

T.C.
ONDOKUZ MAYIS ÜNİVERSİTESİ
LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANA BİLİM DALI



**SCHIFF BAZLI 6-6'-((1E-1'E)-(PROPAN-1,3 DİİLBİS
(AZANİLİDEN)) BİS (FENİLMETANİLİDEN)) BİS (3-
OKTİLOKSİ) FENOL) BİLEŞİĞİNİN SPEKTROSKOPİK
OLARAK İNCELENMESİ**

Yüksek Lisans Tezi

Huriye GÜNER

Danışman
Prof. Dr. Sedat GÜMÜŞ

SAMSUN
2022

TEZ KABUL VE ONAY

Huriye GÜNER tarafından, **Prof. Dr. Sedat GÜMÜŞ** danışmanlığında hazırlanan “**6-6'-((1E-1'E)-(Propan-1,3Diilbis(Azaniliden))Bis (Fenilmetaniliden)) Bis (3-Oktiloksi) Fenol**” başlıklı bu çalışma, jürimiz tarafından (Savunma Sınavı Tarihi) tarihinde yapılan sınav sonucunda oy çokluğu ile başarılı bulunarak Yüksek Lisans Tezi olarak kabul edilmiştir.

	Unvanı Adı Soyadı Üniversitesi Ana Bilim/Ana Sanat Dalı	İmza	Sonuç
Başkan	Prof. Dr. Sedat GÜMÜŞ Ondokuz Mayıs Üniversitesi Fizik Ana Bilim Dalı		<input checked="" type="checkbox"/> Kabul <input type="checkbox"/> Ret
Üye	Prof. Dr. Ayşen Alaman AĞAR Ondokuz Mayıs Üniversitesi Kimya Ana Bilim Dalı		<input checked="" type="checkbox"/> Kabul <input type="checkbox"/> Ret
Üye	Dr. Öğretim Üyesi Seher MERAL Sinop Üniversitesi Boyabat Meslek Yüksekokulu Mülkiyet Koruma ve Güvenlik Bölümü		<input checked="" type="checkbox"/> Kabul <input type="checkbox"/> Ret

Bu tez, Enstitü Yönetim Kurulunca belirlenen ve yukarıda adları yazılı jüri üyeleri tarafından uygun görülmüştür.

ONAY

.../.../...

Prof. Dr. Ali BOLAT
Enstitü Müdürü

BİLİMSEL ETİĞE UYGUNLUK BEYANI

Hazırladığım yüksek lisans tezinin bütün aşamalarında bilimsel etiğe ve akademik kurallara riayet ettiğimi, çalışmada doğrudan ve dolaylı olarak kullandığım her alıntıya kaynak gösterdiğimi ve yararlandığım eserlerin kaynaklarda gösterilenlerden oluştuğunu, her unsurun enstitü yazım klavuzuna uygun yazıldığını ve TÜBİTAK Araştırma ve Yayın Etiği Kurulu Yönetmeliği'nin 3. bölüm 9. maddesinde belirtilen durumlara aykırı davranılmadığını taahhüt ve beyan ederim.

Etik Kurul Gerekli mi ?

Evet

Hayır

İmza

13 /01/ 2022

Huriye GÜNER

TEZ ÇALIŞMASI ÖZGÜNLÜK RAPORU BEYANI

Tez Başlığı: Schiff bazlı 6-6'-(1E-1'E)-(Propan-1,3 Diilbis (Azaniliden)) Bis (Fenilmetaniliden)) Bis (3- Oktiloksi) Fenol) bileşiğinin spektroskopik olarak incelenmesi

Yukarıda başlığı belirtilen tez çalışması için şahsım tarafından 13/01/2022 tarihinde intihal tespit programından alınmış olan özgünlük raporu sonucunda ;

Benzerlik Oranı : % 6

Tek Kaynak Oranı : % 1 çıkmıştır.

İmza

13 /01 / 2022

Danışman Prof. Dr. Sedat GÜMÜŞ

ÖZET

SCHIFF BAZLI 6-6'-((1E-1'E)-(PROPAN-1,3 DİİLBİS (AZANİLİDEN)) BİS (FENİLMETANİLİDEN)) BİS (3- OKTİLOKSİ) FENOL) BİLEŞİĞİNİN SPEKTROSKOPİK OLARAK İNCELENMESİ

Huriye GÜNER

Ondokuz Mayıs Üniversitesi

Lisansüstü Eğitim Enstitüsü

Fizik Ana Bilim Dalı

Yüksek Lisans, Ocak/2022

Danışman: Prof. Dr. Sedat GÜMÜŞ

Bu çalışmada, Ondokuz Mayıs Üniversitesi Kimya Bölümünde sentez edilmiş olan 6-6'-((1E-1'E)-(Propan-1,3 Diilbis (Azaniliden)) Bis (Fenilmetaniliden)) Bis (3-Oktiloksi) Fenol) adlı bileşik fenol yapısı içeren bir Schiff bazıdır. Bu önemli ve büyük bileşiğin yapısı; IR, Raman, ¹H-NMR ve ¹³C-NMR spektroskopisi ile kristal yapısı ise X- ışınları kırınım çalışmasıyla belirlendi. Moleküler titreşim bantlarının ataması için Normal Koordinat Analizi (NCA) kullanılmıştır. Normal koordinat analizi hesabı, bir fortran programı olan Molvib programı çalıştırılarak yapılmıştır ve harmonik kuvvet sabitleri Gaussian 03W paket programı içerisinde bulunan DFT(B3LYP)/6-31G(d) teorik modelden elde edilmiştir. Moleküler titreşim bantlarının atamaları yapılmış olup deneysel ve teorik IR ve Raman spektrum grafikleri karşılaştırmalı olarak verilmiştir. Sonuçlar birbirleriyle oldukça uyumludur ve RMS (kök kare ortalama) değeri 10 cm⁻¹ dir. DFT(B3LYP)/6-311++G(2d,p) moleküler modelleme kullanılarak ¹³C-NMR ve ¹H-NMR spektrumları, dimetil sülfoksit (DMSO) ve kloroform çözücüleri içinde kimyasal kayma değerleri hesaplanmıştır ve deneysel kaymaya karşı teorik kimyasal kaymanın grafikleri çizilmiştir. Her iki grafik arasında iyi bir korelasyon yakalanmıştır. ¹H-NMR spektroskopisinde iki farklı çözücüde ölçülen –OH bağının kimyasal kayma sonucu 15,92 ppm ve 16,12 ppm olarak tespit edilmiştir. Bu bileşiğin kristal yapısında O-H...N güçlü bir hidrojen bağı vardır ve hem moleküler titreşim spektroskopisi (IR, Raman) hem de NMR spektroskopisi çalışması bunu desteklemektedir.

Anahtar Sözcükler: Schiff baz, Fenol, Hidrojen bağı, IR, Raman, ¹H-NMR, ¹³C-NMR

ABSTRACT

THE SPECTROSCOPIC STUDY OF THE SCHIFF-BASED 6-6'-(1E-1'E)- (PROPANE-1,3 DIYLBIS(AZANYLYIDENE)) BIS(PHENYLMETHYLYLIDENE)) BIS(3-OCTYLOXY)PHENOL) COMPOUND

Huriye GÜNER

Ondokuz Mayıs University
Institute of Graduate Studies
Department of Physics

Master, January/2022

Supervisor: Prof. Dr. Sedat GÜMÜŞ

In this study, the compound 6-6'-(1E-1'E)-(Propane-1,3 Diylbis (Azanylyidene)) Bis (Phenylmethylylidene)) Bis (3-Octyloxy) Phenol), which was synthesized in the chemistry department of Ondokuz Mayıs University, is a Schiff base containing a phenol structure. The structure of this important and large compound was determined by IR, Raman, $^1\text{H-NMR}$ and $^{13}\text{C-NMR}$ spectroscopy, and its crystal structure by X-ray diffractometer. Normal Coordinate Analysis (NCA) was used for the assignment of molecular vibration bands. The normal coordinate analysis calculation was performed by running the Molvib program, which is a fortran program and harmonic force constants obtained from the theoretical chemistry model of DFT(B3LYP)/6-31G(d) implemented in the Gaussian03W software. Molecular vibration bands were assigned and the graphics of Raman and IR spectra were given in comparison with theoretic and experimental. The results are quite compatible with each other and The RMS value is 10 cm^{-1} . Using the molecular modelling of DFT(B3LYP)/6-311++G(2d,p), the $^{13}\text{C-NMR}$ and $^1\text{H-NMR}$ spectra chemical shifts for the compound were calculated inside dimethyl sulfoxide (DMSO) and chloroform solvents and the graphics of the experimental chemical shift versus the theoretical ones were plotted for $^1\text{H-NMR}$ and $^{13}\text{C-NMR}$. The good correlation was captured for both of the graphs. The chemical shift of the -OH bond measured in two different solvents in $^1\text{H-NMR}$ spectroscopy was determined to be 15,92 ppm and 16,12 ppm. There is a strong O-H...N hydrogen bond in the crystal structure of this compound, and both molecular vibrational spectroscopy (IR, Raman) and NMR spectroscopy support that there is an intramolecular hydrogen bond available in the structure.

Keywords: Schiff base, Phenol, Hydrogen bond, IR, Raman, $^1\text{H-NMR}$, $^{13}\text{C-NMR}$

ÖN SÖZ VE TEŞEKKÜR

Tez çalışmamın başından itibaren azmin elinden hiçbir şeyin kurtulmayacağını, istek ve çalışmayla her zaman başarılı olacağımı söyleyerek beni cesaretlendiren, sabrı, ilgisi, engin bilgisiyle çalışmamı şekillendiren, desteğini hiçbir zaman esirgemeyen ve hep yanımda olan saygıdeğer tez danışmanım Sayın Prof. Dr. Sedat GÜMÜŞ'e,

Bileşiğin sentezlenmesini gerçekleştiren, çalışmalarım boyunca her zaman bilgileriyle sorunlarıma çözüm bulan Doktor Öğretim Üyesi Seher MERAL'e,

Hayatım boyunca desteklerini hep hissettiğim, her ne koşulda olsa da başarabileceğime inanan değerli annem ve babama teşekkür ederim.

Huriye GÜNER

İÇİNDEKİLER

TEZ KABUL VE ONAY	iii
BİLİMSEL ETİĞE UYGUNLUK BEYANI	iv
TEZ ÇALIŞMASI ÖZGÜNLÜK RAPORU BEYANI	iv
ÖZET	iii
ABSTRACT	iv
ÖN SÖZ VE TEŞEKKÜR.....	v
İÇİNDEKİLER	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ	viii
TABLolar DİZİNİ	ix
1.GİRİŞ	1
2.GENEL BİLGİLER.....	5
2.1.Elektromanyetik Spektrum	5
2.1.1.Radyo Dalgaları	5
2.1.2.Mikro Dalgalar.....	5
2.1.3.Kızılötesi Işımlar.....	6
2.1.4.Görünür Bölge	6
2.1.5.Morötesi Dalgaları	6
2.1.6.X-Işımları.....	6
2.1.7.Gama Işımları	6
2.2.Kızılötesi (Infrared) Spektroskopisi.....	6
2.2.1.Kızılötesi Bölgesinde Karakteristik Bantlar	9
2.2.2.Kızılötesi Spektrumun Klasik Kuramda Açıklanması	10
2.2.3.Kızılötesi Spektrumun Kuantum Kuramda Açıklanması	10
2.3.Moleküllerin Titreşim Türleri	11
2.3.1.Gerilme Titreşimleri.....	11
2.3.2.Eğilme Titreşimleri	11
2.4.Raman Spektroskopisi	12
2.4.1.Raman Etkisinin Klasik Teorisi	13
2.4.2.Raman Etkisinin Kuantum Teorisi.....	14
2.5.Nükleer Manyetik Rezonans Spektroskopisi	15
2.5.1.Kimyasal Kayma.....	15
2.5.2.Kimyasal Kaymayı Etkileyen Faktörler.....	16
2.5.3.Spin-Spin Yarılması.....	17
2.6.Normal Koordinat Analizi	18
2.7.Hesaplamalı Kimya Metotları	24
2.7.1.Ab İnitö Metotları	25
2.7.2.Hatree-Fock Metodu (HF)	25
2.7.3.Yoğunluk Fonksiyonel Teori (DFT).....	28
2.7.3.1.KS-DFT Özuyumlu Alan Denklemleri	29
2.7.3.2.DFT’de Kullanılan Değiş Tokuş-Korelasyon Fonksiyonelleri	30
2.7.3.2.1.LDA	30
2.7.3.2.2.GGA.....	31
2.7.3.2.3.Meta-GGA	31
2.7.3.2.4.Hibrit DFT	31
2.7.3.2.5.İki Katlı-Hibrit DFT.....	31
3.MATERYAL VE YÖNTEM.....	32
3.1.6,6’-(1E,1’E)-(Propan-1,3-Diilbis(Azaniliden))Bis.....	32
(Fenilmetaniliden))Bis(3-Oktiloksi Fenol) Bileşiği	
4.BULGULAR VE TARTIŞMA.....	36
4.1.Moleküler Titreşim Kiplerinin Atanması.....	36
4.2. ¹ H-NMR Analizi	56
4.3. ¹³ C-NMR Analizi	61
4.4. Mulliken Yükleri ve Dipol Moment.....	65

4.5. Moleküler Elektrostatik Potansiyel Değerleri(MEP)	68
5.SONUÇ	69
KAYNAKLAR	70
ÖZ GEÇMİŞ.....	75

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1. Elektromanyetik spektrum.....	5
Şekil 2.2. Kızılötesi bölgeleri.....	7
Şekil 2.3. Enerji seviyeleri.....	9
Şekil 2.4. Moleküler gerilme titreşimleri.....	11
Şekil 2.5. Moleküler eğilme titreşimleri.....	12
Şekil 2.6. Raman saçılması.....	15
Şekil 2.7. NMR spektrumunda kimyasal kayma değerleri.....	16
Şekil 2.8. Kuantum kimyasal metotlar.....	25
Şekil 3.1. Bileşiğin sentezi.....	32
Şekil 4.1. Molekülün yapısı.....	37
Şekil 4.2. IR grafiği.....	39
Şekil 4.3. Raman grafiği.....	39
Şekil 4.4. Bileşiğin kloroform çözücüsünde ¹ H-NMR spektrumu.....	600
Şekil 4.5. Bileşiğin DMSO çözücüsünde ¹ H-NMR spektrumu.....	600
Şekil 4.6. ¹ H-NMR grafiği.....	61
Şekil 4.7. Bileşiğin DMSO çözücüsünde ¹³ C-NMR spektrumu.....	64
Şekil 4.8. Bileşiğin kloroform çözücüsünde ¹³ C-NMR spektrumu.....	64
Şekil 4.9. ¹³ C-NMR grafiği.....	65
Şekil 4.10. MEP görüntüsü.....	68

TABLULAR DİZİNİ

Tablo 2.1. Pik değerleri.....	17
Tablo 3.1. Bileşimin kristal veri bilgileri	33
Tablo 3.2. Atomik yer değiştirme parametreleri.....	33
Tablo 3.3. Geometrik parametreler	34
Tablo 4.1. Skala çarpanları	36
Tablo 4.2. IR ve Raman atamaları	40
Tablo 4.3. Simetri koordinatları.....	48
Tablo 4.4. ¹ H-NMR atamaları (DMSO çözücü)	56
Tablo 4.5. ¹ H-NMR atamaları (kloroform çözücü).....	57
Tablo 4.6. ¹³ C-NMR atamaları (DMSO çözücü)	61
Tablo 4.7. ¹³ C-NMR atamaları (kloroform çözücü).....	62
Tablo 4.8. Mulliken yük dağılımları	66

1. GİRİŞ

Kimya ve Fizikte maddenin yapısını ve karakteristik özelliklerini ortaya çıkarabilmek için birçok bilimsel yöntemler kullanılmaktadır. Spektroskopik yöntemler, madde ile ışının etkileşmesi sonucunda madde hakkında önemli bilgiler verdiğinden dolayı yaygın olarak tercih edilmektedir. Bu spektroskopik tekniklere IR, Raman, NMR ve bunlar gibi örnekler verilebilir. Bununla birlikte, bu deneysel teknikler beraber kullanılarak ve her birinden ayrı gelen sonuçlar yorumlanarak maddenin iç yapısı hakkında bilgi edinilmektedir. Son yıllarda sentez edilen bileşiklerin aydınlatılmasında hesaplamalı kimyada kullanılan kuantum mekaniksel yaklaşım yöntemlerinden de sıklıkla yararlanılmaktadır.

Günümüzde kimya alanında önemli bir fonksiyonel grup olan Schiff bazlı bileşikler hala bir araştırma konusudur. Schiff bazları ilk olarak 1869 yılında Nobel ödüllü Alman Kimyacı H. Schiff tarafından bulunmuş olup kendi ismiyle anılmaktadır (Schiff, 1869). Azometin ($-C=N$) grubu içeren bileşiklere Schiff bazları denilmektedir. Schiff bazları kaynaklarda farklı isimlerle karşımıza çıkmaktadır. Birincil aminler ile aldehitin tepkimesinden ortaya çıkan Schiff bazları, azometin olarak adlandırılır. Birincil aminlerin ketonlarla tepkimesi sonucu oluşan Schiff bağına da imin veya ketimin denir (Karaca, 2018).

Schiff bazlı bileşikler koordinasyon kimyasında önemli bir yer tutmaktadır. İlk kez 1933 yılında Alman kimyacı Pfeiffer tarafından ligand olarak kullanılmıştır. O zamandan beri anorganik bileşiklerde önemli işlevler üstlendiği görülmüştür. Schiff bazları kolay sentezlenebilmesi ve kararlı bir yapıda olması bakımından koordinasyon kimyasındaki araştırmacıların ilgisini çekmektedir. Pek çok ligand çeşidi arasında olan Schiff bazlı ligantlar, merkezi atoma d6n6r adı verilen atomlarla bağlanmaktadır. Schiff bazların bazı metal komplekslerinde g6r6len sıvı kristal 6zelliğinden yararlanarak uçak sanayisinde, dijital saatlerin göstergelerinde kullanılmaktadır (Zhang vd., 2018). Metal kompleksleri renkli madde olduklarından boya endüstrisinde özellikle tekstil boyacılığında pigment boyar maddesi olarak kullanılmaktadır (Cozzi, 2004).

Schiff bazı ve onun metal kompleksleri bazı ilaçların hazırlanmasında, boyar maddelerin üretiminde, elektronik endüstrisinde, plastik sanayisinde, tarım alanında, kozmetik ve polimer üretiminde, analitik kimyada, sıvı kristal teknolojisinde

(Birbiçer, 1998) olmakla birlikte tedavi amaçlı tıp alanında da kullanılmaktadır. Schiff bazları ilaç sektöründe ve kauçuğa katkı maddeleri gibi kimyasal ürünlerin üretimi için yaygın olarak kullanılan organik ara üründür (Macho vd., 2004). Kostimülator, hasta olan hücrelerin vücutta tespit edilmesi için özel yapıdaki proteinlerdir. Bu yapılar kullanılarak oluşturulan Schiff bazlı ilaçlarla bağışıklık sistemi terapötik olarak güçlendirilmektedir (Rhodes vd., 1995). Antifungal ilaçlara direnç gösteren mantar enfeksiyonlarına karşı yeni antifungal ajanların gerekliliği söz konusudur. Klinik önemi olan Schiff bazlı bileşiklerin antifungal aktiviteleri üzerine çalışılmış ve olumlu sonuçlar alınmıştır (Magalhaes vd., 2020). İmin bileşikleri B6 ve B1 vitaminlerinin araştırılması için kullanılmaktadır (Murthy and Reddy; 1981 ; Tsuchido, 2015). İlaç sektöründeki güzel çalışmalar neticesinde tıp alanında da birçok hastalık için umut verici çalışmalar yapılmaktadır. Tıp alanında da Schiff bazları birçok hastalık için yararlı olmaktadır. Epilepsi hastaları için Schiff bazlı bileşikler sentezlenerek antikonvülzan aktiviteleri incelenmektedir (Osman vd., 2021). Serbest radikallerin vücutta birikmesi oksidatif strese veya hücre hasarına neden olur (Aslankoç, 2019). Oksidatif stresle mücadele için Schiff bazlı bileşikler kullanılarak başarılı çalışmalar yapılmaktadır (Munir vd., 2021). Söz konusu bu bileşikler kanser hastalarının kemoterapi sürecinde ilaç olarak da kullanılmaktadır (Yıldırım, 2019). Schiff bazlı bileşikler kanser tedavisi için olumlu sonuçlar vermektedir. Kanser hücreleri vücudun çeşitli bölgelerinde düzensiz bölünmesiyle oluşur. Bu hücreler vücudun belli yerlerinde veya bütün vücuda yayılmış bir şekilde tespit edilmektedir. Tıpta bu inatçı kanser hücreleri için tedavilerde Schiff bazlı bileşikler denenmiş ve tedavi sonucunda güzel sonuçlar alınmıştır (Demirci vd., 2017a; Demirci vd., 2015b). Ayrıca antikanser tedavisinin yanında antidepresan aktivitelerde de iyi sonuçlar sergilemektedir (Sadıa, 2021). Schiff bazlı bileşiklerin tıp ve ilaç sektöründe daha birçok biyolojik eylemleri vardır. Schiff bazları; antibakteriyel (Anacona vd., 2014), antimikrobiyal (Bal, 2016; Yılmaz ve Çukurovalı, 2019), antioksidan (Kostova and Saso, 2013; Kurt, 2018), antifungal (Mohapatra vd., 2019), anti-genotoksik (Özkan vd., 2018), antitümör (Phaniband vd., 2008), anti-anjyogenik (Subramanian vd., 2019), antiülser (Desai vd., 2001) aktivitelerde etkisi vardır. Schiff bazları; aminotiyoller, o-aminofenoller, α -aminoasitler ve aminoalkollere, asetil aseton veya salisilaldehit katılmasıyla da sentezlenir (Şener, 1999). Amino asit-Schiff bazlarının antibakteriyel çalışmalarında mikroorganizmalara karşı oldukça etkili olduğu görülmüştür (Sarı vd., 2003). Bu önemli biyolojik ve farmakolojik

özelliklerinden dolayı ilaç kimyasında yeni bileşiklerin sentezi üzerinde geniş çaplı çalışılmaktadır.

Schiff bazlarının sentezinde son yıllarda yeni teknikler bildirilmeye başlanmıştır. Bu teknikler çözücü içermeyen ortam, mikro dalga, katı hal, su süspansiyon ortamı, moleküler elek ortamında kızılötesi ışınlama sentezi sayılabilir. Bu yenilikler arasında mikro dalga ışınlama sentezinin basit oluşu, tepkimenin kısa sürede daha hızlı verim elde edilmesi ve çevre dostu olması gibi sebeplerden yaygın olarak kullanılmaktadır (Silva vd., 2011). Schiff bazları oluşturuldukları maddelere göre değişik özellik gösterirler ve bu özellikleri sayesinde araştırmacılara çeşitli alanlarda çalışma fırsatı oluşmaktadır.

Diğer alanlarda olduğu kadar polimer teknolojisinde de çok başarılı çalışmalar yapılmaktadır. Polimer teknolojisinde polimerler için anti-statik madde olarak, tarım sahalarında ve bazı grupların özelliklerinden dolayı boya endüstrisinde kullanılmaktadır (Kuru ve Serin; 2018). Lityum iyon piller için Schiff bazlı polimerler anot olarak sentezlenir (Ke vd., 2021). Hatta, plastik sanayisinde Schiff bazlı bileşikler kullanılarak yangına dayanıklı epoksi termoset bileşikler üretilmektedir (Xie vd., 2020). Elektron çekici ve elektron alıcı Schiff bazlı polimer boyalar sentezlenerek ürünlerin absorban ve floresan özellikleri incelenmektedir (Şenol; 2017).

Schiff bazlarının kullanım alanlarından biri de korozyondur. Yapısında bulunan imin ($-C=N-$) grubu molekülün metal üzerinde absorbe olmasında oldukça etkilidir ve metalin korozyonuna karşı dayanımını da artırmaktadır (Özbakır, ve Çiftçibaş; 2017). Bir ucu aromatik amin diğer ucunun da aldehit grubu bulunduran Schiff bazları, son yıllarda asidik ortamda korozyon inhibitörü olarak sıklıkla tercih edilmektedir (Abd El-Lateef vd., 2015; Hegazy vd., 2012). Azometin bileşiklerini içeren alkid boyaları çok iyi alev geciktirici etkisi olduğundan bu katkı maddelerin korozyon direncini önemli ölçüde iyileştirildiği gözlenmektedir (Abd El-Wahab, 2015).

Schiff bazlarının gün geçtikçe kullanım alanları yaygınlaşmaktadır. Çevresel numunelerde potansiyometrik davranışları araştırmak için iyon seçici elektrotlarda kullanılmaktadır (Kardaş ve Topcu; 2018). Schiff bazları fotokromizm ve termokromizm özellik göstermektedir (Li, 2015; Hadjoudis, 2004). Bu özellikleri

kullanılarak termokromik bir malzeme üretilmektedir (Xiao vd., 2014). Fotokromizm özelliği kullanılarak da radyasyon yoğunluğunun kontrol ve ölçümü, görüntü sistemleri ve optik bilgisayarlar da kullanılır (Yeap vd., 2003). Schiff bazları optik sensörler olarak kullanılarak çevreden ve biyolojik numunelerden gelen toksik kimyasalların tespitinde (Berhanu vd., 2019), Schiff baz bileşikleri katalitik aktivite uygulamalarında (Sogukomerogulları vd., 2019; Buldurun vd., 2019; Durmuş vd., 2017), Schiff bazlı bileşiklerinden floresan film probu hazırlanmasında, metal iyonlarının tespitinde, moleküler doking çalışmalarındaki yararlarından dolayı geniş bir kullanım alanına sahiptir (Gan; 2017; Kamacı ; 2017 Karakurt vd., 2019; Manjuraj vd., 2020).

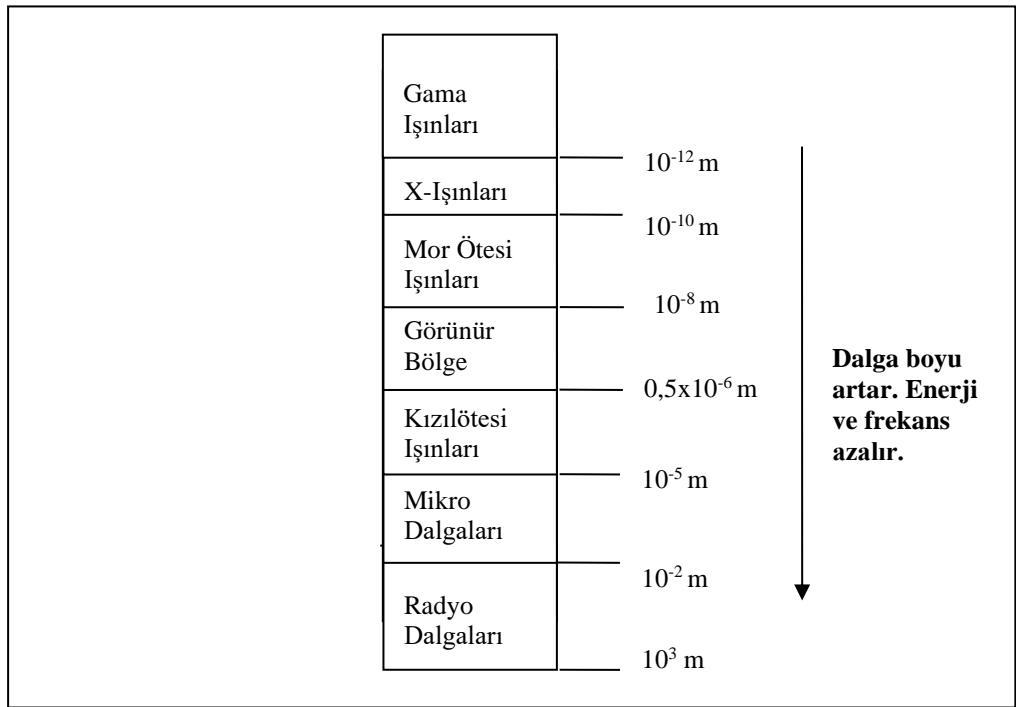
Schiff bazları kimya alanının yanında fizik, biyoloji gibi pek çok alanlardaki araştırmacılarında ilgi odağı haline gelmiştir. Bu önemli bileşiğin özellikleri sayesinde çalışmalara her gün bir yenisi eklenerek geniş bir alana yayılmaktadır. Schiff bazları araştırmacılar tarafından sentezlenerek karakterizasyonu için spektrometrik yöntemlerle birlikte teorik hesaplamalardan destek alınarak aydınlatılır (Karaca, 2018; Tahtacı, 2017; Yılmaz, 2016; Berber vd., 2020; Bozhan ve Özşahin, 2018).

Bu çalışmada, Schiff bazlı bileşik olan 6-6'-(1E-1'E)-(Propan-1,3 Diilbis (Azaniliden)) Bis (Fenilmetaniliden)) Bis (3- Oktiloksi) Fenol) [PDABPB]'ün spektroskopik yöntemleri (IR, Raman, ¹H-NMR, ¹³C-NMR) kullanılarak hesaplamalı kimya modeli (DFT) yardımıyla yapısal özelliklerinin açıklanması amaçlanmıştır.

2. GENEL BİLGİLER

2.1. Elektromanyetik Spektrum

Elektromanyetik dalgaların dalga boyu, frekans veya enerji aralığına göre sınıflandırılması ile elektromanyetik spektrum oluşturulur. Elektromanyetik spektrum çeşitli bölgelerden oluşmaktadır. Her bölge farklı isimle adlandırılmaktadır. Bu sınıflandırma sonucunda, elektromanyetik spektrum bölgeleri, radyo dalgaları, mikro dalgalar, kızılötesi ışınlar, görünür bölge dalgaları, mor ötesi dalgaları, X-ışınları ve gama ışınlarını kapsamaktadır. Her bir spektrum bölgesi farklı bir araştırma alanını içermektedir.



Şekil 2.1. Elektromanyetik spektrum

2.1.1. Radyo Dalgaları

Spektrum üzerinde en uzun dalga boyuna sahip ışınlardır. Bu spektrum bölgesinde çekirdek spini geçişleri gözlenmektedir. Bu nedenle, maddelerin çekirdek manyetik rezonansı (NMR) ve elektron paramanyetik rezonansı (ESR) bu bölgede incelenmektedir.

2.1.2. Mikro Dalgalar

Dönme spektroskopisinin temelini oluşturur. Mikro dalganın etkisi ile molekülerin dönme enerji geçişleri olmaktadır. Ayrıca, mikro dalgalar sayesinde

numunelerin ısıtılmasında, veri bilgilerinin taşınmasında, radar sistemlerinde kullanılmaktadır.

2.1.3. Kızılötesi Işımlar

Bu ışınlar ile moleküllerin titreşim enerji geçişleri gerçekleştirilmektedir. Bu ışınlar elektromanyetik spektrumda görünür bölge ile mikro dalga bölgesi arasına düşmektedir. Bu titreşim bölgesinde ışınlar yakın, orta ve uzak kızılötesi olmak üzere üç kısma ayrılmaktadır. Bu spektrum bölgesinde moleküler titreşim geçişleri gözlemlendiği için bu araştırma alanına kızılötesi spektroskopisi veya moleküler titreşim spektroskopisi denir. Moleküllerin ayırt edici özelliğini veren karakteristik özellikleri hakkında bilgi verirler. Bu bölge moleküler titreşimlerin parmak izi gibidir.

2.1.4. Görünür Bölge

İnsan gözü ile görülebilen elektromanyetik dalgalardır. Buna ışık adı verilir. Görünür bölgede farklı dalga boylarına sahip renkler vardır. Beyaz ışık prizma veya merceğe üzerine düşürüldüğünde dalga boylarının büyüklüğüne göre kırmızı, turuncu, sarı, yeşil, mavi, mor olarak renklere ayrılmaktadır.

