamında sentezlenmemiş ya da sentezlenememiş moleküller için kolay bir şekilde uygulanmakta ve istenen sonuçlar elde edilebilmektedir. Hesapsal kimya, kimyasal sorunların çözümünde, bilgisayarların yardımcı olarak kullanıldığı kimyanın bir dalıdır. Hesapsal kimyada yapılar, moleküller ve katı özelliklerini hesaplayabilmek için, etkili bilgisayar programları kullanılır. Sadece tek bir analizle molekül yapısı, elektron yüklerini, bağ uzunlukları, bağ açıları, enerjiler, dipol moment vb. gibi geniş yelpazede bilgi verebilecek bir metot yoktur. Bazı teorik hesaplamalı çalışmalarda deneysel yöntemlerden daha hassas sonuçlar sağlanmaktadır. Hesaplama yöntemleriyle yapılan çalışmaların sonuçları oldukça güvenilirdir.

Laboratuvar alıřmalarda elde edilen sonuların doėruluėu kiřiye baėlı olarak deėiřebilir. Maliyeti yksek olan deneysel alıřmalar, bilgisayar ortamında kullanılan teorik hesaplama programları ile veriler hazırlanarak kısa sre iinde sonular elde edilebilir. Ancak teorik hesaplamalar genelde deneysel alıřmaların yerini tutamaz. nk bilim insanları iin her zaman doėru ve gvenilir olan sonular deneysel veriler olacaktır. Geleneksel olarak deneysel sonular ile teorik alıřmalarla bilgisayar ortamında elde edilen sonular karřılařtırılıp yorumlanmaktadır. Deneysel alıřma ile aıklanamayan bir sonu teorik alıřmalarla alıřılarak elde edilen veriler yorumlanıp aydınlatılabilmektedir.

Genellikle kimya deneyleri ile elde edilen bilgileri ve bazı durumlarda řimdiye kadar gzden kamıř kimyasal olayları tahmin edilmiřtir. Bu durumda kimyanın birok alanında meydana gelen deėiřiklerde nclk etmiřtir. rneėin; yeni ila yapımı ve malzemelerin tasarımında kullanıldı. Hesaplanan zelliklerin rnek yapısı řunlardır, kesin nispi atomları, istenen durumları ve etkileřim enerjisi, elektronik řarj daėıtımları, dipol ve yksek ok kutuplu moment, titreřimsel frekansları, reaktivite veya diėer spektroskopik miktarlarıdır [1].

Metotlar, statik ve dinamik konum arasında karřılařtırılır ve her durumda, bilgisayarın kullanımı ve diėer aralarla (rneėin, bellek ve disk alanı) alıřma sistemi hızlı bir řekilde artar. alıřılan sistemler tek bir molekl, molekl grupları veya katılar olabilir. Hesapsal kimya yntemleri yksek hassaslıkta ve yaklařık derecede deneysel alıřmalara yakın sonu veren metotlardır. Ayrıca bu yntemler sadece kk sistemler iin uygun bulunmaktadır [2].

Hesapsal yntem yardımıyla kimyanın birok dalı zelliklede organik kimya ile ilgili sorunlar zlmeye alıřılır. Konunun temel esası, 3 ana noktadan oluřmaktadır.

- **Kodların zm;** Hesapsal kimyada kullanılan pek ok kısaltma ve kodlanmış terim mevcuttur. Bunların her birinin ne anlama geldiėinin bilinmesi gerekmektedir.



- **Teknik problemler**; Hesaplamalar programlar yardımıyla yapıldığından, programların nasıl kullanıldığına bilinmesi gerekmektedir.
- **Kalite kontrol**; Yapılan hesaplamaların kalitesinin iyi bilinmesi gerekmektedir.

Birinci kısımda belirtilen temel esas, hesapsal kimyada kullanılan metotların kısaltmalar ile kodlanması sonucu ortaya çıkmıştır. Kullanılan bütün hesapsal metotların kodlar programda gösterilmektedir. Örneğin; MM kodu, moleküler mekanik anlamına gelmektedir. Buna benzer yüzlerce ve hatta binlerce kod bulunmaktadır.

İkinci kısımda ise, iyi bir bilgisayar bilgisine sahip olmanın ne kadar önemli olduğu anlatılmaktadır. Çünkü yapılan hesaplamalar bilgisayarlar tarafından gerçekleştirildiği için, bilgisayar ve program kullanabilme yeteneğinin çok iyi ve hakim olunması gerekir.

Üçüncü kısımda, yapılan hesaplamaların iyi yorumlanabilmesi için konu hakkında iyice araştırılmanın yapılması ve iyi bilgi sahip olunması gerekliliği anlatılmaktadır [3].

Sonuç olarak bilgisayar hesaplamalı moleküler spektroskopisi, kimyasal hesaplamalar sonucunda moleküllerin veya kimyasal reaksiyonların birçok fiziksel özelliğini teorik olarak hesaplayarak moleküllerin yapılarının aydınlatılmasında yardımcı olur. Bu fiziksel özellikler; moleküller, geçiş durumları, bağ veya reaksiyon enerjiler, moleküler yapılar ve orbitaller, çok kutuplu momentler, atomik yükler, elektrostatik potansiyeller, elektronik geçişler (UV spektrumu), titreşim spektrumları, manyetik perdeleme etkileri (NMR spektrumu), kutuplaşabilme yakınlıkları (polarizabilite) ve termokimyasal büyüklükler (entropi, entalpi, oluşum ısısı vb.) örnek gösterilebilir [4,5].

### 1.1.2. Hesapsal Kimyanın Tarihçesi

1927'de, hesaplamalı kimya ile ilgili ilk kuantum mekaniği teorisi, Walter Heitler ve Fritz London tarafından yaratıldı. Hesaplamalı kuantum kimyasının gelişimi sırasında yazılan kitaplar şunlardır: Linus Pauling ve E. Bright Wilson'ın 1935 Uygulamalı Kuantum Mekaniğine Giriş, 1944'te Eyer Walter ve Kimball tarafından Kimya, 1944'te Heitler'in Temel Dalga Mekaniği - Kuantum Kimyası ve Sonrası Uygulamaları ile Coulson'un 1952 ders kitabı Valence'de bu kitaplar kimyagerler için temel referans olarak kullanıldı.

1940'lı yıllarda etkili olan bilgisayar teknolojisinin gelişmesiyle birlikte, kimyacılar için karmaşık olarak görülen atomik sistemler için ayrıntılı dalga denklemlerinin çözümleri hayata geçirilmeye başlandı. 1950'lerin başında, ilk yarı deneysel atomik yörünge hesaplamaları yapıldı. Teorik kimyagerler, dijital bilgisayarların ilk büyük kullanıcıları olmuştur. İngiltere'de dijital bilgisayarların detaylı kullanımı Smith ve Sutcliffe tarafından yapıldı [6].

Ab initio Hartree-Fock hesaplamaları ilk olarak diatomik moleküllerde bir temel Slater orbitaller seti kullanarak, 1956 yılında M.I.T. üniversitesinde gerçekleştirildi. Diatomik moleküller için sistematik çalışmalar minimum temel set ve büyük temel set kullanılarak Ransil ve Nesbet tarafından 1960 yılında yayınlandı [7].

İlk çoklu-atomik hesaplamalar Gaussian orbitaller kullanarak 1950 yıllarında gerçekleştirilmiştir. İlk yapılandırma etkileşim hesaplamaları Cambridge'de 1950 yıllarında Boys ve grubu tarafından Gaussian orbitalleri kullanarak EDSAC adlı bilgisayarda gerçekleştirilmiştir. 1971 yılında, ab-initio hesaplamaları bibliyografyası yayınlandı. Bu yayında büyük molekül olan naftalin ve azulende yer almıştır [8].

1970'li yılların başında, ATMOL, Gauss, IBMOL ve POLYAYTOM gibi etkili ab initio bilgisayar programları, kullanılmaya başlandı. Bu dört programdan, sadece Gaussian

geliştirilmiştir. Bu program günümüzde de, yaygın olarak kullanılmaktadır. Diğer programlar ise, etkinliğini kaybetmiştir. Aynı zamanda, MM2 gibi moleküler mekanik metotları, Norman Allinger tarafından geliştirilmiştir [9].

“Hesapsal kimya” terimi ilk olarak 1970’lerde *Computers and Their Role in the Physical Sciences* kitabında Sidney Fernbach ve Abraham Haskell Taub tarafından önerildi. 1970’li yıllarda, hesapsal kimyada kullanılan yöntemler yeni ortaya çıkan bir bilim dalının bir parçası olarak görülmeye başlanmıştır. *The Journal of Computational Chemistry* dergisi ilk olarak, 1980 yılında yayınlanmaya başlamıştır. [10-11].

### **1.1.3. Hesapsal Kimyada Kavramlar**

Teorik kimya terimi, kimya matematiğidir. Fakat hesapsal kimya bilgisayar ile birlikte matematiksel yöntemlerin birlikte kullanılması ile oluşmuştur. Hesapsal kimyacılar bazı gelişmelerle, tam relativistik Dirac denklemi çözümünde ilerlemeler kaydetmiş olmalarına rağmen, genellikle non-relativistik Schrödinger denklemini çözmek için uğraşırlar. [12].

İlke olarak, Schrödinger denklemi ile zamana bağlı veya zamandan bağımsız formunun iki eşitliğide çözmek mümkündür. Fakat uygulamada, bu çok küçük sistemler dışında uygulaması çok zordur. Hesapsal kimyada mevcut algoritmaların moleküllerin yapıları düzenli bir şekilde hesaplanır. En az 40’a kadar elektron bulduran moleküllerin özelliklerini hesaplamak mümkündür. Hesaplanan enerjiler için hatalar birkaç kJ/mol’den daha az aralıklarda gösterilebilir. (Molekül geometrilerinde bağ uzunlukları ve açıları, birkaç pikometre ve derece hata ile hesaplanabilir.) Çok büyük molekül elektron içerenler için hesapsal işlemi ise yaklaşık bir değer olarak hesaplanarak gerçekleştirilir [13].

Büyük moleküllerde, yaklaşık sonuçlar veren yarı-deneysel yöntemlerle de çalışılabilir. Hatta büyük moleküller klasik mekanik metotlarıyla detaylı bir şekilde incelenebilir. Bu

yöntemler moleküler mekanik olarak adlandırılır. Büyük komplekslerin küçük parçaları ile kuantum mekaniği (QM) ve geri kalan kısım ile ise, moleküler mekanik (MM) yöntemleri ilgilenir.

Teorik Kimyada kimyacılar, fizikçiler ve algoritma geliştirici matematikçiler bilgisayar programları ile atomik ve moleküler özellikleri, aynı zamanda kimyasal reaksiyonlar için reaksiyon yollarını kullanarak moleküllerin yapısı aydınlatılabılır. Hesapsal kimyacılar ise, mevcut şuan ki teknoloji, bilgisayar programları ile özel kimyasal sorulara cevap bulabilmek ve molekül yapılarının aydınlatılması konusunda teorik metotları kullanırlar.

Hesapsal kimyanın teorik kimyadan farklı iki yönü şudur:

- Hesapsal çalışmalar, spektroskopik piklerin kaynağı gibi deneysel veriler sonucunda moleküllerin yapısını anlamlandırmaya yardımcı olmak için veya laboratuvar deneysel sürecin başlangıç noktası saptamak için gerekebilir.
- Bilgisayar hesaplamaları bugüne kadar tamamen laboratuvar ortamında sentezlenmemiş ve öngörülmemiş molekülleri tahmin etmek için veya deneysel yollarla reaksiyon mekanizmaları bulmak ve ortaya çıkarmak için çalışmalar yürütülebilir [13].

#### **1.1.4. Hesapsal Kimyada Kullanılan Yöntemler**

Tek bir molekül formülü, moleküler izomerlerin yapısının aydınlatılmasına yeterli olabilir. Her izomer enerji yüzeyinde yerel minimum enerji adı verilen ve toplam enerjiden gelen koordinatların bir fonksiyonu olarak oluşturulur. Minimum lokal enerji bütün yer değiştirme enerji artışına yol gösteren sabit bir noktadır. Minimum lokal enerji, küresel minimum ve en kararlı izomere benzeyen olarak adlandırılır. Her iki yönde toplam enerjide düşüşe sebep olan belirli bir koordinat değişimi varsa, sabit nokta geçiş yapısıdır ve koordinat, reaksiyon koordinatıdır. Bu sabit noktaları belirleyici durum geometri optimizasyonu olarak adlandırılır.

Geometri optimizasyonu ile moleküler yapının tespiti, atomik koordinatları mevcut olan enerjinin birinci türevinin hesaplanması için kullanılan etkili yöntemlerden sonra sıradan olmuştur. Eğer harmonik hareket tahmin edilecekse, titreşim frekansının ilgili ikinci türevlerinin değerlendirilmesi gerekmektedir.

Frekanslar, ikinci türevleri içeren Hessian matrisi öz değerler ile ilgilidir. Eğer öz değerlerin tümü pozitifse, frekanslar doğrudur ve sabit noktası yerel minimumdur. Eğer öz değerlerden biri negatifse, sabit nokta geçiş yapısıdır. Birden fazla öz değer negatif ise, sabit nokta daha karmaşıktır ve genellikle daha az etkilidir. Toplam enerji, Schrödinger denkleminin zamana bağlı yaklaşık çözümleridir ve genellikle relativistik koşullar içermeden belirlenir. Elektronik ve nükleer hareketleri ayırmasını sağlar. Born-Oppenheimer yaklaşımı kullanılarak yapılır.

Böylece Schrödinger denkleminin basitleştirilmesi yapılır. Yoğunluk fonksiyonel yöntemi ve yarı-deneysel yöntemlerinin başlıca içeriği değişkendir. Çok büyük sistemler için, göreceli toplam enerji moleküler mekanik yöntemleri kullanılarak karşılaştırılabilir [14].

## 2. TEORİK HESAPLAMA YÖNTEMLERİ

### 2.1. Moleküler Mekanik Yöntem

Moleküler mekanik yöntemlere kuvvet alanı yöntemi olarak da adlandırılır. Moleküllerin yapı ve özelliklerini yorumlamak için klasik fizik yasalarını kullanır. Moleküler mekanik hesaplamalarda moleküler sistemlerin çekirdek etkileşimleri esas alınır ve molekül elektronları hesaba katılmaz [15].

Moleküler mekanik yöntemlerde organik molekülleri apolar çözeltilerde araştırarak çok net sonuçlar vermiştir. Bu yöntemler arasında; Atom ve moleküllerin bağlanma, açılış, bükme, burulma, bağlanma (dağılım, değişme, itme ve elektrostatik etkileşim) enerjilerini temsil etmek için basit analitik işlevler kullanır. Bu analitik özelliklerin ve bunların birinci ve ikinci türevleri hızlı ve verimli bir şekilde değerlendirilir ve böylece bu yöntem daha büyük moleküllere uygulanır [16].

HYPERCHEM, QUANTA, SYBYL, ALCEMY, ECEPP, AMBER, CHARMM, MM<sub>x</sub>, BIO+ ve OPLS gibi birçok moleküler mekanik yöntemi hali hazırda mevcuttur. Bu programlar çok hızlıdır ve güvenilir bir şekilde temel haldeki bir sistemin enerjilerini hesaplayarak hassas sonuçlar elde edilebilir. Dezavantajı ise bir reaksiyon sisteminin modellenemesi ve bağ oluşumu veya parçalanmasını içeren işlemlerin gerçekleştirilememesidir[17].

## 2.2. Elektronik Yapı Yöntemleri

Kantitatif mekanik hesaplamalarda, temel kuantum mekanik yasaları kullanılır. Kuantum mekaniğindeki bir molekülün enerjisi gibi birçok fiziksel özelliğe, karşılık gelen Schrödinger denkleminin çözülmesiyle elde edilir. Enerjinin büyüklüğü ve molekülün diğer özellikleri,

$$H_{\psi} = E_{\psi} \quad (2.1)$$

Schrödinger denklemi tarafından verilir. Çok küçük sistemler dışında, Schrödinger denklemi, günümüzde büyük moleküller için kesin ve eksiksiz bir çözüm bulunmamasına rağmen bazı matematiksel yaklaşımlarla bu denklemin yaklaşık çözümü elde edilir. Elektronik yapı tipleri; yarı deneysel (semi empirical) ve ab initio yöntemler olarak iki kısma ayrılır.

### 2.2.1. Yarı-deneysel Yöntemler

Bu yöntemlerde, hesaplamayı kolaylaştırmak için deneysel çalışmalardan elde edilen bazı parametrelerin kullanılmasına gerekmektedir ve hesaplamalarda kullanılan parametreler, incelenen moleküler yapıları için uygun olduğundan, Schrödinger denkleminin yaklaşık çözümü ile yapılan hesaplamalarda daha iyi veriler elde etmek mümkündür. Ayrıca, moleküler sistemdeki tüm orbitallerin küresel simetrik kabul edildiğinden ve sadece değerlik elektronları göz önüne alındığından, hesaplama süresi ab initio yöntemlere oranla daha kısa sürede gerçekleşir. Bundan dolayı yüzlerce atom içeren büyük moleküllerin optimizasyonları ve bazı fiziksel özellikleri için yaygın olarak kullanılmaktadır. Yarı deneysel yöntemlere örnek olarak; CNDO (Complete Neglect of Differential Overlap), INDO (Intermediate Neglect of Differential Overlap), MNDO (Modified Neglect of Differential Overlap), NDDO (Neglect of Diatomic Differential Overlap), AM1 (Austin Model 1), OM1-2 (Orthogonalization Method 1-2), PM3-5-6 (Parametric Model 3-5-6), RM1 (Recife Model 1), QM/MM (Quantum Mechanics/Molecular Mechanics), SAM1 (Semiempirical Ab Initio Model 1) ve benzeri yöntemler verilebilir.

Yarı deneysel metotlar, HF hesaplamalarını daha da basite indirgemek için deneysel sonuçlardan üretilen parametreleri hesaplamalarda kullanır. Basitleştirme çeşitli basamaklardan oluşabilir.

- Hamilton'un basitleştirmesi
- Bazı integralleri değerlendirerek
- Dalga fonksiyonun basitleştirilmesi

Yarı deneysel yöntemler hesaplamalarda kuantum fiziğini kullanır ve bu metotlarda deneysel sonuçlardan, empirik parametreler türetilirken, parametreler için deneysel veya ab-initio metotlarından veri almak gerekir. Bu metotlar, çoğunlukla orta boyuttaki sistemler için kullanılır (yüzlerce atom içeren moleküller). Bu bölümün devamında hesaplamalarda kullandığımız semi-empirik yöntemler kısaca açıklanmıştır [19].



**Tablo 2.1.** Bazı yarı deneysel hesaplama yöntemleri.

<b>Kısaltma</b>	<b>Tanım</b>
<b>CNDO</b>	Complete Neglect of Differential Overlap. SCF LCAO moleküler orbital yaklaşımına dayanan, tarafından geliştirilen ilk yarı deneysel moleküler orbital yöntemidir.
<b>INDO</b>	Intermediate Neglect of Differential Overlap. Özellikle singlet ve triplet yarılımlarında çok iyi sonuçlar verir.
<b>MINDO/3</b>	Modified INDO. Olusum ısılarında doğruya yakın sonuçlar verir.
<b>NDDO</b>	Neglect of Diatomic Differential Overlap. Farklı atomlar üzerindeki orbitaller arasındaki örtüsmeyi ihmal eder.
<b>MNDO</b>	Modified Neglect of Diatomic Differential Overlap. NDDO yaklaşımına benzer. Temel durum özellikleri üzerine odaklanmıştır; çoğunlukla olusum ısı ve geometriler. Bu yöntemi geliştirmek için 39 bileşikten deneysel veri kullanılmıştır.
<b>AM1</b>	Austin Model 1. MNDO yönteminin çekirdek içindeki itme fonksiyonlarında küçük bir değişiklikle moleküldeki büyük itmeleri ortadan kaldırmak için yaratılmıştır.
<b>PM3</b>	MNDO-PM olarak adlandırılan MNDO'nun üçüncü parametresi olduğunu göstermek için PM3 şeklinde gösterilen yöntemdir. Aynı anda birden fazla eleman için parametreleri optimize edebilen bir yaklaşımdır.
<b>PM6</b>	Bütün ana elementler ve geçiş metalleri için yeni ve daha hassas yöntemdir.

### 2.2.2. Ab-İnitio Yöntemleri

Hesapsal kimyanın kullanıldığı programlar, değişik kuantum kimyası metotlarına dayanmakta ve bu yöntemler ise Schrödinger eşitliğini çözer ve moleküler Hamiltonian ile ilgilidir. Denklemlerinde herhangi bir deneysel ve yarı deneysel parametreler içermeyen, bu metotlar ab-initio metotları olarak gösterilmektedir. En basit ab-initio elektronik yapı hesap tipi Hartree-Fock (HF) tablosudur ve buna bağlı olarak da elektron-elektron bağlantılı olan iticilik hesaplanmaz. Sadece ortalama etki dikkate alınır. Temel setin hacmi büyüdükçe enerji ve dalga fonksiyonu Hartree- Fock limiti adı verilen limite eğilimindedir. Birçok hesaplama tipi Hartree-Fock hesaplamasıyla başlar. Ardından elektron-elektron itişini doğrular. Bu aynı zamanda elektronik korelasyon olarak da tanımlanır [20].

Moleküler mekanik ve yarı deneysel yöntemlerden farklı olarak, Ab initio yöntemlerinde farklı parametreler için ışık hızı, Planck sabiti, çekirdek ve elektronların kütlesi gibi temel fiziksel sabitler haricinde deneysel parametreler kullanılmamıştır [21]. Bu yöntemler kuantum mekanik temellere dayandığından, moleküler yapı ve özellikleri hesaplanabilir. Bu nedenle, hesaplama süresi moleküler mekanik yöntemlere göre çok daha yüksektir. Hesaplama süresini azaltmak için moleküler yapı geometrilerinde ve kullanılan bazı parametrelerde sadeleştirmeler yapılabilir. Ancak bu sadeleştirmeler, kesin olmayan sonuçların elde edilmesine sebep olur. Hesaplama süresi, moleküler sistemi içeren elektron sayısına bağlıdır.

Hartree-Fock (HF) teorisi kullanılan ab initio yöntemlerinde, elektron korelasyonları göz ardı edilir ve bu korelasyonlar ortalama bir değer olarak dikkate alınır. Bu yaklaşım, HF hesaplamalarının bazı moleküler sistemleri için daha az doğrulukla sonuçlanır. Buna rağmen günümüzde ab initio yöntemler, yüzlerce atomlardan oluşan karmaşık moleküler sistemler için yaygın bir şekilde kullanılmaktadır.

Titreşim spektrumlarının ve moleküllerin kuvvet alanlarının ab initio yöntemleriyle hesaplanması, 1969'da Pulay çalışmasıyla başlar. çalışmasıyla başlar [22]. Çok atomlu moleküllerin kuvvet alanlarının hesaplanmasında *gradyent metodu* kullanarak yaklaşık sonuçlar elde etmiştir. Pulay'ın bu çalışmasından sonra Hartree-Fock'da atomlara etki eden kuvvetlerin analitik olarak ab initio yöntemlerinde elde edilebileceğini göstermiştir [23]. Moleküler sistemin enerjisinin ikinci ve daha yüksek dereceli analitik türevlerle elde edilebilmesi, kuantum mekaniksel hesaplama yöntemlerinin gelişimine sebep olmuştur. Bu enerji türevlerinden elde edilen fiziksel büyükler Tablo 2.2'de verilmektedir.

**Tablo 2.2.** Enerji türevlerinden elde edilen fiziksel özellikler.

Enerji Türevleri	Fiziksel Özellikler
$\frac{\partial E_e}{\partial R}$	Atomlara etki eden kuvvetler, molekülleri geometrisi, potansiyel enerji yüzeyleri
$\frac{\partial^2 E_e}{\partial R_i \partial R_j}$	Kuvvet sabitleri, temel titreşimlerin dalga sayıları ve spektrumlar
$\frac{\partial^2 E_e}{\partial R_i \partial \varepsilon_\alpha}$	Dipol moment türevleri, harmonik yaklaşımda infrared şiddeti
$\frac{\partial^3 E_e}{\partial R_i \partial \varepsilon_\alpha \partial \varepsilon_\beta}$	Kutuplanabilirlik (polarizibilite) türevleri, harmonik yaklaşımda Raman şiddeti

$E_e$  : toplam elektronik enerji,  $R$  : Atomik koordinatlar,  $\varepsilon$  : elektrik alan bileşeni

Ab initio yöntemleri, moleküler mekaniğin ve yarı deneysel yöntemlerin aksine, hesaplama yönteminde deneysel sonuçları kullanmaz. Ab initio yöntemlerinin hesaplanması, kuantum mekanik yasalarına ve az sayıda fiziksel sabitlere dayanmaktadır:

- Isık hızı
- Elektronların ve çekirdeğin yükü ve kütlesi
- Planck sabiti

Ab initio yöntemleri, bir dizi zor matematiksel hesaplama kullanarak Schrödinger denkleminin çözümünü yapar. Yarı deneysel ve ab initio yöntemleri, hesaplama ücreti ve sonucun duyarlılığı arasında bölünmüştür. Yarı deneysel hesaplamalar nispeten ucuzdur ve moleküler sistemlerin kalitatif tanımlarını sağlar ve sistemler için yapıların ve enerjilerin kantitatif olarak tahmin edilmesi, iyi parametre setleri olduğunda oldukça hassas hale gelir. Ab initio hesaplamaları sistemlerin geniş bir aralığı için yüksek kalitede hassasiyet sağlar.

### **2.3. Hartree-Fock (HF) Yöntemi**

Hartree-Fock (HF) hesapsal kimyada kuantum sistemlerinin enerjisini hesaplamaya yardımcı olan bir yöntemdir. Hartree-Fock denklemleri, elektronların hareketi için sıradan Schrödinger eşitliği olarak düşünülebildiği için her elektronun biraz farklı potansiyel alanda hareket ettiği; sistemin tüm yüklerinden elektrostatik olarak hesaplanan pozitif ve negatif hareketleri araştırılan elektronu çevreleyen bir elektronun büyüklüğüne eşit olan bir değişim yükünün ortadan kaldırılmasıyla düzeltilerek gösterilmiştir. Belirli bir noktadaki çeşitli elektronik dalga fonksiyonları üzerinden yoğunlaştırılmış ve ortalaması alınmış olan değişim yüklerinin ağırlıklı bir ortalamasını oluşturarak, tüm elektronları hareket ettirmek için bir ortalama potansiyel alan oluşturuldu ve Hartree-Fock yönteminin basitleştirilmesi ve tüm elektronların aynı alanda hareket ettiği varsayılarak katıların normal bant resmi ile kabul edilmiştir. Ortalama değişim yükünü, yerel yoğunluğu söz konusu pozisyondaki gerçek yük yoğunluğuna eşit olan bir serbest elektron gazında olması gereken ilgili değerle değiştirebiliriz; Bu, Hartree-Fock yöntemininkine benzer nitelikte hareket eden ortalama potansiyel alan için çok basit bir ifadeyle sonuçlanır. Bu sadeleştirilmiş alan, atomik yapıdaki sorunlara tatmin olunacak sonuçlarla doğrulanabilir ve moleküllerin ve katıların sorunlarına da uyarlanmıştır [18].

### 3. GABEDİT

Gabedit, ön hesaplama ve işlem sonrası dokuz bilgisayarlı kimya yazılım paketine adapte olmuş ve ücretsiz kullanım hakkı sunan bir grafik kullanıcı arayüzüdür. Moleküler sistemleri düzenlemek, görüntülemek, analiz etmek, dönüştürmek ve canlandırmak için araçlar içerir. Konformasyonel bir arama aracı, bir moleküler mekaniği olan yarı-elektriksel potansiyel kullanılarak uygulanır. Input dosyaları Gabedit tarafından desteklenen hesaplamalı kimya yazılımı için oluşturulabilir. İlgilenilen bazı moleküler özellikler, doğrudan hesaplamalı kimya programlarının çıktısından işlenir; diğerleri, gösterilmeden önce Gabedit tarafından hesaplanır. Moleküler orbitaller, elektron yoğunluğu, elektrostatik potansiyel, nükleer manyetik rezonans koruyucu yoğunluk ve diğer volumetrik veri özellikleri gösterilebilir. Bir konvolüsyondan sonra elektronik dairesel dikroizm, UV-görülebilir, kızıl ötesi ve Raman ile hesaplanmış spektrumları oynayabilir. Gabedit, geometri, yüzeyler, konturlar ve renk kodlu düzlemler için bir Povray dosyası üretebilir. Output (çıkıtı) popüler görüntü ve vektör grafik formatı biçimlerine ihraç edilebilir; Program ayrıca animasyon için bir dizi resim oluşturabilir. Kuantum mekanik elektrostatik potansiyeller atomlar üzerindeki kısmi yükler kullanılarak veya multigrad yöntemiyle Poisson denklemi kullanılarak hesaplanabilir. Molekül yükündeki atomlar da hesaplanabilir. Gabedit platformdan bağımsızdır.

Bilgisayar donanımının sürekli hızlandırılması, kimya tasarımı, planlama, sentez ve malzeme bilimi gibi farklı alanlarda çok değerli araçların kuantum kimya programlarını oluşturmuştur. Kuantum kimyası yöntemlerinden gelen tahminler, diğer araştırmalara tamamlayıcı olarak düşünülebilir. Bununla birlikte, uzman olmayanlar genellikle, bilinmeyen kavramların veya karmaşık kullanıcı ara yüzlerinin kullanılması nedeniyle bu araçların kullanılmasından vazgeçirirler. Deneyimli hesaplamalı kimya yazılımı (CCS) kullanıcıları, uzman olmayanların yanı sıra, bu adımı basitleştiren kullanıcı dostu bir ara yüzden faydalanabilir ve uygun bir format içine CCS hesaplarından önemli ve alakalı çıktılarını dağıtır. Bazı CCS sağlayıcıları, belirli bir grafik kullanıcı arabirimi (GUI) geliştirerek ürün kullanımını basitleştirir.

Birçok durumda, belirli bir sistemin optimum çalışması birkaç kuantum kimyası yazılımının kullanılmasını gerektirmektedir, bu yüzden Gabedit, kullanıcının çeşitli kuantum kimyası yazılımlarını kullanarak birden fazla hesaplamayı yönetmesine yardımcı olabilecek tek bir GUI olarak pratik ve avantajlıdır.

Kuantum kimya yazılımları da eğitimde giderek daha fazla kullanılmaktadır. Bir GUI'ye sahip olmak, Gabedit'in kullanımı kolaydır ve bu nedenle, sonuçları analiz etmeye ve hesaplamayı öğrenmeye başlamak için (genellikle oldukça karmaşık olan) veri dosyalarını hazırlamayı öğrenen öğrenciler için bir giriş olarak uygundur. Gabedit bu bağlamda bir öğretim yardımcısıdır.

Gabedit, basit ve güçlü bir uygulamada moleküler yapıları bir araya getirmek ve modifiye etmek için bir paket sağlar. Gamess-US, Gauss, Molcas, Molpro, MPQC, Open Mopac, Orca, PC Gamess ve QChem dahil olmak üzere en popüler CCS için girdiler üretebilir ve ardından uygun CCS'yi çalıştırabilir ve bu hesapların sonuçlarını analiz edebilir. Varsayılan ayarlar, Gabedit'i yeni başlayanlar ve öğrenciler için kolayca erişilebilir kılar, ancak varsayılan ayarlar elbette daha deneyimli kullanıcıya uyacak şekilde uyarlanabilir.

### ***Programa Genel Bakış***

Gabedit;

- Çeşitli CCS'ler aracılığıyla kuantum kimyası yöntemlerinden elde edilen sonuçların üretimini kolaylaştırmak.
- Bu sonuçların kapsamlı bir analizini sağlamak için bir grafik kullanıcı arabirimi GUI geliştirdi.

Gabedit destekli CCS paketlerinden herhangi birinin input dosyasını yapabildiği bir moleküler geometri oluşturur. Daha sonra seçilen CCS'yi çalıştırır ve karşılık gelen çıktıların bir analizini sağlar.

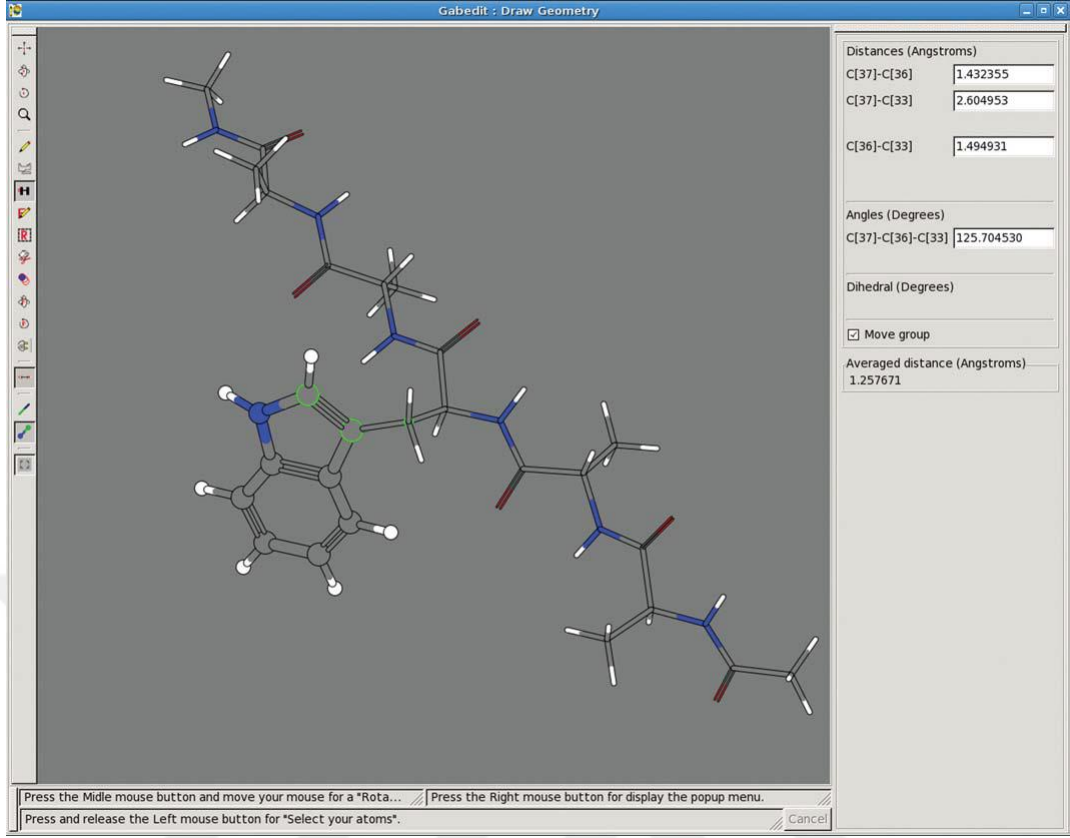
Gabedit, molekül atomunu atomla veya parçalara bölünerek inşa edilebilir. Geometri inşa ediciler aynı zamanda bu bölümde tartışarak çeşitli formatlardan geometrileri okuyabilirler. Geometri oluşturulduktan sonra, kullanıcılar Gabedit tarafından desteklenen herhangi bir CCS için bir input dosyalarını oluşturabilir. Gabedit bir metin editörü içerir ve input CCS verileri modifikasyon gerektirir. Kullanıcı, CCS işini

Gabedit'in grafik ara biriminden yerel bilgisayarda veya uzak ana sunucuda çalıştırabilir.

Gabedit'in en güçlü özellikleri, CCS output dosyaları üzerinde yaptığı analiz ile ilişkilidir. Uygun görselleştirme, sonuçların doğru yorumlanması için yardım etmek için kritiktir ve aynı zamanda değerli bir eğitim aracı sunar. Gabedit, mütevazı donanım gereksinimleriyle gerçek zamanlı görselleştirme sağlamak için ayarlanmıştır, böylece program, bilimsel toplantılarda sonuçları sunmak için standart bir dizüstü bilgisayar üzerinde çalışabilir veya eğitim gösterileri için sınıf ortamlarında kullanılabilir. Gabedit, hem basılı hem de Web tabanlı yayınların yanı sıra ekran tabanlı görsel formatlara uygun çeşitli formatlarda output üretebilir.

### ***Geometri inşa edilmesi;***

Gabedit, üç boyutta kullanıcının bir molekülü inşa etmesini ve incelemesini sağlar (Şekil 1). Gabedit tarafından bir molekülü inşa etmek için çeşitli olanaklar sunulmaktadır. Gabedit'ten lineer moleküller, siklik moleküller, simetri eksenli moleküller, polipeptidler, polinükleik asitler, polisakkaritler ve nanotüpleri inşa etmek için Gabedit'te bir molekül atom-atom, bir parçadan ya da uygulanmış araçlar kullanarak elde edilebilir. Gabedit, 3 boyutta molekülün geometrisini modifiye edebilir. Gabedit'te bulunan bir XYZ editörü koordinatları değiştirmek için kullanılabilir. Gabedit, XYZ formatını bir Z matris formatına dönüştürebilir. Z-matrisi daha sonra atomlar, açılar, dihedral açıları arasındaki mesafenin ve atomlar arasındaki bağlantının değiştirilebildiği bir editör kullanılarak değiştirilebilir. Bağlantıların herhangi bir değişikliğinden sonra mesafeler, açılar ve dihedral değerleri otomatik olarak yeniden hesaplanır. Çoğu hesaplamalı kimya yazılımları, geometri optimizasyon prosedürü sırasında molekülün bazı atomlarını dondurabilir. Gabedit bunu, "hangi atomların dondurulacağını belirlemek için" işlemini seçmek için bir "tıklama" kullanarak yapmasına izin verir [24].



Şekil 3.1. Gabedit programında örnek bir molekülün yapısı gösterilmiştir.



#### 4. YÖNTEM VE TEKNİKLER

Bazı trifenil amin türevlerinin IR,  $^1\text{H-NMR}$  ve  $^{13}\text{C-NMR}$  spektrumlarının deneysel ve teorik olarak incelenmesi kişisel olarak alınan Pentium (R) Dual-Core-CPU T4200 @ 2.00 GHz işlemci 4 GB RAM DELL marka bilgisayarda ChemOffice, ve Gabedit programları kullanılarak yapılmıştır.

Grubumuz tarafından sentezlenmiş olan 4-Nitro-N-(4-Nitro Fenil)-N-Fenil, Anilin, 4-izopropil-N,N-Bis(4-Nitro Fenil)Anilin, 4-izopropil-N,N-Bis(4-Aminofenil)Anilin, 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin ve 4-Azido-N-(4-Azidofenil)-N-Fenilanilin molekülleri Gabedit programında yapılan ab-initio hesaplamaları için her bir molekül için, ilk önce ChemBioDraw programında çizilmiş ve Chem3D programıyla SYBL2 (mol2) yöntemiyle minimize edilmiştir. Minimize edilmiş moleküller Gabedit 2.4.8 programına verilerek her bir yapı için ab-initio hesaplamalar yapılmıştır.

Her bir molekül için ilk önce gaz fazında Hartree Fock (HF) hesaplama metodu ve BLYP6-31G temel seti kullanılarak optimizasyon yapılmıştır.

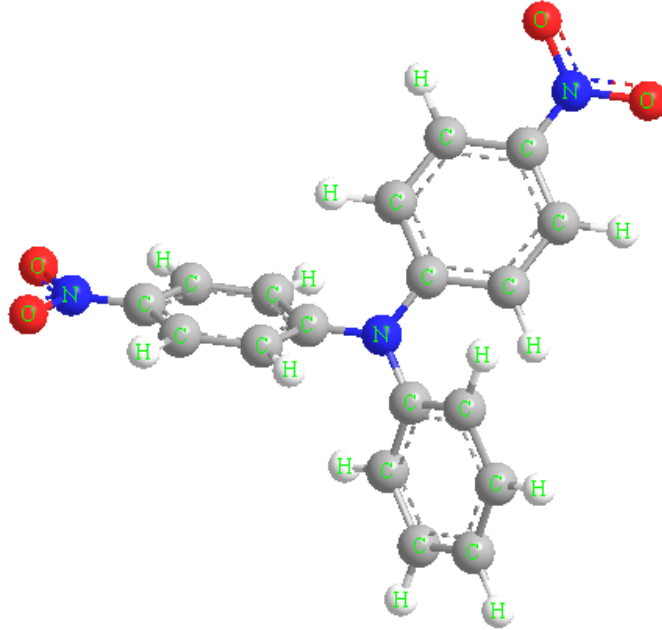
Sonra moleküller için hem gaz fazı hem de sıvı fazında yoğunluk fonksiyonu (DFT) ile BLYP (LYP korelasyon fonksiyoneli kullanılarak Becke'nin üçlü parametresi hibrit fonksiyoneli) ve 6-311++G(d,p) (4-Nitro-N-(4-Nitro Fenil)-N-Fenil, Anilin, 4-izopropil-N,N-Bis(4-Nitro Fenil)Anilin, 4-izopropil-N,N-Bis(4-Aminofenil)Anilin, 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin ve 4-Azido-N-(4-Azidofenil)-N-Fenilanilin için ++ ve d,p seçmeden de 6-311G temel seti kullanılmıştır) optimizasyon ve freq hesabı yapılmıştır.

Moleküllerin FTIR,  $^1\text{H-NMR}$  ve  $^{13}\text{C-NMR}$  spektrumları teorik hesaplamaları yapılarak deneysel sonuçlarla karşılaştırılmıştır.

## 5. BULGULAR

4-Nitro-N-(4-Nitro Fenil)-N-Fenil molekülüne ait Gabedit 2.4.8 programında Ab initio ve yarı-deneysel olarak hesaplanan geometrik olarak çizilen molekülün yapısı Şekil 1’de verilmiştir. Deneysel ve Teorik olarak hesaplanan  $^1\text{H-NMR}$  –  $^{13}\text{C-NMR}$  verileri ve hata oranları hesaplanarak aşağıdaki tabloda gösterilmiştir. Ayrıca Sigma Plot 12.0 grafik çizim programında deneysel ve teorik veriler çizilerek sonuçların birbirine yakın olduğu da görülmüştür. Böylece teorik olarak hesaplanan moleküllerin laboratuvar ortamında sentezlenen moleküllerle neredeyse aynı sonuçları elde edilmesi programın ne kadar etkin bir şekilde çalıştığını göstermiştir ve sonuçların güvenilirliğini ve doğruluğu hakkında yardımcı olmuştur.