2.1.5. Morötesi Dalgaları

Bu ışınlar UV ışınları da denilmektedir. Çıplak gözle görülmezler. Görünür bölgeden daha kısa dalga boyuna sahiptirler. Güneşten gelen bu ışınların bir kısmı dünyamıza ulaşır bir kısmı ise atmosfer tarafından tutulmaktadır. Bu ışınlar sayesinde moleküllerin elektronik geçişleri gözlenir.

2.1.6. X-Işımları

X ışınları gözle görülmeyen pek çok alanda kullanılan röntgen ışınları olarak bilinen iyonlaştırıcı özelliği bulunan ışınlardır. X-Işımları spektroskopisiyle kristallerin yapıları belirlenmektedir.

2.1.7. Gama Işımları

X-ışınlarından daha yüksek enerjiye sahip ışınlardır. Bu ışınlar yüksüz ve zararlı ışınlardır. Bu ışınlar çekirdek tepkimeleri sonucunda gerçekleşir.

2.2. Kızılötesi (Infrared) Spektroskopisi

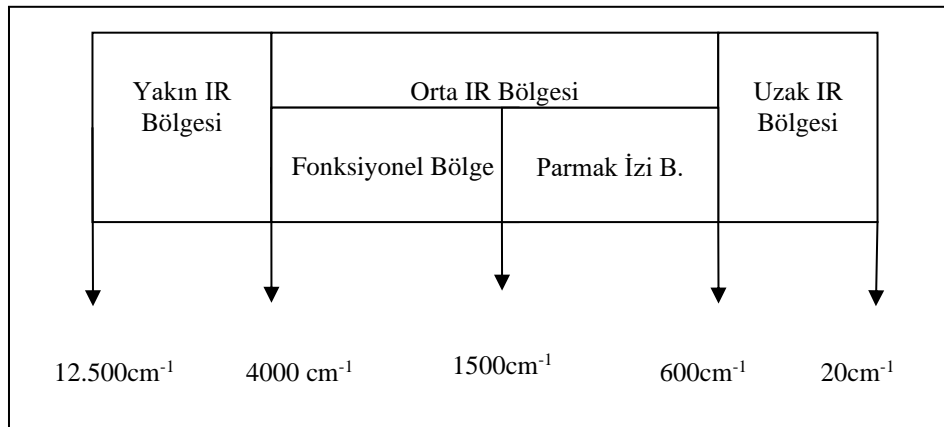
Kızılötesi ışıması, elektromanyetik spektrumda dalga boyu açısından görünür bölgeden daha uzun ve mikro dalgadan daha kısa olan ışımalarıdır. Spektroskopide

ışınımların ölçüm sonuçları genelde dalga sayısı (cm^{-1}) cinsinden verilir. Bu ışınlara yakın, uzak, orta olmak üzere üç bölgede incelenmektedir.

Yakın IR bölgesi genelde $12500\text{-}4000\text{ cm}^{-1}$ aralığını kapsar. Yapılan incelemelerde hızlı, doğru kararlar alınmasında, spektrumlardaki katlı ton ve birleşik bantların teşhisinde güvenilir bir bölgedir.

Orta IR bölgesi çok büyük bir öneme sahip olup $4000\text{-}400\text{ cm}^{-1}$ aralığındadır. Orta IR bölgesinde fonksiyonel ve parmak izi bölgesi olarak ele alınmaktadır. $4000\text{-}1500\text{ cm}^{-1}$ aralığında fonksiyonel gruplar tespit edilmektedir. $1500\text{-}600\text{ cm}^{-1}$ bölgesi ise parmak izi bölgesine ait olup moleküllerin ayırt edici bölgesidir. Bu bölgedeki pikler moleküllere özgüdür. Moleküllerin tanımlanmasında çok yararlıdır.

Uzak IR bölgesi mikro dalga kaynaklı ışınlarla çok yakın olduğundan dönme titreşim hareketleri ve ağır atomların titreşim frekanslarının yorumlanmasında $600\text{-}20\text{ cm}^{-1}$ aralığındaki alandır.



Şekil 2.2. Kızılötesi bölgeleri

Bileşiği oluşturan atomlar dönme, öteleme ve titreşim enerji seviyelerine sahiptir. Moleküle gönderilen kızılötesi ışınım bir molekül tarafından soğurularak dönme ve titreşim enerji seviyelerinde değişime sebep oluyorsa kızılötesi spektroskopisi ilgi alanıdır. Soğurma neticesinde molekülün yapısında bir değişiklik olmazken atomlar arasındaki uzaklık ve açıların değişimi gerçekleşmektedir. IR spektroskopisindeki soğurma bantlarının elde edilmesi için atomların titreşimleri neticesinde moleküllerin dipol momentinde değişim olması gerekmektedir.

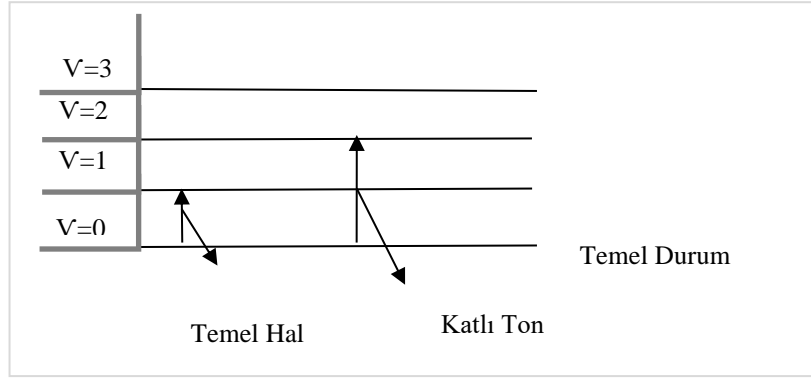
Titreşim hareketleri Hooke yasasına dayanmaktadır. Hooke yasasına göre, basit iki atoma sahip molekülün titreşim frekansı şu şekildedir.

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{2\pi c} \sqrt{\frac{k}{m_{ind}}} \quad (2.1)$$

$$m_{ind} = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B} \quad (2.2)$$

m_{ind} ifadesi indirgenmiş kütle, k ise kuvvet sabiti, $\tilde{\nu}$ titreşim frekansı olarak tanımlanmaktadır. Kuvvet sabiti, moleküldeki atomların kütlelerine, hibritleşme türüne, molekülde olan elektronegatif yapının bulunup bulunmamasına, rezonans olayına, bağlar arasındaki tekli, çiftli, üçlü bağ yapısına göre değişiklik göstermektedir. Tek bağlı yapıya sahip molekülde kuvvet sabiti yaklaşık $k=500$ N/m dir. Çift bağlarda kuvvet sabiti iki katına, üçlü bağlarda ise kuvvet sabiti üç katına çıkmaktadır. Kuvvet sabiti arttıkça moleküller arasındaki bağlar daha kuvvetli olacaktır (Pavia vd., 2009).

Kırmızı ötesi spektrumunda bant oluşması için molekülün temel enerji seviyesinden diğer enerji seviyelerine geçiş yapması gerekir. $\tilde{\nu}_0$ -taban durumundan $\tilde{\nu}_1$ -birinci uyarılmış enerji seviyesine geçerken ν frekansı kadar temel soğurma bandı oluşmaktadır. Bu temel geçişler izinlidir fakat spektrumda izinli olamayan geçişler de vardır. Işınım temel enerji seviyesinden her zaman bir üst enerji seviyesine çıkmaz eğer ışınım ν_0 dan ν_2 enerji seviyesine geçerse elde edilen bant katlı ton bandıdır. Temel frekans ile katlı ton frekansı yaklaşık olarak birbirine eşit olursa Fermi rezonansı gerçekleşir ve spektrumda görülen bu banda fermi rezonans bandı denir (Erdik,1993). Molekülün normal frekanslarından farklı değer almasını sağlayan fermi rezonansı, katlı ton, birleşik bant gibi olaylar IR'de elde edilen pik sayısının artmasına sebep olmaktadır. Molekülün yapısı veya dış etkenlerden dolayı bazı pikler görünmez veya üst üste çakışabilirler. Yukarıdaki nedenlerden dolayı titreşim spektrumunun band atamalarını yapmak güçleşir.



Şekil 2.3. Enerji seviyeleri

Molekülün IR ışınımını soğurması için molekül titreşirken o esnada dipol momentinin de değişmesi gerekmektedir. Küçük moleküllerde oluşan temel bantların teşhis edilmesi ve yorumlanması çok basittir. Fakat günümüzde sentezlenen moleküller çok büyük olduklarından çok karmaşık spektrumlar elde edilir. Çünkü N atomlu bir molekülde $3N$ kadar serbestlik derecesi olup doğrusal olmayan bir molekül için 3-dönme ve 3-öteleme hareketi dışında $3N-6$ adet titreşim bandı gözlenmesi beklenir. Doğrusal olan molekülde ise hareket iki eksen yönündedir ve $3N-5$ tane pik beklenir (Stuart, 2005).

2.2.1. Kızılötesi Bölgesinde Karakteristik Bantlar

IR spektroskopisi yardımıyla molekülün yapısı tayin edilmektedir. Kırmızı ötesi spektrumda molekülün kolay bir şekilde yorumlanabilmesi için fonksiyonel bölge ve parmak izi bölgesinden yararlanılmaktadır. Bu bölgeler için soğurma değerleri tablolar halinde düzenlenmektedir. Bu tablolar sayesinde yapısı bilinen molekülün spektrumları ile yapısı bilinmeyen moleküllerin spektrumları karşılaştırılarak bilgi sahibi olunmaktadır. Bu tür bant atamalarına kalitatif atama denir. Böylesi atamalarda yanlışlık payı olabilir.

IR'ye ait frekans değerleri ilgili kaynaklarda genel olarak değerleri verilmiştir. Bu frekans değerlerini molekül içi ve moleküler dışı etkiler değiştirmektedir. Molekül yapısına bağlı olarak hidrojen bağı, konjugasyon, elektronegatif atomların varlığı, rezonans, atomların birbirleriyle etkileşimi gibi nedenler frekans değerlerini kaydırmaktadır. Moleküler dışı etki olarak da çalışılan ortam, bileşiğin fiziksel durumu ve çözeltinin yapısı da sonuçların değişmesine neden olmaktadır.

2.2.2. Kızılötesi Spektrumun Klasik Kuramda Açıklanması

Kızılötesi spektrumda soğurma bandı elde edilmek için titreşim esnasında gerçekleşen dipol momentinin sıfırdan farklı yani değişim gözlenmesi gerekir. Dipol momentinin değişimi sistemde elektriksel alanı meydana getirmektedir. Bileşiğin sahip olduğu ν normal frekansıyla kızılötesi ışınımının elektrik alan frekansının eşit olması gerekir. Bu şart sağlanırsa molekül tarafından ışın soğrulur. Bileşiğe ait elektrik dipol moment vektörel bir nicelik olduğundan $\vec{\mu}$ ile gösterimi kabul edilmektedir. Moleküler dipol moment titreşim esnasında olduğundan Q titreşim normal koordinatlarının bir işlevi olarak Taylor serisine açılırsa;

$$\mu = \mu_0 + \sum_k \left\{ \left(\frac{d\vec{\mu}}{dQ_k} \right) Q_k \right\} + \frac{1}{2} \sum_k \left\{ \left(\frac{d^2\vec{\mu}}{dQ_k^2} \right) Q_k^2 \right\} + \dots \quad (2.3)$$

Dipol moment normal koordinat cinsinde bu şekli almaktadır. Yüksek terimli ifadeler ihmal edilir ve birinci dereceden terimler dikkate alınmaktadır.

$$\mu = \mu_0 + \sum \left\{ \left(\frac{d\vec{\mu}}{dQ_k} \right) Q_k \right\} \quad (2.4)$$

tanımlanmaktadır. Bu denkleme göre $\left(\frac{d\vec{\mu}}{dQ_k} \right)$ ifadesi sıfırdan farklı olduğunda IR spektroskopisinde araştırmacının eline okunacak pikler gelmektedir.

2.2.3. Kızılötesi Spektrumun Kuantum Kuramda Açıklanması

Kuantum kuramda IR spektroskopisini anlayabilmek için dalga fonksiyonlarını a ve b alçak ve yüksek enerji düzeylerindeki ψ^a ve ψ^b dalga fonksiyonlarıyla temsil ettiğimizde geçiş dipol momentini;

$$\vec{\mu}_{ab} = \int \psi^{(a)} \vec{\mu} \psi^{(b)} d\tau \quad (2.5)$$

şeklinde olup, $d\tau$ hacim elemanıdır. Geçiş momentini moleküler geçişler esnasında soğurmanın şiddetini belirlemektedir. $\vec{\mu}_{ab}$ denklemindeki $\vec{\mu}$ yerine yazılırsa;

$$\vec{\mu}_{ab} = \int \psi^{(a)} \psi^{(b)} d\tau + \sum_k \left\{ \left(\frac{d\vec{\mu}}{dQ_k} \right) \right\}_0 \int \psi^{(a)} Q_k \psi^{(b)} d\tau \quad (2.6)$$

a ve b enerji düzeyleri aynı konumu göstermedikçe $\psi^{(a)}$ ve $\psi^{(b)}$ dalga fonksiyonları ortogondur. Eğer a ve b enerji düzeyleri aynı konumdaysa bu olayda

soğurma olmamaktadır. O halde bir üst enerji seviyesine geçebilmesi gerekli olan koşul;

$$\vec{r}_{ab} = \left(\frac{d\vec{r}}{dQ_k} \right) \int \psi^{(a)} Q_k \psi^{(b)} d\tau \quad (2.7)$$

$\left(\frac{d\vec{r}}{dQ_k} \right)$ sıfırdan farklı ise bileşik soğurma yapmaya uygundur.

2.3. Moleküllerin Titreşim Türleri

Titreşim hareketleri gerilme ve eğilme hareketleri olarak iki bölümde incelenmektedir.

2.3.1. Gerilme Titreşimleri

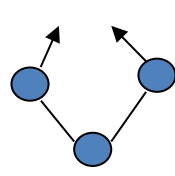
Gerilme titreşimleri atomlar arasındaki bağların belirli aralıklarla uzayıp kısılmasıyla görülen hareketlerdir. Moleküldeki bağların aynı anda uzaması veya aynı anda kısılması simetrik gerilmeyi, moleküldeki bağların aynı zamanda birinin uzaması diğerinin kısılmasıyla da asimetrik gerilme oluşmaktadır.



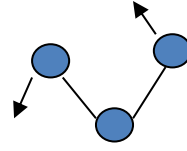
Şekil 2.4. Moleküler gerilme titreşimleri

2.3.2. Eğilme Titreşimleri

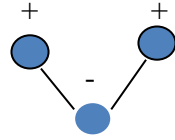
Eğilme titreşimleri, atomlar arasındaki bağ açılarının değişmesi ile oluşan titreşim hareketidir. Eğilme titreşimleri düzlem içi ve düzlem dışı olarak incelenmektedir. Düzlem içi eğilme hareketi başlığında makaslama ve sallanma hareketi, düzlem dışı eğilmede ise dalgalanma, burkulma titreşim hareketleri oluşmaktadır.



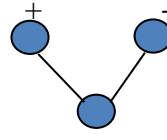
Düzlem içi-makaslama



Düzlem içi-sallanma



Düzlem dışı -dalgalanma



Düzlem dışı-burkulma

Şekil 2.5. Moleküler eğilme titreşimleri

2.4. Raman Spektroskopisi

Raman spektroskopisi moleküler titreşim spektroskopisinin bir çeşididir. Raman spektroskopisinin temeli ışınımın saçılması olayından kaynaklanmaktadır. Saçılma elastik ve elastik olmayan saçılma olarak iki başlıkta incelenmektedir. Işıma kaynağı olarak günümüzde lazer ışını görev almaktadır. Bu ışınlanma sonucunda Raman'a göre üç çeşit saçılma elde edilmektedir. Bunlar, Rayleigh saçılması, Stokes saçılması, Anti-stokes saçılmasıdır.

Saçılan ışığın bir kısmı gelen ışığın dalga boyuyla aynı bir kısmı ise farklı dalga boylarındadır. Farklı dalga boylarına kaymasının sebebini C.V. Raman moleküllerin kimyasal yapısına bağlı olduğunu ifade etmiştir. Elastik olmayan saçılmanın temeli foton ile numunenin çarpışmasından sonra fotonun dalga boyunda değişim olmasıdır. Elastik saçılma ise foton ile numunenin çarpışmasından sonra fotonun dalga boyunda değişim olmazsa veya etkileşen maddenin enerjisi ile saçılan fotonun enerjisi eşit ise elastik saçılma olur. Elastik saçılma ise Rayleigh saçılmasının temelini oluşturur. Rayleigh saçılması, Stokes ve Anti-Stokes saçılımına göre daha şiddetlidir. Bu saçılmaların gözlemlendiği spektrumda moleküler titreşim bantları stokes çizgilerine göre çözümlenmektedir. Bu spektroskopiye Raman spektroskopisi denilmektedir.

Raman ve Infrared spektroskopisi birbirinin tamamlayıcısı olmakla beraber ikisinin çalışma ilkesi birbirinden farklıdır. Raman olayında, belirli bir enerjiye sahip numune, elektromanyetik ışınım ile etkileşime girer ve kısa süreli sanal bir enerji

düzeyine geçiş yapar. Sanal enerji seviyesi sonsuz sayıda değer olup, kararlı bir enerji seviyesi değildir. Bu nedenle molekül kararlı bir hale gelmek için ya daha önceden bulunduğu enerji düzeyine veya bir başka enerji seviyesine gitmek istemektedir. Bu olayda, foton ile molekül arasında bir enerji alışverişi yaşanır.

2.4.1. Raman Etkisinin Klasik Teorisi

Klasik olarak, moleküller üzerine ν_0 frekanslı elektromanyetik dalga gönderildiğinde elektrik alan ile molekülün elektriksel özellikleri etkileşime girerler. Elektromanyetik alan indüklenmiş dipol momente yol açarak molekülün yüklü parçacıklarına etki eder. P indüklenmiş dipol momenti uygulanan elektrik alanla orantılıdır.

$$P = \alpha E \quad (2.8)$$

α kutuplanabilirlik, E elektrik alan ve P indüklenmiş dipol momenttir. Hem E hem de α zamanla değişir. Radyasyonun elektrik alanı zamanın fonksiyonu olarak ν_0 frekansında salınım yapar. Molekülün bu dipol salınımları, Rayleigh, Raman anti-Stokes ve Raman Stokes frekanslarıyla saçılmış radyasyonu yayar. Eğer moleküler titreşim kutuplanabilirlikte değişime neden olmazsa dipol moment salınıminin genlik modülasyonu olmaz. Böylece, Raman Stokes veya Raman anti-Stokes saçılması beklenmez.

İki atomlu molekülde kutuplanabilirlik molekülün çekirdekleri arasındaki uzaklıkla ilgilidir. Titreşim esnasında çekirdekler arası uzaklık değiştiği için α 'yı denge konumu etrafında $r - r_0$ 'a göre seriye açılırsa (Goca, 1993).

$$\alpha(r) = \alpha(r_0) + \left(\frac{d\alpha}{dr}\right)_{r=r_0} (r - r_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2\alpha}{dr^2}\right)_{r=r_0} (r - r_0)^2 + \dots \quad (2.9)$$

$$r = r_0 + b \cos 2\pi\nu_0 t \quad (2.10)$$

(2.10) denklemi (2.9) denkleminde yerine yazılırsa;

$$\alpha(r) = \alpha(r_0) + b \left(\frac{d\alpha}{dr}\right)_{r=r_0} \cos 2\pi\nu_0 t + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2\alpha}{dr^2}\right)_{r=r_0} b^2 \cos^2 2\pi\nu_0 t + \dots = \quad (2.11)$$

$$\alpha(r_0) + \frac{1}{4} \left(\frac{d^2\alpha}{dr^2} \right)_{r=r_0} b^2 + \left(\frac{d\alpha}{dr} \right)_{r=r_0} b \cos 2\pi \nu_0 t + \frac{1}{4} \left(\frac{d^2\alpha}{dr^2} \right)_{r=r_0} b^2 \cos 4\pi \nu_0 t + \dots$$

Burada, molekülün ν_0 frekansı, r_0 denge uzaklığı, ν ise gelen ışığın frekansıdır. Işığın elektrik alanı,

$$E = E_0 \cos 2\pi \nu t \quad (2.12)$$

ve molekülün indüklenmiş dipol momenti,

$$P = aE = aE_0 \cos 2\pi \nu_0 t \quad (2.13)$$

dir. (2.12) denklemi (2.13) denkleminde yerine yazılırsa dipol momentin değeri;

$$\begin{aligned} P = & \left[\alpha(r_0) + \frac{1}{4} \left(\frac{d^2\alpha}{dr^2} \right)_{r=r_0} b^2 \right] E_0 \cos 2\pi \nu t + \left(\frac{d\alpha}{dr} \right)_{r=r_0} b E_0 \cos 2\pi \nu_0 t \cos 2\pi \nu t + \\ & \frac{1}{4} \left(\frac{d^2\alpha}{dr^2} \right)_{r=r_0} b^2 E_0 \cos 4\pi \nu_0 t \cos 2\pi \nu t + \dots = \quad (2.14) \\ & \left[\alpha(r_0) + \frac{1}{4} \left(\frac{d^2\alpha}{dr^2} \right)_{r=r_0} b^2 \right] E_0 \cos 2\pi \nu t + \frac{1}{2} \left(\frac{d\alpha}{dr} \right)_{r=r_0} b E_0 \cos 2\pi (\nu + \nu_0) t + \\ & \frac{1}{2} \left(\frac{d\alpha}{dr} \right)_{r=r_0} b E_0 \cos 2\pi (\nu - \nu_0) t + \frac{1}{8} \left(\frac{d^2\alpha}{dr^2} \right)_{r=r_0} b^2 E_0 \cos 2\pi (\nu + 2\nu_0) t + \\ & \frac{1}{8} \left(\frac{d^2\alpha}{dr^2} \right)_{r=r_0} b^2 E_0 \cos 2\pi (\nu - 2\nu_0) t + \dots \end{aligned}$$

elde edilir. Böylece, saçılan ışığın $\nu - \nu_0$, $\nu = \nu_0$, $\nu + \nu_0$ frekanslarının yanı sıra üst harmoniklerdeki frekanslarda ışınlar olmaktadır. Klasik fizikte ki bu sorun için kuantum fiziği çözüm getirmektedir (Goca, 1993).

2.4.2. Raman Etkisinin Kuantum Teorisi

Fotonlarla molekülün etkileşimi sonrası ışınlar elastik veya elastik olmayan saçılma olarak dağılırlar. Elastik saçılmada enerji değişimi söz konusu değildir.

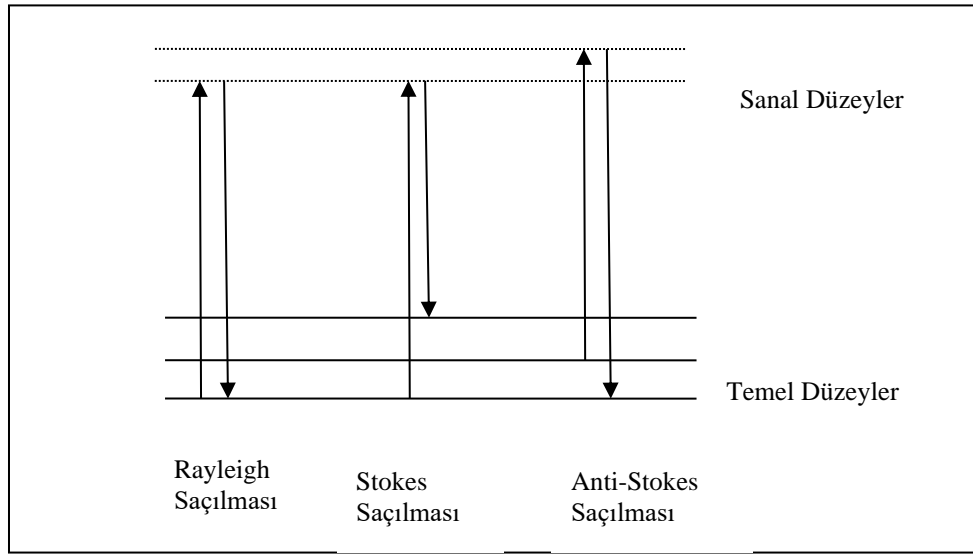
$$h\nu_s = h\nu - (E' - E) \quad (2.15)$$

$$\nu_s = \nu - \frac{E' - E}{h} = \nu - \nu_0 \quad (2.16)$$

$h\nu$ enerjisiyle gelen ışık molekülden $E' - E$ miktarda enerji soğurmakla E' uyarılmış hale geçer. Kalan enerji $h\nu_s$ olarak saçılır. Buna göre saçılan ışık frekansı

gelen ışık frekansından küçük olursa, bu saçılma çizgisine Stokes çizgisi adı verilmektedir. Diğer durumda ise saçılan ışığın frekansı gelen ışığın frekansından büyük ise bu saçılma çizgisi ise Anti-Stokes çizgisidir (Atkins, 2005). Uyarılma enerjisi, saçılan fotonun enerjisine eşit ise yani enerji kaybı olmazsa Rayleigh saçılmasıdır.

Kuantum fiziği sayesinde elimizdeki verilerle deneysel sonuçların uyduğu gözlenmektedir. Böylece Raman saçılması olayı net bir şekilde açıklanabilmektedir.



Şekil 2.6. Raman saçılması

2.5. Nükleer Manyetik Rezonans Spektroskopisi

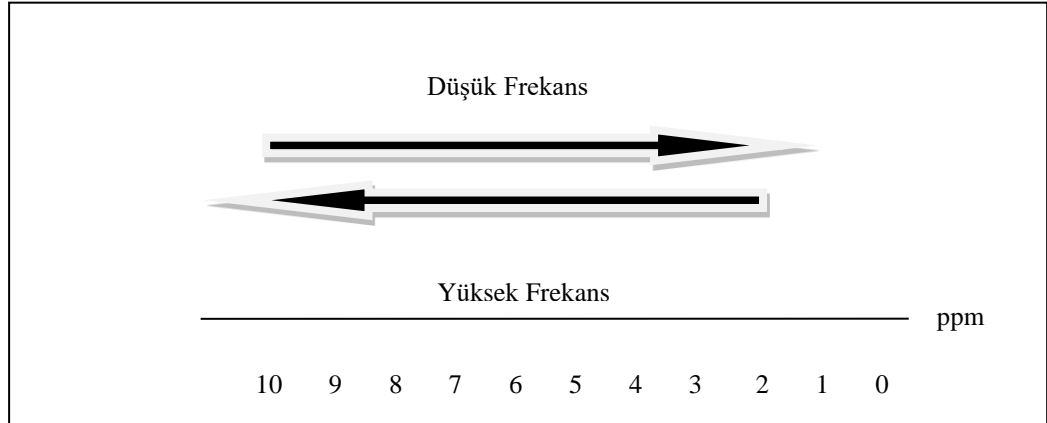
Nükleer manyetik rezonans spektroskopisinin temeli elektromanyetik spektrumdaki radyo frekans bölgelerindeki ışınların soğrulmasına bağlıdır. Bu ışınların etkileri ile çekirdek spini geçişleri oluşmaktadır. Çekirdek spini, çekirdeğin kendi eksenini etrafında dönerek topaç hareketine benzer salınım (presesyon) hareketi yapmaktadır.

Rezonans şartı için çekirdek bulunduğu enerji seviyesinde radyo frekansı ışınımını soğurarak yeterli enerjiye ulaştığında bir üst enerji seviyesine geçmesi gerekir. Rezonans şartının gerçekleşmesiyle birlikte NMR’da pik elde edilmektedir.

2.5.1. Kimyasal Kayma

Çekirdeğin sahip olduğu rezonans frekansı ile standart olarak kullanılan tetrametilsilan maddenin rezonans frekansı karşılaştırılarak oluşan farka veya

uzaklığa kimyasal kayma adı verilmektedir. Kimyasal kayma değerleri 0-10 arasında değişen sayı değerlerini almaktadır.



Şekil 2.7. NMR spektrumunda kimyasal kayma değerleri

2.5.2. Kimyasal Kaymayı Etkileyen Faktörler

Çok fazla sayıda çekirdek türüne NMR tekniği uygulanmasına rağmen organik kimyacıların en fazla NMR'ı kullandığı çekirdekler proton ve karbondur. Mesela, proton NMR'ında aslında tüm protonlar aynı frekansta rezonansa gelmesi beklenirken gerçekte her bir protonun kimyasal çevresi farklı olduğu için ayrı ayrı frekansta rezonansa gelirler. Kimyasal kayma dediğimiz bu olay sonucunda molekül içinde farklı fonksiyonel grupların tespit edilmesine olanak sağlar.

Kimyasal kimya, elektronegatif etki, hibritleşme, asidik hidrojenler ve hidrojen bağı ile değişmektedir. Genelde, bunlar molekül içi ve molekül arası etkiler olarak sınıflandırılabilir. Molekül içi etkenlerin sebepleri arasında, molekülde bulunan karbon atomunda veya komşusundaki karbon atomuna bağlı elektron çekici olan atomların olup olmaması, atomlar arasındaki bağ türleri, melezleşme, manyetik anizotropi, diamanyetik anizotropi gibi etkenler kimyasal kayma değerlerini değiştirmektedir.

Molekülün yapısında elektronegatif atom varsa çekirdeğin çevresindeki elektron bulutunun yoğunluğu azalarak kimyasal kaymanın sonucunu beklenenden daha düşük bölgeye çekerek paramanyetik alanda daha yüksek frekansta değer vermesine sebep olmaktadır.

Molekülde çiftli ve üçlü bağı bulunması atomların birbirine daha kuvvetli bağlanmasına sebep olacağından düşük alan bölgesine kaydırarak frekans değerini

artırmaktadır. Çiftli ve üçlü bağlar melezleşme türlerinin ortaya çıkmasına sebep olmaktadır. Melezleşme türleri kimyasal kayma değerini değiştirerek yüksek frekansta sonuç alınmasına neden olmaktadır.

Manyetik anizotropi ikili, üçlü ve aromatik yapıli bileşiklerde π bağının olması sebebiyle kimyasal kayma sonuçlarını artırmaktadır. Diamanyetik anizotropi, moleküldeki protonda çok fazla perdeleme durumu yaşanacağından pik değerleri yüksek manyetik alanda sonuç vermesine sebep olmaktadır.

Molekül dışı sebepler molekülden kaynaklı olmayan dış faktörlerin etkisiyle oluşmaktadır. Molekül için kullanılan çözücü ve değiştirilen sıcaklık spektrumda beklenen kimyasal değerden farklı sonuçlar vermektedir.

2.5.3. Spin-Spin Yarılmaları

NMR spektroskopisinde pik elde etmek için manyetik alana ihtiyaç duyulmaktadır. Manyetik alana göre komşu atomdaki spinlerin konumu rezonansa gelme durumunu etkileyeceğinden çeşitli yarılmalar oluşmaktadır. İkili, üçlü, dördü vs. pikler verebileceği gibi çoklu piklerde elde edilmektedir. Bu çoklu piklerin arasındaki uzaklık “J” değeri eşleşme sabiti olarak tanımlanır. Spektrumdaki pikler arasındaki uzaklık yani eşleşme sabitinin değeri çekirdeğin cinsine, komşu atomdan ne kadar etkileneceğine göre değişiklik gösterir.

Piklerin bağıl miktarları piklerin altında kalan alanın hesabı Pascal üçgeninden faydalanılarak bağıl bolluk oranları ile belirtilmektedir. Tablo 2.1’de pik değerleri verilmiştir (Pavia vd., 2009).