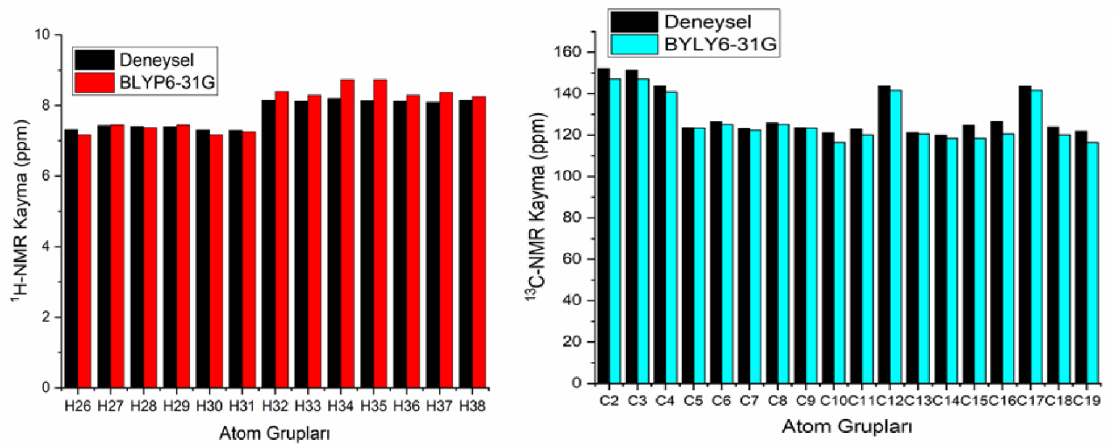
Ekler kısmında gösterilen deneysel verilerin spektrumları verilmiş ve yorumlanması yapılmış ve Gabedit programında teorik olarak hesaplanan moleküllerle karşılaştırılmıştır.



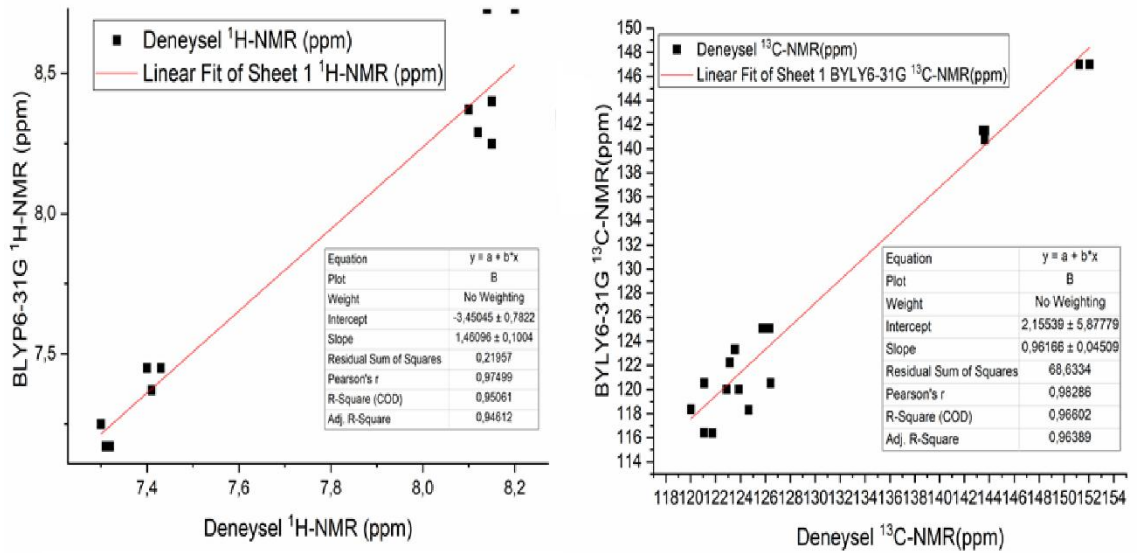
**Şekil 5.1.** 4-Nitro-N-(4-Nitro Fenil)-N-Fenil Anilin molekülünün üç boyutlu atom yapısı gösterilmiştir.

**Tablo 5.1.** 4-Nitro-N-(4-Nitro Fenil)-N-Fenil Anilin molekülünün  $^1\text{H-NMR}$  –  $^{13}\text{C-NMR}$  Deneysel ve Teorik Hesaplamalarının karşılaştırılması.

Adı	Deneysel	BLYP6- 31G	Hata	Adı	Deneysel	BYLY6- 31G	Hata
H26	7.32	7.17	0.15	C2	152.05	146.98	5.07
H27	7.43	7.45	-0.02	C3	151.25	146.97	4.28
H28	7.41	7.37	0.04	C4	143.63	140.73	2.90
H29	7.40	7.45	-0.05	C5	123.54	123.33	0.21
H30	7.31	7.17	0.14	C6	126.34	125.09	1.25
H31	7.30	7.25	0.05	C7	123.15	122.24	0.91
H32	8.15	8.40	-0.25	C8	125.77	125.09	0.68
H33	8.12	8.29	-0.17	C9	123.57	123.34	0.23
H34	8.20	8.73	-0.53	C10	121.07	116.41	4.66
H35	8.14	8.73	-0.60	C11	122.89	120.03	2.86
H36	8.12	8.29	-0.17	C12	143.65	141.5	2.15
H37	8.10	8.37	-0.27	C13	121.09	120.52	0.57
H38	8.15	8.25	-0.15	C14	120.00	118.36	1.64
				C15	124.65	118.33	6.32
				C16	126.43	120.52	5.91
				C17	143.49	141.5	1.99
				C18	123.87	120.03	3.84
				C19	121.75	116.38	5.37

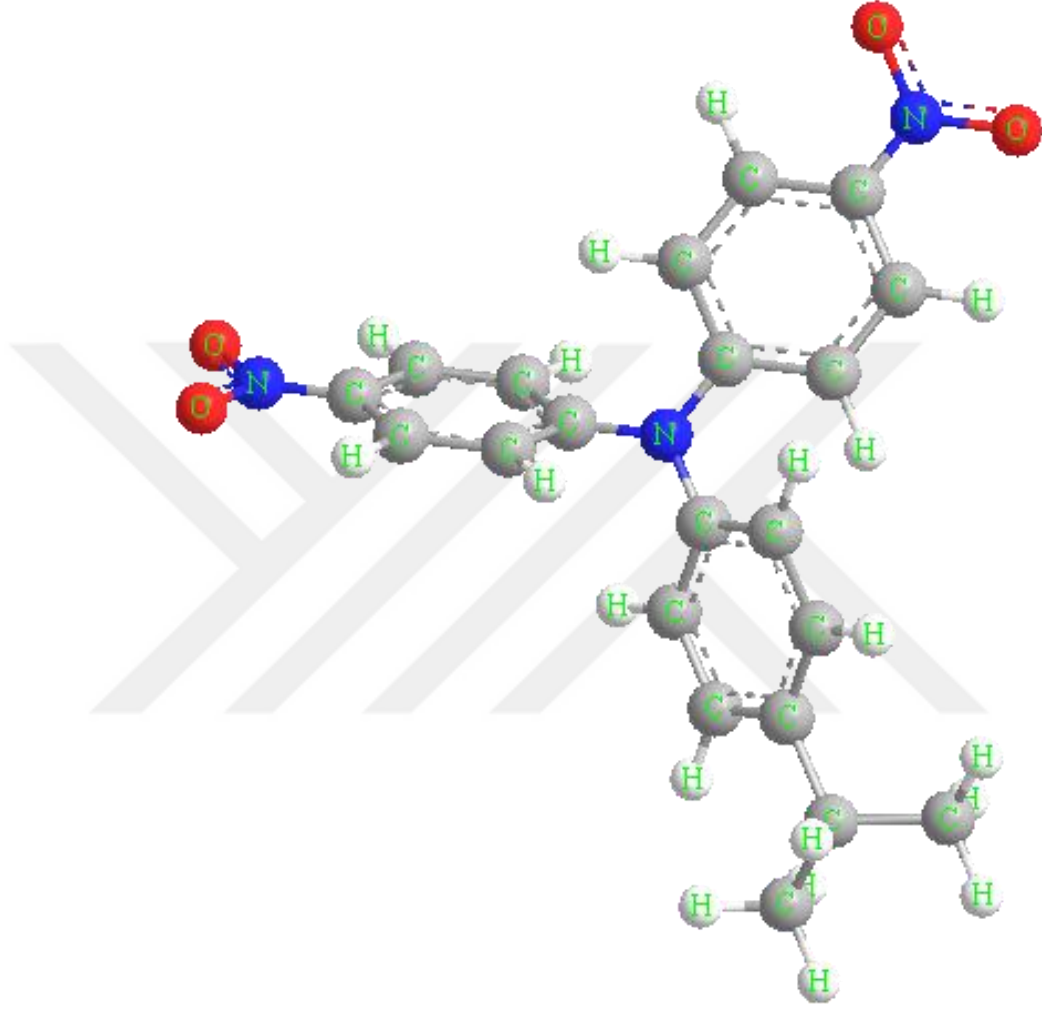


**Şekil 5.2.** 4-Nitro-N-(4-Nitro Fenil)-N-Fenil Anilin molekülünün <sup>1</sup>H-NMR – <sup>13</sup>C-NMR Deneysel ve Teorik kimyasal kayma grafiği.



**Şekil 5.3.** 4-Nitro-N-(4-Nitro Fenil)-N-Fenil Anilin molekülünün <sup>1</sup>H-NMR-<sup>13</sup>C-NMR Deneysel ve Teorik Hesaplamaları verileri grafikte gösterilmiştir.

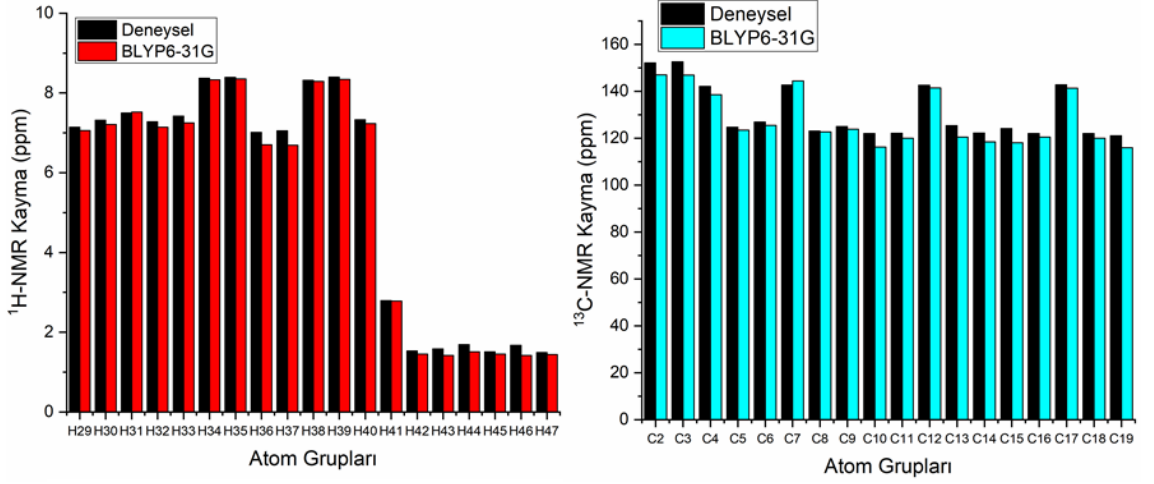
4-izopropil-N,N-Bis(4-Nitro Fenil)Anilin molekülünün; Ekler kısmında gösterilen deneysel verilerin spektrumları verilmiş ve yorumlanması yapılmış ve Gabedit programında teorik olarak hesaplanan moleküllerle karşılaştırılmıştır.



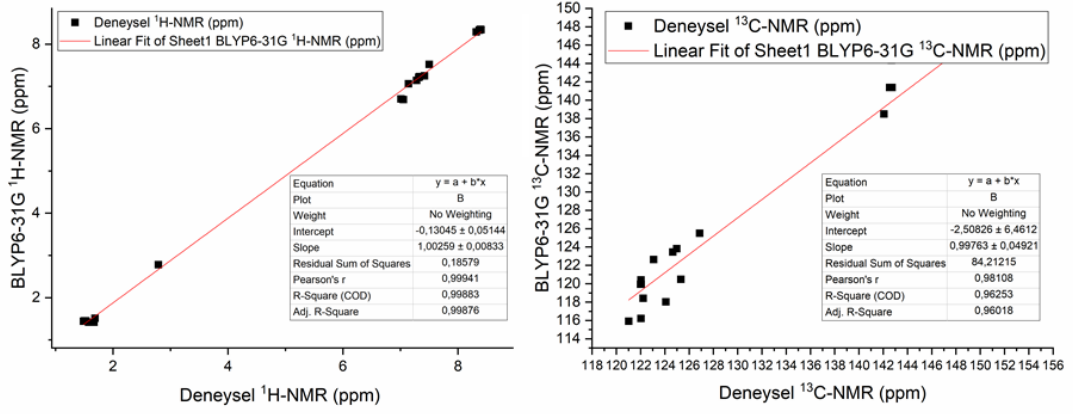
**Şekil 5.4.** 4-izopropil-N,N-Bis(4-Nitro Fenil)Anilin molekülünün üç boyutlu atom yapısı gösterilmiştir.

**Tablo 5.2.** 4-izopropil-N,N-Bis(4-Nitro Fenil)Anilin molekülünün  $^1\text{H-NMR}$  –  $^{13}\text{C-NMR}$  Deneysel ve Teorik Hesaplamalarının karşılaştırılması.

Adı	Deneysel	BLYP6- 31G	Hata	Adı	Deneysel	BYLY6- 31G	Hata
H29	7.14	7.06	0.08	C2	152.09	146.96	5.13
H30	7.32	7.21	0.11	C3	152.53	146.93	5.60
H31	7.50	7.52	-0.02	C4	142.07	138.50	3.57
H32	7.28	7.14	0.14	C5	124.65	123.46	1.19
H33	7.42	7.25	0.17	C6	126.87	125.49	1.38
H34	8.37	8.33	0.04	C7	142.69	144.37	-1.68
H35	8.39	8.35	0.04	C8	123.08	122.64	0.44
H36	7.01	6.70	0.31	C9	124.98	123.82	1.16
H37	7.05	6.69	0.36	C10	122.03	116.22	5.81
H38	8.32	8.29	0.03	C11	122.05	119.95	3.00
H39	8.40	8.34	0.06	C12	142.54	141.38	1.16
H40	7.33	7.23	0.10	C13	125.32	120.48	4.84
H41	2.79	2.78	0.01	C14	122.21	118.41	3.80
H42	1.53	1.45	0.08	C15	124.09	118.02	6.07
H43	1.58	1.42	0.16	C16	122.03	120.41	1.62
H44	1.69	1.51	0.18	C17	142.74	141.37	1.37
H45	1.51	1.45	0.06	C18	122.00	119.95	2.05
H46	1.67	1.42	0.25	C19	121.02	115.91	5.11
H47	1.49	1.44	0.05				

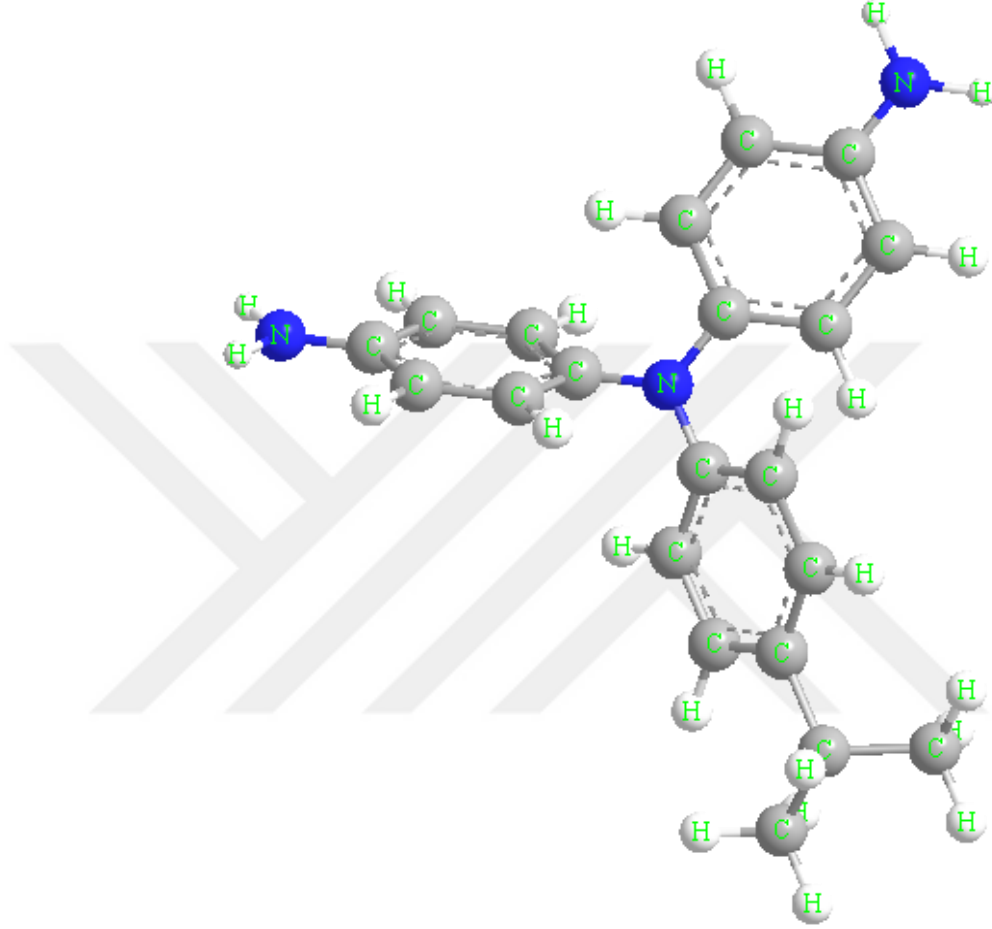


Şekil 5.5. 4-Nitro-N-(4-Nitro Fenil)-N-Fenil Anilin molekülünün <sup>1</sup>H-NMR – <sup>13</sup>C-NMR Deneysel ve Teorik kimyasal kayma grafiği.



Şekil 5.6. 4-izopropil-N,N-Bis(4-Nitro Fenil)Anilin molekülünün <sup>1</sup>H-NMR-<sup>13</sup>C-NMR Deneysel ve Teorik Hesaplamaları verileri grafikte gösterilmiştir.

4-izopropil-N,N-Bis(4-Aminofenil)Anilin molekülünün; Ekler kısmında gösterilen deneysel verilerin spektrumları verilmiş ve yorumlanması yapılmış ve Gabedit programında teorik olarak hesaplanan moleküllerle karşılaştırılmıştır.



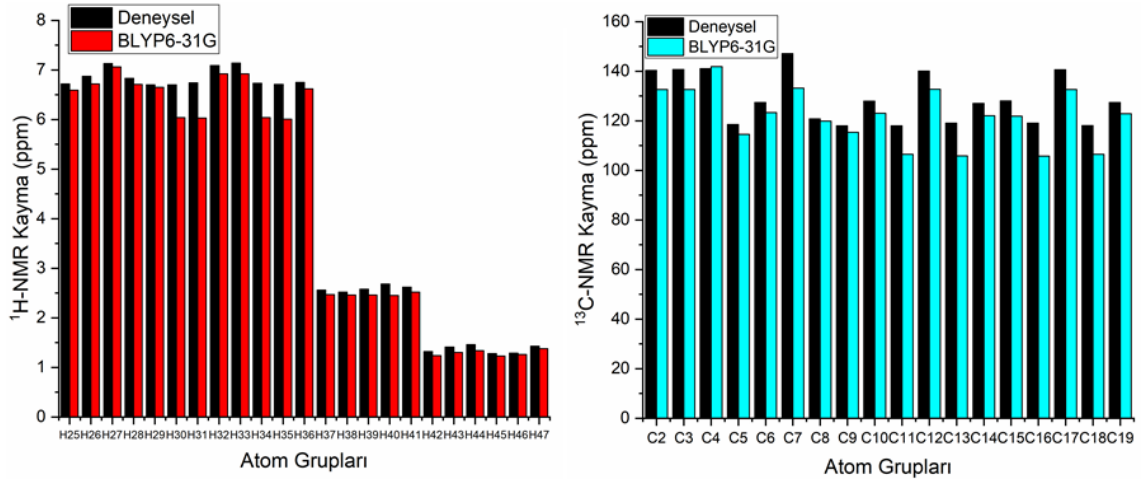
**Şekil 5.7.** 4-izopropil-N,N-Bis(4-Aminofenil)Anilin molekülünün üç boyutlu atom yapısı gösterilmiştir.