Tablo 2.1. Pik değerleri

N (Atom Sayısı)	Piklerin Bağıl Şiddeti	Adlandırma
0	1	Tekli pik
1	1:1	İkili pik
2	1:2:1	Üçlü pik
3	1:3:3:1	Dördü pik
4	1:4:6:4:1	Beşli pik
5	1:5:10:10:5	Altılı Pik

2.6. Normal Koordinat Analizi

Moleküllerin titreşim kiplerinin incelenmesi için klasik mekanik yasalarına dayalı hesaplamalar yapan birçok bilgisayar programları vardır. Moleküler titreşim band atamalarında çok kullanılan programlardan biri Molvib fortran programıdır ve harmonik kuvvet alanları yaklaşımı kullanır. Yani, program girdi olarak molekülün denge durumundaki moleküler geometrisine ait olan harmonik kuvvet alanlarına ihtiyaç duyar. Bu kuvvet alanları, hesaplamalı kimyada kullanılan modellerden temin edilir. Yaklaşık kuantum mekaniksel modellerde ise bazı sistematik hatalardan dolayı bu kuvvet alanları bir miktar yüksek hesaplanır. Molvib, molekülün gözlenebilir kuvvet alanları (ya da gözlenebilir titreşim frekansları) ile bu denge geometrisinden hesaplanan kuvvet alanları arasında mukayese etmek için belirli çarpanlar (skalalar) kullanır. Bu çarpanları kendimiz önerebileceğimiz gibi kendisi de üretebilir. Normal koordinat hesabında önemli husus, kuvvet sabitlerinin kalitesidir.

Literatürde ab initio kuantum mekaniksel harmonik kuvvet alanları hesaplamalarında en kaliteli kuvvet sabitleri Yoğunluk Fonksiyonel teorisinden gelmektedir. Çünkü Hartree-Fock Roothaan (HFR) metodundan gelen kuvvet sabitleri klasik mekanik yasalarına dayalı seküler determinatın sonuçlarını genelde sağlamamaktadır. Yani, bu seküler determinatın verdiği titreşim frekansları ile ab initio hesaplarından gelen harmonik frekanslar uyumlu olmalıdır. HFR metodu elektron korelasyonunu hesaplamalarda dikkate almamaktadır. İleri HFR metotları hesaplama süresi pahasına bu hatayı gidermektedir. Bunun yerine daha çok elektron korelasyonunu da dikkate alan DFT metotları tercih edilmektedir. DFT metotları HFR metoduna göre daha hızlı ve doğru sonuç vermektedir. Elbette DFT hesabından gelen titreşim frekansları baz seti kesintisinden dolayı bir parça gözlenebilir frekanslardan yüksek çıkmaktadır. Bu sistematik hatalarla birlikte molekülün anharmonik etkilerini de gidermek için gözlenebilir frekanslar ile hesaplanmış frekansları, klasik mekanik yasalarına dayalı olan normal koordinat analizinde, skala işlemine tabi tutmak zorundayız. Molvib programı ile yapılan normal koordinat analizi sayesinde molekülün herhangi gözlenebilir titreşim bandı için yüzde potansiyel enerji dağılımları (P.E.D), kızılötesi ve Raman band şiddetleri elde edilebilmektedir.

Moleküler titreşimlerin normal koordinat analizini (NCA) gerçekleştirmek için, q_i iç koordinatlar cinsinden yeni bir koordinat seti tanımlanması gerekir. Bu yeni koordinat sistemine normal koordinat sistemi denir. Q_k olarak gösterilip, $k=1,2,\dots,3N$ olarak ifade edilir. Normal koordinatlar, q_i kütle ağırlıklı kartezyan yer değiştirme koordinatları açısından doğrusal denklemlerle tanımlanır. Klasik mekanik yasalarına göre işlem gören normal koordinat analizini tanıtan denklemler şu şekildedir.

$$Q_k = \sum_{i=1}^{3N} l''_{ki} q_i \quad (2.17)$$

$$k=1,2,\dots,3N$$

l''_{ki} katsayılarının seçildiği, böylece yeni koordinatlar açısından kinetik ve potansiyel enerjilerin ifadeleri şu şeklide olur.

$$2T = \sum_{i=1}^{3N} \dot{Q}_k^2 \quad (2.18)$$

$$2V = \sum_{i=1}^{3N} \lambda'_k Q_k^2 \quad (2.19)$$

Q ve q ifadeleri birbirine bağlı doğrusal cebirsel denklemlerdir.

$$q_i = \sum_{k=1}^{3N} l'_{ik} Q_k \quad (2.20)$$

$$i=1,2,\dots,3N$$

Q_k ve q_i ifadelerinin hangisinin değeri biliniyorsa birbirlerinin yerine koyulur, Kronecker ifadesi ortaya çıkar.

$$\sum_{i=1}^{3N} l''_{ki} l'_{il} = \delta_{kl} \quad (2.21)$$

$$\sum_{k=1}^{3N} l'_{ik} l''_{kj} = \delta_{ij} \quad (2.22)$$

Normal koordinatlar kullanılarak hareket denklemleri oluşturulursa,

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{Q}_k} + \frac{\partial V}{\partial Q_k} = \ddot{Q}_k + \lambda'_k Q_k = 0 \quad (2.23)$$

$$k=1,2,\dots,3N$$

Aşağıdaki ifadeye göre çözüm yapılırsa;

$$Q_k = K'_k \cos(\lambda'_k t + \varepsilon'_k) \quad (2.24)$$

$$k=1,2,\dots,3N$$

K'_k ve ε'_k keyfi sabitlerdir. Yukarıda verilen q_i ifadesinde Q_k yerine koyulursa,

$$q_i = \sum_{k=1}^{3N} l'_{ik} K'_k \cos(\lambda'_k t + \varepsilon'_k) \quad (2.25)$$

$$l'_{ik} = l_{ik} \quad \text{ve} \quad \lambda'_k = \lambda_k$$

Ortogonalite normal koordinatlara dönüşmenin çok önemli bir özelliğidir. Bir koordinat kümesinin karelerinin toplamını diğer kümelerin karelerinin toplamına dönüştüren yapıya ortogonal dönüşüm olarak adlandırılır.

$$\sum_{i=1}^{3N} \dot{q}_i^2 = \sum_{i,k,l} l_{ik} l_{il} \dot{Q}_k \dot{Q}_l = \sum_k \dot{Q}_k^2 \quad (2.26)$$

En son yazılan denklem normal koordinat sisteminin bir parçasıdır. Bu denklemin doğru olabilmesi için aşağıdaki ifadenin geçerli zorunludur.

$$\sum_i l_{ik} l_{il} = \delta_{kl} \quad (2.27)$$

Ayrıca, Q_k 'yi q_i cinsinden veren dönüşümü içeren benzer kanıtlarla (katsayılar $l''_{ki} = (l^{-1})_{ki}$) olduğu bulunmuştur.

$$\sum_k (l^{-1})_{ki} (l^{-1})_{kj} = \delta_{ij} \quad (2.28)$$

$$(l^{-1})_{ki} = l_{ik}$$

Bu denklemlere göre dönüşüm katsayıları tablosu çizilirse,

	Q_1	Q_2	$Q_3 \dots\dots\dots$	Q_{3N}
q_1	l_{11}	l_{12}	l_{13}	$l_{1,3N}$
q_2	l_{21}	l_{22}	l_{23}	$l_{2,3N}$
q_3	l_{31}	l_{32}	l_{33}	$l_{3,3N}$
...
q_{3N}	$l_{3N,1}$	$l_{3N,2}$	$l_{3N,3}$	$l_{3N,3N}$

q_i koordinatının yönü boyunca bir okun bileşen l_{ik} ile orantılıdır ve $(l^{-1})_{ki}=l_{ik}$ olduğundan, diyagram dönüşümdeki katsayıları da temsil eder.

Normal koordinat ifadesi olan Q_k nın denklemi;

$$Q_k = \sum_i l_{ik} q_i \quad (2.29)$$

N atomlu bir molekülün potansiyel enerjisi analitik bir fonksiyon olarak ifade edilebilir. 3N kartezyen atomik koordinatlarında $R_1, R_2, R_3, \dots, R_{3N}$

$$V(R) = V(R_1, R_2, R_3, \dots, R_{3N}) \quad (2.30)$$

N atomlu bir molekülün potansiyel enerjisi, 3N kartezyen atom koordinatlarında analitik bir fonksiyon olarak ifade edilir.

$$R^0 = (R_1^0, R_2^0, \dots, R_{3N}^0) \quad (2.31)$$

Kartezyen yer değiştirme koordinatları $X_i = R_i - R_i^0$ ($i=1,2,\dots,3N$)

$$V(R) = V(R^0) + \sum_i \left(\frac{dV}{dx_i}\right)_0 x_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(\frac{d^2V}{dx_i dx_j}\right) x_i x_j + \quad (2.32)$$

anharmonik etkiler

Denge enerjisini $V(R_0)$ sıfır enerji noktası olarak belirlenir ve denge durumu geçerlidir.

$$\left(\frac{dV}{dx_i}\right)_0 = 0 \quad (2.33)$$

$$i=1,2,\dots,3N$$

Harmonik yaklaşımda, 3. mertebe ve sonrası için ifadeler ihmal edildiğinde potansiyel enerji şu şekilde ifade edilir.

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i,j} f_{ij} X_i X_j \quad (2.34)$$

Burada f_{ij} katsayıları, dengedeki potansiyel enerjinin ikinci dereceden kısmi türevleri, 3N düzeninin kare simetrik matrisini oluşturmaktadır (harmonik kuvvet sabiti matrisi F olarak adlandırmaktadır).

Klasik tanımda, N atomlu molekülün toplam kinetik enerjisi,

$$T = \frac{1}{2} \sum_i M_i \dot{x}_i^2 \quad (2.35)$$

Potansiyel ve kinetik enerjiler için ifadeler, Lagrange denklemlerinde yerine konulursa;

$$\frac{dV}{dx_i} + \frac{d}{dt} \left(\frac{dT}{d\dot{x}_i} \right) = 0 \quad (2.36)$$

$$(i=1,2,\dots,3N)$$

Klasik Newton hareket denklemlerini elde ederiz.

$$M_i \ddot{x}_i + \sum_j f_{ij} x_j = 0 \quad (2.37)$$

$$(i=1,2,\dots,3N)$$

Bu denklemlerin periyodik çözümleri vardır.

$$x_i = x_i^0 \sin(Wt + \delta) \quad (2.38)$$

$$i=(1,2,\dots,3N)$$

Çözümleri hareket denklemlerinde yerine koyarak x_i^0 genliklerinin ve normal frekanslarının W olduğu yeni bir denklem grubu elde edilir.

$$\sum_j f_{ij} x_j^0 = M_i W^2 x_i^0 \quad (2.39)$$

$$(i=1,2,\dots,3N)$$

Bu denklem grubu, kuvvet sabiti F için özdeğer denklemine denktir.

Hesaplamalar için kütle ağırlıklı kartezyen yer değiştirme koordinatlarını kullanmaktadır. Kütle ağırlıklı koordinatlar şu şekilde ifade edilir.

$$\zeta_i = \sqrt{M_i} x_i \quad (2.40)$$

$$(i=1,2,\dots,3N)$$

$$\sum_j (M_i M_j)^{-1/2} f_{ij} \zeta_j^0 = W^2 \zeta_i^0 \quad (2.41)$$

$$(i=1,2,\dots,3N)$$

Dinamik matris ise;

$$D = M^{-1/2}FM^{1/2} \quad (2.42)$$

$M^{-1/2}$, atomik kütlelerin karşılıklı kareköklerini içeren diyagonal matristir.

Dinamik matris için özdeğer denklemi, matris formunda yazılırsa,

$$\check{U}DU = \Lambda \quad (2.43)$$

Λ diyagonal matristir, özdeğerlerinden oluşmaktadır. $\lambda_i = W_i^2$ ($i=1,2,\dots,3N$)

U ise normalize edilmiş özvektörleri içeren ortagonal bir matristir.

Bir molekül $3N-6$ serbestlik derecesine sahiptir. Bu durum dinamik matriste farklıdır. Özdeğerlerinin altısı sıfır olacaktır.

Normal titreşim frekansı ile dinamik matrise karşılık gelen özdeğerler arasındaki ilişki,

$$\nu_i = 1302,79\sqrt{\lambda_i} \quad (2.44)$$

Ortogonal dönüşüm U , normal koordinatlar Q_i ($i=1,2,\dots,3N$) olarak tanımlanan yeni bir denklem takımı elde edilmektedir.

$$\zeta = UQ \quad \text{ve} \quad Q = \check{U}\zeta$$

Bu koordinatlar açısından potansiyel ve kinetik enerjiler diyagonaldır.

$$V = \frac{1}{2}\check{x}Fx = \frac{1}{2}\check{\zeta}D\zeta = \frac{1}{2}\check{Q}\check{U}DUQ = \frac{1}{2}\check{Q}\Lambda Q \quad (2.45)$$

$$T = \frac{1}{2}\check{x}M\dot{x} = \frac{1}{2}\check{\zeta}\dot{\zeta} = \frac{1}{2}\check{Q}\check{U}\dot{U}\dot{Q} = \frac{1}{2}\check{Q}\dot{Q} \quad (2.46)$$

İç koordinatlar S_i ve kartezyen yer değiştirme x_i arasındaki ilişki matris formundaki ifade edilirse;

$$S = BX$$

B matrisi molekülün geometrisinden elde edilir.

F matrisi iç koordinatlar açısından ifade edilirse potansiyel enerji şu şekilde yazılmaktadır.

$$V = \frac{1}{2} \check{x} \check{B} F_s B x = \frac{1}{2} \check{s} F_s s \quad (2.47)$$

Dinamik matris denklemleri son olarak şu şekli almaktadır.

$$D = M^{-1/2} \check{B} F_s B M^{-1/2} \quad (2.48)$$

L-matrisi, normalden iç koordinatlara dönüşüm sağlar ve aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$L = B M^{-1/2} U \quad (2.49)$$

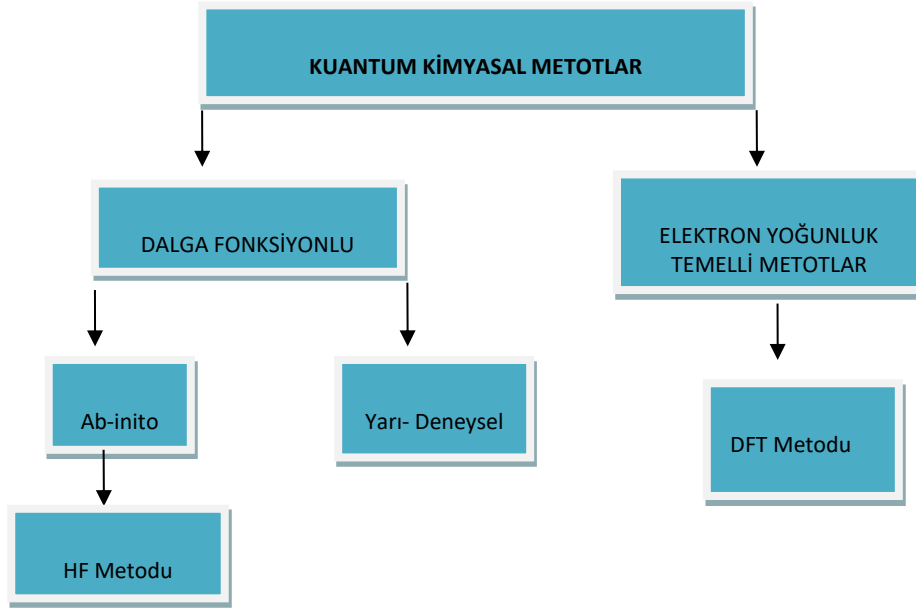
B matrisi ve özvektör matrisi U yardımıyla L matrisi hesaplanmaktadır. Normal modların kolayca yorumlanabilmesi için sütunlar l'e normalleştirilmektedir.

Molekülün normal titreşimlerinin simetri sınıflandırması için potansiyel enerji dağılımına (P.E.D) ihtiyaç duyulmaktadır. Molvib programı ile potansiyel enerji dağılımı tanımlanmaktadır (Wilson, 1955).

$$P_{ij} = (L_{ij})^2 F_{jj} / \lambda_i \quad (2.50)$$

2.7. Hesaplamalı Kimya Metotları

Schrödinger denkleminin tam çözümü Hidrojen atomu için mümkündür. Fakat daha büyük ve çok elektronlu atomlar için bu mümkün değildir. Çok elektronlu atomların çözümü için araştırmacılar tarafından kuantum kimyasal yaklaşımlar kullanılmaktadır. Kuantum kimyasal metotlar hesaplama süreleri açısından birbirinden farklı olmakla birlikte dalga fonksiyonlu ve elektron yoğunluk temelli iki farklı tabanlı yaklaşımlardır.



Şekil 2.8. Kuantum kimyasal metotlar

2.7.1. Ab İnitio Metotları

Elektronik hesaplama için deneysel sonuçları kullanmaksızın başlangıçtan itibaren kuantum mekanik ilkelerine dayalı hesaplama yapan metotlardır.

2.7.2. Hartree-Fock Metodu (HF)

Elektron korelasyonunu dikkate almaksızın kullanılan *abinitio* metodudur. Bu metotta, atomik dalga fonksiyonu temeline dayalı hesaplamalar yapılır. Atomik dalga fonksiyonu için Slater veya Gauss tipi dalga fonksiyonu kullanılmaktadır. Çok elektronlu atomun dalga fonksiyonu Slater determinantı ile temsil edilir ve bu determinantta tek elektronlu atomik dalga fonksiyonları Pauli ilkesine uygun şekilde yerleştirilir ve sonra varyasyon ilkesine dayanan özuyumlu alan yaklaşımı (selfconsistent field approximation) kullanılır. Bu metotta, atomu temsil eden bir elektronlu baz seti çok büyük seçilirse hesaplama uzun sürer. İleri HF metotları hassas hesaplamalar yapmasına rağmen bunun bedeli hesap süresinde ödenmektedir. Bunun yerine günümüzde elektron yoğunluk teorisine dayalı metotlar daha çok tercih edilmektedir.

Çok elektronlu bir sistemin atomik birimler cinsinden Hamiltonyeni,

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 - \sum_{\alpha=1}^M \sum_{i=1}^N \frac{Z_{\alpha}}{r_{i\alpha}} + \sum_{i=1}^N \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}} - \sum_{\alpha=1}^M \frac{1}{2M_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2 + \sum_{\alpha=1}^M \sum_{\beta=1}^M \frac{Z_{\alpha}Z_{\beta}}{R_{\alpha\beta}} \quad (2.51)$$

ile verilir. Burada M toplam çekirdek sayısı, N toplam elektron sayısıdır; α ve β indisleri çekirdekleri, i ve j indisleri elektronları temsil eden indislerdir.

Bu denklemdaki ilk terim elektronların kinetik enerji işlemcisi, ikinci terim α çekirdeği ile i. elektron arasında çekim potansiyel enerjisi, üçüncü terim i. elektron ile j. elektron arasındaki Coulomb itme potansiyelidir. Bu terimler, elektron hareketine etki eden terimlerdir. Dördüncü terim çekirdeklerin kinetik enerji işlemcisi, son terim ise α ve β çekirdekleri arasında itme potansiyel enerjisidir. Bu iki terim ise çekirdek hareketi ile ilgilidir.

Sistemin Schrödinger hareket denklemi:

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (2.52)$$

dir. Born-Oppenheimer yaklaşımında çekirdek hareketi elektronun hareketine göre yavaş olduğu için ayrı tutulur. Schrödinger denklemi,

$$(\hat{H}_e + V_{NN})\psi_e = U\psi_e \quad (2.53)$$

olarak yazılır. Burada $U = E_e + V_{NN}$ dir. Elektronik Hamiltonyen terim numarasına göre kısaca yazılırsa,

$$\hat{H}_e = \hat{T}_e + \hat{V}_{eN} + \hat{V}_{ee} \quad (2.54)$$

dır. Çekirdeğin Hamiltonyeni,

$$\hat{H}_N = \hat{T}_N + \hat{V}_{NN} \quad (2.55)$$

dir. Bu kısım moleküler titreşim ile ilgilidir. Bundan sonraki kısımlarda sadece elektronik hareketle ilgileneceğiz.

Slater Determinant Dalga Fonksiyonunda bir elektronlu spin orbitallerinden oluşur;

$$\psi(x_1, x_2 \dots x_N) = (N!)^{-1/2} \begin{bmatrix} x_i(x_1) & \cdots & x_k(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_i(x_N) & \cdots & x_k(x_N) \end{bmatrix} \quad (2.56)$$

Bir spin orbitali atomik uzaysal dalga fonksiyonu ile spin fonksiyonunun çarpımıdır. $(N!)^{-1/2}$ normalizasyon çarpanıdır. Pratik açıdan bu determinant dalga fonksiyonu,

$$|\Psi_0\rangle = |x_1 x_2 \dots x_a x_b \dots x_N\rangle \quad (2.57)$$

ile gösterilir. Moleküler sistemin hamiltonyeninin beklenen değeri

$$E_e = \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle \quad (2.58)$$

dir. Varyasyon ilkesi uygulandığında Hartree-Fock denklemleri elde edilir. Tek elektronlu Hartree-Fock operatörü,

$$F_k(1) x_a(1) = \varepsilon_a x_a(1) \quad (2.59)$$

olarak yazılır. Burada, Fock ifadesi;

$$F_k(1) = h(1) + V^{HF}(1) = h(1) + \sum_a [j_b(1) - K_b(1)] \quad (2.60)$$

dir.

Bu denklemden $h(1)$, bir elektronun kinetik enerjisi ve çekirdek çekim potansiyelinin içeren çekirdek Hamiltonyendir. $j_b(1)$ ise iki elektron arasında etkileşim potansiyeli bulan Coulomb işlemcisidir:

$$j_b(1) X_a(1) = \left[\int d X_2 X_b^*(2) r_{12}^{-1} X_b(2) \right] X_a(1) \quad (2.61)$$

$K_b(1)$, iki elektronun koordinatlarını değiştiren ve değiş-tokuş potansiyelini hesaplayan işlemcisidir:

$$\begin{aligned} K_b(1) X_a(1) &= \left[\int d X_2 X_b^*(2) r_{12}^{-1} X_a(2) \right] X_b(1) j_b(1) X_a(1) \\ &= \left[\int d X_2 X_b^*(2) r_{12}^{-1} X_b(2) \right] X_a(1) \end{aligned} \quad (2.62)$$

Fock işlemcisine göre HF-Hamiltonyeni

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N F_k(i) = \sum_{i=1}^N h(i) + \sum_{i=1}^N V^{HF}(i) \quad (2.63)$$

ile verilir. HF-Hamiltonian, toplam dalga fonksiyonlarına da uygulanırsa,

$$\hat{H}_0 |\Psi_0\rangle = E_0^{(0)} |\Psi_0\rangle \quad (2.64)$$

$$E_0^{(0)} = \sum_a \varepsilon_a \quad (2.65)$$

yazılır. Burada $E_0^{(0)}$ taban durumu enerjisidir, ε_a ise orbital enerjisidir. İleri Hartree Fock yaklaşımında pertürbasyon metotları kullanılır ve korelasyon etkileri giderilir.

HF ve ileri HF yaklaşımlarında, N tane elektron için 3N tane uzaysal koordinat üzerinden hesaplama gerçekleştiği için hesaplama süresi uzar. Öte yandan ileri HF metotlarında daha hassas hesaplamalar için şu şekilde bir sıralama vardır: CCSD(T)>CCSD>MP2>HF.

2.7.3. Yoğunluk Fonksiyonel Teori (DFT)

HF ve ileri-HF'un temelinde dalga fonksiyonu kullanılırken bu hesaplamada elektron yoğunluğu kullanılmaktadır. Elektron yoğunluğu $\rho(r)$ ile gösterilir ve uzaysal konumda üç değişkenin bir fonksiyonu olduğu için hızlı ve basit bir hesaplama yapılmasını sağlar. DFT toplam enerji yoğunluğuna bağlı olarak elektronik enerjii ve elektron yoğunluğunu hesaplamaya çalışır. DFT, elektron yoğunluğunu tek elektronlu elektron yoğunluklarına dönüştürmesiyle HF ile benzer özelliğe sahip olmaktadır. Bu benzerlik olmasına rağmen DFT güzel sonuçlar verdiği için daha fazla tercih edilmektedir. DFT teorisi, elektron yoğunluğu temelinde toplam enerjii hesaplamaktadır. P. Hohenberg ve W. Kohn, ilk olarak elektron yoğunluğu üzerinden hesaplamayı önermiştir. DFT teorisinde varyasyon yaklaşımının sonucunda ortaya çıkan taban durumundaki elektron yoğunluğuna dayalı olarak moleküler özellikleri hesaplamak için çözüm getirmişlerdir. Esasında onların bu çözümü iki teoreme dayanır:

Birinci Teorem: çok elektronlu sistemin taban durumu özellikleri, sadece $n(x,y,z)$ elektron yoğunluğuna bağlıdır.

İkinci Teorem: Sistemin doğru taban durumu yoğunluğu, $E[n(x,y,z)]$ fonksiyoneli üzerinden toplam enerjii minimum yapan yoğunluktur fakat bu fonksiyonel tam bilinmiyor.

2.54 denklemini elektron yoğunluğuna göre yazarsak;

$$E[\rho] = T[\rho] + E_{eN}(\rho) + E_{eN}[\rho] \quad (2.66)$$

$$E_{eN}[\rho] = \sum_A \frac{Z_A \rho(\vec{r})}{|\vec{R}_A - \vec{r}|} d\vec{r} \quad (2.67)$$

$$J[\rho] = \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' \quad (2.68)$$

$J[\rho]$, Coloumb elektron itme terimidir, bu terimin katkısı büyüktür. Bunu hesaplarken elektronların antisimetri ilkesi ve korelasyon etkileri göz önüne alınmalıdır. Öte yandan teori, kinetik enerji işlemcisinin yoğunluk fonksiyonuna göre nasıl hesaplanacağı hakkında bilgi vermemektedir.

Kohn-Sham (KS) kinetik enerji işlemcisinin hesabı ile ilgili bir teorem önerdi: Kinetik enerjiyi, KS dalga fonksiyonları üzerinden oluşturulan tek bir Slater determinantından elde edilen elektron yoğunluğuna göre hesaplamaktır.

Aslında, bu yol HF metodu ile aynıdır. Bu metoda KS-DFT denir ve en çok kullanılan yaklaşımdır.

$$T_s[\rho] = \sum_{i=1}^N \left\langle \phi_i \left| -\frac{1}{2} \nabla^2 \right| \phi_i \right\rangle \quad (2.69)$$

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(\vec{r})|^2 \quad (2.70)$$

$$E_{KS} - DFT[\rho] = T_s[\rho] + E_{eN}[\rho] + J[\rho] + E_{xc}[\rho] \quad (2.71)$$

$$E_{xc}[\rho] = (T[\rho] - T_s[\rho]) + (E_{ee}[\rho] - J[\rho]) \quad (2.72)$$

KS-DFT'de deęiş tokuş-korelasyon terimi olan $E_{xc}[\rho]$ hariç, geri kalan terimlerin hepsini hesaplamak mümkündür. $E_{xc}[\rho]$ fonksiyonelinin tam şekli bilinmemektedir. Bilinse bile bunu hesaplamanın faydası yoktur. Bu nedenle, deęiş tokuş-korelasyon fonksiyonelleri için çeşitli yaklaşımlar mevcuttur. Bu yaklaşımlara S-VWN, B3LYP ve bunun gibi örnekler verilebilir.

2.7.3.1. KS-DFT Özuyumlu Alan Denklemleri

$$\hat{h}_{ks}(\vec{r})\phi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \phi_i(\vec{r}) \quad (2.73)$$

$$\hat{h}_{ks}(\vec{r}) = -\frac{1}{2} \nabla^2(\vec{r}) + V_{eff}(\vec{r}) \quad (2.74)$$

$$V_{eff}(\vec{r}) = V_{eN}(\vec{r}) + \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} dr' + V_{xc}(\vec{r}) \quad (2.75)$$

Bu denklemler HF denklemlerine çok benzerdir. Sadece farklı olarak yaklaşık korelasyon etkilerini hesaplar ve deęiş tokuř terimini ele alır.

Deęiş Tokuř-Korelasyon Potansiyeli

$$V_{xc}(\rho) = \frac{dE_{xc}(\rho)}{d\rho} \quad (2.76)$$

E_{xc} ; genellikle deęiş tokuř ve korelasyon olmak üzere iki kısma ayrılır. E_x ve E_c parçacık başına enerji cinsinden yazılır.

$$E_{xc}[\rho] = E_x[\rho] + E_c[\rho] \quad (2.77)$$

$$E_{xc}[\rho] = \int \rho(\vec{r}) E_x[\rho(\vec{r})] d\vec{r} + \int \rho(\vec{r}) E_c[\rho(\vec{r})] d\vec{r} \quad (2.78)$$

$$V_{xc}(\rho) = E_{xc}[\rho(\vec{r})] + \rho(\vec{r}) \frac{dE_{xc}(\vec{r})}{d\rho} \quad (2.79)$$

$$V_{xc}(\rho) = E_x[\rho(\vec{r})] + E_c[\rho(\vec{r})] + \frac{dE_x(\vec{r})}{d\rho} + \frac{dE_c(\vec{r})}{d\rho} \quad (2.80)$$

2.7.3.2 DFT’de Kullanılan Deęiş Tokuř-Korelasyon Fonksiyonelleri

2.7.3.2.1. LDA

Yerel yoğunluk yaklaşımıdır. Bu fonksiyonel belli bir noktada sadece yerel yoğunluęa baęlıdır. Örneęin S-VWN dir.

Model olarak homojen elektron gazı sonuçlarını kullanır. Dirac, bu ifadeyi deęiş tokuř fonksiyoneli içinde kullandı (Kısaca S ile gösterilir. “Slater” deęiş tokuř).

$$E_x^{LDA}[\rho] = -C_x \int \rho^{4/3}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.81)$$

$$\epsilon_x^{LDA}[\rho] = -C_x \rho^{1/3}(\vec{r}) \quad (2.82)$$

Eęer α ve β yoğunlukları farklıysa (Ör: açık-kabuk sistemi) LSDA yaklaşımını kullanır.

$$E_x^{LSDA}[\rho] = -2^{1/3} C_x \int \left(\rho_\alpha^{4/3}(\vec{r}) + \rho_\beta^{4/3}(\vec{r}) \right) d\vec{r} \quad (2.83)$$

$$\epsilon_x^{LDA} [\rho] = -2^{1/3} C_x \left[\rho_\alpha^{1/3}(\vec{r}) + \rho_\beta^{1/3}(\vec{r}) \right] \quad (2.84)$$

Korelasyon enerjisi için, homojen gaz modeli kullanır. Bunun korelasyon enerjisi Monte Carlo simülasyonundan nümerik olarak belirlenir. Vosko, Wilk ve Nusair (VWN) ile verilen analitik biçimine uyumlu hale getirilir.

ϵ_C^{VWN} ; LSDA, VWN korelasyonunu ifade eder. Daha teknik ismi, LSDA'nın S-VWN dir (slater deęiş tokuş+ vosko, wilk, Nusair korelasyonu).

VNN kullanılırsa, elektron korelasyonu iki kat yüksek hesaplanır. Baę uzunlukları büyüktür. Daha iyi yaklaşıma gerek vardır.

2.7.3.2.2. GGA

Gradyant- düzeltmeli yaklaşımdır. Bu fonksiyonel yerel yoğunluęa ve onun gradyantına baęlıdır. Örneęin PW91, LYP, P86, PBE korelasyon fonksiyonelleri, B88 ("B"), PW86, PW91, PBE deęiş tokuş fonksiyoneli dir.

2.7.3.2.3. Meta-GGA

Bu fonksiyonel ise yoğunluęa, yoğunluęun gradyantına ve ikinci türevine baęlıdır. Örneęin M06-L, B95, B98, TPSS, VSXC dir.

2.7.3.2.4. Hibrit DFT

HF'taki deęiş tokuş ifadesini karıştırır. Örneęin B3LYP (hibrit GGA), M05-2X ve M06-2X, hibrit meta-GGA dır. A. Beche tarafından sonuçları iyileştirmek için hibrit fonksiyoneller verildi. Beche'nin 3 parametrelili hibrit fonksiyoneli GGA'lardan ve LSDA'dan daha iyidir. B3 benzeri fonksiyoneller daha etkindir ve

$$E_x^{B3} = (1 - a)E_x^{LSDA} + aE_x^{HF} + b\Delta E_x^{B88} + (1 - c)E_c^{LSDA} + c\Delta E_c^{GGA}$$

ile verilmektedir. B3LYP modeli bu formu kullanır.

2.7.3.2.5. İki Katlı-Hibrit DFT

Hibrit DFT, MP2 korelasyonunda karıştırılmaktadır. Örneęin B2-LYP dir.

$$E_{xc} = (1 - a)E_x^{GGA} + aE_x^{HF} + (1 - C_{MP2})E_c^{GGA} + C_{MP2}E_c^{MP2}$$

DFT moleküllerin geometrisini iyi hesaplar fakat enerji hesaplarında iyi deęildir. B3LYP dięer DFT modelleri içinde en iyi olandır.

Minnesota fonksiyonellerinin (M05-2X, M06-2X, M06-L, vb.) iyi olduğu görülmüştür. Fakat numerik integrasyon gridine dikkat etmek gerekir. İleri HF tersine DFT yaklaşımını kullanan modellerde doğruluk sıralaması yapmak mümkün değildir, çünkü değiş tokuş- korelasyon fonksiyonelleri yaklaşık olarak hesaplanır.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1. 6,6'-((1E,1'E)-(Propan-1,3-Diilbis(Azanylidene))Bis(Fenilmetaniliden)) Bis(3-(Oktiloksi)Fenol) Bileşiği

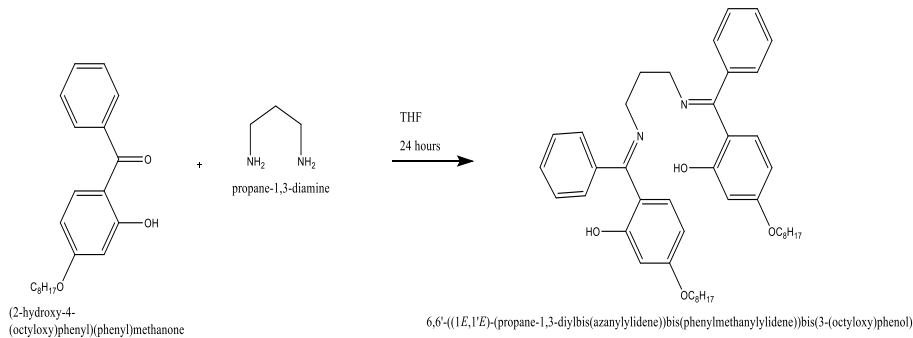
Çalışılan molekül Ondokuz Mayıs Üniversitesi Kimya Bölümünden temin edilmiştir (Meral, 2019). İncelenen bu yapının 109 tane atomu olup 321 tane titreşim kipi mevcuttur.

FT-IR Spektrometresi: Vertex 80 V Bruker FT-IR (bileşik ATR ile incelendi) (Meral,2019).

Raman Spektrometresi: Thermo Scientific Nicolet 6700 FT-IR/NXR FT-Raman modül. Raman cihazı 1064 nm InGaAs laser (max.2W)

¹H-NMR Spektrometresi: Agilent marka 400/54 (400 MHz- Çözücü olarak DMSO ve Kloroform kullanıldı)

¹³C-NMR Spektrometresi: Agilent marka 400/54 (400 MHz- Çözücü olarak DMSO ve Kloroform kullanıldı)



Şekil 3.1. Bileşiğin sentezi

Bileşikte aromatik halkalar, metilen gruplarının birbirine bağlandığı alkil zinciri bulunmaktadır. Bileşik, sağ tarafta ve sol tarafta aynı atomlardan oluşmuş simetrik bir yapıdır. Oksijen atomunun bir ucu metilen grubunun (CH₂) karbon atomunda, diğer ucu ise fenil halkasına bağlıdır. Horizontal yapıdaki bu fenil grup ile vertikal yapıya sahip aromatik halka imin karbonuna bağlanmıştır. Yapının

ortasındaki metilen yapıları ise azot atomuna bir köprü gibi bağlanarak sağdaki ve soldaki yapılar birleştirilerek simetrik bir Schiff bazı oluşturulmuştur.

Şekil 3.1’de bileşiğin sentez tepkimesi sunulmuştur. 6-6’- ((1E-1’E) - (propan -1,3- diilbis (azaniliden)) bis (fenilmetaniliden)) bis (3-oktiloksi) fenol) bileşiği oluşturulmuştur. Wingx programı ile çözümlenip, Gaussian-09 programı ile de teoriksel olarak hesaplamaları yapılmıştır. Bu sonuçlar FT-IR, Raman, ¹H-NMR, ¹³C-NMR spektroskopileri ile desteklenerek kristalin sonuçları yorumlanmıştır.

Tablo 3.1. Bileşiğin kristal veri bilgileri

KRİSTAL VERİLERİ	
Kimyasal Formül	C ₄₅ H ₅₈ N ₂ O ₄
Molekül Kütlesi	690,93
Kristal Sistemi	Monoclinic
Uzay Grubu	P2/c
Sıcaklık(K)	293
Birim Hücre Parametreleri (Å)	a=18,6449(17), b=10,3064(6), c=10,4721(9)
Dalga Boyu (°)	95,480 (7)
Birim Hücre Hacmi (Å ³)	2003,1(3)
Birim Hücredeki Molekül Sayısı	2
Radyasyon Tipi	Mo Kα
Çizgisel Soğurma Katsayısı(mm ⁻¹)	0,007
Veri Toplama	
Ölçülen Yansıma Sayısı	26722
Bağımsız Yansıma Sayısı	3745
Gözlemlenen Yansıma Sayısı	1464
<i>R</i> _{int}	0,102
Verilerin Arıtılması	
R	0,070
WR	0,215
$\Delta p_{max}, \Delta p_{min}$ (e/Å ⁻³)	0,49-0,43

Tablo 3.2. Atomik yer değiştirme parametreleri

	U ¹¹	U ²²	U ³³	U ¹²	U ¹³	U ²³
O2	0,088(2)	0,0541(15)	0,099(2)	0,0051(13)	0,0464(17)	-0,0051(14)
O1	0,096(2)	0,0465(14)	0,100(2)	-0,0075(13)	0,0545(18)	-0,0011(14)
N1	0,077(2)	0,0505(17)	0,085(2)	0,0012(15)	0,040(2)	-0,0024(16)
C12	0,067(3)	0,046(2)	0,066(2)	-0,0042(17)	0,020(2)	-0,0060(17)
C11	0,071(3)	0,045(2)	0,068(3)	-0,0072(18)	0,025(2)	-0,0042(17)

C16	0,0674(18)	0,0517(12)	0,0762(17)	-0,0022(13)	0,0127(14)	-0,0019(12)
C15	0,0589(19)	0,0515(13)	0,066(2)	-0,0035(15)	0,0171(17)	-0,0021(15)
C9	0,067(3)	0,050(2)	0,070(3)	0,0023(18)	0,022(2)	-0,0083(18)
C23	0,059(3)	0,050(3)	0,084(4)	0,000	0,024(3)	0,000
C10	0,077(3)	0,0417(19)	0,079(3)	-0,0014(18)	0,025(2)	-0,0022(18)
C13	0,081(3)	0,046(2)	0,083(3)	-0,0015(19)	0,033(2)	0,0030(19)
C14	0,081(3)	0,053(2)	0,084(3)	0,000(2)	0,046(2)	0,0004(19)
C8	0,073(3)	0,070(2)	0,075(3)	0,005(2)	0,030(2)	-0,001(2)
C5	0,080(3)	0,078(3)	0,074(3)	0,012(2)	0,026(2)	-0,006(2)
C3	0,076(3)	0,075(3)	0,086(3)	0,008(2)	0,024(3)	0,006(2)
C6	0,072(3)	0,072(3)	0,083(3)	0,005(2)	0,028(2)	-0,004(2)
C22	0,092(3)	0,053(2)	0,113(3)	0,007(2)	0,058(3)	-0,003(2)
C2	0,080(3)	0,076(3)	0,084(3)	0,002(2)	0,027(3)	-0,002(2)
C17	0,085(2)	0,0602(14)	0,089(2)	-0,0122(16)	-0,0013(17)	0,0010(15)
C4	0,070(3)	0,084(3)	0,089(3)	0,006(2)	0,028(3)	-0,006(2)
C7	0,081(3)	0,065(2)	0,084(3)	0,011(2)	0,027(3)	-0,008(2)
C19	0,101(2)	0,0682(19)	0,120(2)	0,0033(17)	0,0018(18)	0,0108(16)
C18	0,096(2)	0,0597(14)	0,101(2)	-0,0137(17)	0,0036(17)	-0,0004(16)
C1	0,084(3)	0,092(3)	0,109(4)	0,008(3)	0,027(3)	-0,013(3)
C21	0,119(2)	0,0807(17)	0,110(2)	-0,0060(19)	-0,0281(19)	0,0074(18)
C20	0,127(2)	0,0854(17)	0,129(2)	0,000(2)	-0,031(2)	0,0158(18)

Tablo 3.3. Geometrik parametreler

Bağ Yapan Atomlar	Bağ Uzunluğu (Å) ve Açısı	Bağ Yapan Atomlar	Bağ Uzunluğu (Å) ve Açısı
O ₂ -C ₉	1,356 (4)	C ₅ -H _{5B}	0,9700
O ₂ -C ₈	1,423(4)	C ₃ -C ₂	1,485(5)
O ₁ -C ₁₁	1,340(4)	C ₃ -C ₄	1,532(5)
O ₁ -H ₁	0,8200	C ₃ -H _{3A}	0,9700
N ₁ -C ₁₅	1,280(4)	C ₃ -H _{3B}	0,9700
N ₁ -C ₂₂	1,456(4)	C ₆ -C ₇	1,516(5)
C ₁₂ -C ₁₃	1,386(5)	C ₆ -H _{6A}	0,9700
C ₁₂ -C ₁₁	1,423(4)	C ₆ -H _{6B}	0,9700
C ₁₂ -C ₁₅	1,462(5)	C ₂₂ -H _{22A}	0,9700
C ₁₁ -C ₁₀	1,367(5)	C ₂₂ -H _{22B}	0,9700
C ₁₆ -C ₂₁	1,345(6)	C ₂ -C ₁	1,495(5)
C ₁₆ -C ₁₇	1,351(5)	C ₂ -H _{2A}	0,9700
C ₁₆ -C ₁₅	1,504(5)	C ₂ -H _{2B}	0,9700
C ₉ -C ₁₄	1,383(5)	C ₁₇ -C ₁₈	1,382(5)
C ₉ -C ₁₀	1,386(5)	C ₁₇ -H ₁₇	0,9300
C ₂₃ -C _{22i}	1,503(4)	C ₄ -H _{4A}	0,9700
C ₂₃ -C ₂₂	1,503(4)	C ₄ -H _{4B}	0,9700
C ₂₃ -H _{23A}	0,9700	C ₇ -H _{7A}	0,9700
C ₂₃ -H _{23B}	0,9700	C ₇ -H _{7B}	0,9700
C ₁₀ -H ₁₀	0,9300	C ₁₉ -C ₁₈	1,290(6)
C ₁₃ -C ₁₄	1,369(5)	C ₁₉ -C ₂₀	1,363(7)
C ₁₃ -H ₁₃	0,9300	C ₁₉ -H ₁₉	0,9300
C ₁₄ -H ₁₄	0,9300	C ₁₉ -H ₁₈	0,9300
C ₈ -C ₇	1,506(5)	C ₁ -H _{1A}	0,9600
C ₈ -H _{8A}	0,9700	C ₁ -H _{1B}	0,9600
C ₈ -H _{8B}	0,9700	C ₁ -H _{1C}	0,9600
C ₅ -C ₄	1,504(5)	C ₂₁ -C ₂₀	1,412(6)
C ₅ -C ₆	1,513(5)	C ₂₁ -H ₂₁	0,9300
C ₅ -H _{5A}	0,9700	C ₂₀ -H ₂₀	0,9300
C ₉ -O ₂ -C ₈	118,4(3)	C ₅ -C ₆ -C ₇	121,1(3)
C ₁₁ -O ₁ -H ₁	109,5	C ₅ -C ₆ -H _{6A}	109,2
C ₁₅ -N ₁ -C ₂₂	120,3(3)	C ₇ -C ₆ -H _{6A}	109,2

C ₁₃ -C ₁₂ -C ₁₁	116,8(3)	C ₅ -C ₆ -H _{6B}	109,2
C ₁₃ -C ₁₂ -C ₁₅	122,1(3)	C ₇ -C ₆ -H _{6B}	109,2
C ₁₁ -C ₁₂ -C ₁₅	121,0(3)	H _{6A} -C ₆ -H _{6B}	107,9
O ₁ -C ₁₁ -C ₁₀	118,7(3)	N ₁ -C ₂₂ -C ₂₃	112,6(3)
O ₁ -C ₁₁ -C ₁₂	121,3(3)	N ₁ -C ₂₂ -H _{22A}	109,1
C ₁₀ -C ₁₁ -C ₁₂	120,0(3)	C ₂₃ -C ₂₂ -H _{22A}	109,1
C ₂₁ -C ₁₆ -C ₁₇	117,2(4)	N ₁ -C ₂₂ -H _{22B}	109,1
C ₂₁ -C ₁₆ -C ₁₅	120,8(4)	C ₂₃ -C ₂₂ -H _{22B}	109,1
C ₁₇ -C ₁₆ -C ₁₅	121,8(4)	H _{22A} -C ₂₂ -H _{22B}	107,8
N ₁ -C ₁₅ -C ₁₂	119,4(3)	C ₃ -C ₂ -C ₁	113,2(4)
N ₁ -C ₁₅ -C ₁₆	122,1(3)	C ₃ -C ₂ -H _{2A}	108,9
C ₁₂ -C ₁₅ -C ₁₆	118,5(3)	C ₁ -C ₂ -H _{2A}	108,9
O ₂ -C ₉ -C ₁₄	124,0(3)	C ₃ -C ₂ -H _{2B}	108,9
O ₂ -C ₉ -C ₁₀	116,3(3)	C ₁ -C ₂ -H _{2B}	108,9
C ₁₄ -C ₉ -C ₁₀	119,7(3)	H _{2A} -C ₂ -H _{2B}	107,7
C ₂₂ ⁱ -C ₂₃ -C ₂₂	110,5(4)	C ₁₆ -C ₁₇ -C ₁₈	121,3(4)
C ₂₂ ⁱ -C ₂₃ -H _{23A}	109,5	C ₁₆ -C ₁₇ -H ₁₇	119,4
C ₂₂ -C ₂₃ -H _{23A}	109,5	C ₁₈ -C ₁₇ -H ₁₇	119,4
C ₂₂ ⁱ -C ₂₃ -H _{23B}	109,5	C ₅ -C ₄ -C ₃	112,9(3)
C ₂₂ -C ₂₃ -H _{23B}	109,5	C ₅ -C ₄ -H _{4A}	109,0
H _{23A} -C ₂₃ -H _{23B}	108,1	C ₃ -C ₄ -H _{4A}	109,0
C ₁₁ -C ₁₀ -C ₉	121,3(3)	C ₅ -C ₄ -H _{4B}	109,0
C ₁₁ -C ₁₀ -H ₁₀	119,4	C ₃ -C ₄ -H _{4B}	109,0
C ₉ -C ₁₀ -H ₁₀	119,4	H _{4A} -C ₄ -H _{4B}	107,8
C ₁₄ -C ₁₃ -C ₁₂	123,3(3)	C ₈ -C ₇ -C ₆	113,6(3)
C ₁₄ -C ₁₃ -H ₁₃	118,4	C ₈ -C ₇ -H _{7A}	108,9
C ₁₂ -C ₁₃ -H ₁₃	118,4	C ₆ -C ₇ -H _{7A}	108,9
C ₁₃ -C ₁₄ -C ₉	118,9(3)	C ₈ -C ₇ -H _{7B}	108,9
C ₁₃ -C ₁₄ -H ₁₄	120,5	C ₆ -C ₇ -H _{7B}	108,9
C ₉ -C ₁₄ -H ₁₄	120,5	H _{7A} -C ₇ -H _{7B}	107,7
O ₂ -C ₈ -C ₇	107,8(3)	C ₁₈ -C ₁₉ -C ₂₀	119,1(5)
O ₂ -C ₈ -H _{8A}	110,1	C ₁₈ -C ₁₉ -H ₁₉	120,4
C ₇ -C ₈ -H _{8A}	110,1	C ₂₀ -C ₁₉ -H ₁₉	120,4
O ₂ -C ₈ -H _{8B}	110,1	C ₁₉ -C ₁₈ -C ₁₇	121,8(5)
C ₇ -C ₈ -H _{8B}	110,1	C ₁₉ -C ₁₈ -H ₁₈	119,1
H _{8A} -C ₈ -H _{8B}	108,5	C ₁₇ -C ₁₈ -H ₁₈	119,1
C ₄ -C ₅ -C ₆	116,1(3)	C ₂ -C ₁ -H _{1A}	109,5
C ₄ -C ₅ -H _{5A}	108,3	C ₂ -C ₁ -H _{1B}	109,5
C ₆ -C ₅ -H _{5A}	108,3	H _{1A} -C ₁ -H _{1B}	109,5
C ₄ -C ₅ -H _{5B}	108,3	C ₂ -C ₁ -H _{1C}	109,5
C ₆ -C ₅ -H _{5B}	108,3	H _{1A} -C ₁ -H _{1C}	109,5
H _{5A} -C ₅ -H _{5B}	107,4	H _{1B} -C ₁ -H _{1C}	109,5
C ₂ -C ₃ -C ₄	115,7(3)	C ₁₆ -C ₂₁ -C ₂₀	120,7(5)
C ₂ -C ₃ -H _{3A}	108,4	C ₁₆ -C ₂₁ -H ₂₁	119,6
C ₄ -C ₃ -H _{3A}	108,4	C ₂₀ -C ₂₁ -H ₂₁	119,6
C ₂ -C ₃ -H _{3B}	108,4	C ₁₉ -C ₂₀ -C ₂₁	119,2(5)
C ₄ -C ₃ -H _{3B}	108,4	C ₁₉ -C ₂₀ -H ₂₀	120,4
H _{3A} -C ₃ -H _{3B}	107,4	C ₂₁ -C ₂₀ -H ₂₀	120,4
C ₁₃ -C ₁₂ -C ₁₁ -O ₁	-179,2(4)	C ₁₅ -C ₁₂ -C ₁₃ -C ₁₄	179,4(4)
C ₁₅ -C ₁₂ -C ₁₁ -O ₁	1,1(6)	C ₁₂ -C ₁₃ -C ₁₄ -C ₉	0,6(7)
C ₁₃ -C ₁₂ -C ₁₁ -C ₁₀	-0,2(6)	O ₂ -C ₉ -C ₁₄ -C ₁₃	179,2(4)

Hidrojen bağı geometrisi (Å, °)

D-H...A	D-H	H...A	D...A	D-H...A
O1-H1...N1	0,82	1,83	2,553(4)	147
O1-H1...N1	0,82	1,83	2,553(4)	147

B3LYP/6-311++(2d,p) model kimyası kullanıldığında, OH...N arasında bağ uzunluğu 2,57 Å bulunmuştur. OH...N molekül içi hidrojen bağındaki ağır atomlar arasında uzaklık $2,88 \text{ Å} \pm 0.13$ dır.

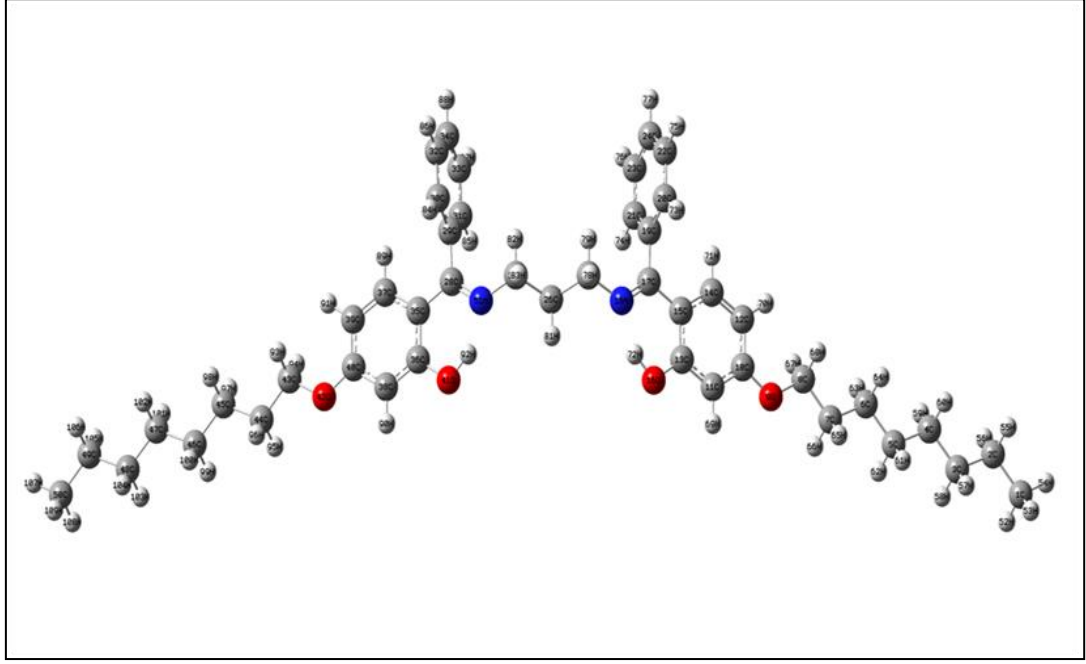
4. BULGULAR VE TARTIŞMA

4.1. Moleküler Titreşim Kiplerinin Atanması

Şekil 4.1’de molekülün içindeki atom sembolleri ve etiket numaraları gösterilmektedir. Normal koordinat analizi (NCA) için Molvib programı kullanılmıştır (Sundius, 1990; Sundius, 2002). Bu program, girdi verileri için her bir atomun üç boyutlu uzaydaki konumlarını, kütlelerini, frekansları, kuvvet sabitlerini, dipol momentlerin türevlerini ve lokal simetri koordinatlarını istemektedir. Bu veriler, Rdarch denen program tarafından Gaussian arşiv dosyasından çıkarılmıştır. Arşiv dosyası ise Gaussian03W (Frisch vd., 2004) paket programı içerisinde bulunan DFT(B3LYP)/6-31G(d) moleküler modelleme ile çalıştırılan hesap sonucundan oluşturulmuştur. Molvib programı skala çarpanlarını kendisi en küçük kareler metodu ile hesaplamaktadır fakat molekülümüz çok büyük bir molekül olduğu için biz Baker’in (Baker vd., 1998) hazır skala çarpanlarını kullandık. Bu çarpanların molekülün iç koordinatlara sınıflandırılması Tablo 4.1’da gösterilir.

Tablo 4.1. Skala çarpanları

İç Koordinatlar		Başlangıç Değeri	Değişken Aralığı	Son Değer	Hata Değeri
Gerilme	X-X	0,92070	0,0500	0,92070	0,0072
Gerilme	C-H	0,91640	0,0500	0,91640	0,0020
Gerilme	O-H	0,95270	0,0500	0,95270	0,0077
Eğilme	X-X-X	1,01440	0,0500	1,01440	0,0105
Eğilme	X-X-H	0,94310	0,0500	0,94310	0,0032
Eğilme	H-C-H	0,90160	0,0500	0,90160	0,0070
Torsiyon	Tümü	0,95230	0,0500	0,95230	0,0015



Şekil 4.1. Molekülün yapısı

Raman ve IR şiddetleri ise verilen şiddet formülüne göre simirra programında (Istvan, 2002), program içerisinde küçük bir değişiklik hesaplanmaktadır. IR ve Raman şiddetlerinin ayrı ayrı grafikleri Şekil 4.2 ve Şekil 4.3’de verilmiştir. Ayrıca yaklaşık band atamaları, PED değerleri (potansiyel enerji dağılımı) ile birlikte Tablo 4.2.’de verilmektedir.

Aromatik bileşik olan benzen ve benzen türevlerinde IR spektrumunda C-H gerilmesi $3000-3100\text{ cm}^{-1}$ aralığında gözlenir (Berber vd., 2020). Bu çalışmadaki Schiff bazlı molekül için 3064 cm^{-1} de gözlenen aromatik C-H gerilme titreşimi, IR de zayıf, Raman’da ise şiddetli banda atanmıştır. Aromatik C=C gerilmesi $1573-1430\text{ cm}^{-1}$ bölgesinde meydana gelmektedir (Halay vd., 2018; Berber vd., 2020). IR spektroskopisinde, C=C gerilme titreşimleri $1575, 1440, 1426\text{ cm}^{-1}$ orta şiddette bantlar olarak gözlenmiştir. Raman spektroskopisinde, $1573, 1519, 1458, 1431\text{ cm}^{-1}$ ’de gözlenen pikler zayıf bantlara atanmıştır. Bununla birlikte, bileşik içinde dikey durumda olan monosüstitüe fenil halkasının ve yatay konumda olan 1,3-disüstitüe benzen biriminin düzlem dışı C-H eğilme kipleri $650-950\text{ cm}^{-1}$ arasında bulunmaktadır (Erdik,1993). $923, 889, 847, 776, 783\text{ cm}^{-1}$ ’de gözlenen IR pikleri, fenil halkalarına ait düzlem dışı C-H eğilme kiplerinde tespit edilmektedir. Raman spektroskopisinde ise bu frekanslara karşılık gelen pikler zayıf olarak gözlenmektedir.

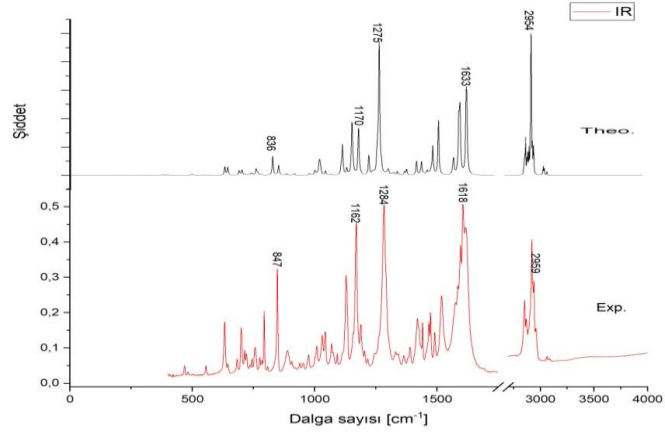
Alifatik C-H gerilmesi, 2957-2857 cm^{-1} aralığındadır (Buldurun vd., 2019). Alifatik C-H gerilmesi IR spektrumunda 2940, 2920, 2902, 2882, 2868, 2853 cm^{-1} bantlarına atanabilir. Buna karşılık gelen alifatik C-H gerilmeleri, Raman spektrumunda, 2927, 2863, 2845 cm^{-1} frekans değerleri olarak belirlendi. Simetrik ve asimetrik metilenin C-H gerilmesi 1496-1021 cm^{-1} frekanslarında gözlenmektedir (Bülbül ve Akyüz, 2015). Deneysel IR spektrumundaki 1131, 1216, 1205 cm^{-1} pikler bu bantlara atanmıştır. Deneysel Raman spektrumunda ise bantlar bu değerlerde bulunur fakat onlar IR spektrumundakinden daha keskindir. Molekül içinde terminal kısımda konumlanan C-H gerilmesi ise IR spektrumunda gözlenmemekte fakat Raman spektrumunda 3001 cm^{-1} 'de zayıf bir pik olarak belirlenmiştir.

Bu molekülün asıl kimliğinin kazanmasına neden olan fonksiyonel grup C=N gerilmesi, 1640-1600 cm^{-1} 'de keskin bir pik olarak gözlenir (Yılmaz, 2016; Karaca, 2018). Fakat bu gerilme, C=C gerilme bölgesi ile çakıştığı için band ataması biraz zor olmaktadır. Tablo 4.2'de görüldüğü gibi, normal koordinat analizi yardımıyla, C=N gerilme titreşim kipini, IR'de 1605 cm^{-1} 'de, Ramanda ise 1603 cm^{-1} 'deki pik değeri imin (C=N) bandı olarak belirlenmiştir.

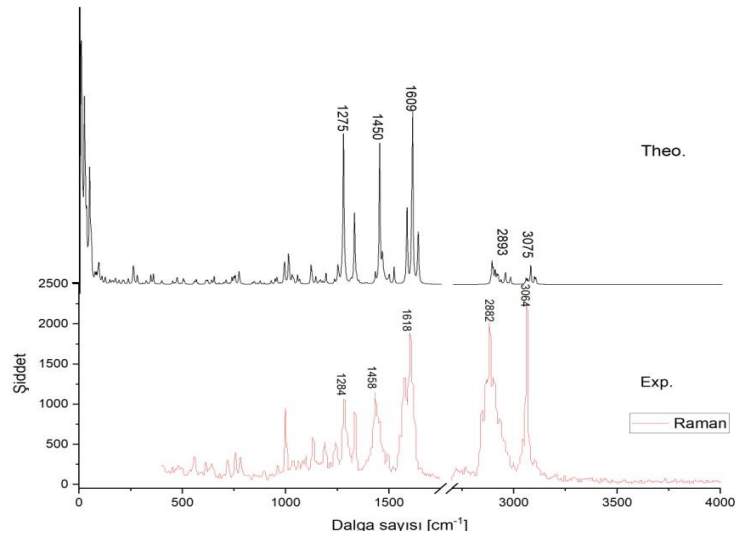
Benzene hidroksil (-OH) bağlanarak yapı fenol özelliği kazanır. Fenollerde -OH gerilmesi için beklenen değer yaklaşık olarak 3550-3200 cm^{-1} , 1260 cm^{-1} 'de C-O gerilmesi (Karakurt vd., 2019), 1494 cm^{-1} (Karakurt vd., 2016) ve 1409 cm^{-1} 'de -OH eğilme kipini (Tamer vd., 2013) atamışlardır. Yine, son yıllarda hidroksibenzofenon bileşikleri üzerine yapılan çalışmada, -OH bağının gerilme titreşimi 3470-2929 cm^{-1} aralığında belirlenmiştir (Wang and Cui, 2015). Öte yandan, molekül içi hidrojen bağından dolayı bu band düşük frekanslara kayar ve 2959 cm^{-1} 'deki keskin IR bandı, O-H enol grubuna atanabilir (Mohammed vd., 2020). 1244 cm^{-1} 'de gözlemlenen pik değeri ise C-O gerilmesine atanmıştır. Alkollerde ve fenollerde C-OH düzlem içi eğilme kipi ise 1446-1423 cm^{-1} frekans bölgesinde geniş ve zayıf bir pik olarak görünmektedir (Sarı, 2003). Fakat bu, CH₃ eğilmesi ile sık sık engellenir. Bizim çalışmamızda ise bu eğilme kipi, 1426 cm^{-1} 'de %12 potansiyel enerji dağılımı oranında gözlemlendi. Ancak -CH₃ eğilmesi yerine yatay durumdaki fenil halkasının düzlem dışı C-H eğilmeleri tarafından engellenmiştir.