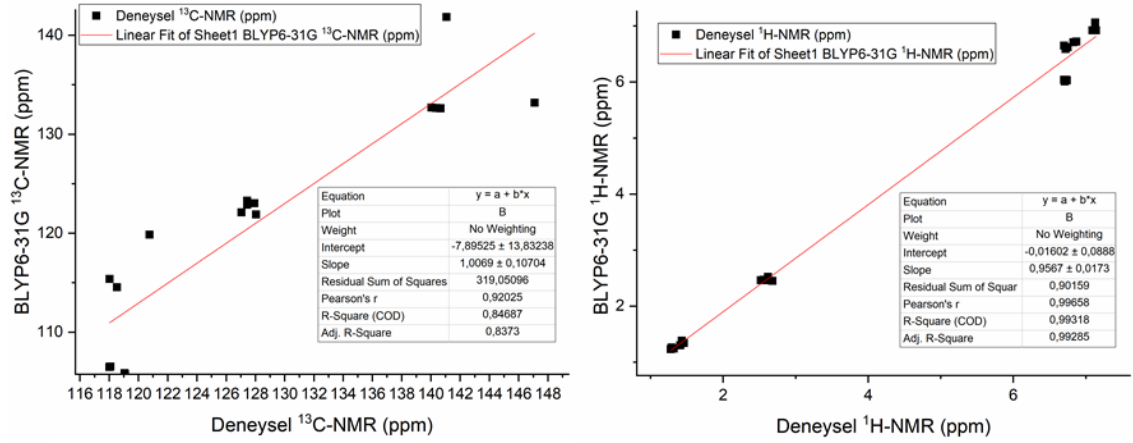
**Tablo 5.3.** 4-izopropil-N,N-Bis(4-Aminofenil)Anilin molekülünün  $^1\text{H-NMR} - ^{13}\text{C-NMR}$

Deneysel ve Teorik Hesaplamalarının karşılaştırılması.

Adı	Deneysel	BLYP6-31G	Hata	Adı	Deneysel	BYLY6-31G	Hata
H25	6.72	6.59	0.13	C2	140.34	132.64	7.70
H26	6.87	6.72	0.15	C3	140.67	132.61	8.06
H27	7.13	7.06	0.07	C4	141.07	141.84	-0.77
H28	6.83	6.71	0.12	C5	118.54	114.54	4.00
H29	6.70	6.65	0.05	C6	127.43	123.29	4.14
H30	6.70	6.04	0.66	C7	147.09	133.18	13.91
H31	6.74	6.03	0.71	C8	120.76	119.85	0.91
H32	7.09	6.92	0.17	C9	118.03	115.38	2.65
H33	7.14	6.92	0.22	C10	127.93	123.03	4.90
H34	6.73	6.04	0.69	C11	118.02	106.49	11.53
H35	6.71	6.01	0.70	C12	140.04	132.7	7.34
H36	6.75	6.62	0.13	C13	119.05	105.87	13.18
H37	2.56	2.47	0.09	C14	127.05	122.1	4.95
H38	2.52	2.46	0.06	C15	128.04	121.89	6.15
H39	2.58	2.46	0.12	C16	119.08	105.75	13.33
H40	2.68	2.45	0.23	C17	140.65	132.63	8.02
H41	2.62	2.52	0.10	C18	118.09	106.52	11.57
H42	1.32	1.24	0.08	C19	127.43	122.89	4.54
H43	1.41	1.3	0.11				
H44	1.46	1.34	0.12				
H45	1.28	1.23	0.05				
H46	1.29	1.26	0.03				
H47	1.43	1.38	0.05				



Şekil 5.8. 4-izopropil-N,N-Bis(4-Aminofenil)Anilin molekülünün  $^1\text{H-NMR}$  –  $^{13}\text{C-NMR}$  Deneysel ve Teorik kimyasal kayma grafiği.

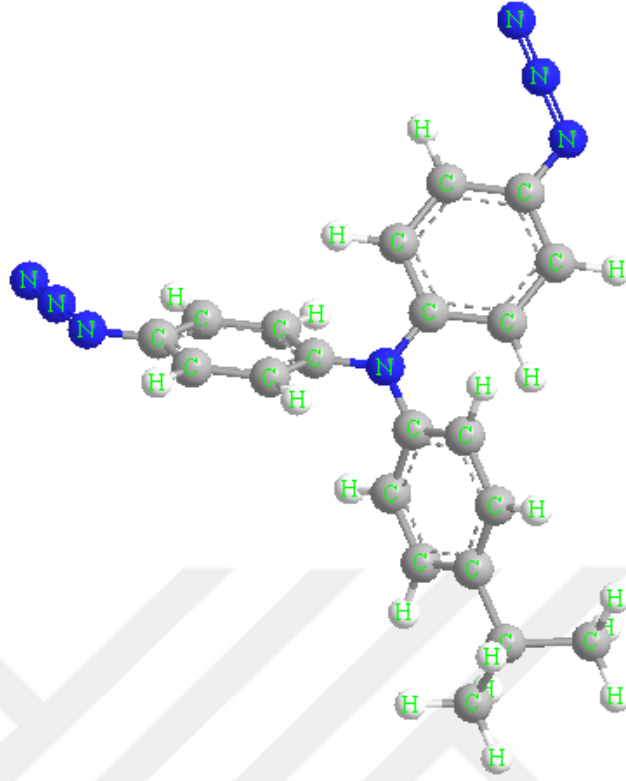


Şekil 5.9. 4-izopropil-N,N-Bis(4-Aminofenil)Anilin molekülünün  $^1\text{H-NMR}$ - $^{13}\text{C-NMR}$  Deneysel ve Teorik Hesaplamaları verileri grafikte gösterilmiştir.

4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün; Ekler kısmında gösterilen deneysel verilerin spektrumları verilmiş ve yorumlanması yapılmış ve Gabedit programında teorik olarak hesaplanan moleküllerle karşılaştırılmıştır.

### **Geometri Optimizasyonu**

4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin en uygun hale getirilmiş temel durum yapısı ve toplam enerji dönüşümü Şekil 5.10' da verilmiştir. DFT-B3LPY / CAM-B3LYP - 6-311G (d,p) temel seti hesaplanan molekülün optimize edilmiş bağ uzunlukları, bağ açıları ve dihedral açıları parametreleri Tablo 5.4 ve 5.5'de listelenmiştir. 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün en uygun hale getirilmiş geometriden teorik hesaplanan tüm değerler verilmiş ve karşılaştırılmıştır. Bu yapının minimum potansiyel enerjiye sahip olduğu anlamına gelir. Fenil halkalarındaki bütün bağ uzunlukları ve bağ açıları normal aralıktadır. C- C bağ mesafelerinin DFT için 1.08363-1.53993 Å ve CAM-B3LYP için 1.08310 - 1.53209 Å aralığında, C-N için ise bu değerler için DFT için 1.41818- 1.41983 Å ve CAM-B3LYP için 1.41386 - 1.41855 Å fenil halkasına bağlı azot atomuna aittir. Aromatik halkadaki C-H uzunlukları 1.08322- 1.09602 Å ve N-N uzunluğu ise 1.13465-1.23075 Å'dur. Tüm C-C-C açıları 118° - 121° arasındadır. Bileşikteki C-C-H açısı 119°-120°, C-C-N 116°-120°, C-N-N 118° ve N-N-N 172°'dir. DFT ve CAM-B3LYP değerleri arasında çok az farklar vardır. Bazı trifenil amin bileşikleri teorik olarak hesaplanan değerler, molekül değişimlerinin geometrisi hakkında fikir verebilir.



**Şekil 5.10.** 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün üç boyutlu atom yapısı gösterilmiştir.

**Tablo 5.4.** Molekülün teorik olarak elde edilen bağ uzunlukları (Å) ve bağ açıları (°).

<b>Bağ Uzunlukları</b>	<b>6-311G</b>	<b>CAM-B3LYP</b>	<b>Bağ Açıları</b>	<b>6-311G</b>	<b>CAM-B3LYP</b>
C1-C2	1.38735	1.38207	C1-C2-C3	120.83823	120.79397
C1-C6	1.39757	1.39065	C1-C6-C5	119.36696	119.44970
C1-H7	1.08322	1.08255	C1-C6-N42	116.50506	116.55052
C6-N42	1.41977	1.41850	C2-C3-C4	118.40597	118.49869
C3-N31	1.41818	1.41386	C6-N42-N43	118.82183	117.74133
N42-N43	1.23075	1.22677	N42-N43-N44	172.98864	173.90410
N43-N44	1.13465	1.12538	C1-C2-H8	119.63556	119.74498
C15-H20	1.08304	1.08251	C6-C1-H7	119.06626	118.99934
C14-H19	1.08460	1.08409	C6-C5-H10	120.54782	120.64902
C11-C12	1.38720	1.38192	C3-N31-C16	120.19963	120.21968
C12-C13	1.39768	1.39078	N31-C3-C2	120.79322	120.71094
C12-H18	1.08323	1.08255	N31-C3-C4	120.80059	120.79019
C13-N45	1.41983	1.41855	N31-C16-C15	120.82049	120.82449
N45-N46	1.23069	1.22673	C25-C26-H30	119.50876	119.46081
N46-N47	1.13468	1.12539	C11-C12-C13	120.33477	120.28904
C24-H29	1.08355	1.08302	C13-C14-H19	120.54168	120.64686
C23-C24	1.39254	1.38757	C12-C13-N45	116.50116	116.54348
C21-C22	1.40111	1.39466	C14-C13-N45	124.13911	124.00989
C22-C32	1.52136	1.51587	C13-N45-N46	118.82376	117.73957
C32-H33	1.09602	1.09473	N45-N46-N47	172.99746	173.90600
C34-H35	1.09413	1.09283	C26-C25-N31	120.64383	120.58889
C34-H36	1.09296	1.09177	C22-C32-C34	111.90613	111.75007
C34-H37	1.09413	1.09308	C32-C34-H36	111.23284	111.26713
C32-C34	1.53993	1.53209	C32-C34-H35	111.24436	110.65762
C32-C38	1.53962	1.53184	C32-C34-H37	111.24436	111.12589
C38-H39	1.09415	1.09308	C34-C32-C38	111.02104	110.94699
C38-H40	1.09298	1.09179	C32-C38-H39	111.31370	111.19158
C38-H41	1.09413	1.09283	C32-C38-H40	111.23292	111.26718
C26-C30	1.08363	1.08310	C32-C22-C21	121.77698	121.57295
C21-H27	1.08489	1.08429	C21-C26-H30	119.99943	120.08057
C23-H28	1.08563	1.08487	C25-N31-C16	119.92012	119.91356

Tablo 5.4. DFT ve CAM-B3LYP / 6-311G (d,p) esasına göre seçilen bileşiğinin optimize edilmiş bağ uzunlukları ve bağ açıları gösterilmektedir. Aralarındaki fark çok azdır ve bu fark iki sistem arasında iyi bir uyumu göstermektedir.

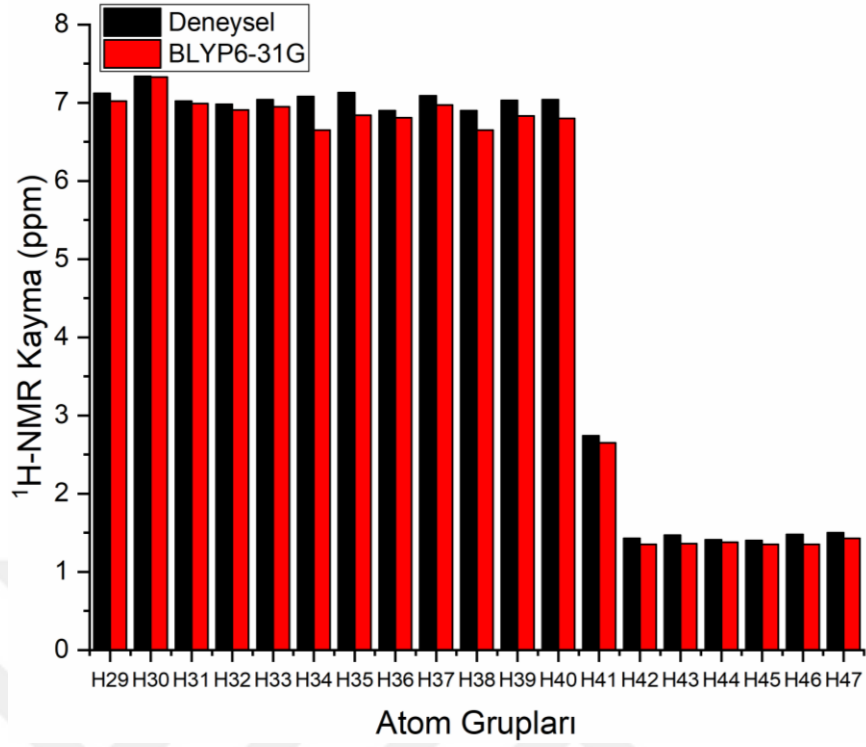
**Table 5.5.** Molekülün teorik olarak elde edilen dihedral bağ açıları (°).

<b>Dihedral Açılı</b>	<b>6-311G</b>	<b>CAM-B3LYP</b>
C1-C2-C3-C4	-0.19481	-0.28253
C1-C6-C5-C4	-0.30431	-0.38371
C1-C6-C5-H10	-179.34130	-179.46581
C1-C6-N42-N43	-179.65500	-179.85042
C6-C1-C2-H8	-179.36800	-179.38684
C6-N42-N43-N44	179.44234	179.75639
H7-C1-C2-H8	-0.29476	-0.26162
H9-C4-C5-H10	-0.12829	-0.11777
C2-C3-N31-C16	138.32142	138.57564
N31-C3-C4-H9	-0.40095	-0.29943
C11-C12-C13-C14	-0.47887	-0.48801
C12-C13-C14-H19	-179.36135	-179.48246
C11-C12-C13-N45	179.54793	179.52180
C12-C13-N45-N46	-179.89562	-179.98344
C13-N45-N46-N47	179.50126	179.75265
N45-C13-C12-H18	0.44360	0.37805
N42-C6-C1-H7	0.41423	0.35927
C24-C25-N31-C16	-43.64461	-43.29803
H27-C21-C22-C23	-179.45792	-179.53699
C22-C32-C34-H35	-176.51710	-176.72973
C22-C32-C34-H36	-56.29107	-56.38985
C22-C32-C34-H37	63.87021	63.71252
C22-C32-C38-H39	-64.44114	-64.15057
C22-C32-C38-H40	55.80680	56.02590
C22-C32-C38-H41	175.98553	176.32233
H35-C34-C32-H33	-59.69236	-59.77104
H33-C32-C34-H37	-179.30505	-179.32879

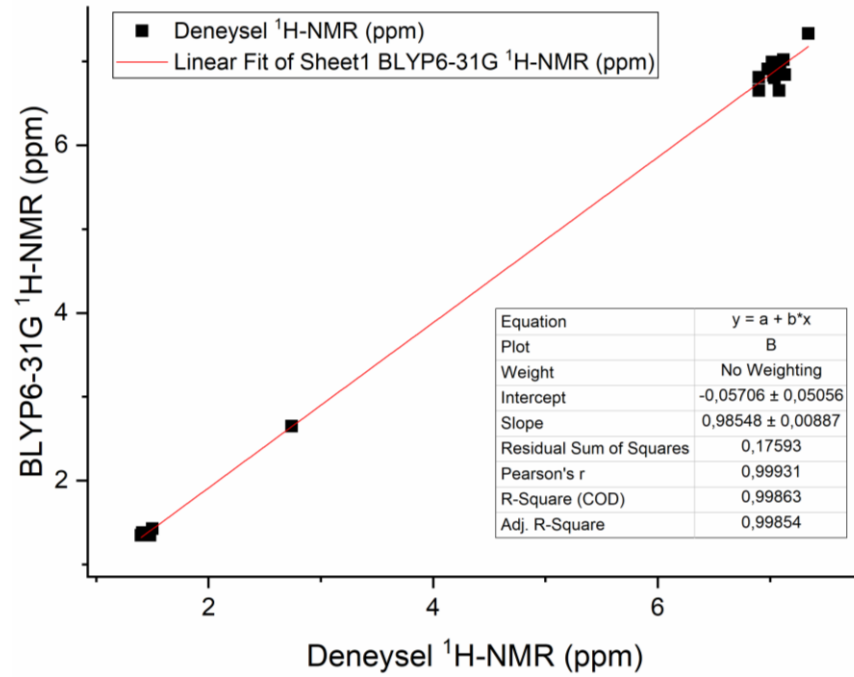
Tablo 5.5. DFT ve CAM - B3LPY / 6-311G (d,p) esasına göre seçilen bileşimin optimize edilmiş dihedral bağ açıları gösterilmektedir. Aralarındaki fark çok azdır ve bu fark iki sistem arasında iyi bir uyumu göstermektedir.

**Tablo 5.6.** 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün <sup>1</sup>H-NMR Deneysel ve Teorik Hesaplamalarının karşılaştırılması.

Adı	Deneysel	BLYP6-31G	Hata
H29	7.12	7.02	0.10
H30	7.34	7.33	0.01
H31	7.02	6.99	0.03
H32	6.98	6.91	0.07
H33	7.04	6.95	0.09
H34	7.08	6.65	0.43
H35	7.13	6.84	0.29
H36	6.90	6.81	0.09
H37	7.09	6.97	0.12
H38	6.90	6.65	0.25
H39	7.03	6.83	0.20
H40	7.04	6.8	0.24
H41	2.74	2.65	0.09
H42	1.43	1.35	0.08
H43	1.47	1.36	0.11
H44	1.41	1.38	0.03
H45	1.40	1.35	0.05
H46	1.48	1.35	0.13
H47	1.50	1.43	0.07



Şekil 5.11. 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün <sup>1</sup>H-NMR Deneysel ve Teorik kimyasal kayma grafiği.



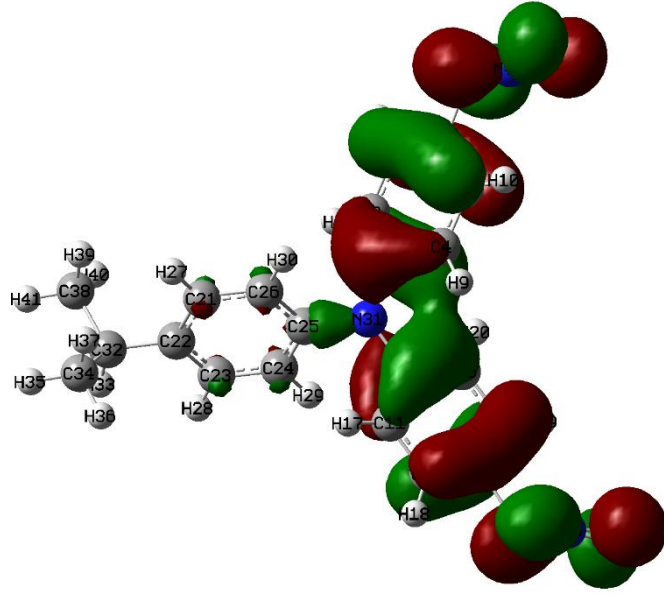
Şekil 5.12. 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün <sup>1</sup>H-NMR Deneysel ve Teorik Hesaplamaları verileri grafikte gösterilmiştir.



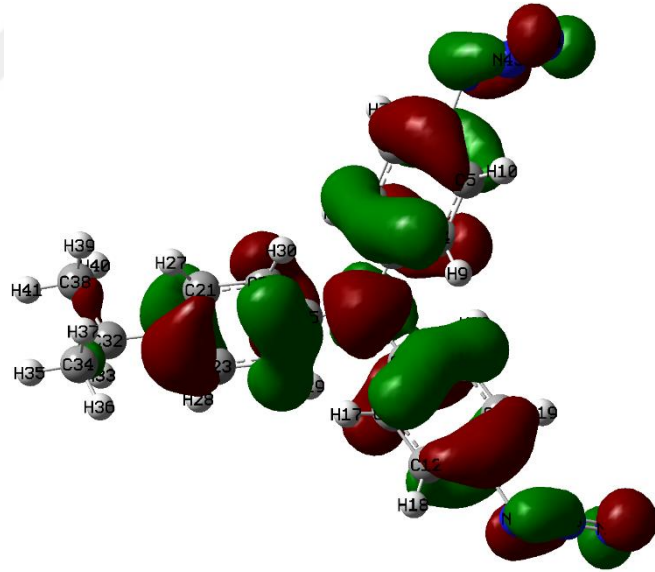
## HOMO ve LUMO Analizi

Bir moleküldeki orbitallerle ilgili ana elektronik parametreler en yüksek dolu moleküler orbital (HOMO) ve en düşük boş moleküler orbitaldir (LUMO) ve bunların enerji açığından oluşmaktadır. HOMO, bir elektron donörü olarak işlev görebilecek en dıştaki (en yüksek enerji) orbitaldeki elektronlardır. LUMO, elektronları kabul etmek için yeterli alana sahip olan ve elektron akseptör olarak hareket edebilen en içteki (en düşük enerji) orbitaldir. Şekiller 5.13.-5.20 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin için HOMO ve LUMO'nun yoğunluk orbital gösterimidir. Ayrıca bileşiğin  $E_{LUMO+1}$  ve  $E_{HOMO-1}$  grafikleri de alınmıştır. Şekilden moleküle ait DFT metodu için  $E_{HOMO}$  -5,3300 eV -  $E_{LUMO}$  -1,4776 eV değeri, CAM-B3LYP metodu için  $E_{HOMO}$  -6,5376 eV -  $E_{LUMO}$  -0,2255 eV değeri hesaplanmıştır. Diğer orbitaller için; DFT metodu için  $E_{HOMO-1}$  -6,6647 eV- $E_{LUMO+1}$  -1,3935 eV değeri, CAM-B3LYP metodu için  $E_{HOMO-1}$  -8.0250 eV -  $E_{LUMO+1}$  -0.01959 eV değeri hesaplanmıştır.