NCA metodu ile bant atamaları RMS=10 cm^{-1} değeri ile hesaplanmıştır. Bu çalışmada yapılan atamaların literatür ile uyum yakaladığı görülmektedir. IR ve

Raman şiddet grafiklerine bakılırsa deneysel spektrumla teorik spektrumun çok iyi uyuştuğu da fark edilebilir.



Şekil 4.2. IR grafiği



Şekil 4.3. Raman grafiği

Tablo 4.2. IR ve Raman atamaları

No	Hes.Frek.	IR _{frek}	I _{IR}	Ra _{frek}	I _{Ra}	Yaklaşık Bant Atamaları ve PED Değerleri
1	3101	-	14,07	-	116,78	v _{fenil} (98)
2	3099	-	14,24	-	113,34	v _{fenil} (99)
3	3093	-	2,43	3100	151,708	v _{fenil} (97)
4	3093	-	1,87	-	93,96	v _{fenil} (97)
5	3077	-	7,42	-	41,76	v _{fenil} (96)
6	3077	-	7,58	-	35,96	v _{fenil} (99)
7	3075	3064	22,41	3062	394,70	v _{fenil} (95)
8	3075	-	10,47	-	213,58	v _{fenil} (96)
9	3067	-	37,00	-	24,66	v _{fenil} (91)
10	3067	-	21,04	-	12,46	v _{fenil} (91)
11	3061	-	14,80	-	91,244	v _{fenil} (96)
12	3060	-	9,40	-	72,32	v _{fenil} (97)
13	3053	-	0,606	3043	111,00	v _{fenil} (98)
14	3052	-	0,31	3037	88,22	v _{fenil} (97)
15	3047	-	1,59	-	17,20	v _{fenil} (98)
16	3047	-	1,07	-	13,18	v _{fenil} (98)
17	2978	-	44,78	-	107,02	vCH ₃ (98)-terminal
18	2978	-	44,82	3001	107,11	vCH ₃ (99)-terminal
19	2974	-	69,88	-	34,84	vCH ₂ (90)
20	2974	-	71,27	-	35,20	vCH ₂ (90)
21	2972	-	21,39	-	3,21	vCH-CH ₂ -CH(92)-köprü
22	2964	-	123,70	-	21,13	vCH ₂ (80)'-zigzag (sadece bir)
23	2964	-	39,40	-	7,41	vCH ₂ (80)'-zigzag (sadece bir)
24	2954	2959	670,36	-	303,97	Sol halka-vOH(82)+ sağ halka- vOH(13)
25	2950	-	697,84	-	183,84	Sol halka-vOH(80)+ sağ halka-vOH(12)
26	2943	-	89,47	-	8,90	vCH ₂ -CH-CH ₂ -CH (76)-orta zigzag
27	2943	2940	90,00	-	8,67	vCH ₂ -CH ₂ -CH ₂ (76)'-orta zigzag
28	2932	-	64,00	-	96,03	v CH ₂ -Ø-CH ₂ (80) + CH(18)' -orta zigzag
29	2931	-	101,43	-	20,63	v CH ₂ -Ø-CH ₂ (93)-köprü
30	2931	-	0,92	-	9,796	vCH ₂ -CH-CH ₂ -CH (79)-orta zigzag
31	2931	-	0,71	-	10,39	vCH ₂ -CH ₂ -Ø-CH ₂ (78)'-orta zigzag
32	2924	-	46,72	-	11,05	vCH ₂ (91)-köprü bağlantısı
33	2920	2920	43,26	2927	52,37	vCH ₂ (96)-köprü bağlantısı
34	2919	-	41,02	-	49,39	vCH ₂ (92)-köprü bağlantısı
35	2918	-	22,47	-	45,17	vCH-CH ₂ (98)-top zigzag-oksijenin yanında
36	2918	-	22,12	-	45,92	vCH-CH ₂ (94)-üst zigzag-oksijenin yanında
37	2916	-	1,64	-	56,64	vCH ₂ -Ø-CH ₂ -Ø-CH ₂ (86)-orta zigzag-aynı hatta
38	2916	-	1,53	-	57,88	vCH ₂ -Ø-CH ₂ -Ø-CH ₂ (86)-orta zigzag-aynı hatta
39	2912	-	45,83	-	145,53	vCH ₃ (97)-terminal
40	2912	-	42,264	-	97,92	vCH ₃ (97)-terminal
41	2908	-	0,60	-	7,63	vCH ₂ -CH ₂ -CH ₂ (96)-orta zigzag-üçgen şekli
42	2908	-	0,67	-	7,65	vCH ₂ -CH ₂ -Ø-CH ₂ (88)-orta zigzag
43	2903	2902	0,18	-	172,43	vCH ₂ -CH ₂ -CH ₂ (92)-orta zigzag-üçgen şekli
44	2903	-	0,04	-	177,18	vCH ₂ -CH ₂ -CH ₂ (91)-orta zigzag-üçgen şekli
45	2900	-	124,18	-	42,81	vCH ₂ -CH-CH ₂ -CH (78)-orta zigzag
46	2900	-	113,35	-	42,51	vCH ₂ -CH-CH ₂ -CH (79)-orta zigzag

47	2895	-	7,85	-	20,50	v CH ₂ -CH ₂ -Ø-Ø-CH ₂ (94)'-orta zigzag
48	2895	-	8,38	-	17,75	v CH ₂ -CH ₂ -Ø-Ø-CH ₂ (93)'-orta zigzag
49	2893	2882	84,81	-	333,73	vCH-CH ₂ (90)-top zigzag-oksijenin yanında
50	2889	-	58,08	-	93,91	v CH ₂ -Ø-CH ₂ (97)-köprü
51	2888	2868	9,35	2863	388,64	v CH ₂ -Ø-Ø-CH ₂ -Ø-CH ₂ (73)- orta zigzag- oksijenin yanında
52	2888	-	9,96	-	124,86	v CH ₂ -Ø-Ø-CH ₂ -Ø-CH ₂ (73)- orta zigzag- oksijenin yanında
53	2885	-	4,07	-	5,75	vCH ₂ -CH ₂ -CH ₂ (87)-orta zigzag-üçgen şekli
54	2885	-	3,73	-	6,04	vCH ₂ -CH ₂ -CH ₂ (87)-orta zigzag-üçgen şekli
55	2883	-	4,21	-	32,67	v CH ₂ -CH ₂ -Ø-Ø-Ø-CH ₂ (97)-orta zigzag- oksijen yanında
56	2883	-	4,62	-	29,93	v CH ₂ -CH ₂ -Ø-Ø-Ø-CH ₂ (96)-orta zigzag- oksijen yanında
57	2881	2853	12,21	2845	43,11	v CH ₂ -Ø-CH ₂ (87)-köprü-oksijenin yanında
58	2881	-	16,08	-	21,81	v CH ₂ -Ø-CH ₂ (87)-köprü- oksijen yanında
59	1637	-	371,24	-	325,06	ρCH(21)' + vCC(14)' +CC(9) +vCC(5) + βCOH(14) – halka _h - sadece bir titreşim
60	1633	1618	456,59	-	233,15	ρCH(36)'+ vCC(12)+ βCOH(11)+ vCC(9)
61	1609	1605, 1595	174,34	1603	1135,80	vN=C(16)' +vN=C(11) + halka _h - ρCH(5)
62	1607	-	277,56	-	218,01	vN=C(13)+ ρCH(8)+vN=C(54)'+ρCH(7)'
63	1604	-	112,92	-	242,34	ρCH(17)+ vN=C(8)+ vCC(7)+ vCC(7)- halka _v -sadece bir titreşim
64	1603	-	272,76	-	137,40	vN=C(13)+ ρCH(10)+ vCC(7)+ vCC(7)- halka _v - sadece bir titreşim
65	1582	1575	92,08	1573	506,20	βCOH(13)+ vN=C(13) + halka _h - ρCH(9)+ vCC(7)+ βCOH(6)
66	1580	-	30,05	-	100,77	βCOH(13)+ vN=C(13)+ vCC(10)+ halka _h - ρCH(7)
67	1578	-	4,30	-	20,80	ρCH(19)+ vCC(15)+ vCC(15)+ halka _v - ρCH(13)+ vCC(11)+ vCC(9)
68	1577	-	11,60	1553	54,06	vCC(15)+ ρCH(15)+ vCC(13)+ vCC(10)+ vCC(8)+ halka _v -ρCH(8)
69	1520	-	84,95	-	88,40	ρCH(59)'+ρCH(8)+ ρCH(7)'
70	1519	1519	304,15	1519	37,03	ρCH(73)' -halka _h
71	1496	-	45,93	-	36,27	ρCH(37)'+τC ⁸ (XY ₂)(16)+ τC ⁴³ (XY ₂)(6)+ δC ⁴³ H ₂ (5)
72	1496	1493	149,59	1490	21,14	ρCH(32)'+τC ⁸ (XY ₂)(16)
73	1493	-	6,28	-	4,21	tCC(40)+ τC ² (XY ₂)(29)+δC ² H ₂ (21)
74	1492	-	6,86	-	8,83	halka _v -ρCH(79)'+ vCC(12)
75	1491	-	6,64	-	7,90	ρCH(79)' -halka _v
76	1488	-	16,92	-	5,40	halka _v - ρCH(12)'+τC ⁴⁷ (XY ₂)(9)+τC ⁴⁸ (XY ₂)(8)+ δC ⁴⁷ H ₂ (8) δC ⁴⁸ H ₂ (7)+ τC ⁴⁷ (XY ₂)(6)
77	1486	-	3,37	-	10,83	τC ²⁷ (XY ₂)(22)+ τC ²⁵ (XY ₂)(12)+δC ²⁵ H ₂ (11)+δC ²⁷ H ₂ (10)+ τC ²⁶ (XY ₂)(9)+ δC ²⁶ H ₂ (7)

78	1485	-	4,88	-	1,16	$tCC(30) + \tau C^8(XY_2)(8) + tCC(40) + \tau C^5(XY_2)(7) + \delta C^5H_2(6) + \tau C^4(XY_2)(5)$
79	1481	-	10,46	-	8,93	$\rho CH(10)' + \tau C^{49}(XY_2)(9) + \delta C^{49}H_2(8) + \tau C^{45}(XY_2)(7) + \beta^a C^{50}(XY_3)(7) + \delta C^{45}H_2(8)$
80	1477	-	4,70	-	21,28	$tCC(35) + \tau C^2(XY_2)(23) + \delta C^2H_2(6)$
81	1473	-	4,50	-	9,79	$\tau C^{44}(XY_2)(13) + \delta C^{44}H_2(12) + \beta^a C^{50}(XY_3)(12) + \tau C^{47}(XY_2)(7) + \tau C^{49}(XY_2)(6) + \delta C^{47}H_2(6)$
82	1473	1473, 1467	23,16	1472	12,96	$\tau C^{27}(XY_2)(33) + \delta C^{27}H_2(16) + \tau C^{25}N(12) + \delta C^{25}H_2(12) + \rho C^{27}N(5) + wC^{27}C^{25}(5)$
83	1470	-	0,65	-	5,65	$tCC(36) + \tau C^2(XY_2)(31) + \delta C^2H_2(16)$
84	1470	-	5,14	-	18,24	$tCC(49) + \beta_b C^1(XY_3)(22) + \beta_a C^1(XY_3)(8)' + \rho^b CH_3(7) + \rho^a CH_3(6) - zigzag$
85	1467	-	0,19	-	28,54	$\beta_b C^{50}(XY_3)(14) + \delta C^{45}H_2(12) + \tau C^{45}(XY_2)(11) + \delta C^{44}H_2(9) + \tau C^{44}(XY_2)(9) + \delta C^{48}H_2(7)$
86	1465	-	0,78	-	59,33	$\tau C^2(XY_2)(26) + tCC(24) + \delta C^2H_2(19)$
87	1462	-	0,12	-	42,89	$\beta_a C^{50}(XY_3)(23) + \delta C^{46}H_2(17) + \tau C^{46}(XY_2)(15) + \delta C^{45}H_2(6)$
88	1462	-	7,44	-	76,27	$\delta C^{26}H_2(23) + \tau C^{26}(XY_2)(23) + \tau C^{27}(XY_2)(13) + \delta C^{27}H_2(8)$
89	1461	-	0,23	-	8,47	$\delta C^{48}H_2(13) + \delta C^{47}H_2(15) + \beta_a C^{50}(XY_3)(11) + \tau C^{47}(XY_2)(11) + \tau C^{48}(XY_2)(11) + \beta_b C^{50}(XY_3)(9)$
90	1460	-	0,02	-	8,62	$\tau C^2(XY_2)(15) + tCC(15) + \delta C^2H_2(14) + \delta C^5H_2(10) + \tau C^5(XY_2)(9) + \delta C^6H_2(8)$
91	1460	-	0,07	-	15,62	$\delta C^4H_2(23) + \tau C^4(XY_2)(20) + \delta C^3H_2(9) + \tau C^3(XY_2)(8) + \delta C^5H_2(5)$
92	1458	-	3,77	-	20,76	$\beta_a C^{50}(XY_3)(49) + \beta_b C^{50}(XY_3)(36) + \rho^b CH_3(6)$
93	1453	-	2,90	-	20,98	$\beta_b C^{50}(XY_3)(81) + \beta_a C^{50}(XY_3)(7) + \rho^b CH_3(7)$
94	1450	-	45,54	1458	568,82	$halka_h - \rho CH(24)' + halka_h - \beta CCC(13)' + vCC(10) + \rho CH(9)' + vCC(8)$
95	1449	-	51,23	-	429,67	$halka_h - \rho CH(47)' + vCC(9) + vCC(7) + vC - O(5) - halka_h$
96	1444	1440	5,58	1431	7,26	$halka_v - \rho CH(61)' + vCC(9) + vCC(9)$
97	1443	-	4,04	-	1,01	$halka_v - \rho CH(68)' + vCC(8) + vCC(8)$
98	1429	1426	73,45	-	43,30	$halka_h - \rho CH(36)' + halka_h - \beta CCC(7)' + \beta COH(6) + \beta COH(5)$
99	1428	-	26,16	-	28,58	$halka_h - \rho CH(41)' + halka_h - \beta CCC(8)' + \beta COH(6)$
100	1390	-	2,06	-	2,53	$\delta C^2H_2(58) + tCC(9) + \tau C^2(XY_2)(9)$
101	1388	1420	39,58	1414	4,99	$\delta C^8H_2(17) + \delta C^7H_2(11) + \rho C^8(XY_2)(11) + wC^7C^8(5) + \rho C^{10}(XY_2)(10) + vCC(8)$
102	1383	-	1,85	-	3,70	$\beta_a C^{50}(XY_3)(46) + \rho^a CH_3(24) + \beta C^{50}(XY_3)(21)$
103	1380	1390	22,39	1392	4,90	$\rho C^{39}(XY_2)(51) + \delta C^{43}H_2(19) + \delta C^{44}H_2(9)$
104	1379	-	1,05	-	2,38	$\rho C^1(XY_2)(38) + \beta C^1(XY_3)(13) + \beta_a C^1(XY_3)(13) + \delta C^2H_2(12) + tCC(5)$
105	1364	1364	0,14	-	1,92	$\delta C^{47}H_2(20) + \delta C^{46}H_2(20) + \delta C^{48}H_2(10) + \delta C^{45}H_2(9) + vCC(14) - zigzag$

106	1362	-	0,89	-	1,66	$\delta C^5H_2(27)+\delta C^6H_2(20)+\delta C^4H_2(12)+vCC(17)$ -zigzag
107	1360	-	5,09	-	2,19	$\delta C^{48}H_2(19)+\delta C^{49}H_2(15)+\delta C^{45}H_2(14)+\rho C^{39}(XY_2)(9)+\delta C^{46}H_2(8)+vCC(6)$
108	1350	-	24,82	-	11,92	$\delta C^{25}H_2(22)+\delta C^{27}H_2(17)+\delta C^{26}H_2(17)+vCC(14)$ -zigzag
109	1347	-	0,08	-	5,68	$\delta CH_2(42)$ -zigzag+ $\delta CH_2(22)$ -köprü
110	1338	-	7,84	-	27,68	$\delta C^{49}H_2(8)+\beta_sCCC(8)+\beta_bCC=N(8)+\delta C^{47}H_2(6)+\delta C^{45}H_2(5)+vCC(5)$
111	1336	-	8,53	-	4,31	$\delta C^{27}H_2(14)+\rho C^{39}(XY_2)(12)+\delta C^{25}H_2(6)+\beta_sCCC(5)+\delta C^{49}H_2(5)+\beta_bCC=N(5)$
112	1331	-	6,46	-	112,11	$\beta_sCCC(10)+vCCC(13)+\beta_bCC=N(7)$
113	1327	1331	10,00	1334	364,87	$\delta C^{27}H_2(18)+\delta C^{25}H_2(8)+vCC(7)$
114	1323	-	0,56	-	5,10	ring _v - $\rho CH(50)$ '
115	1323	-	0,41	-	6,04	ring _v - $\rho CH(82)$ '
116	1313	-	34,46	1308	16,72	ring _h - $\rho CH(42)$ ' + vC-O(18)
117	1309	-	19,98	-	12,31	ring _h - $\rho CH(80)$ '
118	1304	-	10,45	-	3,55	Bridge- $\delta CH_2(33)+\delta CH_2(18)-\emptyset-\delta CH_2(13)$ zigzag-aynı satırda
119	1296	-	6,85	-	1,50	köprü- $\delta CH_2(16)-\emptyset-\delta CH_2(21)-\emptyset-\delta CH_2(16)$ -köprü
120	1292	-	0,46	-	0,21	zigzag-aynı satırda - $\delta CH_2(37)+\delta CH_2(33)$ zigzag-aynı satırda
121	1292	-	1,27	-	0,64	$\delta CH_2(5)+-\emptyset-\delta CH_2(74)$ - zigzag
122	1288	-	0,18	-	1,17	$\delta CH_2(79)$ -zigzag
123	1287	-	0,96	-	1,26	$\delta CH_2(79)$ -zigzag
124	1284	-	34,82	-	6,03	vCC(65)+ $\rho CH(7)$ -halka _v
125	1284	-	21,95	-	26,82	vCC(64)+ $\rho CH(8)$ -halka _v
126	1281	-	0,25	-	38,79	$\delta CH_2(32)-\emptyset-\delta CH_2(41)$ -zigzag
127	1278	-	9,59	-	50,12	$\delta CH_2(14)-\emptyset-\delta CH_2(22)-\emptyset-\delta C^8H_2(8)+\rho C^8(XY_2)(5)$ -zigzag
128	1275	1284	488,74	1285	465,49	Zigzag-vCC(25)+ $\beta_bCC=N(9)+vC-O(8)+\delta C^{27}H_2(6)$
129	1274	-	446,39	-	292,28	$C^{27}H_2(25)+\delta C^{26}H_2(6)$ -köprü+ vCC(15)+vC-O(7)+ $\beta C^{28}(XY_3)(6)$
130	1273	-	16,09	-	41,50	$\delta CH_2(61)-\emptyset-\delta CH_2(7)$ -zigzag
131	1272	-	0,25	-	22,69	$\delta CH_2(64)-\emptyset-\emptyset-\delta CH_2(9)$ -zigzag+ tCC(9)
132	1269	-	154,90	-	75,98	$\delta CH_2(53)$ -orta zigzag-üçgen şekli+ vCCC(12)
133	1265	-	65,58	-	20,83	$\delta CH_2(54)$ -orta zigzag-üçgen şekli+ $\rho CH(11)$ '-halka _v
134	1255	-	0,80	-	5,30	$\delta CH_2(56)'+\rho^bCH_3(9)$ -zigzag
135	1254	-	1,19	-	4,82	$\delta CH_2(39)-\emptyset-\delta CH_2(22)$ -zigzag tCC(7)
136	1251	-	12,92	-	38,36	$\rho CH(61)'+vC-O(5)$ -halka _h
137	1248	1244	8,89	1240	61,80	$\rho CH(18)+\rho CH(8)+vCC(6)+vC-O(8)$ - halka _h
138	1247	-	4,42	-	13,97	zigzag- $\delta CH_2(57)+tCH(5)$ -halka _h
139	1245	-	2,094	-	7,54	$\delta CH_2(66)+tCC(8)$
140	1232	1216	134,33	1216	22,39	$\delta CH_2(69)$ - orta zigzag-üçgen şekli
141	1224	-	0,38	-	0,57	$\rho^bCH_3(20)+tCC(20)+\rho^aCH_3(10)+\delta CH_2(20)$
142	1217	-	0,16	-	0,27	$\delta CH_2(30)'+\rho^bCH_3(17)'+\rho^aCH_3(8)'+\beta CH_3(8)'$ -zigzag
143	1201	-	1,40	-	2,58	$\delta CH_2(75)'$ -zigzag
144	1201	1205	1,70	-	1,48	$\delta CH_2(70)'$ -zigzag

145	1192	-	28,98	-	8,09	halka _h -ρCH(25)'+δCH ₂ (75)'-zigzag+ ρC ²⁷ (XY ₂)(5)+wC ²⁷ (XY ₂)(5)
146	1191	-	112,98	-	26,68	ρCH(26)+ ρCH(13)'- halka _h + vC- O(11)+ vC ¹⁴ C ¹² (7)
147	1189	1189	230,53	1189	26,02	ρCH(55)'+ vC-O(5)
148	1188	-	3,49	-	0,50	δCH ₂ (29)+ tCC(22)+β _h C ¹ (XY ₃)(9)
149	1179	-	0,13	-	0,91	ρ ^b CH ₃ (22) + ρ ^a CH ₃ (11)+ β _s CH ₃ (12)+δCH ₂ (20)-zigzag
150	1175	-	1,73	-	7,77	δCH ₂ (27)+ ρCH(47)+ ρCH(7)-halka _v
151	1175	-	0,78	-	5,06	δCH ₂ (36)+ ρCH(24)+ ρCH(20)-halka _v
152	1165	-	142,65	-	12,04	ρCH(74)-halka _h
153	1162	1170	310,54	1170	11,83	ρCH(32)+ ρCH(22)+ γCH(6)'-halka _h
154	1157	-	0,02	-	5,98	ρCH(59)+ρCH(22) -halka _v
155	1157	1157	6,59	1159	1,97	δCH ₂ (52)+ ρCH(6)+ tCC(8)
156	1157	-	0,04	-	2,25	ρCH(69)+ρCH(6) -halka _v
157	1146	-	1,21	-	2,21	δCH ₂ (78)'-zigzag
158	1141	-	43,66	-	34,57	ρCH(69)+ρCH(6) -halka _h +δCH ₂ (14)'
159	1124	1129	130,23	1132	11,54	ρCH(58)-halka _h
160	1123	-	81,46	-	32,22	ρCH(58)-halka _h + tCC(11)+ vC ³ C ² (6)'
161	1118	-	22,02	-	29,35	ρCH(13)-halka _h +βC ⁵⁰ (XY ₃)(7)+ vC ⁴⁹ C ⁴⁸ (7)+ δCH ₂ (5)
162	1118	1093	27,07	1098	46,47	ρCH(54)-halka _h
163	1076	1076	3,84	1080	1,17	ρCH(43)+ρCH(6)-halka _v + vC ³³ C ³¹ (9)+ vC ³² C ³⁰ (8)
164	1075	-	1,64	-	0,30	ρCH(39)+ρCH(9)-halka _v + vC ²³ C ²¹ (10)+ vC ²² C ²⁰ (9)
165	1064	1070	1,98	1063	12,97	vC ³ C ² (7)+ vC ⁸ C ⁷ (20) tCC(11)+ δCH ₂ (5)'
166	1062	-	1,29	-	9,67	vC ⁴⁴ C ⁴³ (23)+ halka _h -ρCH(8)+ vC ⁴⁹ C ⁴⁸ (23)+ δCH ₂ (7)'+βC ⁵⁰ (XY ₃)(6)
167	1053	1043	28,74	-	35,67	vC-N ⁵¹ (9)+ vC-N ¹⁸ (7)+vCC(17)+ δCH ₂ (15)'
168	1035	-	11,12	-	10,60	vC ⁴⁸ C ⁴⁷ (27)+ vC ⁴⁷ C ⁴⁶ (14)+ vC ⁴⁹ C ⁴⁸ (12)+ vC ⁴⁴ C ⁴³ (8)+ halka _h -ρCH(9)+ vC-O(7)
169	1033	-	5,70	-	7,15	vCC(62)+ δCH ₂ (12)
170	1033	-	14,07	-	0,93	vCC(66)+ vC-O(9)
171	1032	-	31,96	-	2,87	vCC(34)+ vC-O(21)
172	1031	-	8,22	-	1,92	vC-N ¹⁸ (9)+ vC-N ⁵¹ (7)+βC ¹⁷ (XY ₃)(6)
173	1029	1031	62,15	1034	11,12	halka _h -ρCH(24)+ vC-O(22)+vCC(19)
174	1026	-	43,78	-	13,60	vCC(53)+ vC-O(22)
175	1026	-	2,50	-	11,70	halka _v -ρCH(9)+ halka _v -vCC(15)+ βCCC(6)'+ halka _v -vCC(20)+
176	1019	-	7,47	-	1,32	zigzag-vCC(16)+ vC-N ⁵¹ (8)+ vC-N ¹⁸ (8)+ βCCC(5)'
177	1013	-	9,68	-	43,32	vCC(38)+ vC-N ¹⁸ (6)
178	1011	-	8,46	-	5,76	vCC(51)
179	1009	-	23,68	1000	94,58	vC-N ⁵¹ (7)+ vC-N ¹⁸ (8)+ vCC(30)
180	1001	-	0,06	-	0,05	δCH ₂ (41)+ ρ ^b CH ₃ (14)'+ρ ^a CH ₃ (8)' -zigzag
181	999	-	0,11	-	0,17	δCH ₂ (63)+ tCC(14)-zigzag
182	996	-	6,14	-	1,47	vCC(31)+βNCC(5)+ βCCC(5)'
183	991	-	1,55	-	65,59	vCC(34)+ρCH(7)+ βCCC(12)'-halka _v
184	989	-	2,33	-	12,50	vCC(34)+ βCCC(12)'-halka _v
185	987	-	4,23	-	9,89	vCC(52)
186	987	975	6,30	978	11,30	vCC(58)-zigzag
187	975	-	0,22	-	0,11	tCCCC(26)+ γCH(74)'-halka _v
188	973	-	0,40	-	0,183	tCCCC(50)+ γCH(41)'-halka _v

189	969	-	0,55	962	3,83	vCC(62)-zigzag
190	968	-	1,09	-	1,49	vCC(69)-zigzag+halka _h -pCH(5)
191	954	952	1,50	949	24,05	βCCC(22)' + ρCH(9) + vCC(7)-halka _h + vC-O(7)
192	947	-	0,06	-	0,24	tCCCC(75)+ γCH(15)'-halka _v
193	945	-	0,05	-	0,18	tCCCC(17)+ γCH(72)'-halka _v
194	944	939	0,94	934	16,60	βCCC(21)' + ρCH(32)+ vCC(6)-halka _h
195	929	-	0,67	-	0,20	δCH ₂ (22)+βC ⁵⁰ (XY ₃)(11)+ρ ^a CH ₃ (12)+ρ ^b CH ₃ (22)-terminal
196	927	-	0,52	-	0,20	ρ ^b CH ₃ (10)+ ρ ^a CH ₃ (6)+ δCH ₂ (35)+ tCCCC(17)
197	926	-	5,11	-	5,54	wC ²⁸ C ²⁹ (6)+tCCCC(36)+γCH(36)'- halka _h
198	925	923	6,00	920	7,78	tCCCC(25)+γCH(49)'-halka _h
199	915	-	1,13	-	0,34	tCCCC(34)+ γCH(62)'-halka _h
200	913	-	1,15	-	0,37	tCCCC(65)+ γCH(29)'-halka _h
201	894	889	10,02	894	1,52	tCCCC(31)+ γCH(15)' - sol halka+ tCCCC(15)+ γCH(14)'-sağ halka
202	891	-	4,16	-	3,19	tCCCC(23)+ γCH(6)' - sol halka+ tCCCC(24)+ γCH(20)'-sağ halka
203	873	-	1,18	-	6,41	δCH ₂ (26)+ tC ² C ¹ (17)+ vCC(24)+ρ ^a C ¹ (XY ₃)(11)+τC ² (XY ₂)(5)
204	871	-	1,34	-	6,38	vCC(44)+ ρ ^a C ⁵⁰ (XY ₃)(19)+ βC ⁵⁰ (XY ₃)(12)
205	861	-	43,77	-	1,38	tC-O(76)+ γCH(13)' -halka _h
206	859	-	32,23	-	1,43	tCCCC(7)+ tC-O(73)- halka _h
207	853	-	0,46	-	0,08	ρ ^b CH ₃ (22)+ ρ ^a CH ₃ (12)+ δCH ₂ (23)+ tC ² C ¹ (9)
208	851	-	0,82	-	0,13	ρ ^b CH ₃ (21)+ ρ ^a CH ₃ (14)+ βC ⁵⁰ (XY ₃)(12)+ δCH ₂ (21)
209	848	-	1,38	-	0,63	δCH ₂ (67)-zigzag
210	845	-	0,10	-	5,53	tCCCC(72)+γCH(13)'-halka _h
211	843	-	0,21	-	4,24	tCCCC(51)+γCH(39)'-halka _v
212	836	847	88,44	845	4,09	γCH(52)' + tCCCC(12)+wC-O(12)'- halka _h
213	835	-	48,96	-	2,22	tCCCC(59)+ tC-O(11)+ γCH(16)'-halka _h
214	792	-	3,20	-	0,36	tC ² C ¹ (21)+ρ ^b CH ₃ (14)+ ρ ^a CH ₃ (8)+ γCH(11)' +δCH ₂ (7)
215	789	793	4,57	793	0,44	ρ ^b CH ₃ (13)+ ρ ^a CH ₃ (8)+ βC ⁵⁰ (XY ₃)(7)+ tCCCC(13)+ γCH(7)' +δCH ₂ (44)
216	776	-	8,41	-	0,48	tCCCC(12)+ tC ² C ¹ (6)+ γCH(48)'+ wC ¹⁷ C ¹⁵ (7)
217	775	-	7,40	-	3,66	halka _v -tCCCC(44)+ tCCCC(17)+ γCH(7)'-halka _h
218	771	-	11,80	-	30,80	tCCCC(76)-halka _h
219	767	776,7 83	42,15	780	3,71	sol halka _v - tCCCC(62)+ γCH(8)'-sağ halka _v
220	752	757	9,95	757	19,09	tCCCC(42)+ βCCC(31)' + ρCH(8)
221	746	744	12,51	741	14,41	ρCH(11)+ vCC(17)+ vC-O(7)+ γCH(7)'
222	743	-	2,28	-	0,59	tCC(44)+ δCH ₂ (27)+ρ ^b CH ₃ (5)
223	738	-	1,78	-	0,11	ρ ^b CH ₃ (15)+ ρ ^a CH ₃ (9)+ βC ⁵⁰ (XY ₃)(7)+ δCH ₂ (33)
224	736	721	0,72	719	15,50	tCCCC(45)+ δCH ₂ (32)-zigzag
225	723	-	1,91	-	1,43	γCH(15)'+ uC ¹⁷ (XY ₃)(9)+ tCCCC(20)+ ρC ¹⁷ C ¹⁵ (13)+ wC-O(8)'-halka _h