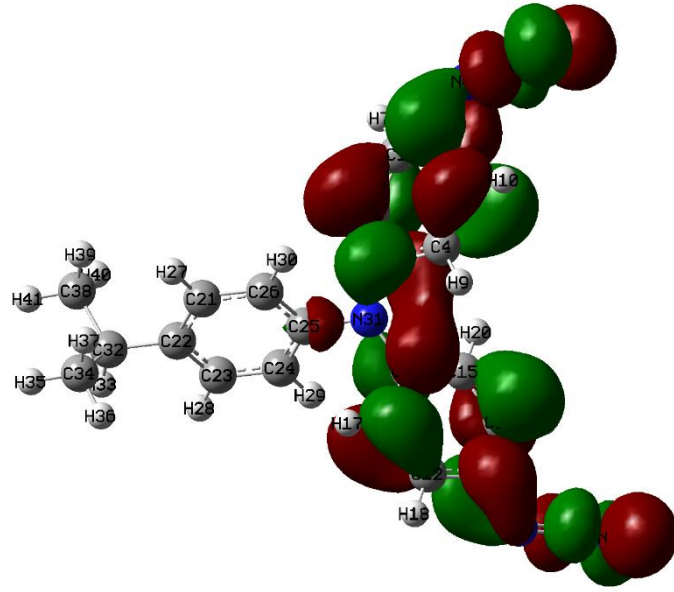
HOMO ve LUMO orbitalleri, molekülün diğer türlerle etkileşime girme şeklini belirler. Ayrıca bant boşluğu, kimyasal reaktivite ve kinetik stabilitenin karakterizasyonuna yardımcı olur. Polarizasyon, sertlik, elektronegatiflik ve küçük bir sınır yörünge boşluğu olan bir molekülün reaktif endekslerini gösterir. Tablo 5.7. de kimyasal reaktivite endekslerini gösterir.



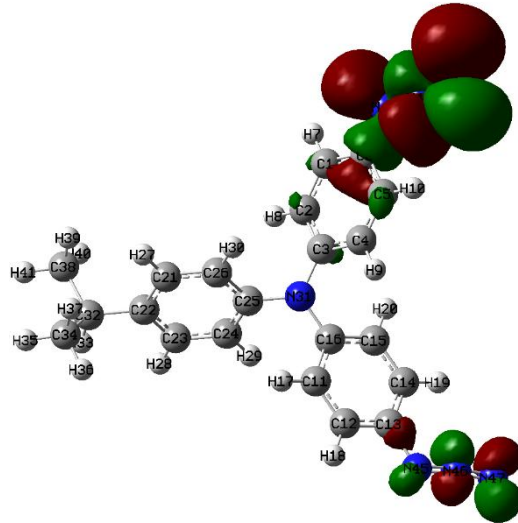
**Şekil 5.13.** 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün  $DFT_{HOMO-1}$  molekülünün atomik orbital bileşimi.



**Şekil 5.14.** 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün  $DFT_{HOMO}$  molekülünün atomik orbital bileşimi.



**Şekil 5.15.** 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün  $DFT_{LUMO}$  molekülünün atomik orbital bileşimi.

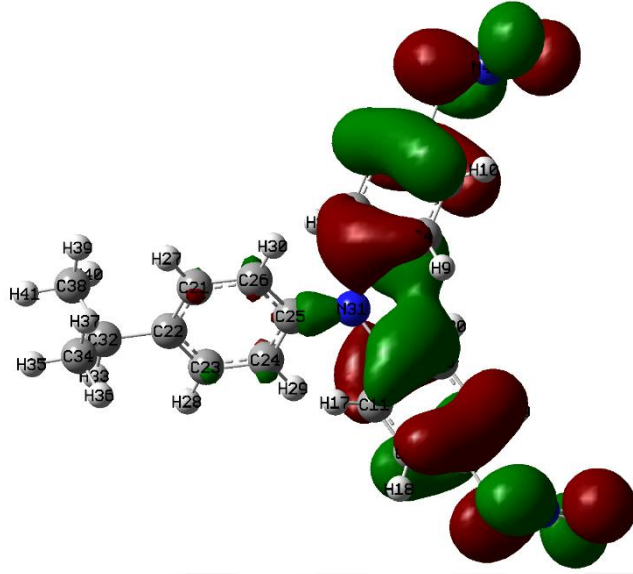


**Şekil 5.16.** 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün  $DFT_{LUMO+1}$  molekülünün atomik orbital bileşimi.

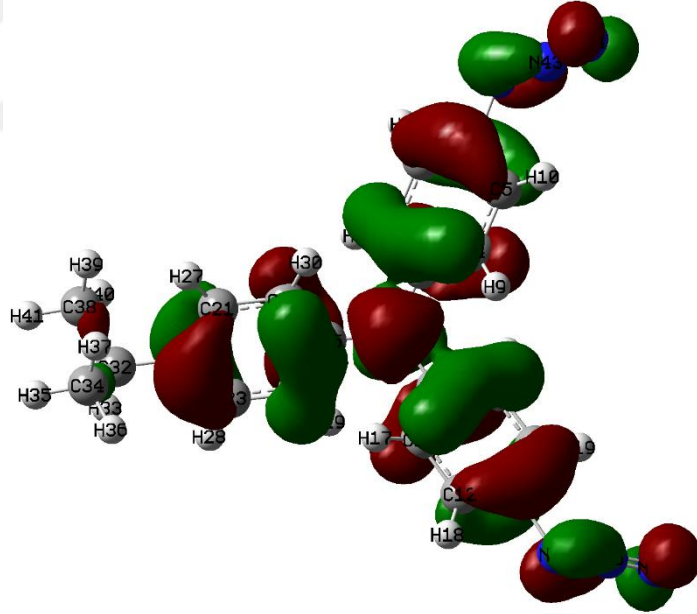
**Tablo 5.7.** HOMO, LUMO, enerji boşlukları (HOMO – LUMO) ve ilgili 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin (au) moleküler özelliklerinin karşılaştırılması.

Moleküler Enerji	6-311G	CAM-B3LYP
$E_{LUMO}$	-1.4776	-0.2255
$E_{HOMO}$	-5.3300	-6.5376
Enerji açığı ( $\Delta$ ) $E_{HOMO} - E_{LUMO}$	-3.8524	-6.3121
İyonlaşma Potansiyeli ( $I = -E_{HOMO}$ )	5.3300	6.5376
Elektron İlgisi ( $A = -E_{LUMO}$ )	1.4776	0.2255
Global Sertlik ( $\eta = (I - A)/2$ )	-1.9262	-3.1560
Küresel Yumuşaklık ( $s = 1/2 \eta$ )	-0.9631	-1.5780
Kimyasal potansiyel ( $\mu = (I + A)/2$ )	3.4038	3.3815
Elektronegativite ( $\chi = (I + A)/2$ )	1.2388	0.6127
Global Elektrofiliklik ( $\omega = \mu^2/2 \eta$ )	-6.0148	-1,1811

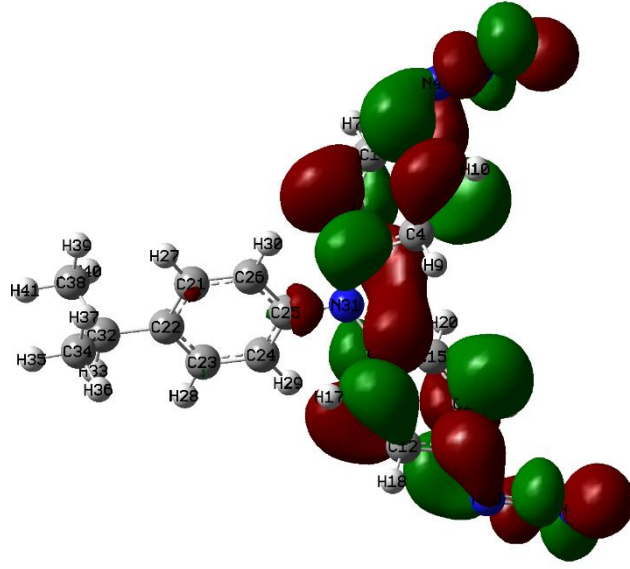
Dipol momenti, molekül içinde uygulanan elektrik alanı ile ilgili enerjinin önemli özelliğidir. Temel olarak, dipol momenti Van der Waals tipi dipol-dipol kuvvetlerini içeren moleküller arası etkileşimlerden oluşur ve güçlü moleküller arası çekim meydana getirir.



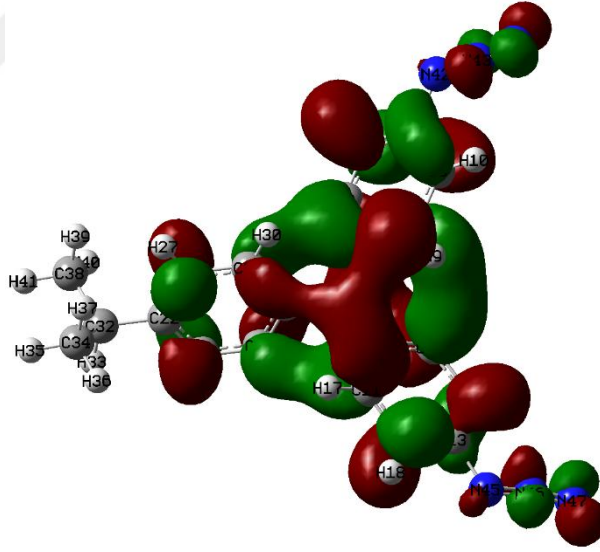
Şekil 5.17. 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün  $CAM_{HOMO-1}$  molekülünün atomik orbital bileşimi.



Şekil 5.18. 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün  $CAM_{HOMO}$  molekülünün atomik orbital bileşimi.



**Şekil 5.19.** 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün CAM<sub>LUMO</sub> molekülünün atomik orbital bileşimi.



**Şekil 5.20.** 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülünün CAM<sub>LUMO+1</sub> molekülünün atomik orbital bileşimi.

Tablo 5.8. de hesaplanan parametreler, elektronik dipol momenti ve toplam dipol momenti gösterir. Aşağıdaki denklem kullanılarak hesaplanabilir.

$$\langle \alpha \rangle = 1/3 (\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz})$$

$$\langle \beta_{tot} \rangle = [ (\beta_{xxx} + \beta_{xyy} + \beta_{zzz})^2 + (\beta_{yyy} + \beta_{yzz} + \beta_{yxx})^2 + (\beta_{zzz} + \beta_{zxx} + \beta_{zyy})^2 ]^{1/2}$$

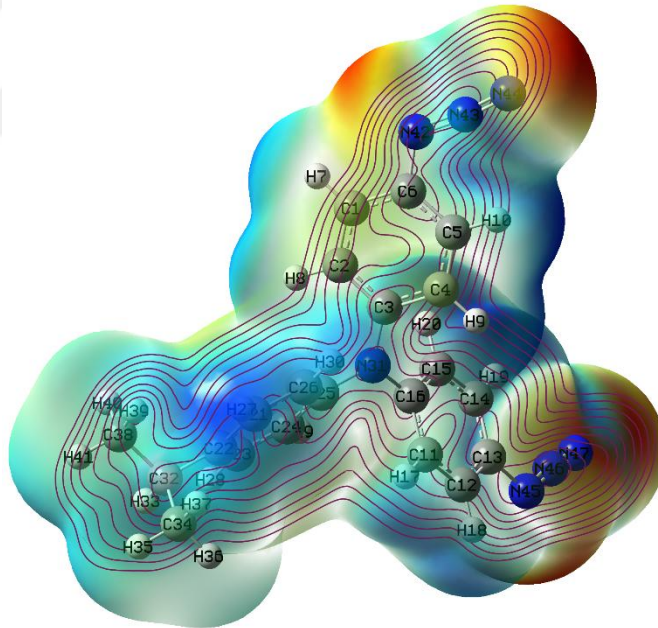
**Tablo 5.8.** DFT ile CAM ait temel set B3LYP / 6-31G (d, p), elektrik hesaplanan dipol momentleri (Debye), (au) polarisability,  $\beta$  bileşenleri ve  $\beta$  tot 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin değerini.

Parametreler	6-311G	CAM-B3LYP	Parametreler	6-311G	CAM-B3LYP
$\mu_x$	-3.3384	-2.9997	$\beta_{xxx}$	-129.0892	-116.8850
$\mu_y$	-0.3968	-0.3744	$\beta_{xxy}$	9.8159	8.0053
$\mu_z$	-0.0794	-0.0742	$\beta_{xyy}$	-110.2374	96.6208
$\mu(D)$	3.3628	3.0239	$\beta_{yyy}$	-37.5913	-34.0256
$\alpha_{xx}$	-168.4820	-166.7202	$\beta_{xxz}$	0.1053	-0.3011
$\alpha_{yy}$	-184.6869	-183.1794	$\beta_{xyz}$	-21.4529	-18.6032
$\alpha_{zz}$	-163.3488	-163.6825	$\beta_{yyz}$	-5.8448	-5.0772
$\alpha_{xy}$	2.4855	2.5158	$\beta_{xzz}$	0.7633	0.2473
$\alpha_{xz}$	0.4174	0.3699	$\beta_{yzz}$	-0.2082	-0.3079
$\alpha_{yz}$	-1.1425	-0.3026	$\beta_{zzz}$	1.0690	-1.1016
$\alpha$ (au)	-172,1725	-171,1940	$\beta$ (esu)	$2,4 \times 10^{-32}$	$3,3 \times 10^{-32}$

## Moleküler Elektrostatik Potansiyel Yüzey (MESP)

Moleküler elektrostatik potansiyel yüzeyi MESP, molekülerin şekil, boyut ve elektrostatik potansiyel değerlerini gösterir ve 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin molekülü için çizilmiştir. Moleküler elektrostatik potansiyel (MESP) haritalaması, moleküler yapının fizikokimyasal özelliklerini araştırmakta çok faydalıdır. Molekülün negatif elektrostatik potansiyele sahip bir kısmı elektrofilik atağa duyarlıdır.

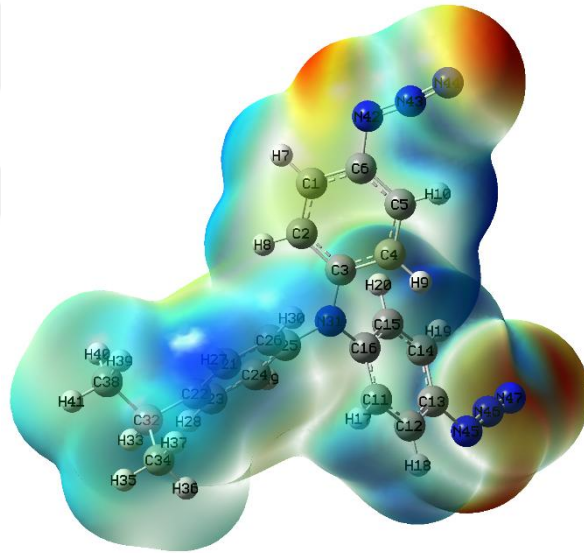
MESP haritasındaki kırmızı ve mavi bölgeler, negatif ve pozitif potansiyel bölgelere karşılık gelir ve sırasıyla elektron bakımından zengin ve elektron eksikliği olan bölgeleri ifade eder. Yeşil renk bölgesi ise nötr elektrostatik potansiyeli gösterir.



**Şekil 5.21.** 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin'in moleküler elektrostatik potansiyeli (kotur).



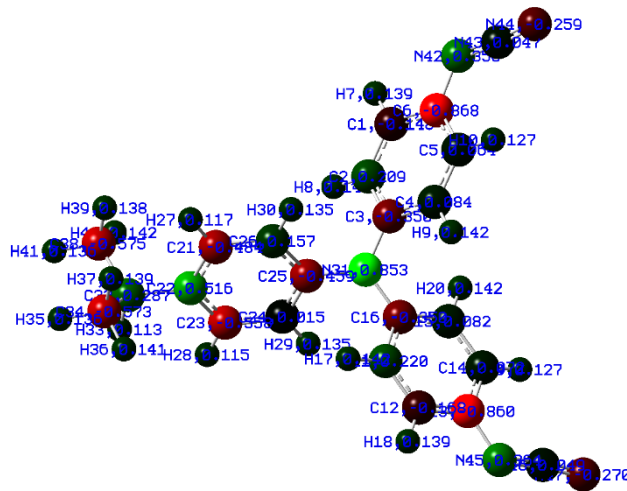
Bu çalışmada, moleküler elektrostatik potansiyel (MESP) haritaları, Şekil 5.21-5.22'de gösterildiği gibi 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin için haritalandırılmıştır. 4-izopropil-N, N-Bis (4-Azidofenil) Anilin durumunda, MESP haritası, nitrojen atomlarının etrafında kırmızı renkle karakterize negatif bölge bölgeleri olduğunu göstermektedir. 4-İzopropil-N, N-Bis (4-Azidofenil) Anilin molekülünün azot atomları etrafındaki nispeten büyük bir bölge en negatif potansiyel bölgeyi (koyu kırmızı) temsil eder ve elektrofilik etkileşim için uygundur. Hidrojen atomu pozitif yükün maksimum gücünü taşır (koyu mavi). Aromatik halka bölgesi, çoğu yeşil renkle temsil edilen neredeyse nötr bir potansiyel gösterir.



**Şekil 5.22.** 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin'in moleküler elektrostatik potansiyeli.

## Mulliken Atomik Yükleri

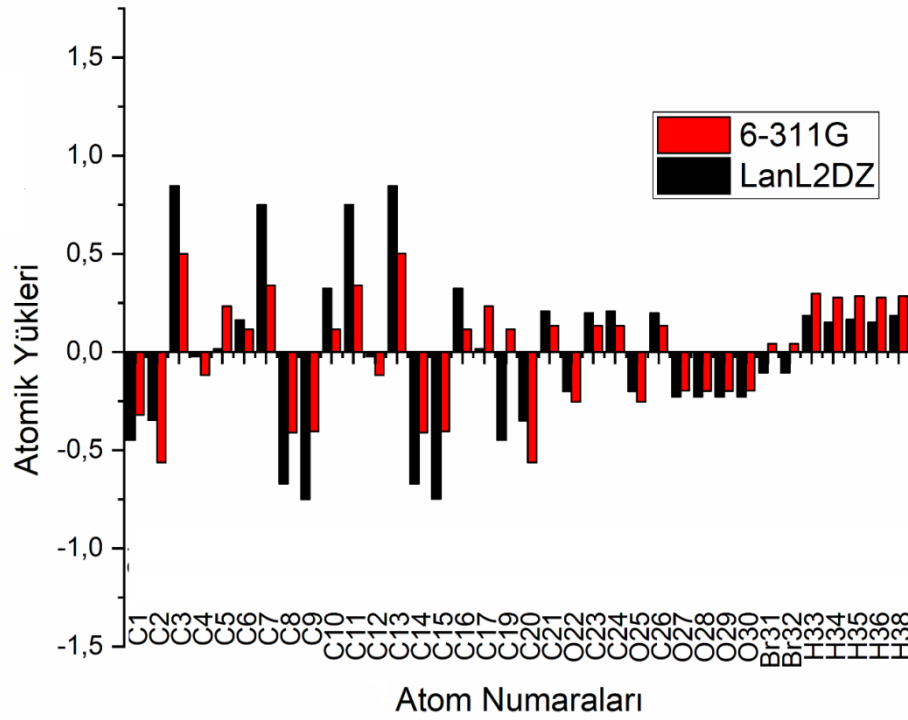
Mulliken, kuantum kimyasal hesaplamaların moleküler sisteme uygulanmasında önemli bir role sahiptir. Çünkü atomik yükler dipol momentini, moleküler polarizasyonu, elektronik yapıyı ve moleküler sistemlerin birçok özelliğini etkiler. Atomdaki yük dağılımı, molekül içindeki yük transferi de dahil olmak üzere donör ve akseptör çiftlerinin oluşumunu gösterir. Mulliken atomu, temel set B3LYP / 6-311G (d, p) 'de DFT ve CAM metotları kullanılarak hesaplandı. Elde edilen veriler Şekil 5.23-5.24ve Tablo 5.9'da sunulmaktadır. Mulliken yükü dağılımı, aromatik halkaya bağlı azot atomu N'nun, N31 (0.852537) - (0.793107), N42 (0.355902) - (-0.033063), N43 (0.046818) - (-0.029280),N44 (-0.258854) – (-0.278103), N45 (0.363991) – (0.448551), N46 (0.049169) - (-0.033063), ve N47 (-0.270415) - (-0.283405), negatif yüke sahip olduğunu gösterir. Aromatik halkaya bağlı H atomunun yük değeri ise pozitif yüke sahip olduğu görülmektedir. Bazı C atomlarının pozitif, bazılarının negatif olduğu da gözlenmiştir.



Şekil 5.23. 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin Mulliken atomik yükleri.

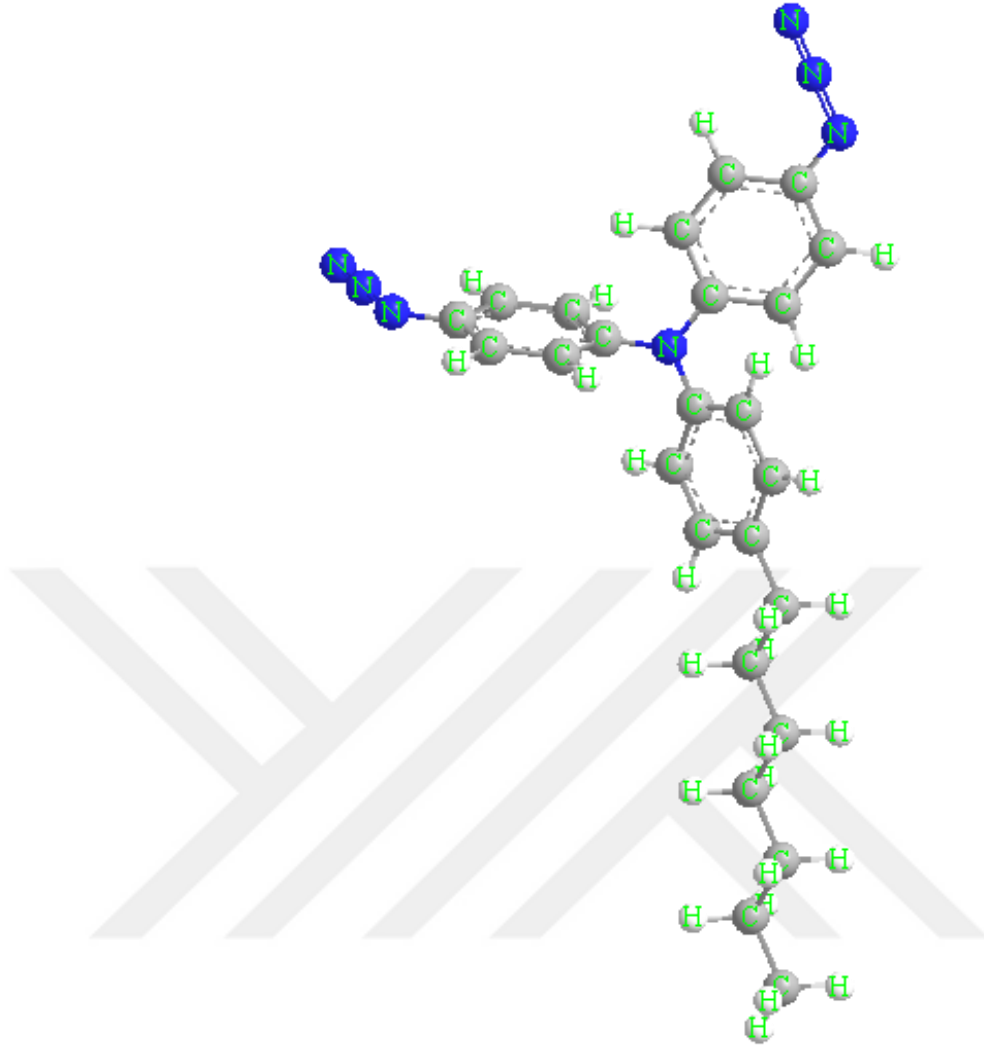
**Tablo 5.9.** Mulliken atomik yükleri DFT ile CAM B3LYP / 6-311G (d,p) ile hesaplanmıştır.

	<b>6-311G</b>	<b>CAM-B3LYP</b>		<b>6-311G</b>	<b>CAM-B3LYP</b>
C1	-0.147582	-0.012631	C24	0.014625	-0.111687
C2	0.209087	0.079071	C25	-0.458647	-0.381255
C3	0.349759	-0.244121	C26	0.157161	-0.070516
C4	0.083747	0.037754	H27	0.117111	0.126677
C5	0.064443	0.055930	H28	0.115338	0.124321
C6	-0.868131	-0.876341	H29	0.134860	0.145142
H7	0.138957	0.149517	H30	0.134574	0.144710
H8	0.142649	0.154376	N31	0.852537	0.793107
H9	0.141830	0.152190	C32	0.286690	0.187423
H10	0.127499	0.134440	H33	0.112695	0.120309
C11	0.219670	0.124314	C34	-0.572865	-0.557127
C12	-0.168464	-0.047091	H35	0.135756	0.138059
C13	-0.860012	-0.889883	H36	0.140764	0.143610
C14	0.072342	0.058752	H37	0.138521	0.140009
C15	0.081539	0.033483	C38	-0.575038	-0.553779
C16	-0.350165	-0.262252	H39	0.138056	0.139249
H17	0.142492	0.154072	H40	0.142051	0.144579
H18	0.138727	0.149690	H41	0.135844	0.138082
H19	0.127460	0.134389	N42	0.355902	0.439243
H20	0.142480	0.152670	N43	0.046818	-0.029280
C21	-0.483687	-0.277844	N44	-0.258854	-0.278103
C22	0.516294	0.318152	N45	0.363991	0.448551
C23	-0.558061	-0.353494	N46	0.049169	-0.033063
			N47	-0.270415	-0.283405



**Şekil 5.24.** 4-izopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin Mulliken atomik yüklerini karşılaştırılması.

4-Azido-N-(4-Azidofenil)-N-Fenilanilin molekülünün; Ekler kısmında gösterilen deneysel verilerin spektrumları verilmiş ve yorumlanması yapılmış ve Gabedit programında teorik olarak hesaplanan moleküllerle karşılaştırılmıştır.

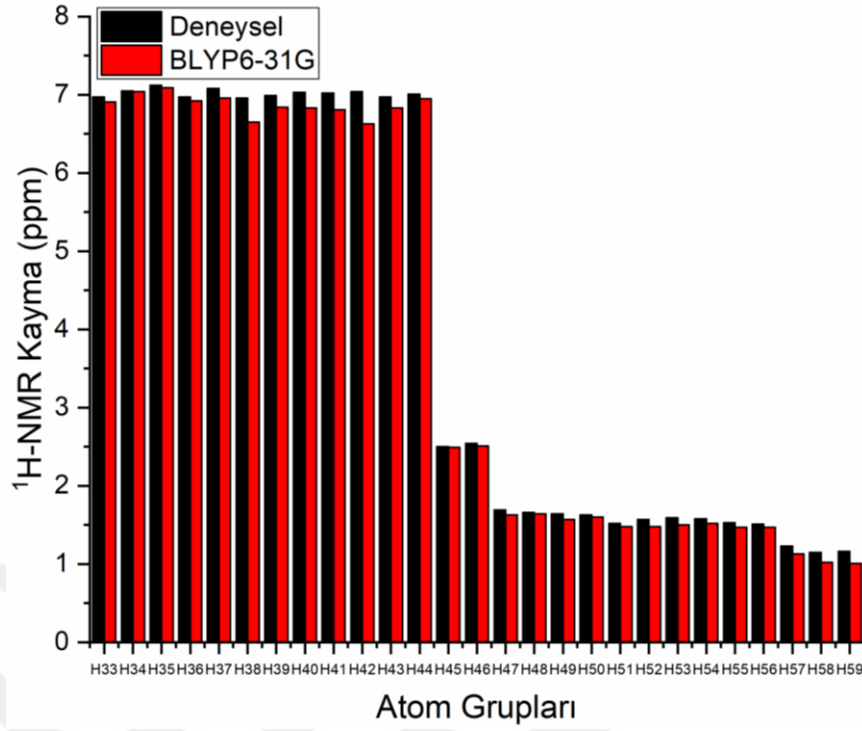


**Şekil 5.25.** 4-Azido-N-(4-Azidofenil)-N-Fenilanilin molekülünün üç boyutlu atom yapısı gösterilmiştir.

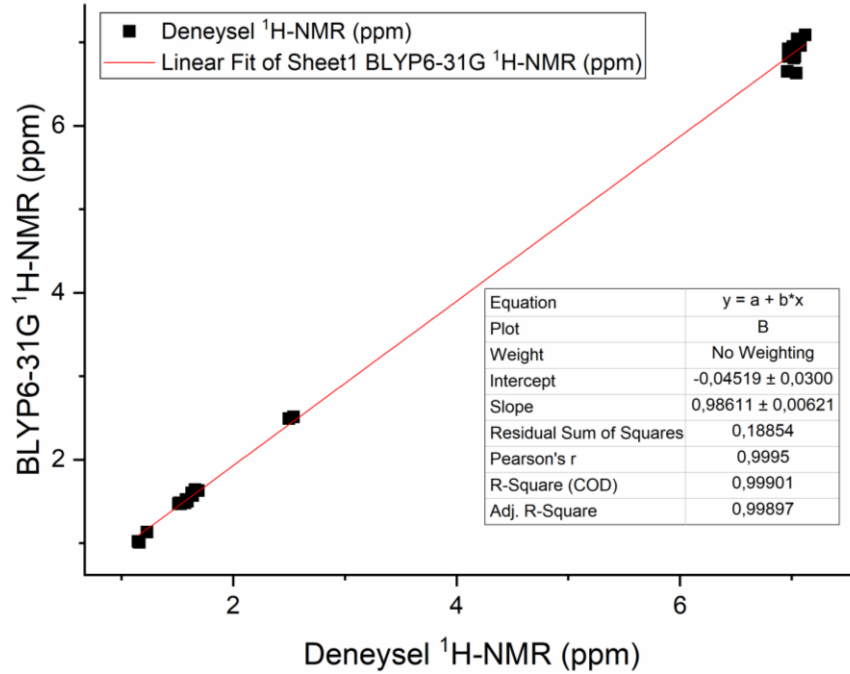
**Tablo 5.10.** 4-Azido-N-(4-Azidofenil)-N-Fenilanilin molekülünün <sup>1</sup>H-NMR Deneysel ve

Teorik hesaplamalarının karşılaştırılması.

Adı	Deneysel	BLYP6-31G	Hata	Adı	Deneysel	BLYP6-31G	Hata
H33	6.97	6.91	0.06	H48	1.66	1.64	0.02
H34	7.05	7.04	0.01	H49	1.64	1.57	0.07
H35	7.12	7.09	0.03	H50	1.63	1.6	0.03
H36	6.97	6.92	0.05	H51	1.52	1.48	0.04
H37	7.08	6.96	0.12	H52	1.57	1.48	0.09
H38	6.96	6.65	0.31	H53	1.59	1.5	0.09
H39	6.99	6.84	0.15	H54	1.58	1.52	0.06
H40	7.03	6.83	0.20	H55	1.53	1.47	0.06
H41	7.02	6.81	0.21	H56	1.51	1.47	0.04
H42	7.04	6.63	0.41	H57	1.23	1.13	0.10
H43	6.97	6.83	0.14	H58	1.15	1.02	0.13
H44	7.01	6.95	0.06	H59	1.16	1.01	0.15
H45	2.50	2.49	0.01				
H46	2.54	2.51	0.03				
H47	1.69	1.63	0.06				



Şekil 5.26. 4-Azido-N-(4-Azidofenil)-N-Fenilanilin molekülünün <sup>1</sup>H-NMR Deneysel ve Teorik kimyasal kayma grafiği.



Şekil 5.27. 4-Azido-N-(4-Azidofenil)-N-Fenilanilin molekülünün <sup>1</sup>H-NMR Deneysel ve Teorik Hesaplamaları verileri grafikte gösterilmiştir.

## 6. SONUÇ ve TARTIŞMA

Laboratuvar ortamında sentezlenen deneysel verilerle teorik olarak hesaplanarak elde edilen sonuçlar arasında genel olarak iyi uyum görülmüştür. Bu durumda kullanılan teorik yöntemin güvenilirliğini göstermiş ve Bazı Trifenil Aminlerin teorik olarak hesaplamaları için BYLY6-31G hesaplama yöntemi ile iyi sonuçlar elde edilmiştir. Moleküller ChemBioDraw programında çizilerek Gabedit programına aktarılmış ve proton NMR ve karbon NMR verileri deneysel verilere oldukça yakın sonuçlar vermiştir. Bu çalışma ile sentezlenen Bazı Trifenil Aminlerin teorik olarak da yapıları ve kimyasal özellikleri hakkında bilgi elde edilmiştir. Böylece daha sonraki çalışmalar için bu veriler göz önüne alınarak gelecekte sentezlenecek moleküllerin daha önceden kimyasal madde sarfiyatları mimimuma indirilerek ve gerekli öngörülerde bulunarak moleküllerin sentezi için önemli kolaylıklar sağlayacaktır.

Deneysel ve teorik verilerin uyumluluğu için ayrıca regresyon (uyumluluk) analizi de yapılmıştır. Hem deneysel hem de teorik değerlerin uyumluluğu için yapılan regresyon analizinde  $deneysel_{NMR} = a \cdot teorik_{NMR} + b$  eşitliği kullanılmıştır. Bu eşitliğe göre iki değişkenin uyumlu olup olmadığı a değerinin 1'e yakın veya eşit ve b değerinin de 0'a yakın veya eşit olması gerekmektedir.

Sonuç olarak sentezlenen bileşikler çeşitli yöntemlerle karakterize edilip yapıları tayin edilmiştir. Çalışmamızın bilimsel literatürde bu konudaki bilgileri destekleyeceği ve bundan sonra yapılacak çalışmalara temel oluşturacağı inancındayız.



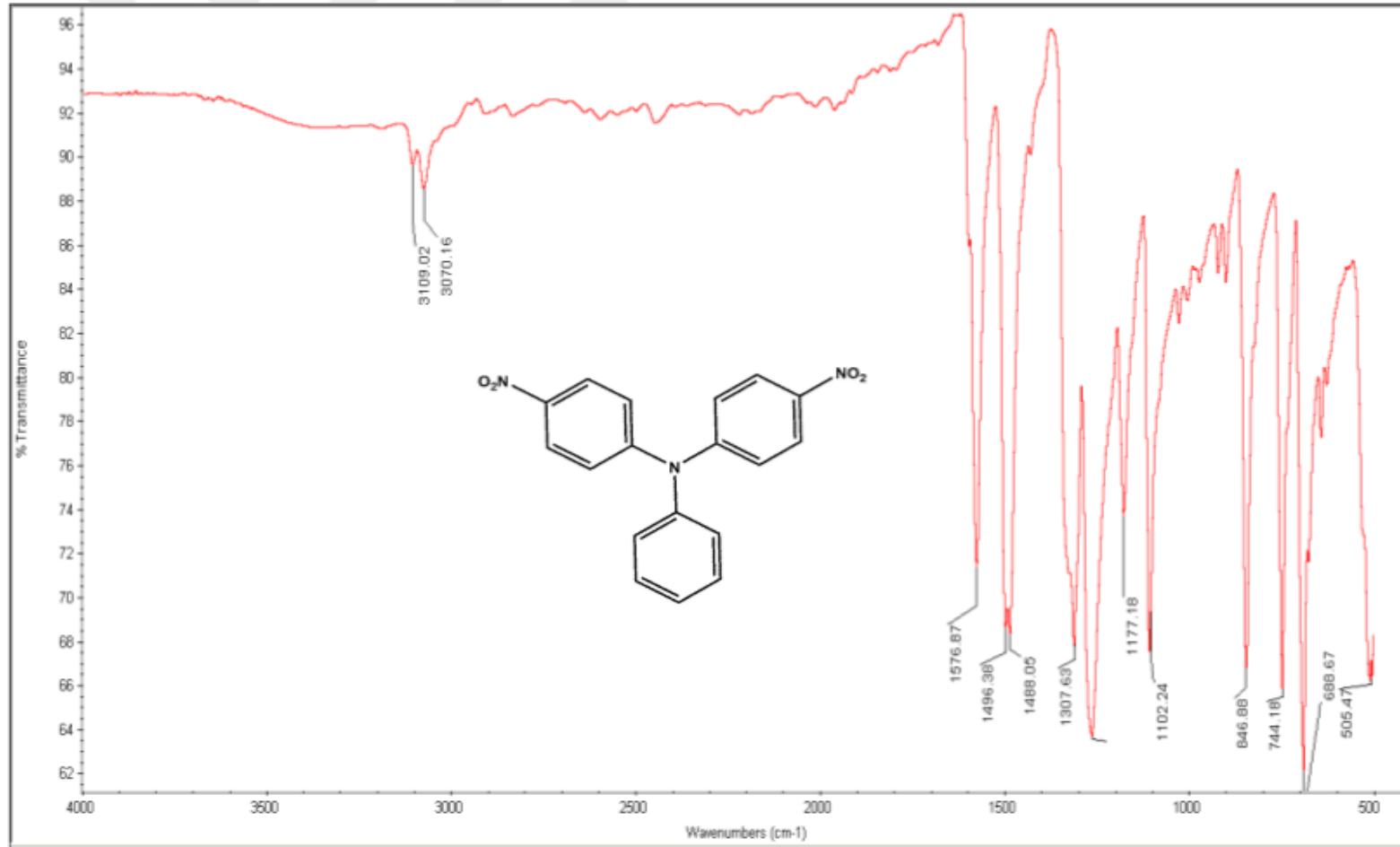
## 7. KAYNAKLAR

- [1] Allinger, N., (1977). Conformational analysis. 130. MM2. A hydrocarbon force field utilizing V1 and V2 torsional terms. *Journal of the American Chemical Society*, **99**: 8127–8134.
- [2] Buenker, R. J., Peyerimhoff, S. D., (1969). Ab initio SCF calculations for azulene and naphthalene. *Chemical Physics Letters*, **3**, 37-42.
- [3] Dinur, U., Hagler, T., (1991). *Rev. Comput.Chem.*, **2**, 99.
- [4] Foresman, J.B., Frisch, A., (1996). *Exploring chemistry with electronic structure methods*, 2nd edition, Gaussian, Inc., Pittsburgh.
- [5] Dorsett, H.E., White, A., (2000). *Overview of molecular modelling and ab-initio molecular orbital methods suitable for use with energetic materials*, DSTO technical report, Australia.
- [6] Smith, S. J.; Sutcliffe, B. T., (1997). The development of Computational Chemistry in the United Kingdom. *Reviews in Computational Chemistry*, **70**, 271–316.
- [7] Rode, J. E., Dobrowolski, J. Cz., (2003). Chiral allenes: theoretical VCD and IR spectra *J.Mol.Struct (Theochem)*, 635,151-159.
- [8] Schaefer, H. F., (1972). *The electronic structure of atoms and molecules*. Reading, Massachusetts: Addison-Wesley Publishing Co.,146.
- [9] Schaefer, H.F., (1984). *Quantum Chemistry*. Oxford: Clarendon Press, 328-341.
- [10] Streitwieser, A., Brauman, J. I. and Coulson, C. A., (1965). *Supplementary Tables of Molecular Orbital Calculations*. Oxford: Pergamon Press, 7188–7189.
- [11] Buenker, R. J., Peyerimhoff, S. D., *Chemical Physics Letters* (1969), **3**, 37.
- [12] Szabo, A., Ostlund, N.S., (1982). *Modern Quantum Chemistry*, McGraw-Hill, 128-146.
- [13] Young, D., (2001). *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems*, John Wiley & Sons, 24-25.
- [14] Donald, A., (1984). *Quantum chemistry*. Solutions manual to accompany Quantum chemistry, 281.

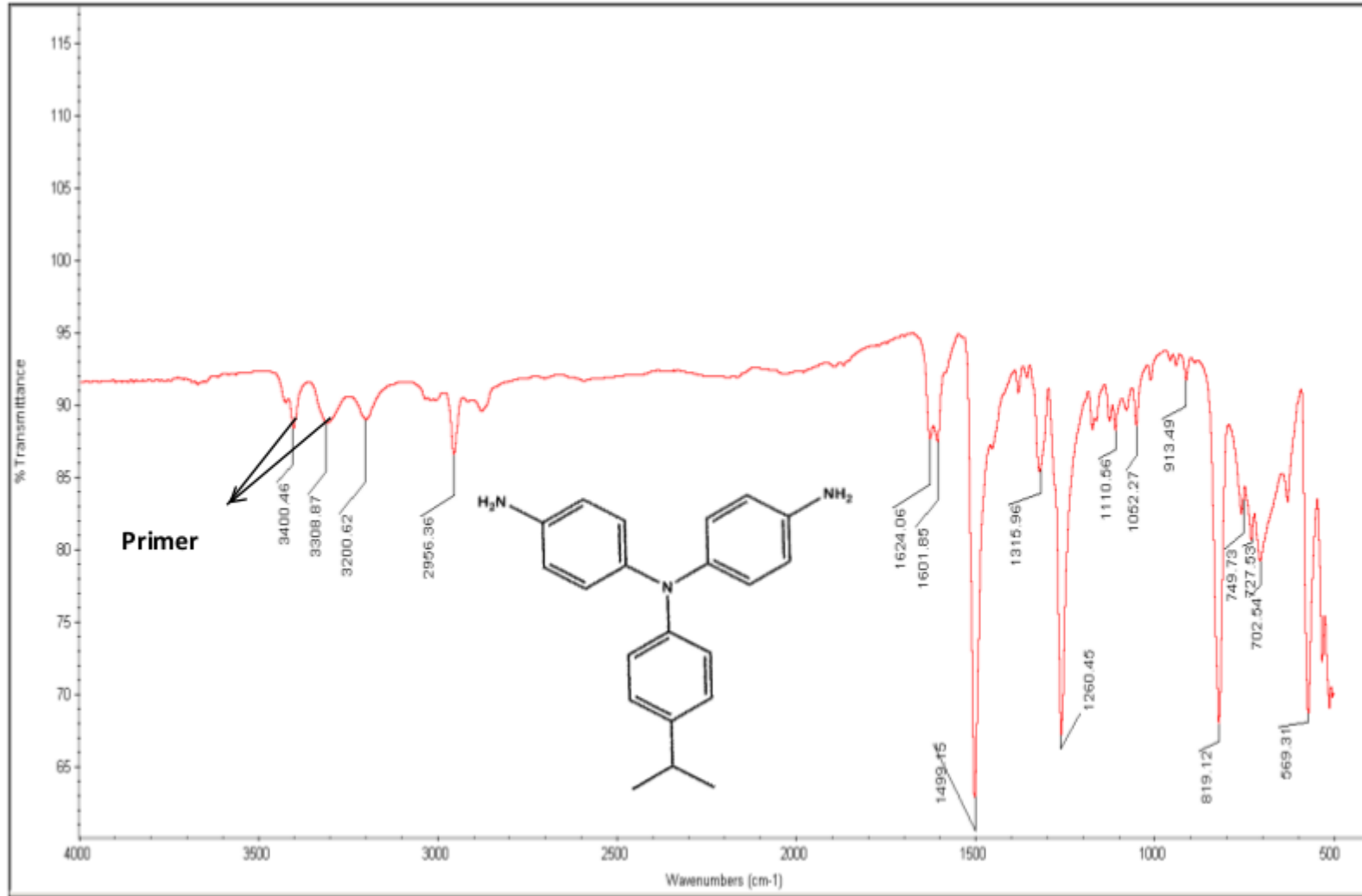
- [15] Ermeç, M., (2008). 2,4 ve 6-bromonikotinik Asit Moleküllerinin ve Yapılarının Titresim Spektroskopisi Yöntemiyle Deneysel ve Teorik Olarak İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Afyon Kocatepe Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, 113 s., Afyonkarahisar,.
- [16] Kollman, P., (1985). Theory of Complex Molecular Interactions: Computer Graphics, Distance Geometry, Molecular Mechanics, and Quantum Mechanics, vol.18, pp.105-111.
- [17] Çelik, I., Akkurt, M., Ide, S., Tutar, A., ve Çakmak, O., 2003, “C<sub>7</sub>H<sub>8</sub>Br<sub>4</sub> Molekülünün Konformasyon Analizi ve Kuantum Mekanik Yöntemle Optimizasyonu, Elde Edilen Elektronik ve Yapısal Parametrelerin X-Isınları Yapı Analiz Sonuçları ile Karşılaştırılması”, G.Ü. Fen Bilimleri Dergisi (G.Ü. Journal of Science), vol.16(1), pp.27-35.
- [18] Cramer, C. J., (2002). Essentials of Computational Chemistry. Chichester: John Wiley & Sons, Ltd., 153–189.
- [19] <http://www.shodor.org/chemviz/overview/ccbasics.html>.
- [20] Ziegler, T., (1991). Approximate density functional theory as a practical tool in molecular energetics and Dynamics, *Chem. Rev.* **91**, 651-667.
- [21] Jensen, F., (1999). *Introduction to computational chemistry*, John Wiley & Sons, New York.
- [22] Pulay, P., (1969). Ab initio calculation of force constants and equilibrium geometries in polyatomic molecules, *Mol. Phys.*, **17**, 197-204.
- [23] Pulay, P., (1987). *Analytical derivative methods in quantum chemistry, ab initio methods in quantum chemistry* (Ed: Lawley, K.P.), John Wiley & Sons Ltd., New York.
- [24] Allouche, A.-R., (2010). Software News and Updates Gabedit—A Graphical User Interface for Computational Chemistry Softwares, *J Comput Chem* **32**: 174–182.