226	722	-	6,40	-	1,06	$\gamma\text{CH}(9)'+\text{sol halka}_h\text{-tCCCC}(8)+\text{sağ halka}_h\text{-tCCCC}(8)+\text{uC}^{28}(\text{XY}_3)(15)+\text{wC}^{17}\text{C}^{15}(8)+\gamma\text{CH}(6)'$
227	717	-	0,19	-	0,11	$\text{tC}^2\text{C}^1(43)+\delta\text{CH}_2(35)$
228	715	714	0,31	-	0,03	$\rho^b\text{CH}_3(9)+\delta\text{CH}_2(57)\text{-zigzag}$
229	710	700	23,25	700	3,52	$\text{tCCCC}(88)\text{-halka}_v$
230	709	-	4,18	-	0,02	$\delta\text{CH}_2(59)\text{-zigzag}+\text{tC}^{48}\text{C}^{47}(6)$
231	709	-	4,72	-	0,05	$\delta\text{CH}_2(55)\text{-zigzag}+\text{tC}^2\text{C}^1(23)$
232	707	-	9,52	-	7,95	$\text{sol halka}_v\text{-tCCCC}(36)+\gamma\text{CH}(40)'\text{-sağ halka}_v$
233	698	683	22,06	680	1,78	$\text{tCCCC}(80)\text{-halka}_v$
234	697	-	12,21	-	2,94	$\text{sol halka}_v\text{-tCCCC}(36)+\gamma\text{CH}(67)'+\text{tCCCC}(9)\text{-sağ halka}_v$
235	676	-	1,47	-	0,25	$\text{tCCCC}(40)+\text{wC-O}(14)+\text{wC-O}(10)+\gamma\text{CH}(9)'+\text{uC}^{17}(\text{XY}_3)(7)$
236	674	-	0,95	666	2,86	$\text{tC-N}^{51}(5)+\text{sol halka}_h\text{-tCCCC}(26)+\text{uC}^{28}(\text{XY}_3)(17)+\text{tCCCC}(5)\text{-sağ halka}_h$
237	650	645	56,12	642	15,59	$\rho\text{CH}(15)+\beta^p_a\text{C}^{17}\text{NC}_2(6)+\beta\text{C}^{17}(\text{XY}_3)(16)+\beta\text{CCC}(12)'\text{-halka}_h$
238	639	-	17,31	-	1,78	$\text{tCCCC}(20)+\text{wC-O}(9)'+\rho\text{CH}(7)\text{-halka}_h$
239	639	-	10,27	-	1,84	$\text{wC-O}(29)+\text{wC-O}(25)+\text{tCCCC}(18)\text{-halka}_h$
240	637	632	36,88	627	4,98	$\gamma\text{CH}(15)+\beta\text{CCC}(9)'\text{-sol halka}_h$
241	620	-	0,00	-	3,60	$\rho\text{CH}(23)+\beta\text{CCC}(50)'\text{-sağ halka}_v$
242	618	-	0,07	-	3,92	$\beta\text{CCC}(59)'+\rho\text{CH}(20)+\text{uC}^{28}(\text{XY}_3)(5)$
243	613	-	0,70	-	4,40	$\text{tCCCC}(44)+\beta\text{CCC}(15)'+\rho\text{C}^{28}\text{C}^{35}(6)$
244	610	-	0,42	612	5,67	$\gamma\text{CH}(18)+\rho\text{C}^{17}\text{C}^{15}(11)+\text{tCCCC}(11)+\rho\text{C-O}(7)$
245	571	-	3,26	-	1,14	$\beta\text{CCC}(31)'+\text{tCCCC}(9)+\rho\text{CH}(19)$
246	564	558	0,71	556	7,52	$\beta\text{CCC}(23)'+\text{tCCCC}(23)+\rho\text{CH}(13)$
247	557	-	0,34	-	3,10	$\text{tCCCC}(16)+\beta_a\text{C}^{28}(\text{XY}_3)(11)+\rho\text{C-O}(10)$
248	554	-	4,36	-	3,18	$\text{tCCCC}(22)+\beta_a\text{C}^{17}(\text{XY}_3)(9)+\gamma\text{CH}(8)+\rho\text{C-O}(6)+\text{wC}^{28}\text{C}^{29}(5)$
249	507	-	5,48	-	3,89	$\text{tCCCC}(21)+\text{wC}^{28}\text{C}^{29}(15)$
250	501	-	7,52	497	7,64	$\beta\text{CNC}(9)+\rho\text{CH}(7)$
251	489	-	0,50	-	0,91	$\delta\text{CH}_2(15)+\text{wC}^{28}\text{C}^{29}(6)+\text{tCCCC}(5)+\tau\text{C}^2(\text{XY}_2)(6)$
252	482	481	2,81	480	0,14	$\delta\text{CH}_2(17)+\tau\text{C}^2(\text{XY}_2)(6)$
253	473	-	0,08	-	6,11	$\text{Sol halka}_h\text{-}\rho\text{C-O}(13)+\rho\text{C-O}(6)\text{-sağ halka}_h$
254	470	469	0,14	467	4,98	$\rho\text{C-O}(13)\text{-halka}_h$
255	462	-	1,04	-	0,25	$\text{tCCCC}(21)+\text{wC}^{17}\text{C}^{15}(14)+\gamma\text{CH}(10)+\text{wC-O}(8)+\text{wC-O}(6)$
256	459	-	1,35	-	1,41	$\text{tCCCC}(35)+\text{sol halka}_h\text{-}\gamma\text{CH}(6)+\text{wC}^{17}\text{C}^{15}(5)+\text{sağ halka}_h\text{-}\gamma\text{CH}(6)$
257	450	-	0,55	-	1,40	$\text{wC}^{28}\text{C}^{29}(16)+\text{tCCCC}(6)+\beta\text{CNC}(9)$
258	449	-	0,86	452	2,48	$\delta\text{CH}_2(10)+\text{tCCCC}(6)\text{-halka}_v+\beta\text{CCC}(5)'\text{-halka}_h$
259	403	-	4,13	406	0,67	$\delta\text{CH}_2(18)+\text{tCCCC}(11)\text{-halka}_v+\gamma\text{CH}(9)+\tau\text{C}^2(\text{XY}_2)(8)$
260	402	-	1,70	-	0,37	$\delta\text{CH}_2(12)+\gamma\text{CH}(14)+\text{tCCCC}(17)\text{-halka}_v$
261	401	-	0,01	-	0,13	$\gamma\text{CH}(49)+\text{tCCCC}(40)\text{-sağ halka}_v$
262	397	-	0,70	-	3,54	$\delta\text{CH}_2(20)+\tau\text{C}^2(\text{XY}_2)(9)$
263	387	-	6,13	-	0,27	$\beta\text{COC}(5)$
264	357	-	0,19	-	8,21	$\text{tC-N}^{51}(10)+\text{tC-N}^{18}(8)+\text{wC}^{18}\text{C}^{17}(8)$
265	344	-	0,51	-	7,28	$\text{tC-N}^{51}(8)+\text{tC-N}^{18}(6)+\text{wC}^{17}\text{C}^{15}(11)$

266	325	-	0,04	-	1,26	wC ¹⁷ C ¹⁵ (10)+ tCCCC(6)-halka _v
267	321	-	3,20	-	1,97	wC ¹⁷ C ¹⁵ (20)+ tCCCC(6)-halka _h
268	306	-	1,69	-	0,79	δCH ₂ (19)+ τC ² (XY ₂)(9)
269	302	-	0,08	-	0,02	δCH ₂ (20)+ τC ² (XY ₂)(9)+ tCCCC(6)-halka _v
270	279	-	2,10	-	4,94	wC ¹⁷ C ¹⁵ (8)+ sol halka _v - ρC ²⁸ C ²⁹ (7)+ ρC ¹⁷ C ¹⁹ (7)- sađ halka _v + tCCCC(6)+ tC-N ⁵¹ (6)
271	262	-	0,30	-	4,04	tCCCC(18)+ γCH(14)+ β _b C ¹⁷ (XY ₃)(13)
272	260	-	0,23	-	3,57	ρC ²⁸ C ³⁵ (14)+ vCC(8)+ β _a C ²⁸ (XY ₃)(8)
273	259	-	0,10	-	3,18	ρC ² (XY ₂)(7)+ ρC ¹⁷ C ¹⁵ (6)+ tCCCC(34)
274	258	-	0,27	-	0,90	tCCCC(39)+ β _b C ²⁸ (XY ₃)(8)+ ρC ²⁸ C ³⁵ (5)
275	249	-	0,00	-	0,00	tC ² C ¹ (100)
276	243	-	0,00	-	0,00	tC ⁵⁰ C ⁴⁹ (87)+ tC ⁴⁸ C ⁴⁷ (6)
277	237	-	0,55	-	0,77	Sađ halka _h - tCCCC(23)+ γCH(7)+ sol halka _h -tCCCC(23)+tC-O(12)
278	235	-	2,42	-	1,67	γCH(8)+sađ halka _h - tCCCC(24)+ sol halka _h -tCCCC(28)+tC-O(6)
279	214	-	2,86	-	1,15	β _a C ¹⁷ (XY ₃)(9)'+β _a C ²⁸ (XY ₃)(8)'+tCCCC(9)-sol halka _v
280	209	-	1,76	-	1,26	β _a C ²⁸ (XY ₃)(14)'+βCNC(8)+ tC-N ⁵¹ (5)
281	191	-	1,17	-	2,00	β _a C ¹⁷ (XY ₃)(10)'+β _a C ²⁸ (XY ₃)(6)'+tCCCC(6)-sol halka _v +δCH ₂ (8)
282	185	-	0,38	-	0,15	ρC ¹⁷ C ¹⁹ (14)+ tCCCC(14)+ ρC ²⁸ C ²⁹ (9)+ tC ¹⁷ C ¹⁵ (8)+ uC ²⁸ (XY ₃)(5)+ uC ¹⁷ (XY ₃)(6)
283	175	-	0,18	-	1,86	Sol halka _v - tCCCC(14)+ ρC ²⁸ C ²⁹ (8)+ ρC ¹⁷ C ¹⁹ (5)+sađ halka _h - tCCCC(10)
284	172	-	0,09	-	1,45	Sol halka _v - tCCCC(13)+ sađ halka _v - tCCCC(9)+ δCH ₂ (7)
285	165	-	0,51	-	0,06	tCC(79)+ tC-O(9)
286	164	-	0,53	-	0,02	tC ² C ¹ (44)+ tCC(39)-zigzag
287	162	-	0,22	-	0,92	δCH ₂ (7)+ tCCCC(11)+ β _a C ¹⁷ (XY ₃)(5)
288	158	-	0,15	-	0,70	tCCCC(11)+ tCC(30)-zigzag
289	156	-	0,05	-	0,45	tCC(56)-zigzag
290	146	-	0,00	-	1,54	tCCCC(14)-sol halka _v
291	138	-	0,68	-	0,04	tC-O(25)+ tCC(57)-zigzag
292	134	-	0,66	-	0,03	tC-O(10)+ tCC(65)
293	129	-	0,50	-	0,13	tCCCC(9)+ tC-O(12)+ tC-O(11)
294	124	-	0,03	-	2,00	tC-O(5)
295	109	-	0,08	-	1,79	tCC(26)+ tC-O(9)-sol halka _h + tCC(6)+ tC-O(6)-sađ halka _v + tCCCC(6)
296	101	-	0,02	-	0,24	tCC(38)+ tCC(16)
297	94	-	0,01	-	3,26	tCCCC(35)+ wC ²⁸ C ²⁹ (10)
298	92	-	0,09	-	1,80	tC-O(13)+ tCC(10)
299	89	-	0,09	-	1,58	tCCCC(20)+ wC ²⁸ C ²⁹ (6)
300	87	-	0,06	-	0,20	tC-O(13)+ tCC(63)-zigzag
301	81	-	0,21	-	1,50	tC-N ⁵¹ (15)+ tC-N ¹⁸ (13)+ tCC(39)
302	75	-	0,05	-	1,42	tC-N ⁵¹ (10)+ tC-N ¹⁸ (8)+ tCC(14)
303	58	-	0,03	-	2,75	tCC(19)+ tCCCC(11)+ tC-O(7)
304	56	-	0,08	-	2,45	tCCCC(61)+ wC ²⁸ C ²⁹ (17)+ tC-O(5)
305	54	-	0,25	-	1,97	tCC(21)+ wC ¹⁷ C ¹⁹ (14)+ γCH(9)
306	49	-	0,15	-	5,02	tCC(29)+ tC-O(14)+ tC-O(7)
307	49	-	0,32	-	5,55	tC-O(16)+ tC ³⁵ C ²⁸ (18)+ tC ⁴⁷ C ⁴⁶ (6)+ tCCCC(12)-halka _v
308	46	-	0,03	-	3,14	tC ³⁵ C ²⁸ (28)+ tC ⁴⁶ C ⁴⁵ (5)+ wC ²⁸ C ²⁹ (7)+ tCCCC(19)-halka _v

309	41	-	0,43	-	0,94	tCC(31)-zigzag+ tC-O(6)-sağ halka _v + tC-O(6)+ tCCCC(12)-sol halka _h
310	36	-	0,24	-	0,91	tCCCC(22)+ tC ³⁵ C ²⁸ (14)+ wC ²⁸ C ²⁹ (7)
311	34	-	0,16	-	3,46	tCC(20)+ tC-N ¹⁸ (11)+ tC-O(6)+ tCCCC(9)-halka _v
312	29	-	0,15	-	3,18	tCC(41)+ tC-N ¹⁸ (8)+ tCC(13)
313	27	-	0,34	-	1,74	tCC(36)+ tC-N ⁵¹ (8)+ tC ²⁶ C ²⁵ (9)+ tC- O(7)
314	25	-	0,15	-	1,18	βC=O(6)+ tCC(7)+ tCCCC(12)-halka _v
315	23	-	0,09	-	7,71	halka _h -tCCCC(6)+ tCC(71)+ tC-N ¹⁸ (6)
316	18	-	0,00	-	0,20	tC-N ¹⁸ (10)+ tCC(20)-zigzag
317	16	-	0,00	-	1,67	tC=O(23)+ tC-N ¹⁸ (17)+ tC-N ⁵¹ (6)+ tC- O(10)
318	11	-	0,36	-	1,58	tC=O(15)+ tC-N ⁵¹ (34)+ tC-O(13)
319	9	-	0,30	-	1,73	tC=O(16)+ tC-N ¹⁸ (28)+ tC ¹⁹ C ¹⁷ (6)
320	8	-	0,07	-	1,14	tCC(24)+ tC ¹⁷ C ¹⁵ (6)+ tC-N ⁵¹ (15)+ tC- N ¹⁸ (6)+ tC-O(10)
321	6	-	0,07	-	1,92	tC-N ⁵¹ (10)+ tC-N ¹⁸ (14)+ tCC(18)+ tC- O(7)+ tCCCC(5)-halka _h

(v:germe; δ:makaslama; ρ:sallanan; τ:büküm; w:sallamak; t:torsiyonal mod;β:deformasyon;γ:düzlem dışı bükme; u: şemsiye harf; a:asimetrik s:simetrik; büyük harf a ve b: dejenere deformasyon tipleri. "halka_v" molekülün benzen parçasının sayfa düzlemine dik , "halka_h" benzen parçasının sayfa düzlemine yatay olduğunu gösterir.)

Tablo 4.3. Simetri koordinatları

Simetri Koordinatları	
S ₁ =R _{2,1}	v _{CC}
S ₂ =R _{3,2}	v _{CC}
S ₃ =R _{4,3}	v _{CC}
S ₄ =R _{5,4}	v _{CC}
S ₅ =R _{6,5}	v _{CC}
S ₆ =R _{7,6}	v _{CC}
S ₇ =R _{8,7}	v _{CC}
S ₈ =R _{9,8}	v _{OC}
S ₉ =R _{10,9}	v _{CO}
S ₁₀ =R _{11,10}	v _{CO}
S ₁₁ =R _{12,10}	v _{CC}
S ₁₂ =R _{13,11}	v _{CC}
S ₁₃ =R _{14,12}	v _{CC}
S ₁₄ =R _{15,13}	v _{CC}
S ₁₅ =R _{15,14}	v _{CC}
S ₁₆ =R _{16,13}	v _{OC}
S ₁₇ =R _{17,15}	v _{CC}
S ₁₈ =R _{18,17}	v _{NC}
S ₁₉ =R _{19,17}	v _{CC}
S ₂₀ =R _{20,19}	v _{CC}
S ₂₁ =R _{31,19}	v _{CC}
S ₂₂ =R _{22,20}	v _{CC}
S ₂₃ =R _{23,21}	v _{CC}
S ₂₄ =R _{24,22}	v _{CC}
S ₂₅ =R _{24,23}	v _{CC}
S ₂₆ =R _{25,18}	v _{CN}
S ₂₇ =R _{26,25}	v _{CC}
S ₂₈ =R _{27,26}	v _{CC}
S ₂₉ =R _{29,28}	v _{CC}
S ₃₀ =R _{30,29}	v _{CC}
S ₃₁ =R _{31,29}	v _{CC}

$S_{32}=R_{32,30}$	VCC
$S_{33}=R_{33,31}$	VCC
$S_{34}=R_{34,32}$	VCC
$S_{35}=R_{34,33}$	VCC
$S_{36}=R_{35,28}$	VCC
$S_{37}=R_{36,35}$	VCC
$S_{38}=R_{37,35}$	VCC
$S_{39}=R_{38,36}$	VCC
$S_{40}=R_{39,37}$	VCC
$S_{41}=R_{40,38}$	VCC
$S_{42}=R_{40,39}$	VCC
$S_{43}=R_{41,36}$	VOC
$S_{44}=R_{42,40}$	VOC
$S_{45}=R_{43,42}$	VCO
$S_{46}=R_{44,43}$	VCC
$S_{47}=R_{45,44}$	VCC
$S_{48}=R_{46,45}$	VCC
$S_{49}=R_{47,46}$	VCC
$S_{50}=R_{48,47}$	VCC
$S_{51}=R_{49,48}$	VCC
$S_{52}=R_{50,49}$	VCC
$S_{53}=R_{51,27}$	VNC
$S_{54}=R_{51,28}$	VNC
$S_{55}=I_{52,1}$	VHC
$S_{56}=I_{53,1}$	VHC
$S_{57}=I_{54,1}$	VHC
$S_{58}=I_{55,2}$	VHC
$S_{59}=I_{56,2}$	VHC
$S_{60}=I_{57,3}$	VHC
$S_{61}=I_{58,3}$	VHC
$S_{62}=I_{59,4}$	VHC
$S_{63}=I_{60,4}$	VHC
$S_{64}=I_{61,5}$	VHC
$S_{65}=I_{62,5}$	VHC
$S_{66}=I_{63,6}$	VHC
$S_{67}=I_{64,6}$	VHC
$S_{68}=I_{65,7}$	VHC
$S_{69}=I_{66,7}$	VHC
$S_{70}=I_{67,8}$	VHC
$S_{71}=I_{68,8}$	VHC
$S_{72}=I_{69,11}$	VHC
$S_{73}=I_{70,12}$	VHC
$S_{74}=I_{71,14}$	VHC
$S_{75}=R_{72,16}$	VHO
$S_{76}=I_{73,20}$	VHC
$S_{77}=I_{74,21}$	VHC
$S_{78}=I_{75,22}$	VHC
$S_{79}=I_{76,23}$	VHC
$S_{80}=I_{77,24}$	VHC
$S_{81}=I_{78,25}$	VHC
$S_{82}=I_{79,25}$	VHC
$S_{83}=I_{80,26}$	VHC
$S_{84}=I_{81,26}$	VHC
$S_{85}=I_{82,27}$	VHC
$S_{86}=I_{83,27}$	VHC
$S_{87}=I_{84,30}$	VHC
$S_{88}=I_{85,31}$	VHC
$S_{89}=I_{86,32}$	VHC

$S_{90}=\Gamma_{87,33}$	VHC
$S_{91}=\Gamma_{88,34}$	VHC
$S_{92}=\Gamma_{89,37}$	VHC
$S_{93}=\Gamma_{90,38}$	VHC
$S_{94}=\Gamma_{91,39}$	VHC
$S_{95}=\Gamma_{92,41}$	VHO
$S_{96}=\Gamma_{93,43}$	VHC
$S_{97}=\Gamma_{94,43}$	VHC
$S_{98}=\Gamma_{95,44}$	VHC
$S_{99}=\Gamma_{96,44}$	VHC
$S_{100}=\Gamma_{97,45}$	VHC
$S_{101}=\Gamma_{98,45}$	VHC
$S_{102}=\Gamma_{99,46}$	VHC
$S_{103}=\Gamma_{100,46}$	VHC
$S_{104}=\Gamma_{101,47}$	VHC
$S_{105}=\Gamma_{102,47}$	VHC
$S_{106}=\Gamma_{103,48}$	VHC
$S_{107}=\Gamma_{104,48}$	VHC
$S_{108}=\Gamma_{105,49}$	VHC
$S_{109}=\Gamma_{106,49}$	VHC
$S_{110}=\Gamma_{107,50}$	VHC
$S_{111}=\Gamma_{108,50}$	VHC
$S_{112}=\Gamma_{109,50}$	VHC
$B_{113}=(2\beta_{11,13,15}-\beta_{13,15,14}-\beta_{15,14,12}+2\beta_{14,12,10}-\beta_{12,10,11}-\beta_{10,11,13})/\sqrt{12}$	β_{halkaCC}
$B_{114}=(\beta_{13,15,14}-\beta_{15,14,12}+\beta_{12,10,11}+\beta_{10,11,13})/2$	β_{halkaCC}
$B_{115}=(\beta_{11,13,15}-\beta_{13,15,14}+\beta_{15,14,12}-\beta_{14,12,10}+\beta_{12,10,11}-\beta_{10,11,13})/\sqrt{6}$	β_{halkaCC}
$T_{116}=(t_{11,13,15,14}-t_{15,14,12,10}+t_{14,12,10,11}-t_{10,11,13,15})/2,(t_{70,12,14,71})/2$	T_{halkaCC}
$T_{117}=(-0.288675t_{11,13,15,14}+0.577350t_{13,15,14,12}-0.288675t_{15,14,12,10}-0.288675t_{14,12,10,11}+0.577350t_{13,15,14,12}-0.288675t_{15,14,12,10}), (t_{70,12,14,71})$	T_{halkaCC}
$T_{118}=(-t_{11,13,15,14}+t_{13,15,14,12}-t_{15,14,12,10}+t_{14,12,10,11}-t_{12,10,11,13}+t_{10,11,13,15}), (t_{70,12,14,71})/\sqrt{6}$	T_{halkaCC}
$B_{119}=(2\beta_{21,19,20}-\beta_{19,20,22}-\beta_{20,22,24}+2\beta_{22,24,23}-\beta_{24,23,21}-\beta_{23,21,19})/\sqrt{12}$	β_{halkaCC}
$B_{120}=(\beta_{19,20,22}-\beta_{20,22,24}+\beta_{24,23,21}-\beta_{23,21,19})/2$	β_{halkaCC}
$B_{121}=(\beta_{21,19,20}-\beta_{19,20,22}+\beta_{20,22,24}-\beta_{22,24,23}+\beta_{24,23,21}-\beta_{23,21,19})/\sqrt{6}$	β_{halkaCC}
$T_{122}=(0.5t_{21,19,20,22}-0.5t_{20,22,24,23}+t_{75,22,24,77}+0.5t_{22,24,23,21}-t_{77,24,23,76}-0.5t_{23,21,19,20})$	T_{halkaCC}
$T_{123}=(-0.288675t_{21,19,20,22}+0.577350t_{19,20,22,24}+t_{73,20,22,75}-0.288675t_{20,22,24,23}+t_{75,22,24,77}-0.288675t_{22,24,23,21}+t_{77,24,23,76}+0.577350t_{24,23,21,19}+t_{76,23,21,74}-0.288675t_{23,21,19,20})$	T_{halkaCC}

$T_{124} = (-t_{21,19,20,22} + t_{19,20,22,24} - t_{20,22,24,23} + t_{22,24,23,21} - t_{24,23,21,19} + t_{23,21,19,20}) / \sqrt{6}, (t_{73,20,22,75} + t_{75,22,24,77} + t_{77,24,23,76} + t_{76,23,21,74}) / \sqrt{6}$	T_{ringCC}
$B_{125} = (2\beta_{31,29,30} - \beta_{29,30,32} - \beta_{30,32,34} + 2\beta_{32,34,33} - \beta_{34,33,31} - \beta_{33,31,29}) / \sqrt{12}$	$\beta_{halkaCC}$
$B_{126} = (\beta_{29,30,32} - \beta_{30,32,34} + \beta_{34,33,31} - \beta_{33,31,29}) / 2$	$\beta_{halkaCC}$
$B_{127} = (\beta_{31,29,30} - \beta_{29,30,32} + \beta_{30,32,34} - \beta_{32,34,33} + \beta_{34,33,31} - \beta_{33,31,29}) / \sqrt{6}$	$\beta_{halkaCC}$
$T_{128} = (t_{31,29,30,32} - t_{30,32,34,33} + t_{32,34,33,31} - t_{33,31,29,30}) / 2,$ $t_{28,29,30,84} + t_{86,32,34,88} + t_{88,34,33,87} + t_{85,31,29,28}$	$T_{halkaCC}$
$T_{129} = (-0.288675t_{31,29,30,32} + 0.577350t_{29,30,32,34} - 0.288675t_{30,32,34,33} - 0.288675t_{32,34,33,31} + 0.577350t_{34,33,31,29} - 0.288675t_{33,31,29,30}), (t_{28,29,30,32} + t_{84,30,32,34} + t_{86,32,34,33} + t_{88,34,33,31} + t_{87,33,31,29} + t_{85,31,33,34}), (t_{31,29,30,84} + t_{29,30,32,86} + t_{30,32,34,88} + t_{32,34,33,87} + t_{85,31,29,30} + t_{33,31,29,28}), (t_{28,29,30,84} + t_{84,30,32,86} + t_{86,32,34,88} + t_{88,34,33,87} + t_{87,33,31,85} + t_{85,31,29,28}),$	$T_{halkaCC}$
$T_{130} = (-t_{31,19,20,22} + t_{29,30,32,34} - t_{30,32,34,33} + t_{32,34,33,31} - t_{34,33,31,29} + t_{33,31,29,30}) / \sqrt{6}, (t_{28,29,30,32} + t_{84,30,32,34} + t_{86,32,34,33} + t_{88,34,33,31} + t_{87,33,31,29} + t_{85,31,29,30} + t_{31,29,30,84} + t_{29,30,32,86} + t_{30,32,34,88} + t_{32,34,33,87} + t_{34,33,31,85} + t_{33,31,29,28}) / \sqrt{6}, (t_{28,29,30,84} + t_{84,30,32,86} + t_{86,32,34,88} + t_{88,34,33,87} + t_{87,33,31,85} + t_{85,31,29,28}) / \sqrt{6}$	$T_{halkaCC}$
$B_{131} = (2\beta_{35,36,38} - \beta_{36,38,40} - \beta_{38,40,39} + 2\beta_{40,39,37} - \beta_{39,37,35} - \beta_{37,35,36}) / \sqrt{12}$	$\beta_{halkaCC}$
$B_{132} = (\beta_{36,38,40} - \beta_{38,40,39} + \beta_{39,37,35} - \beta_{37,35,36}) / 2$	$\beta_{halkaCC}$
$B_{133} = (\beta_{35,38,36} - \beta_{36,40,38} + \beta_{38,39,40} - \beta_{40,37,39} + \beta_{39,35,37} - \beta_{37,36,35}) / \sqrt{6}$	$\beta_{halkaCC}$
$T_{134} = (t_{35,36,38,40} - t_{38,40,39,37} + t_{40,39,37,35} - t_{37,35,36,38}) / 2,$ $(t_{35,36,38,90} + t_{38,40,39,91} + t_{40,39,37,89} + t_{37,35,36,41}),$ $(t_{41,36,38,90} + t_{42,40,39,91} + t_{91,39,37,89} + t_{28,35,36,41}),$ $(t_{40,38,36,41} + t_{37,39,40,42} + t_{35,37,39,91} + t_{28,35,36,38})$	$T_{halkaCC}$
$T_{135} = (-0.288675t_{35,36,38,40} + 0.577350t_{36,38,40,39} - 0.288675t_{38,40,39,37} - 0.288675t_{40,39,37,35} + 0.577350t_{39,37,35,36} - 0.288675t_{37,35,36,38}), (t_{35,36,38,90} + t_{20,22,24,23} + t_{36,38,40,42} + t_{38,40,39,91} + t_{40,39,37,89} + t_{39,37,35,28} + t_{37,35,36,41}), (t_{41,36,38,40} + t_{90,38,40,39} + t_{42,40,39,37} + t_{91,39,37,35} + t_{89,37,35,36} + t_{28,35,36,38}), (t_{41,36,38,90} + t_{90,38,40,42} + t_{42,40,39,91} + t_{91,39,37,89} + t_{89,37,35,28} + t_{28,35,36,41})$	$T_{halkaCC}$
$T_{136} = (-t_{35,36,38,40} + t_{36,38,40,39} - t_{38,40,39,37} + t_{40,39,37,35} - t_{39,37,35,36} + t_{37,35,36,38}) / \sqrt{6}, (t_{35,36,38,90} + t_{36,38,40,42} + t_{38,40,39,91} + t_{40,39,37,89} + t_{39,37,35,28} + t_{37,35,36,41}) / \sqrt{6}, (t_{41,36,38,40} + t_{90,38,40,39} + t_{42,40,39,37} + t_{91,39,37,35} + t_{89,37,35,36} + t_{28,35,36,38}) / \sqrt{6}, t_{41,36,38,90}, t_{90,38,40,42}, t_{42,40,39,91}, t_{91,39,37,89}, t_{89,37,35,28}, t_{28,35,36,41}$	$T_{halkaCC}$
$B_{137} = (\beta_{53,1,52} + \beta_{54,1,52} + \beta_{54,1,53} - \beta_{2,1,54} - \beta_{2,1,53} - \beta_{2,1,52}) / \sqrt{6}$	$\beta C^1(XY_3)$
$B_{138} = (2\beta_{53,1,52} - \beta_{54,1,52} - \beta_{54,1,53}) / \sqrt{6}$	$\beta_a C^1(XY_3)$
$B_{139} = (\beta_{54,1,52} - \beta_{54,1,53}) / \sqrt{2}$	$\beta_b C^1(XY_3)$
$B_{140} = (2\beta_{2,1,54} - \beta_{2,1,53} - \beta_{2,1,52}) / \sqrt{6}$	$\rho^a(XY_3)$
$B_{141} = (\beta_{2,1,53} - \beta_{2,1,52}) / \sqrt{2}$	$\rho^b(XY_3)$
$B_{142} = \beta_{1,2,3}$	β_{CCC}