## 8. EKLER

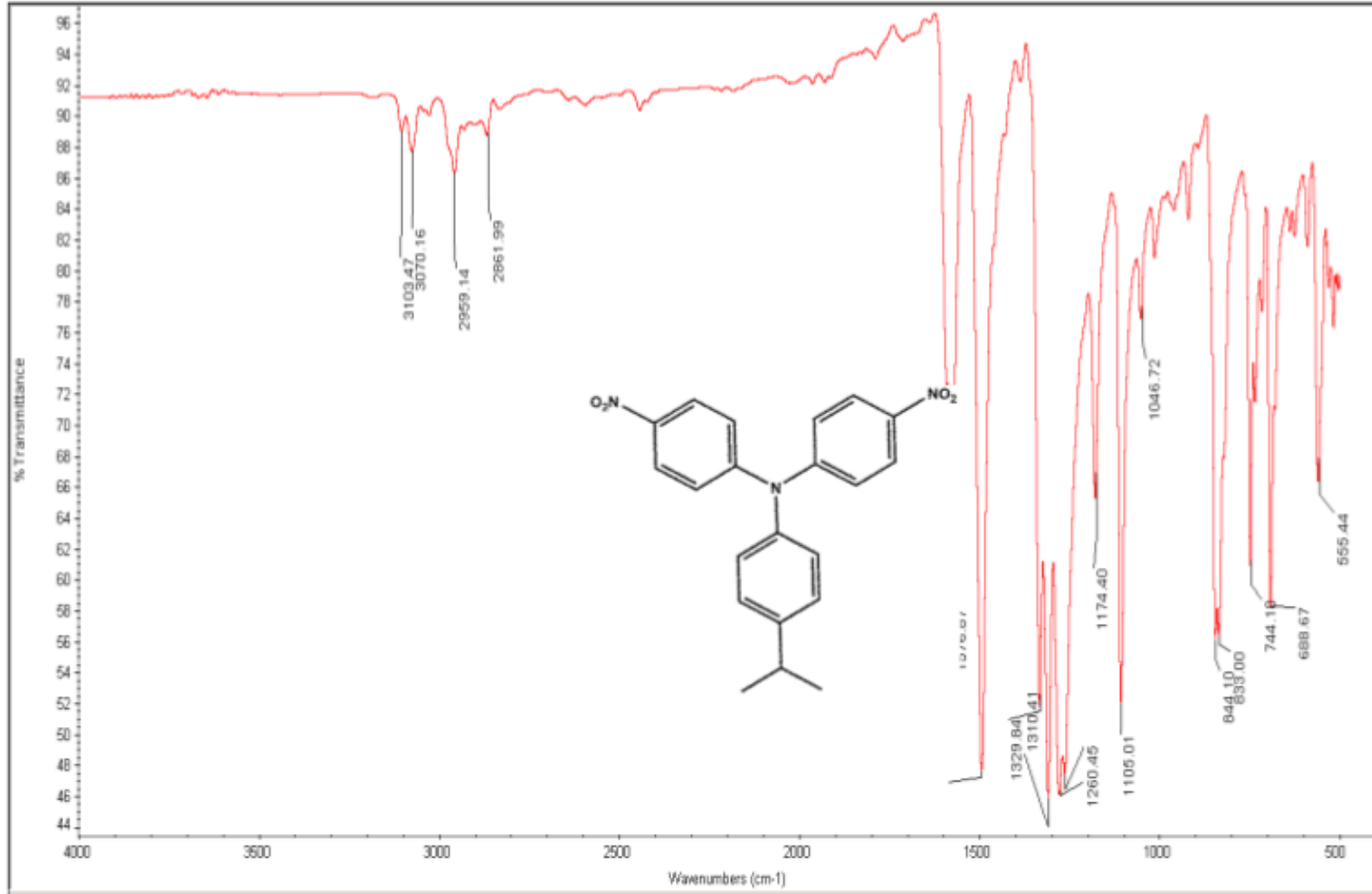




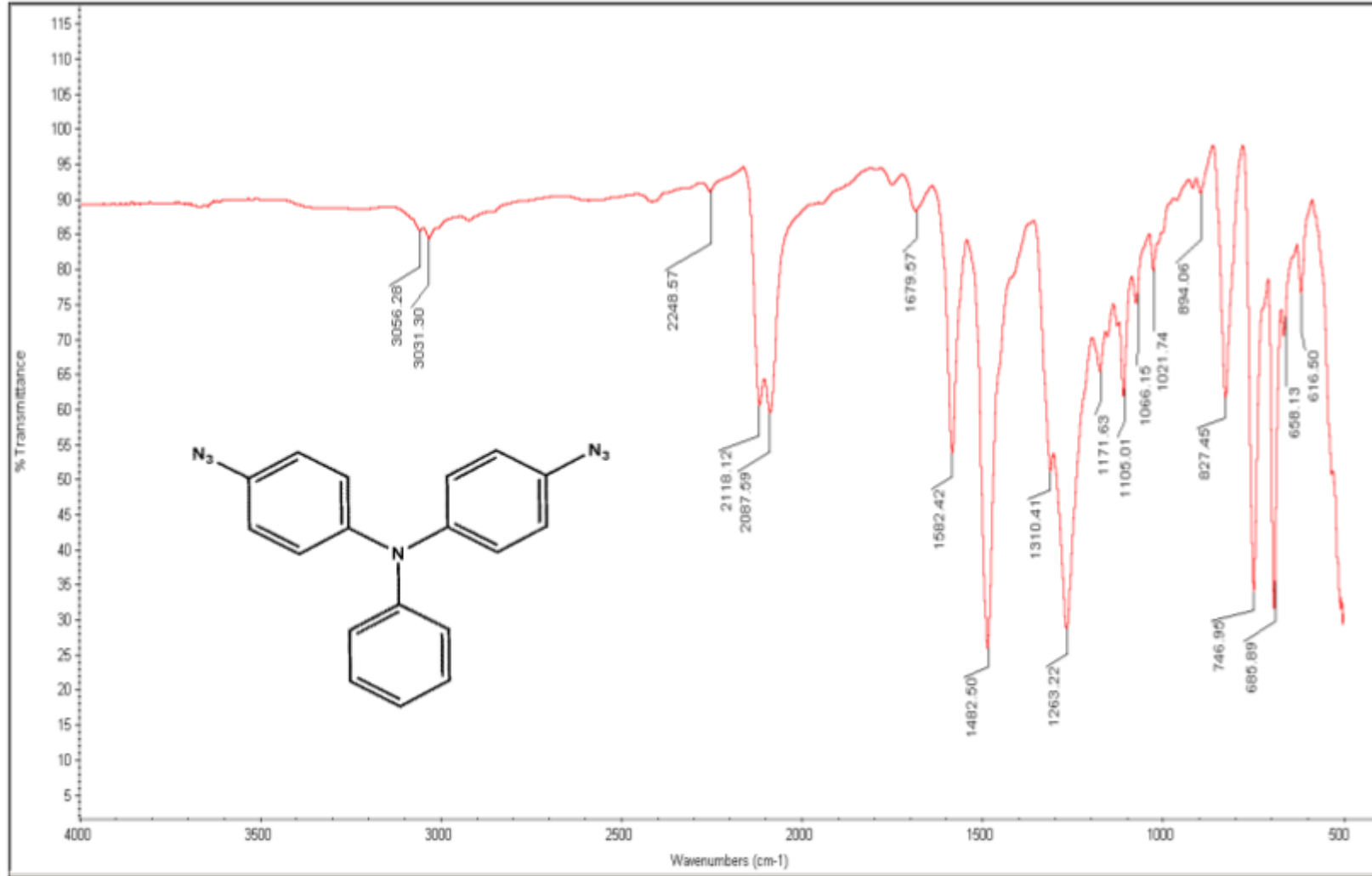
**Ek Şekil 1.** 4-Nitro-N-(4-Nitrofenil)-N-Fenil Anilin FT-IR Spektrumu.



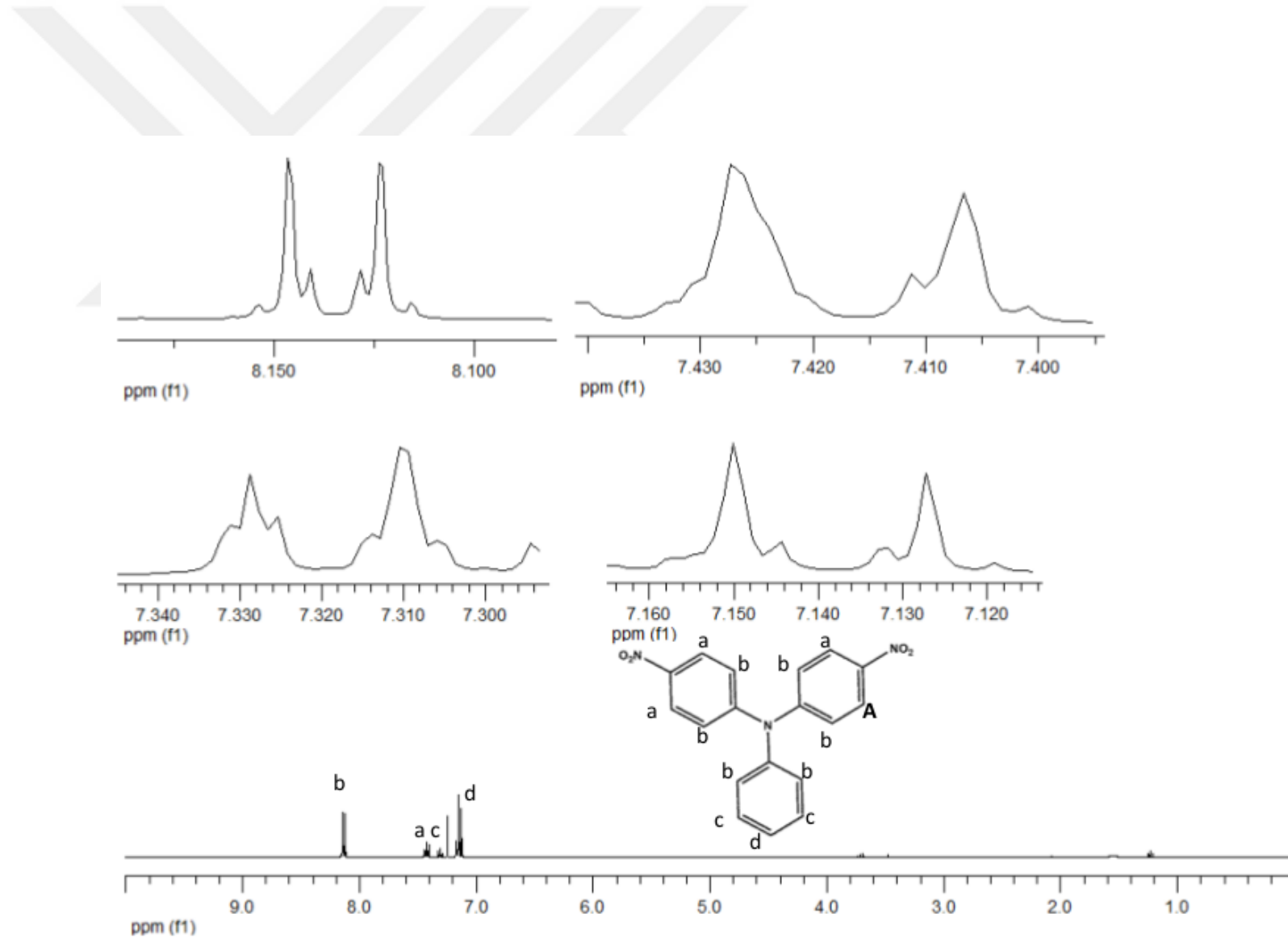
Ek Şekil 2. 4-Izopropil-N,N-Bis(4-Aminofenil)Anilin FT-IR Spektrumu.



Ek Şekil 3. 4-İzopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin FT-IR Spektrumu.

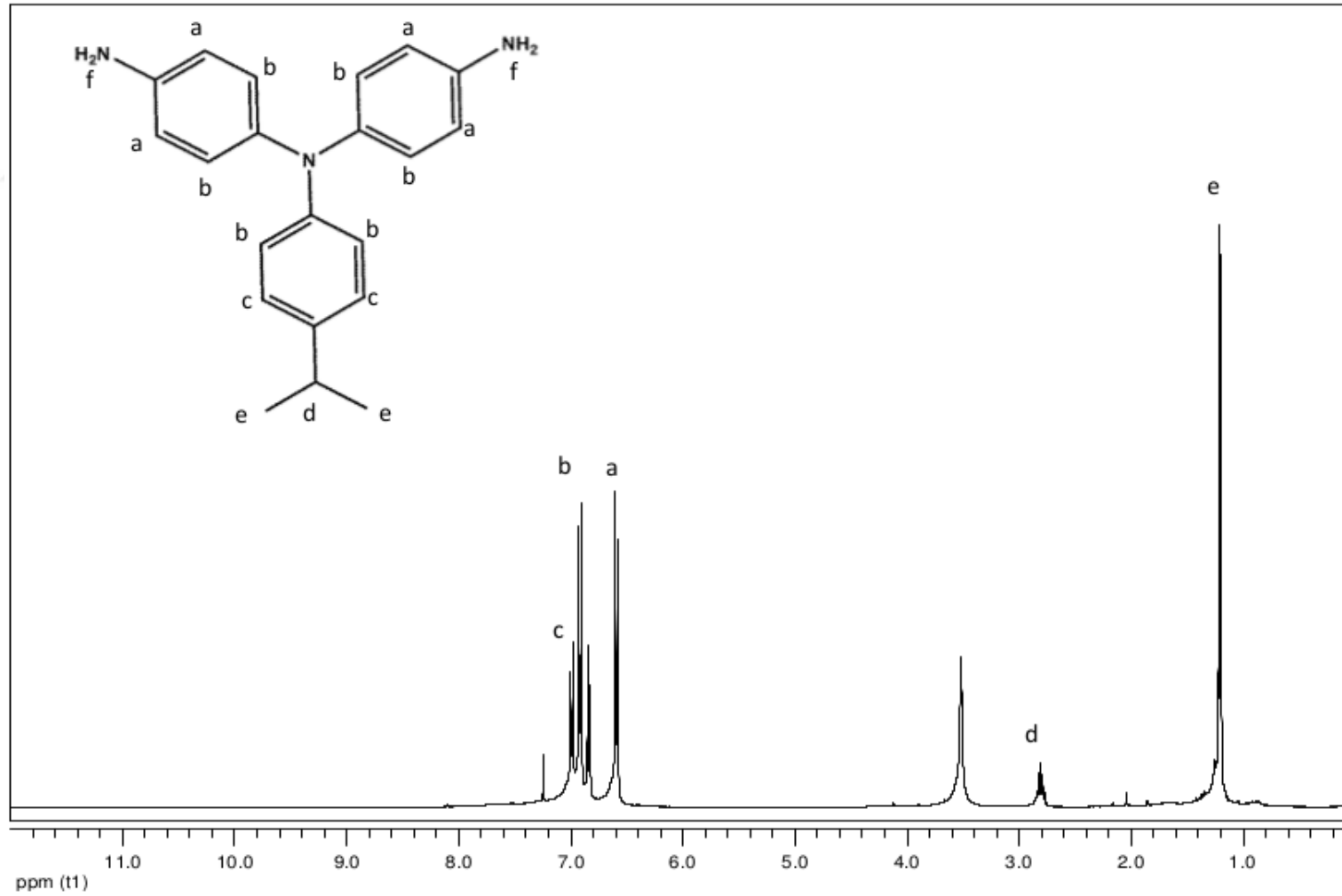


Ek Şekil 4. 4-Azido-N-(4-Azidofenil)-N-Fenil Anilin FT-IR Spektrumu.

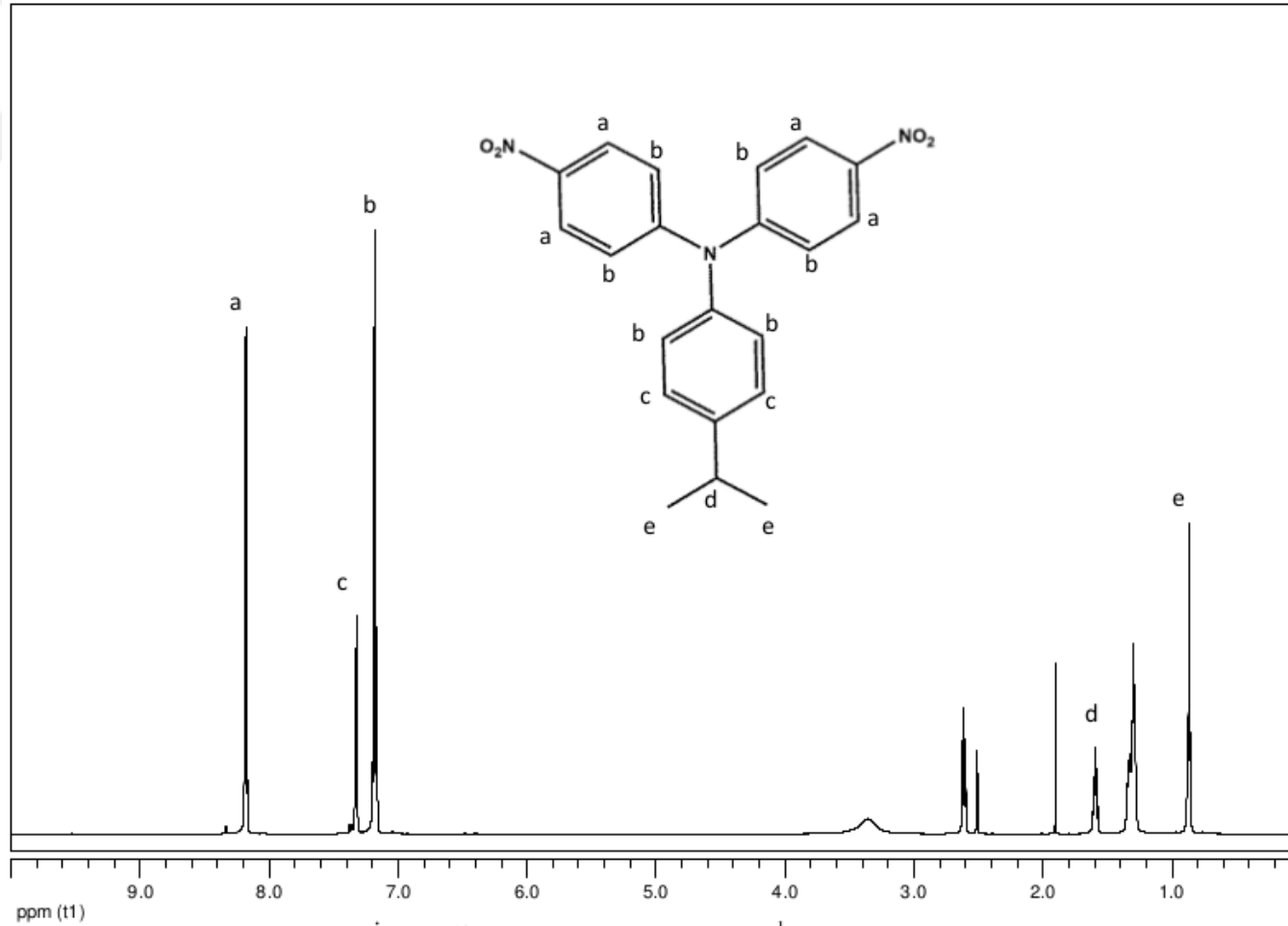


Ek Şekil 5. 4-Nitro-N-(4-Nitrofenil)-N-Fenil Anilin  $^1\text{H-NMR}$  Spektrumu.