$B_{143}=(4\beta_{55,2,56}-\beta_{55,2,1}-\beta_{55,2,3}-\beta_{56,2,1}-\beta_{56,2,3})/2\sqrt{5}$	δC^2H_2
$B_{144}=(\beta_{55,2,1}+\beta_{55,2,3}-\beta_{56,2,1}-\beta_{56,2,3})/\sqrt{4}$	$\rho C^2(XY_2)$
$B_{145}=(\beta_{55,2,1}-\beta_{55,2,3}+\beta_{56,2,1}-\beta_{56,2,3})/\sqrt{4}$	$wC^2(XY_2)$
$B_{146}=(\beta_{55,2,1}-\beta_{55,2,3}-\beta_{56,2,1}+\beta_{56,2,3})/\sqrt{4}$	$\tau C^2(XY_2)$
$B_{147}=\beta_{2,3,4}$	βCCC
$B_{148}=(4\beta_{57,3,58}-\beta_{57,3,2}-\beta_{57,3,4}-\beta_{58,3,2}-\beta_{58,3,4})/2\sqrt{5},$ $\beta_{57,3,2}, \beta_{57,3,4}, \beta_{58,3,2}, \beta_{58,3,4}$	δC^3H_2
$B_{149}=(\beta_{57,3,2}+\beta_{57,3,4}-\beta_{58,3,2}-\beta_{58,3,4})/\sqrt{4}$	$\rho C^3(XY_2)$
$B_{150}=(\beta_{57,3,2}-\beta_{57,3,4}+\beta_{58,3,2}-\beta_{58,3,4})/\sqrt{4}$	$wC^3(XY_2)$
$B_{151}=(\beta_{57,3,2}-\beta_{57,3,4}-\beta_{58,3,2}+\beta_{58,3,4})/\sqrt{4}$	$\tau C^3(XY_2)$
$B_{152}=\beta_{3,4,5}$	βCCC
$B_{153}=(4\beta_{59,4,60}-\beta_{59,4,3}-\beta_{59,4,5}-\beta_{60,4,3}-\beta_{60,4,5})/2\sqrt{5},$ $\beta_{59,4,3}, \beta_{59,4,5}, \beta_{60,4,3}, \beta_{60,4,5}$	δC^4H_2
$B_{154}=(\beta_{59,4,3}+\beta_{59,4,5}-\beta_{60,4,3}-\beta_{60,4,5})/\sqrt{4}$	$\rho C^4(XY_2)$
$B_{155}=(\beta_{59,4,3}-\beta_{59,4,5}+\beta_{60,4,3}-\beta_{60,4,5})/\sqrt{4}$	$wC^4(XY_2)$
$B_{156}=(\beta_{59,4,3}-\beta_{59,4,5}-\beta_{60,4,3}+\beta_{60,4,5})/\sqrt{4}$	$\tau C^4(XY_2)$
$B_{157}=\beta_{4,5,6}$	βCCC
$B_{158}=(4\beta_{61,5,62}-\beta_{61,5,4}-\beta_{61,5,6}-\beta_{62,5,4}-\beta_{62,5,6})/2\sqrt{5},$ $\beta_{61,5,4}, \beta_{61,5,6}, \beta_{62,5,4}, \beta_{62,5,6}$	δC^5H_2
$B_{159}=(\beta_{61,5,4}+\beta_{61,5,6}-\beta_{62,5,4}-\beta_{62,5,6})/\sqrt{4}$	$\rho C^5(XY_2)$
$B_{160}=(\beta_{61,5,4}-\beta_{61,5,6}+\beta_{62,5,4}-\beta_{62,5,6})/\sqrt{4}$	$wC^5(XY_2)$
$B_{161}=(\beta_{61,5,4}-\beta_{61,5,6}-\beta_{62,5,4}+\beta_{62,5,6})/\sqrt{4}$	$\tau C^5(XY_2)$
$B_{162}=\beta_{5,6,7}$	βCCC
$B_{163}=(4\beta_{63,6,64}-\beta_{63,6,5}-\beta_{63,6,7}-\beta_{64,6,5}-\beta_{64,6,7})/2\sqrt{5},$ $\beta_{63,6,5}, \beta_{63,6,7}, \beta_{64,6,5}, \beta_{64,6,7}$	δC^6H_2
$B_{164}=(\beta_{63,6,5}+\beta_{63,6,7}-\beta_{64,6,5}-\beta_{64,6,7})/\sqrt{4}$	$\rho C^6(XY_2)$
$B_{165}=(\beta_{63,6,5}-\beta_{63,6,7}+\beta_{64,6,5}-\beta_{64,6,7})/\sqrt{4}$	$wC^6(XY_2)$
$B_{166}=(\beta_{63,6,5}-\beta_{63,6,7}-\beta_{64,6,5}+\beta_{64,6,7})/\sqrt{4}$	$\tau C^6(XY_2)$
$B_{167}=\beta_{6,7,8}$	βCCC
$B_{168}=(4\beta_{65,7,66}-\beta_{65,7,6}-\beta_{65,7,8}-\beta_{66,7,6}-\beta_{66,7,8})/2\sqrt{5},$ $\beta_{65,7,6}, \beta_{65,7,8}, \beta_{66,7,6}, \beta_{66,7,8}$	δC^7H_2
$B_{169}=(\beta_{65,7,6}+\beta_{65,7,8}-\beta_{66,7,6}-\beta_{66,7,8})/\sqrt{4}$	$\rho C^7(XY_2)$
$B_{170}=(\beta_{65,7,6}-\beta_{65,7,8}+\beta_{66,7,6}-\beta_{66,7,8})/\sqrt{4}$	$wC^7(XY_2)$
$B_{171}=(\beta_{65,7,6}-\beta_{65,7,8}-\beta_{66,7,6}+\beta_{66,7,8})/\sqrt{4}$	$\tau C^7(XY_2)$
$B_{172}=\beta_{7,8,9}$	βCCO
$B_{173}=(4\beta_{67,8,68}-\beta_{67,8,7}-\beta_{67,8,9}-\beta_{68,8,7}-\beta_{68,8,9})/2\sqrt{5},$ $\beta_{67,8,7}, \beta_{68,8,7}$	δC^8H_2
$B_{174}=(\beta_{67,8,7}+\beta_{67,8,9}-\beta_{68,8,7}-\beta_{68,8,9})/\sqrt{4}, \beta_{67,8,7},$ $\beta_{68,8,7}$	$\rho C^8(XY_2)$
$B_{175}=(\beta_{67,8,7}-\beta_{67,8,9}+\beta_{68,8,7}-\beta_{68,8,9})/\sqrt{4}, \beta_{67,8,7},$ $\beta_{68,8,7}$	$wC^8(XY_2)$
$B_{176}=(\beta_{67,8,7}-\beta_{67,8,9}-\beta_{68,8,7}+\beta_{68,8,9})/\sqrt{4}, \beta_{67,8,7},$ $\beta_{68,8,7}$	$\tau C^8(XY_2)$
$B_{177}=\beta_{8,9,10}$	βCOC
$B_{178}=(\beta_{11,10,9}-\beta_{12,10,9})/\sqrt{2}$	$\rho_{halka}(CO)$
$\gamma_{179}=\gamma_{9,10,11,12}$	$W_{halka}(CO)$
$B_{180}=(\beta_{10,11,69}-\beta_{13,11,69})/\sqrt{2}$	$\rho_{halka}(CH)$
$\gamma_{181}=\gamma_{69,11,13,10}$	$\gamma_{halka}(CH)$
$B_{182}=(\beta_{10,12,70}-\beta_{14,12,70})/\sqrt{2}, \beta_{10,12,70}, \beta_{14,12,70}$	$\rho_{halka}(CH)$
$\gamma_{183}=\gamma_{70,12,14,10}$	$\gamma_{halka}(CH)$
$B_{184}=(\beta_{15,13,16}-\beta_{11,13,16})/\sqrt{2}$	$\rho_{halka}(CO)$
$\gamma_{185}=\gamma_{16,13,15,11}$	$W_{halka}(CO)$
$B_{186}=(\beta_{12,14,71}-\beta_{15,14,71})/\sqrt{2}, \beta_{15,14,71}, \beta_{12,14,71}$	$\rho_{halka}(CH)$
$\gamma_{187}=\gamma_{71,14,15,12}$	$\gamma_{halka}(CH)$
$B_{188}=(\beta_{14,15,17}-\beta_{13,15,17})/\sqrt{2}$	$\rho_{halka}(CC)$
$\gamma_{189}=\gamma_{17,15,14,13}$	$W_{halka}(CC)$

$B_{190}=\beta_{13,16,72}$	βCOH
$\gamma_{191}=(\gamma_{18,17,15,19} + \gamma_{15,17,18,19} + \gamma_{19,17,18,15})/\sqrt{3}$	$u\text{C}^{17}(\text{XY}_3)$
$B_{192}=(2\beta_{15,17,19}-\beta_{18,17,19}-\beta_{18,17,15})/\sqrt{6}$	$\beta_a\text{C}^{17}(\text{XY}_3)$
$B_{193}=(\beta_{18,17,19}-\beta_{18,17,15})/\sqrt{2}$	$\beta_b\text{C}^{17}(\text{XY}_3)$
$B_{194}=\beta_{17,18,25}$	βCNC
$B_{195}=(\beta_{20,19,17}-\beta_{21,19,17})/\sqrt{2}$	$\rho_{\text{halka}}(\text{CC})$
$\gamma_{196}=\gamma_{17,19,20,21}$	$W_{\text{halka}}(\text{CC})$
$B_{197}=(\beta_{19,20,73}-\beta_{22,20,73})/\sqrt{2}, \beta_{22,20,73}, \beta_{19,20,73}$	$\rho_{\text{halka}}(\text{CH})$
$\gamma_{198}=\gamma_{73,20,22,19}$	$\gamma_{\text{halka}}(\text{CH})$
$B_{199}=(\beta_{19,21,74}-\beta_{23,21,74})/\sqrt{2}$	$\rho_{\text{halka}}(\text{CH})$
$\gamma_{200}=\gamma_{74,21,23,19}$	$\gamma_{\text{halka}}(\text{CH})$
$B_{201}=(\beta_{20,22,75}-\beta_{24,22,75})/\sqrt{2}$	$\rho_{\text{halka}}(\text{CH})$
$\gamma_{202}=\gamma_{75,22,24,20}$	$\gamma_{\text{halka}}(\text{CH})$
$B_{203}=(\beta_{21,23,76}-\beta_{24,23,76})/\sqrt{2}, \beta_{24,23,76}, \beta_{21,23,76}$	$\rho_{\text{halka}}(\text{CH})$
$\gamma_{204}=\gamma_{76,23,24,21}$	$\gamma_{\text{halka}}(\text{CH})$
$B_{205}=(\beta_{22,24,77}-\beta_{23,24,77})/\sqrt{2}, \beta_{22,24,77}, \beta_{23,24,77}$	$\rho_{\text{halka}}(\text{CH})$
$\gamma_{206}=\gamma_{77,24,23,22}$	$\gamma_{\text{halka}}(\text{CH})$
$B_{207}=\beta_{18,25,26}$	βNCC
$B_{208}=(4\beta_{78,28,79}-\beta_{78,25,18}-\beta_{78,25,26}-\beta_{79,25,18}-\beta_{79,25,26})/2\sqrt{5}, \beta_{78,25,26}, \beta_{79,25,26}, \beta_{78,25,18}, \beta_{79,25,18}$	$\delta\text{C}^{25}\text{H}_2$
$B_{209}=(\beta_{78,25,18}+\beta_{78,25,26}-\beta_{79,25,18}-\beta_{79,25,26})/\sqrt{4}$	$\rho\text{C}^{25}(\text{XY}_2)$
$B_{210}=(\beta_{78,25,18}-\beta_{78,25,26}+\beta_{79,25,18}-\beta_{79,25,26})/\sqrt{4}$	$w\text{C}^{25}(\text{XY}_2)$
$B_{211}=(\beta_{78,25,18}-\beta_{78,25,26}-\beta_{79,25,18}+\beta_{79,25,26})/\sqrt{4}$	$\tau\text{C}^{25}(\text{XY}_2)$
$B_{212}=\beta_{25,26,27}$	βCCC
$B_{213}=(4\beta_{80,26,81}-\beta_{80,26,25}-\beta_{80,26,27}-\beta_{81,26,25}-\beta_{81,26,27})/2\sqrt{5}, \beta_{80,26,25}, \beta_{80,26,27}, \beta_{81,26,25}, \beta_{81,26,27}$	$\delta\text{C}^{26}\text{H}_2$
$B_{214}=(\beta_{80,26,25}+\beta_{80,26,27}-\beta_{81,26,25}-\beta_{81,26,27})/\sqrt{4}$	$\rho\text{C}^{26}(\text{XY}_2)$
$B_{215}=(\beta_{80,26,25}-\beta_{80,26,27}+\beta_{81,26,25}-\beta_{81,26,27})/\sqrt{4}$	$w\text{C}^{26}(\text{XY}_2)$
$B_{216}=(\beta_{80,26,25}-\beta_{80,26,27}-\beta_{81,26,25}+\beta_{81,26,27})/\sqrt{4}$	$\tau\text{C}^{26}(\text{XY}_2)$
$B_{217}=\beta_{26,27,51}$	βCCN
$B_{218}=(4\beta_{82,27,83}-\beta_{82,27,26}-\beta_{82,27,51}-\beta_{83,27,26}-\beta_{83,27,51})/2\sqrt{5}, \beta_{82,27,26}, \beta_{83,27,26}$	$\delta\text{C}^{27}\text{H}_2$
$B_{219}=(\beta_{82,27,26}+\beta_{82,27,51}-\beta_{83,27,26}-\beta_{83,27,51})/\sqrt{4}$	$\rho\text{C}^{27}(\text{XY}_2)$
$B_{220}=(\beta_{82,27,26}-\beta_{82,27,51}+\beta_{83,27,26}-\beta_{83,27,51})/\sqrt{4}$	$w\text{C}^{27}(\text{XY}_2)$
$B_{221}=(\beta_{82,27,26}-\beta_{82,27,51}-\beta_{83,27,26}+\beta_{83,27,51})/\sqrt{4}$	$\tau\text{C}^{27}(\text{XY}_2)$
$\gamma_{222}=(\gamma_{51,28,35,29} + \gamma_{35,28,51,29} + \gamma_{29,28,51,35})/\sqrt{3}$	$u\text{C}^{28}(\text{XY}_3)$
$B_{223}=(2\beta_{35,28,29}-\beta_{51,28,29}-\beta_{51,28,35})/\sqrt{6}$	$\beta_a\text{C}^{28}(\text{XY}_3)$
$B_{224}=(\beta_{51,28,29}-\beta_{51,28,35})/\sqrt{2}$	$\beta_b\text{C}^{28}(\text{XY}_3)$
$B_{225}=(\beta_{30,29,28}-\beta_{31,29,28})/\sqrt{2}$	$\rho_{\text{halka}}(\text{CC})$
$\gamma_{226}=\gamma_{28,29,30,31}$	$W_{\text{halka}}(\text{CC})$
$B_{227}=(\beta_{29,30,84}-\beta_{32,30,84})/\sqrt{2}, \beta_{29,30,84}, \beta_{32,30,84}$	$\rho_{\text{halka}}(\text{CH})$
$\gamma_{228}=\gamma_{84,30,32,29}$	$\gamma_{\text{halka}}(\text{CH})$
$B_{229}=(\beta_{29,31,85}-\beta_{33,31,85})/\sqrt{2}$	$\rho_{\text{halka}}(\text{CH})$
$\gamma_{230}=\gamma_{85,31,33,29}$	$\gamma_{\text{halka}}(\text{CH})$
$B_{231}=(\beta_{30,32,86}-\beta_{34,32,86})/\sqrt{2}$	$\rho_{\text{halka}}(\text{CH})$
$\gamma_{232}=\gamma_{86,32,34,30}$	$\gamma_{\text{halka}}(\text{CH})$
$B_{233}=(\beta_{31,33,87}-\beta_{34,33,87})/\sqrt{2}, \beta_{34,33,87}, \beta_{31,33,87}$	$\rho_{\text{halka}}(\text{CH})$
$\gamma_{234}=\gamma_{87,33,34,31}$	$\gamma_{\text{halka}}(\text{CH})$
$B_{235}=(\beta_{32,34,88}-\beta_{33,34,88})/\sqrt{2}$	$\rho_{\text{halka}}(\text{CH})$
$\gamma_{236}=\gamma_{88,34,33,32}$	$\gamma_{\text{halka}}(\text{CH})$
$B_{237}=(\beta_{36,35,28}-\beta_{37,35,28})/\sqrt{2}$	$\rho_{\text{halka}}(\text{CC})$
$\gamma_{238}=\gamma_{28,35,36,37}$	$W_{\text{halka}}(\text{CC})$
$B_{239}=(\beta_{38,36,41}-\beta_{35,36,41})/\sqrt{2}$	$\rho_{\text{halka}}(\text{CO})$
$\gamma_{240}=\gamma_{41,36,38,35}$	$W_{\text{halka}}(\text{CO})$

$B_{241}=(\beta_{35,37,89}-\beta_{39,37,89})/\sqrt{2}$	$\rho_{\text{halka}}(\text{CH})$
$\gamma_{242}=\gamma_{89,37,39,35}$	$\gamma_{\text{halka}}(\text{CH})$
$B_{243}=(\beta_{36,38,90}-\beta_{40,38,90})/\sqrt{2}$	$\rho_{\text{halka}}(\text{CH})$
$\gamma_{244}=\gamma_{90,38,40,36}$	$\gamma_{\text{halka}}(\text{CH})$
$B_{245}=(\beta_{37,39,91}-\beta_{40,39,91})/\sqrt{2}, \beta_{37,39,91}, \beta_{40,39,91}$	$\rho_{\text{halka}}(\text{CH})$
$\gamma_{246}=\gamma_{91,39,40,37}$	$\gamma_{\text{halka}}(\text{CH})$
$B_{247}=(\beta_{39,40,42}-\beta_{38,40,42})/\sqrt{2}$	$\rho_{\text{halka}}(\text{CO})$
$\gamma_{248}=\gamma_{42,40,39,38}$	$W_{\text{halka}}(\text{CO})$
$B_{249}=\beta_{36,41,92}$	β_{CHO}
$B_{250}=\beta_{40,42,43}$	β_{CCO}
$B_{251}=\beta_{42,43,44}$	β_{CCO}
$B_{252}=(4\beta_{93,43,94}-\beta_{93,43,42}-\beta_{93,43,44}-\beta_{93,43,42}-\beta_{94,43,44})/2\sqrt{5}, \beta_{93,43,42}, \beta_{93,43,44}, \beta_{94,43,42}, \beta_{94,43,44}$	$\delta C^{43}H_2$
$B_{253}=(\beta_{93,43,42}+\beta_{93,43,44}-\beta_{94,43,42}-\beta_{94,43,44})/\sqrt{4}$	$\rho C^{43}(XY_2)$
$B_{254}=(\beta_{93,43,42}-\beta_{93,43,44}+\beta_{94,43,42}-\beta_{94,43,44})/\sqrt{4}$	$w C^{43}(XY_2)$
$B_{255}=(\beta_{93,43,42}-\beta_{93,43,44}-\beta_{94,43,42}+\beta_{94,43,44})/\sqrt{4}$	$\tau C^{43}(XY_2)$
$B_{256}=\beta_{43,44,45}$	β_{CCC}
$B_{257}=(4\beta_{95,44,96}-\beta_{95,44,43}-\beta_{95,44,45}-\beta_{96,44,43}-\beta_{96,44,45})/2\sqrt{5}, \beta_{95,44,43}, \beta_{95,44,45}, \beta_{96,44,43}, \beta_{96,44,45}$	$\delta C^{44}H_2$
$B_{258}=(\beta_{95,44,43}+\beta_{95,44,45}-\beta_{96,44,43}-\beta_{96,44,45})/\sqrt{4}$	$\rho C^{44}(XY_2)$
$B_{259}=(\beta_{95,44,43}-\beta_{95,44,45}+\beta_{96,44,43}-\beta_{96,44,45})/\sqrt{4}$	$w C^{44}(XY_2)$
$B_{260}=(\beta_{95,44,43}-\beta_{95,44,45}-\beta_{96,44,43}+\beta_{96,44,45})/\sqrt{4}$	$\tau C^{44}(XY_2)$
$B_{261}=\beta_{44,45,46}$	β_{CCC}
$B_{262}=(4\beta_{97,45,98}-\beta_{97,45,44}-\beta_{97,45,46}-\beta_{98,45,44}-\beta_{98,45,46})/2\sqrt{5}, \beta_{97,45,44}, \beta_{97,45,46}, \beta_{98,45,44}, \beta_{98,45,46}$	$\delta C^{45}H_2$
$B_{263}=(\beta_{97,45,44}+\beta_{97,45,46}-\beta_{98,45,44}-\beta_{98,45,46})/\sqrt{4}$	$\rho C^{45}(XY_2)$
$B_{264}=(\beta_{97,45,44}-\beta_{97,45,46}+\beta_{98,45,44}-\beta_{98,45,46})/\sqrt{4}$	$w C^{45}(XY_2)$
$B_{265}=(\beta_{97,45,44}-\beta_{97,45,46}-\beta_{98,45,44}+\beta_{98,45,46})/\sqrt{4}$	$\tau C^{45}(XY_2)$
$B_{266}=\beta_{45,46,47}$	β_{CCC}
$B_{267}=(4\beta_{99,46,100}-\beta_{99,46,45}-\beta_{99,46,47}-\beta_{100,46,45}-\beta_{100,46,47})/2\sqrt{5}, \beta_{99,46,45}, \beta_{99,46,47}, \beta_{100,46,45}, \beta_{100,46,47}$	$\delta C^{46}H_2$
$B_{268}=(\beta_{99,46,45}+\beta_{99,46,47}-\beta_{100,46,45}-\beta_{100,46,47})/\sqrt{4}$	$\rho C^{46}(XY_2)$
$B_{269}=(\beta_{99,46,45}-\beta_{99,46,47}+\beta_{100,46,45}-\beta_{100,46,47})/\sqrt{4}$	$w C^{46}(XY_2)$
$B_{270}=(\beta_{99,46,45}-\beta_{99,46,47}-\beta_{100,46,45}+\beta_{100,46,47})/\sqrt{4}$	$\tau C^{46}(XY_2)$
$B_{271}=\beta_{46,47,48}$	β_{CCC}
$B_{272}=(4\beta_{101,47,102}-\beta_{101,47,46}-\beta_{101,47,48}-\beta_{102,47,46}-\beta_{102,47,48})/2\sqrt{5}, \beta_{101,47,46}, \beta_{101,47,48}, \beta_{102,47,46}, \beta_{102,47,48}$	$\delta C^{47}H_2$
$B_{273}=(\beta_{101,47,46}+\beta_{101,47,48}-\beta_{102,47,46}-\beta_{102,47,48})/\sqrt{4}$	$\rho C^{47}(XY_2)$
$B_{274}=(\beta_{101,47,46}-\beta_{101,47,48}+\beta_{102,47,46}-\beta_{102,47,48})/\sqrt{4}$	$w C^{47}(XY_2)$
$B_{275}=(\beta_{101,47,46}-\beta_{101,47,48}-\beta_{102,47,46}+\beta_{102,47,48})/\sqrt{4}$	$\tau C^{47}(XY_2)$
$B_{276}=\beta_{47,48,49}$	β_{CCC}
$B_{277}=(4\beta_{103,48,104}-\beta_{103,48,47}-\beta_{103,48,49}-\beta_{104,48,47}-\beta_{104,48,49})/2\sqrt{5}, \beta_{103,48,47}, \beta_{103,48,49}, \beta_{104,48,47}, \beta_{104,48,49}$	$\delta C^{48}H_2$
$B_{278}=(\beta_{103,48,47}+\beta_{103,48,49}-\beta_{104,48,47}-\beta_{104,48,49})/\sqrt{4}$	$\rho C^{48}(XY_2)$
$B_{279}=(\beta_{103,48,47}-\beta_{103,48,49}+\beta_{104,48,47}-\beta_{104,48,49})/\sqrt{4}$	$w C^{48}(XY_2)$
$B_{280}=(\beta_{103,48,47}-\beta_{103,48,49}-\beta_{104,48,47}+\beta_{104,48,49})/\sqrt{4}$	$\tau C^{48}(XY_2)$
$B_{281}=\beta_{48,49,50}$	β_{CCC}
$B_{282}=(4\beta_{105,49,106}-\beta_{105,49,48}-\beta_{105,49,50}-\beta_{106,49,48}-\beta_{106,49,50})/2\sqrt{5}, \beta_{105,49,48}, \beta_{105,49,50}, \beta_{106,49,48}, \beta_{106,49,50}$	$\delta C^{49}H_2$
$B_{283}=(\beta_{105,49,48}+\beta_{105,49,50}-\beta_{106,49,48}-\beta_{106,49,50})/\sqrt{4}$	$\rho C^{49}(XY_2)$
$B_{284}=(\beta_{105,49,48}-\beta_{105,49,50}+\beta_{106,49,48}-\beta_{106,49,50})/\sqrt{4}$	$w C^{49}(XY_2)$
$B_{285}=(\beta_{105,49,48}-\beta_{105,49,50}-\beta_{106,49,48}+\beta_{106,49,50})/\sqrt{4}$	$\tau C^{49}(XY_2)$

$B_{286}=(\beta_{108,50,109}+\beta_{107,50,109}+\beta_{107,50,108}-\beta_{49,50,107}-\beta_{49,50,108}-\beta_{49,50,109})/\sqrt{6}$	$\beta C^{50}(XY_3)$
$B_{287}=(2\beta_{108,50,109}-\beta_{107,50,109}-\beta_{107,50,108})/\sqrt{6}$	$\beta_a C^{50}(XY_3)$
$B_{288}=(\beta_{107,50,109}-\beta_{107,50,108})/\sqrt{2}$	$\beta_b C^{50}(XY_3)$
$B_{289}=(2\beta_{49,50,107}-\beta_{49,50,108}-\beta_{49,50,109})/\sqrt{6}$	$\rho^a(XY_3)$
$B_{290}=(\beta_{49,50,108}-\beta_{49,50,109})/\sqrt{2}$	$\rho^b(XY_3)$
$B_{291}=\beta_{27,51,28}$	βCNC
$t_{292}=(t_{3,2,1,52}, t_{3,2,1,53}, t_{3,2,1,54}, t_{55,2,1,52}, t_{55,2,1,53}, t_{55,2,1,54}, t_{56,2,1,52}, t_{56,2,1,53}, t_{56,2,1,54})/3$	tCC
$t_{293}=(t_{4,3,2,1}+t_{57,3,2,1}+t_{58,3,2,1}+t_{4,3,2,55}+t_{57,3,2,55}+t_{58,3,2,55}+t_{4,3,2,56}+t_{57,3,2,56}+t_{58,3,2,56})/3$	tCC
$t_{294}=(t_{5,4,3,2}+t_{59,4,3,2}+t_{60,4,3,2}+t_{5,4,3,57}+t_{59,4,3,57}+t_{60,4,3,57}+t_{5,4,3,58}+t_{59,4,3,58}+t_{60,4,3,58})/3$	tCC
$t_{295}=(t_{6,5,4,3}+t_{61,5,4,3}+t_{62,5,4,3}+t_{6,5,4,59}+t_{61,5,4,59}+t_{62,5,4,59}+t_{6,5,4,60}+t_{61,5,4,60}+t_{62,5,4,60})/3$	tCC
$t_{296}=(t_{7,6,5,4}+t_{63,6,5,4}+t_{64,6,5,4}+t_{7,6,5,61}+t_{63,6,5,61}+t_{64,6,5,61}+t_{7,6,5,62}+t_{63,6,5,62}+t_{64,6,5,62})/3$	tCC
$t_{297}=(t_{8,7,6,5}+t_{65,7,6,5}+t_{66,7,6,5}+t_{8,7,6,63}+t_{65,7,6,63}+t_{66,7,6,63}+t_{8,7,6,64}+t_{65,7,6,64}+t_{66,7,6,64})/3$	tCC
$t_{298}=(t_{9,8,7,6}+t_{67,8,7,6}+t_{68,8,7,6}+t_{9,8,7,65}+t_{67,8,7,65}+t_{68,8,7,65}+t_{9,8,7,66}+t_{67,8,7,66}+t_{68,8,7,66})/3$	tCC
$t_{299}=(t_{10,9,8,7}+t_{10,9,8,67}+t_{10,9,8,68})/\sqrt{3}$	tCO
$t_{300}=(t_{11,10,9,8}+t_{12,10,9,8})/\sqrt{2}$	tCO
$t_{301}=(t_{72,16,13,11}+t_{72,16,13,15})/\sqrt{2}$	tCO
$t_{302}=(t_{18,17,15,13}+t_{19,17,15,13}+t_{18,17,15,14}+t_{19,17,15,14})/2$	tCC
$t_{303}=(t_{25,18,17,15}+t_{25,18,17,19})/\sqrt{2}$	tNC
$t_{304}=(t_{20,19,17,15}+t_{21,19,17,15}+t_{20,19,17,18}+t_{21,19,17,18})/2$	tCC
$t_{305}=(t_{26,25,18,17}+t_{78,25,18,17}+t_{79,25,18,17})/\sqrt{3}$	tCN
$t_{306}=(t_{27,26,25,18}+t_{80,26,25,18}+t_{81,26,25,18}+t_{27,26,25,79}+t_{80,26,25,79}+t_{81,26,25,79})/3$	tCC
$t_{307}=(t_{51,27,26,25}+t_{82,27,26,25}+t_{83,27,26,25}+t_{51,27,26,81}+t_{82,27,26,81}+t_{83,27,26,81})/3$	tCC
$t_{308}=(t_{30,29,28,35}+t_{31,29,28,35}+t_{30,29,28,51}+t_{31,29,28,51})/2$	tCC
$t_{309}=(t_{36,25,28,29}+t_{37,35,28,29}+t_{36,35,28,51}+t_{37,35,28,51})/2$	tCC
$t_{310}=(t_{92,41,36,35}+t_{92,41,36,38})/\sqrt{2}$	tCO
$t_{311}=(t_{43,42,40,38}+t_{43,42,40,39})/\sqrt{2}$	tCO
$t_{312}=(t_{44,43,42,40}+t_{93,43,42,40}+t_{94,43,42,40})/\sqrt{3}$	tCO
$T_{313}=(t_{45,44,43,42}+t_{95,44,43,42}+t_{96,44,43,42}+t_{45,44,43,93}+t_{95,44,43,93}+t_{96,44,43,93}+t_{45,44,43,94}+t_{95,44,43,94}+t_{96,44,43,94})/3$	tCC
$T_{314}=(t_{46,45,44,43}+t_{97,45,44,43}+t_{98,45,44,43}+t_{46,45,44,95}+t_{97,45,44,95}+t_{98,45,44,95}+t_{46,45,44,96}+t_{97,45,44,96}+t_{98,45,44,96})/3$	tCC
$T_{315}=(t_{47,46,45,44}+t_{99,46,45,44}+t_{100,46,45,44}+t_{47,46,45,97}+t_{99,46,45,97}+t_{100,46,45,97}+t_{47,46,45,98}+t_{99,46,45,98}+t_{100,46,45,98})/3$	tCC
$T_{316}=(t_{48,47,46,45}+t_{101,47,46,45}+t_{102,47,46,45}+t_{48,47,46,99}+t_{101,47,46,99}+t_{102,47,46,99}+t_{48,47,46,100}+t_{101,47,46,100}+t_{102,47,46,100})/3$	tCC
$T_{317}=(t_{49,48,47,46}+t_{103,48,47,46}+t_{104,48,47,46}+t_{49,48,47,101}+t_{103,48,47,101}+t_{104,48,47,101}+t_{49,48,47,102}+t_{103,48,47,102}+t_{104,48,47,102})/3$	tCC
$T_{318}=(t_{50,49,48,47}+t_{105,49,48,47}+t_{106,49,48,47}+t_{50,49,48,103}+t_{105,49,48,103}+t_{106,49,48,103}+t_{50,49,48,104}+t_{105,49,48,104}+t_{106,49,48,104})/3$	tCC

$T_{319}=(t_{107,50,49,48}+t_{108,50,49,48}+t_{109,50,49,48}+t_{107,50,49,105}+t_{108,50,49,105}+t_{109,50,49,105}+t_{107,50,49,106}+t_{108,50,49,106}+t_{109,50,49,106})/3$	tCC
$T_{320}=(t_{28,51,27,26}+t_{28,51,27,82}+t_{28,51,27,83})/\sqrt{3}$	tCN
$T_{321}=(t_{27,51,28,29}+t_{27,51,28,35})/\sqrt{2}$	tCN

4.2. ¹H-NMR Analizi

Bileşğin proton NMR'ına ait DMSO ve kloroform çözücülerile kimyasal kayma değerleri teorik ve deneysel olarak Tablo 4.4 ve Tablo 4.5'de verilmiştir. Teorik hesaplamalar, integral denklemi formu kullanılan polarize edilmiş sürekli ortam (IEFPCM) içinde DMSO ve kloroform çözücülerile birlikte NMR=GIAO DFT(B3LYP)/6-311++G(2d,p) moleküler modellemesinde gerçekleştirildi.