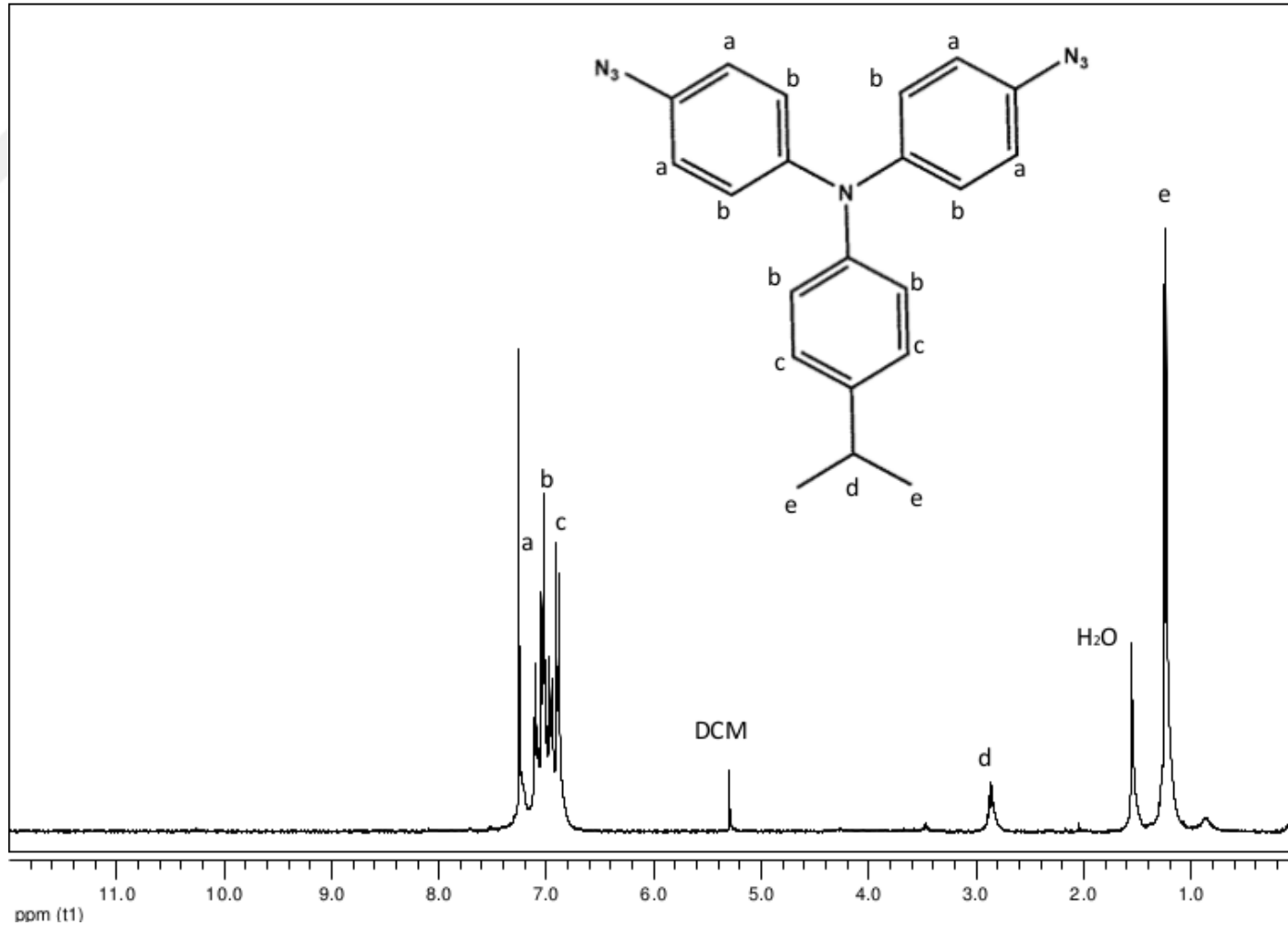




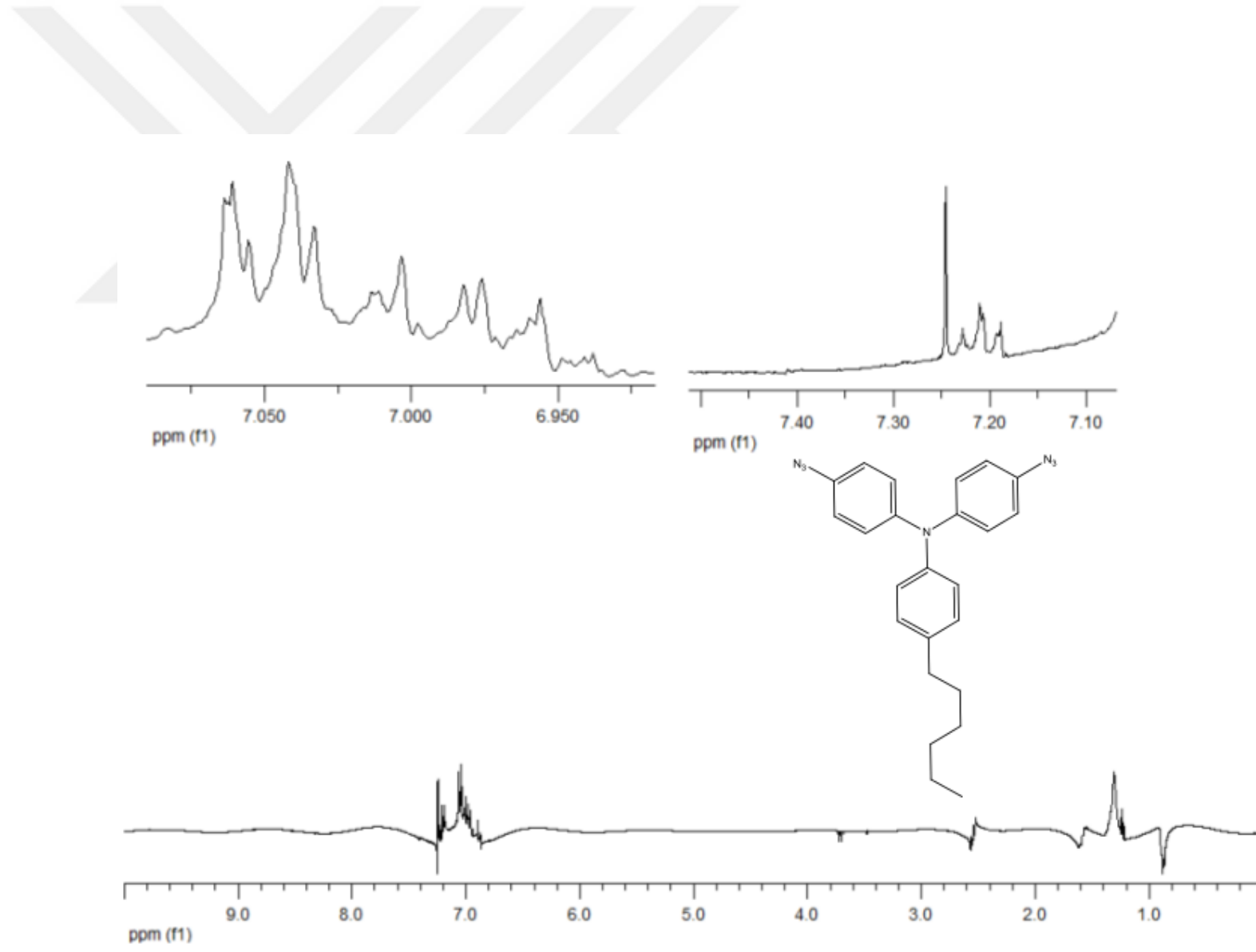
Ek Şekil 6. 4-İzopropil-N,N-Bis(4-Aminofenil)Anilin <sup>1</sup>H-NMR Spektrumu.



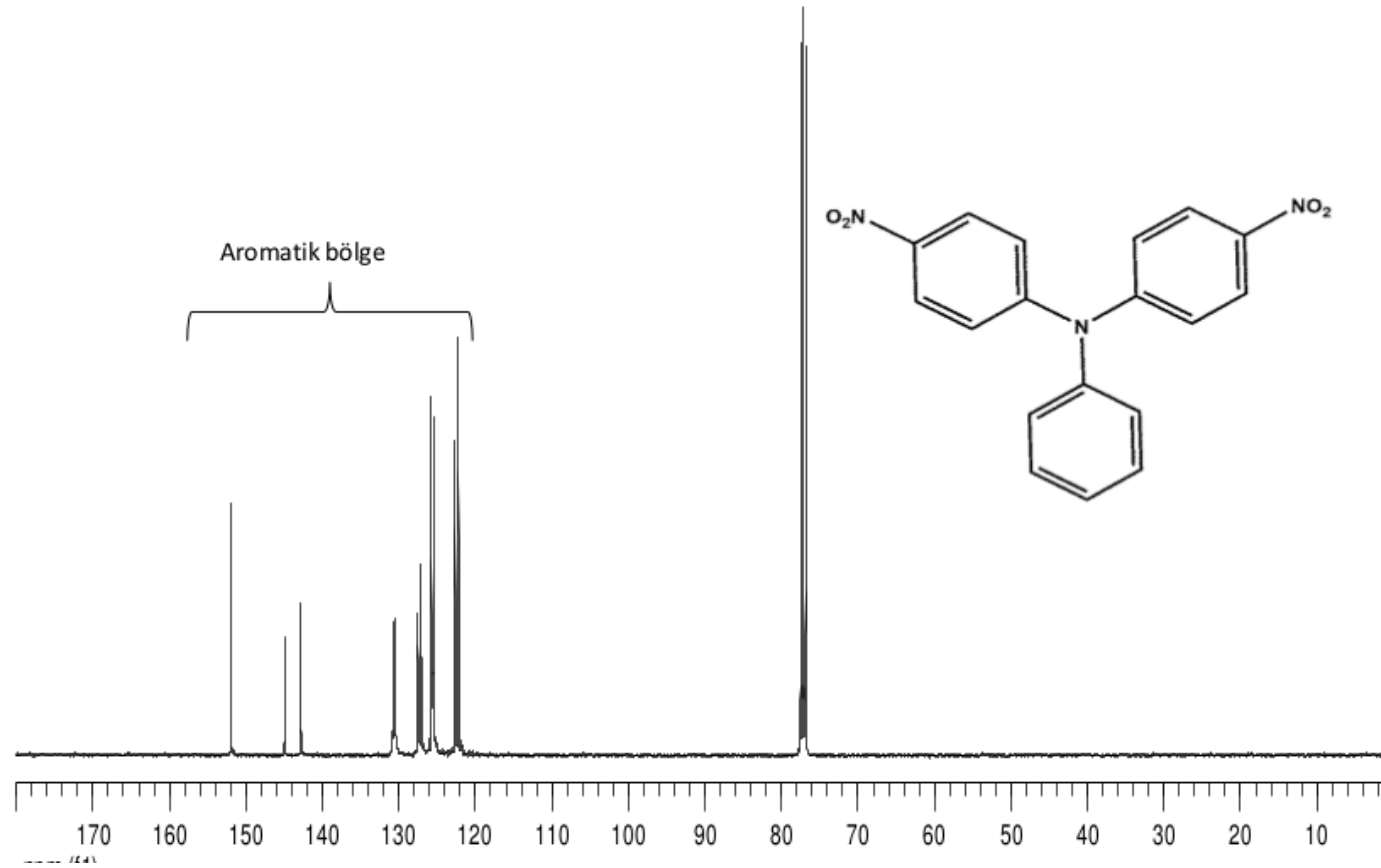
Ek Şekil 7. 4-İzopropil-N,N-Bis(4-Nitrofenil)Anilin  $^1\text{H-NMR}$  Spektrumu.



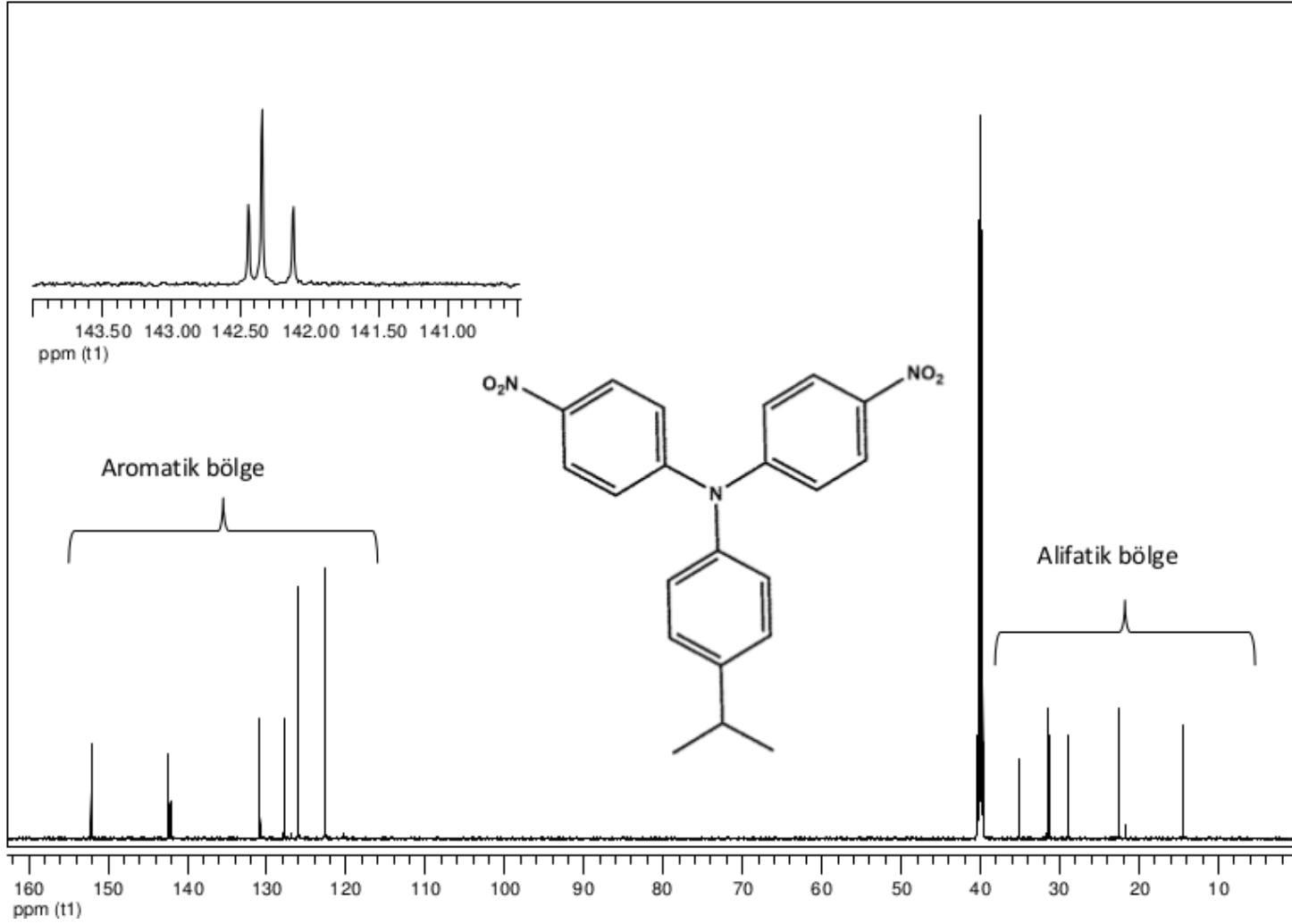
Ek Şekil 8. 4-İzopropil-N,N-Bis(4-Azidofenil)Anilin <sup>1</sup>H-NMR Spektrumu.



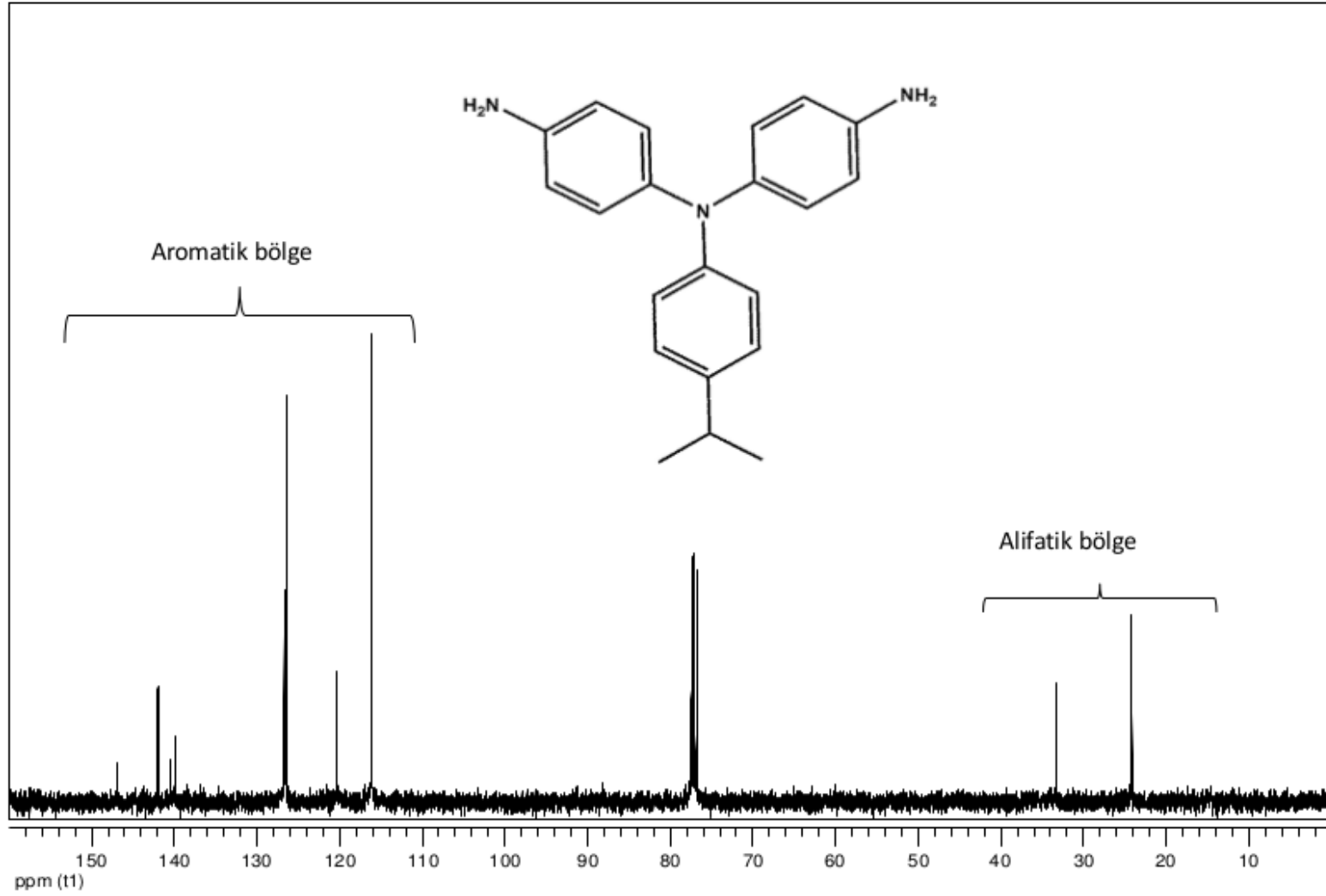
**Ek Şekil 9.** 4-Azido-N-(4-Azidofenil)-N-Fenil Anilin  $^1\text{H-NMR}$  Spektrumu.



**Ek Şekil 10.** 4-Nitro-N-(4-Nitrofenil)-N-Fenil Anilin  $^{13}\text{C}$ -NMR Spektrumu.



Ek Şekil 11. 4-İzopropil-N,N-Bis(4-Nitrofenil)Anilin  $^{13}\text{C}$ -NMR Spektrumu.



Ek Şekil 12. 4-İzopropil-N,N-Bis(4-Aminofenil)Anilin  $^{13}\text{C}$ -NMR Spektrumu.

## ÖZGEÇMİŞ

Ad-Soyad : Ertuğrul ÇİFTCİ

Doğum Tarihi : 27.08.1984

Doğum Yeri : KARS

Medeni Hali : Evli

Yabancı Dili : İngilizce

Öğrenim Durumu :

Lise : 1999-2003 Akhisar Yabancı Dil Ağırlıklı Lisesi

Lisans : 2009-2013 Kafkas Üniversitesi Fen Edebiyat  
Fakültesi Kimya

Yüksek Lisans : 2013-2018 Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri  
Enstitüsü Kimya Anabilim Dalı