Tablo 4.4. ¹H-NMR atamaları (DMSO çözücü)

Atom	δ_{deneysel}	$\delta_{\text{hesaplanan}}$
52H	0,84	0,88
53H	0,84	0,89
54H	0,84	1,17
55H	1,26	1,37
56H	1,26	1,35
57H	1,24	1,27
58H	1,24	1,27
59H	1,32	1,29
60H	1,32	1,30
61H	1,36	1,36
62H	1,36	1,36
63H	1,34	1,28
64H	1,34	1,29
65H	1,83	1,82
66H	1,83	1,82
67H	3,90	3,91
68H	3,90	3,90
69H	6,28	6,60
70H	6,15	6,39
71H	6,49	6,81
72H	15,92	15,70
73H	7,47	7,46
74H	7,47	7,45
75H	7,50	7,79
76H	7,50	7,80
77H	7,46	7,76
78H	3,21	3,39
79H	3,21	2,87
80H	1,64	1,35
81H	1,64	2,45

82H	3,21	2,86
83H	3,21	3,39
84H	7,47	7,46
85H	7,47	7,45
86H	7,50	7,79
87H	7,50	7,80
88H	7,46	7,76
89H	6,49	6,81
90H	6,28	6,62
91H	6,15	6,39
92H	15,92	15,70
93H	3,90	3,90
94H	3,90	3,91
95H	1,83	1,82
96H	1,83	1,82
97H	1,34	1,29
98H	1,34	1,28
99H	1,36	1,37
100H	1,36	1,35
101H	1,32	1,30
102H	1,32	1,29
103H	1,24	1,27
104H	1,24	1,26
105H	1,26	1,35
106H	1,26	1,36
107H	0,84	1,17
108H	0,84	0,88
109H	0,84	0,89

Tablo 4.5. ¹H-NMR atamaları (kloroform çözücü)

Atom	δ_{deneysel}	$\delta_{\text{hesaplanan}}$
52H	0,88	0,88
53H	0,88	0,89
54H	0,88	1,17
55H	1,39	1,36
56H	1,39	1,36
57H	1,27	1,27
58H	1,27	1,27
59H	1,29	1,29
60H	1,29	1,29
61H	1,36	1,36
62H	1,36	1,37
63H	1,27	1,25
64H	1,27	1,27
65H	1,79	1,83
66H	1,79	1,83
67H	3,93	3,86
68H	3,93	3,85

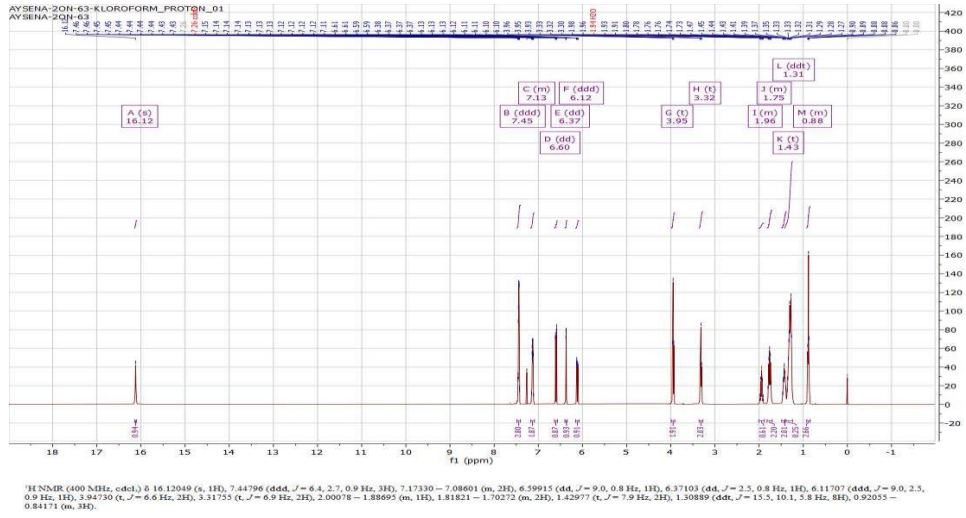
69H	6,59	6,63
70H	6,37	6,29
71H	6,61	6,74
72H	16,12	15,31
73H	7,44	7,43
74H	7,44	7,41
75H	7,46	7,74
76H	7,46	7,75
77H	7,45	7,70
78H	3,32	3,36
79H	3,32	2,85
80H	1,97	1,33
81H	1,97	2,51
82H	3,32	2,85
83H	3,32	3,36
84H	7,44	7,43
85H	7,44	7,41
86H	7,46	7,74
87H	7,46	7,75
88H	7,45	7,69
89H	6,61	6,74
90H	6,59	6,64
91H	7,49	6,29
92H	16,12	15,31
93H	3,93	3,85
94H	3,93	3,86
95H	1,79	1,83
96H	1,79	1,83
97H	1,27	1,25
98H	1,27	1,26
99H	1,36	1,37
100H	1,36	1,36
101H	1,29	1,29
102H	1,29	1,29
103H	1,27	1,27
104H	1,27	1,27
105H	1,39	1,35
106H	1,39	1,33
107H	0,88	1,17
108H	0,88	0,88
109H	0,88	0,89

Aromatik bileşiklerin kimyasal kayması 6,5-7,5 ppm aralığında beklenilmektedir (Charisiadis vd., 2014). Bu nedenle, proton NMR'ları deneysel olarak DMSO çözücüsünde 7,50-6,15 ppm'e, kloroform çözücüsünde ise 6,37-7,49 ppm aralığında çoklu piklere atanmıştır. Alifatik protonlar ise 1-3 ppm arasında görülür (Yılmaz, 2016; Kardaş ve Topcu, 2018). Bu protonlar deneysel olarak DMSO çözücüsü içerisinde 0,88-3,90 ppm'de, kloroform çözücüsünde ise 0,88-3,93

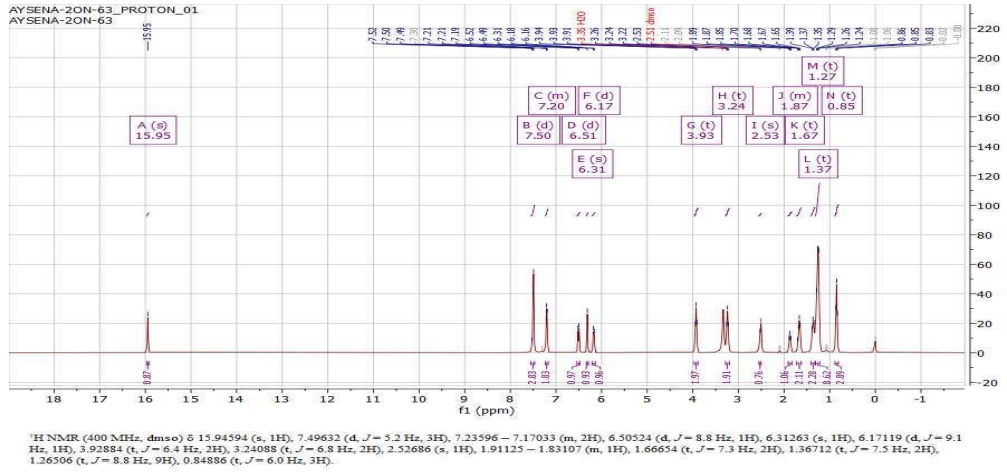
ppm'de gözlenmiştir. Bazı $-CH_2$ protonların beklenen kimyasal kayma değerlerinden aşağı alana kaydığı görülür. Söz konusu protonlar incelendiğinde elektronegatif olan oksijen ve azot atomuna bağlı olduğu görülmüştür. Elektronegatiflik arttıkça kimyasal kayma değeri değişmektedir (Balci, 2000). Alifatikler için iki farklı çözücüdeki proton NMR'ına ait Tablo 4.4 ve Tablo 4.5'e baktığımızda teorik ve deneysel olarak kimyasal kayma değerleri iyi bir uyum içinde olduğu saptanmıştır.

Bununla birlikte, molekül yapısındaki fenol biriminin $-OH$ bağına ait protonun NMR'ındaki kimyasal kayma dikkat çekicidir. Bilindiği gibi, fenol grubundaki hidroksil bağının protonu 4 ppm-7,5 ppm'de keskin tek bir pik olarak kendini gösterirler (Charisiadis vd., 2014). Bu fonksiyonel grup, çevresel etkilere bağlı olarak kimyasal kayma değerini aşağı veya yukarı alana kaydırabilmektedir. Bu çalışmada, $-OH$ protonunun iki farklı çözücülerde kimyasal kayma değeri deneysel olarak tek pik olarak tespit edilmiş ve DMSO'da 15,92 ppm'de, kloroform çözücünde ise 16,62 ppm'de gözlenmiştir. Teoriksel olarak ise DMSO ve kloroformda sırasıyla 15,70 ve 15,31 ppm olarak hesaplanmıştır. Buna göre, bu fonksiyonel grup için umulan kimyasal kayma değeri aşağı alana kaymıştır. $-OH$ 'a ait kimyasal kaymanın ana sebebi, moleküler içi hidrojen bağıdır. Molekül içi ve moleküler arası hidrojen bağları 4,5 ppm- 19 ppm'e kadar olan bir bölgeyi kapsayan H-OH kimyasal kaymaları üzerinde çok önemli bir etkiye sahiptir (Charisiadis vd., 2014). DMSO- D_6 'daki $-OH$ gruplarının kimyasal kaymalarının molekülün yapısına ve halkalardaki ikame edicinin doğasına göre sınıflandırılması sonucunda kimyasal kayma değerleri yüksek değerlerde, kloroform çözücülerde de kimyasal kaymanın beklenen $-OH$ değerinden daha aşağı alanda görüldüğü saptanmıştır (Charisiadis vd., 2014). Teorik ve deneysel olarak $-OH$ pikinde kimyasal kayma değerinin farklı saptanmasının sebebi daha çok moleküler içi hidrojen bağı olarak düşünülebilir.

Çalışılan bu bileşik benzofenon türevidir. Kloroform çözücünde alınan benzofenon yapılı bileşiklerin hidroksil bağına ait 1H -NMR kimyasal kaymaları 12,99-11,20 ppm aralığında gözlenmiştir (Wang and Cui, 2015). Bu çalışmada bileşiğin $-OH$ bağının hem deneysel hem de teorik kimyasal kayma değerleri bir miktar aşağı alana kaymıştır.

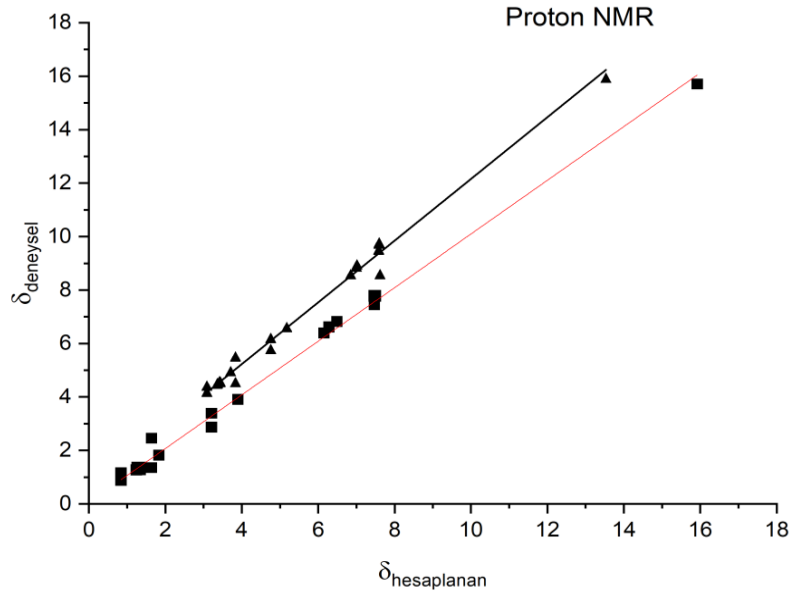


Şekil 4.1. Bileşiğin kloroform çözücüsünde ¹H-NMR spektrumu



Şekil 4.2. Bileşiğin DMSO çözücüsünde ¹H-NMR spektrumu

Şekil 4.6'da, ¹H-NMR ile ilgili olarak her bir çözücü için teorik ve deneysel veriler arasında korelasyonu veren grafikler verilmiştir. Grafikler incelendiğinde uyumun çok iyi olduğu görülmektedir. Grafikte bağımsız değişken x-ekseni teorik değerleri, bağımlı değişken y-ekseni deneysel veriyi göstermektedir. DMSO için $y = 0,06353 + 1,00368x$ şeklinde doğru denklemi elde edilmiştir ve RMS değeri $R^2 = 0,99675$ bulunmuştur. Kloroform çözücü için ise $y = 0,007542 + 0,97227x$ ($R^2 = 0,99385$) doğru denklemi elde edilmiştir. NMR ölçümlerinde en sık kullanılan çözücülerin DMSO ve kloroform olduğu bilinmektedir. Bu denklemler içinde, bu tip bileşikler için, teorik veriler yerine koyularak hiç ölçme yapmaksızın deneysel kimyasal kaymaların yeri tahmin edilebilir.



Şekil 4.3. ¹H-NMR grafiği

Grafik üzerindeki “■” sembolü DMSO çözücü içerisindeki değerler için, “▲” sembolü ise kloroform çözücü için kullanılmıştır.

4.3. ¹³C-NMR Analizi

Bileşiğin ¹³C-NMR’ına ait kimyasal kayma değerleri teoriksel ve deneysel olarak Tablo 4.6 ve Tablo 4.7’de verilmiştir.

Tablo 4.6. ¹³C-NMR atamaları (DMSO çözücü)

Atom	δ_{deneysel}	$\delta_{\text{hesaplanan}}$
1C	14,15	16,21
2C	28,71	29,40
3C	28,85	38,80
4C	28,85	37,27
5C	28,85	36,94
6C	28,85	31,04
7C	28,91	35,55
8C	67,69	73,25
10C	162,79	170,45
11C	105,71	107,26
12C	102,12	103,98
13C	167,40	171,92
14C	132,51	140,07
15C	127,31	121,27
17C	173,61	182,83
19C	133,08	143,44

20C	132,51	133,34
21C	132,51	133,03
22C	128,97	134,11
23C	128,97	133,92
24C	129,35	133,95
25C	47,43	55,15
26C	31,43	38,45
27C	47,43	55,13
28C	173,61	182,86
29C	133,08	143,43
30C	132,51	133,33
31C	132,51	133,04
32C	128,97	134,10
33C	128,97	133,94
34C	129,35	133,96
35C	127,31	121,36
36C	167,40	171,93
37C	132,51	140,06
38C	105,71	107,26
39C	102,12	104,00
40C	162,79	170,44
43C	67,69	73,25
44C	28,91	35,57
45C	28,85	30,96
46C	28,85	37,01
47C	28,85	37,16
48C	28,85	38,88
49C	28,71	29,34
50C	14,15	16,20

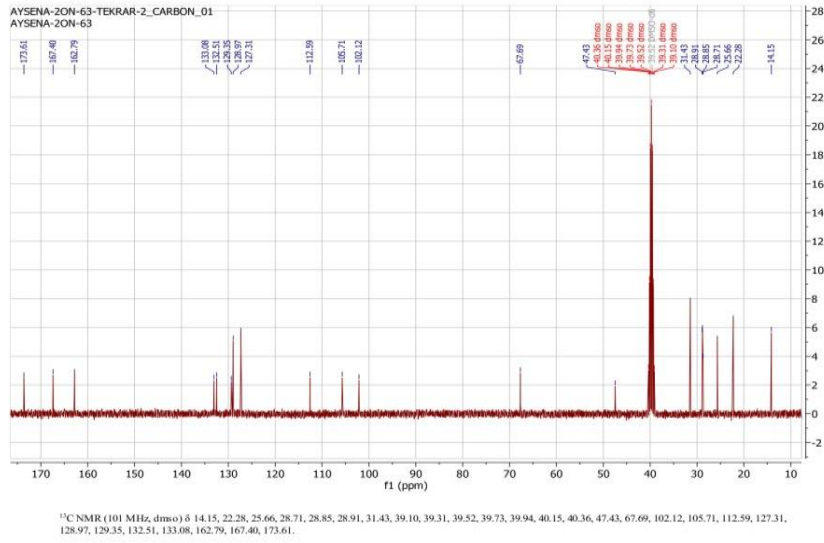
Tablo 4.7. ¹³C-NMR atamaları (kloroform çözücü)

Atom	δ_{deneysel}	$\delta_{\text{hesaplanan}}$
1C	14,23	16,29
2C	29,45	29,45
3C	31,74	38,81
4C	31,74	37,41
5C	31,74	36,93
6C	31,74	31,26
7C	31,93	35,50
8C	68,11	72,87
10C	163,72	170,37
11C	106,14	107,88
12C	102,41	103,23
13C	169,53	172,24
14C	132,85	139,64
15C	127,43	121,15
17C	173,87	182,30
19C	133,33	143,93

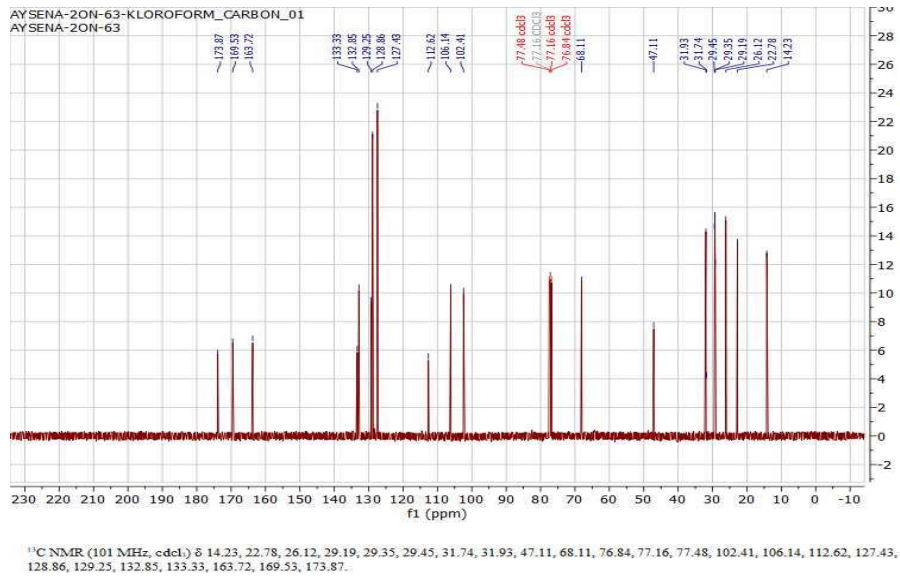
20C	132,85	133,33
21C	132,85	132,93
22C	129,25	133,89
23C	129,25	133,67
24C	128,86	133,55
25C	47,11	55,26
26C	31,93	38,47
27C	47,11	55,26
28C	173,87	182,30
29C	133,33	143,93
30C	132,85	133,33
31C	132,85	133,93
32C	129,25	133,89
33C	129,25	133,67
34C	128,86	133,55
35C	127,43	121,24
36C	169,51	172,24
37C	133,33	139,64
38C	106,14	107,88
39C	102,41	103,23
40C	163,51	170,37
43C	68,11	72,87
44C	31,93	35,51
45C	31,74	31,22
46C	31,74	36,93
47C	31,74	37,41
48C	31,93	38,81
49C	29,45	29,45
50C	14,23	16,29

Aromatik karbon atomları 105-161 ppm'de soğurma yapar (Kurt, 2018; Berber vd., 2020). Deneysel olarak iki çözücüde de 102,12-169,53 ppm aralığındaki pik değerlerine atamaları yapıldı. Yapımız düşey ve yatay düzlemde birbirlerinin simetrisi olacak şekilde aromatik halkalar toplam dört tanedir. İki tane benzen halkasında hidroksil ve oksijen atomu bağlıdır. Elektronegatif özelliği olan bu atomun bağlandığı karbonların kimyasal kayma değerleri beklenenden biraz daha yüksek frekansta çıkmasına sebep olmuştur. Geri kalan aromatik yapılarda ise elektronegatif özellikte veya başka bir yapı bağlı olmadığından beklenen aralıkta sonuç vermiştir. Deneysel ve teorik olarak benzen halkaları uyum içindedir. C=N'e ait karbon atomunun pik değeri 171,4 ve 171,5 ppm'de gözlenmiştir (Mohammed vd., 2020). Molekülümüzde ise deneysel olarak karbon atomu DMSO'da 173,61 ppm'e, kloroform çözücüde ise 173,87 ppm'e atanmıştır. Alifatik metilen karbonda ise 15-65 ppm aralığında soğurma yapması beklenir (Berber vd., 2020). Metilen karbonu için 28,71-68,11 ppm aralığındaki uygun piklere, azot atomuna bağlı karbon için

(N-CH₂) DMSO çözücüsü için 31,43 ppm, kloroform çözücüsü içinde 31,93 ppm'de, terminal -CH₃ için 14,15 ppm ve 14,23 ppm'de gözlenmiştir.

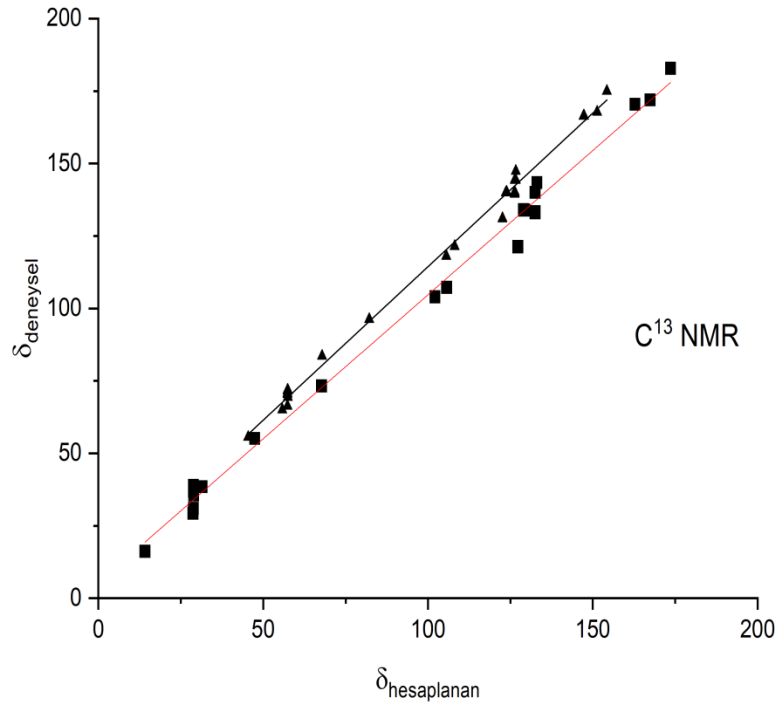


Şekil 4.4. Bileşiğin DMSO çözücüsünde ¹³C-NMR spektrumu



Şekil 4.5. Bileşiğin kloroform çözücüsünde ¹³C-NMR spektrumu

Proton NMR ile verilen denklem ifadeleri aynıdır. DMSO solventi içerisinde denklem, $y=5,28116+0,99458x$ ($R^2=0,99479$) ifade edilmiştir. ¹³C-NMR'da kloroform çözücü için denklem $y=3,40199+1,0042x$ ($R^2=0,99533$) şeklindedir. Teorik ve deneysel ifadeler arasında iyi bir uyum yakalandığı görülmektedir.



Şekil 4.6. ^{13}C -NMR grafiği

4.4. Mulliken Yükleri ve Dipol Moment

Molekülün yük dağılım hesaplamaları DFT(B3LYP)/6-311++G(2d,p) ile yapılmıştır. Negatif yük merkezleri nükleofil (çekirdek sever), pozitif yük merkezleri ise elektrofil (elektron sever) olarak davranırlar. Bunlara molekül yüzeyinde tepkime yuvaları olarak bakılabilir. Nükleofil özellikteki bileşikler, elektron çiftini elektrofil bileşiklere vererek bağ yaparlar. Bu bileşiğin kesirli olan Mulliken yük dağılımları Tablo 4.8’de sunulmuştur. Buna göre Tablo 4.8.’e bakıldığında, genel olarak oksijen ve karbon atomları üzerinde fazla negatif yük toplanmıştır. -0,433 negatif yükünü taşıyan oksijen atomlarıdır. Bu oksijen atoma bağlı karbon atomları (-C-O-C-) en yüksek kısmi pozitif yükü olan 0,846 değerini almıştır ve elektrofil reaktif merkezdir. Fenol grubunun (-OH) oksijen atomu (-0,581) ile komşu azot atomu (-0,353) arasında elektrostatik Coloumb etkileşmesinden dolayı O-H...N molekül içi bir hidrojen bağı mevcuttur.

Bu molekülün toplam dipol momentini 7,38 D olarak hesaplanmıştır. Bu molekülü polar molekül olarak düşünebiliriz.

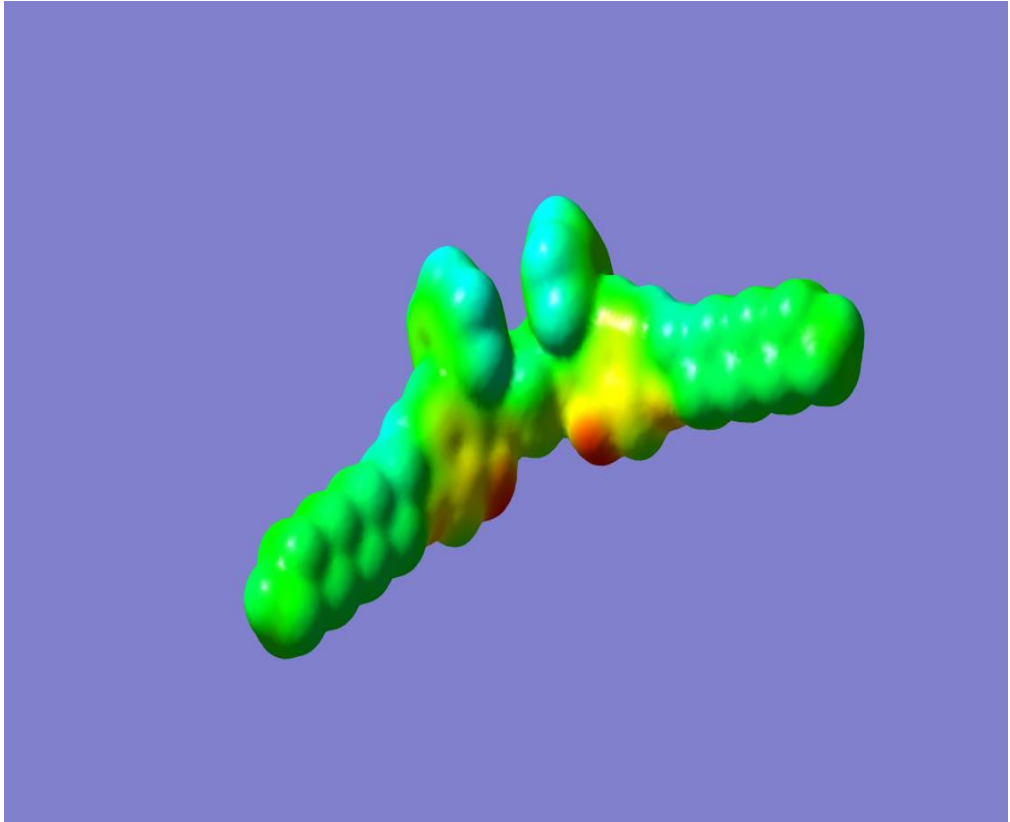
Tablo 4.8. Mulliken yük dağılımları

Atom	Atom No	Mulliken Yükler
C	1	-0,580
C	2	-0,128
C	3	-0,331
C	4	-0,155
C	5	-0,041
C	6	-0,090
C	7	-0,458
C	8	0,014
O	9	-0,433
C	10	0,846
C	11	-0,120
C	12	-0,374
C	13	0,176
C	14	-0,518
C	15	0,280
O	16	-0,581
C	17	0,594
N	18	-0,353
C	19	0,355
C	20	-0,348
C	21	-0,386
C	22	-0,183
C	23	-0,176
C	24	-0,075
C	25	-0,537
C	26	0,222
C	27	-0,537
C	28	0,594
C	29	0,355
C	30	-0,348
C	31	-0,385
C	32	-0,183
C	33	-0,176
C	34	-0,075
C	35	0,280
C	36	0,176
C	37	-0,518
C	38	-0,121
C	39	-0,374
C	40	0,846
O	41	-0,581
O	42	-0,433
C	43	0,014
C	44	-0,458
C	45	-0,090
C	46	-0,041
C	47	-0,155
C	48	-0,332
C	49	-0,128
C	50	-0,580
N	51	-0,353
H	52	0,113
H	53	0,113
H	54	0,115

H	55	0,098
H	56	0,098
H	57	0,104
H	58	0,104
H	59	0,105
H	60	0,105
H	61	0,109
H	62	0,109
H	63	0,107
H	64	0,107
H	65	0,119
H	66	0,119
H	67	0,124
H	68	0,124
H	69	0,097
H	70	0,088
H	71	0,118
H	72	0,488
H	73	0,101
H	74	0,101
H	75	0,088
H	76	0,089
H	77	0,088
H	78	0,114
H	79	0,134
H	80	0,103
H	81	0,123
H	82	0,134
H	83	0,114
H	84	0,101
H	85	0,101
H	86	0,088
H	87	0,089
H	88	0,088
H	89	0,118
H	90	0,097
H	91	0,088
H	92	0,488
H	93	0,124
H	94	0,124
H	95	0,119
H	96	0,119
H	97	0,107
H	98	0,107
H	99	0,109
H	100	0,109
H	101	0,105
H	102	0,105
H	103	0,104
H	104	0,104
H	105	0,098
H	106	0,098
H	107	0,115
H	108	0,113
H	109	0,113

4.5. Moleküler Elektrostatik Potansiyel Değerleri (MEP)

MEP görüntüsünde, kırmızı renkli bölge kısmen negatif yüklü olan, elektron açısından zengin olarak tanımlanan nükleofilik reaktiviteye, mavi renkli bölüm ise kısmen pozitif yüklü elektron açısından fakir olan elektrofilik reaktiviteye bağlanmıştır. Çalışılan moleküle ait moleküler elektrostatik potansiyel görüntüsü Şekil 4.10'da sunulmuştur. Bu şekilde kırmızı renk oksijen ve azot atomuna aittir. Bu atomlar üzerlerine proton çekmeyi severler yani bu atomların elektrofilik bölgeyle etkileştiği söylenebilir. Mavi renk ise pozitif yüklü bölgedir. Yeşil renktekiler ise, elektron yoğunluğu az olan C-H bölgesidir. Bu sonuçlara göre, kırmızı renkten sarı renge gidildikçe elektron yoğunluğu azalır. MEP'e göre, moleküldeki hangi atomların moleküller arası hidrojen bağı yapabileceği yanında nükleofilik, elektrofilik merkezleri de belirtebiliriz.



Şekil 4.7. MEP görüntüsü

5. SONUÇ

Yeni sentezlenmiş olan PDABPBOP (Meral, 2019) benzofenon türevi olup Schiff bazı bir bileşiktir. Hem benzofenon biriminin ve hem de Schiff bazlarının tıp, mühendislik, fen, endüstri gibi pek çok alanlarda kullanıldığı bilinmektedir. Özellikle ilaçların yüzde yedisi fenol içermektedir (Charisiadis vd., 2014). Bununla birlikte, benzofenon türevleri, yüksek reaktif özelliğinden dolayı sentetik kimyanın önemli bir ögesidir (Wang and Cui, 2015). Farmakolojik ve fotokimya özelliklerinden dolayı bu alanda büyük ilgi görmüştür. Hidroksibenzofenonların antikanser, antiparazit, antimikrop ve anti-Alzheimer özellikleri olduğu da gözlenmiştir. Ayrıca, Hidroksibenzofenon türevlerinin leishmaniasis tedavisinde kullanılacak olan yeni ilaçların geliştirilmesi için umut vericidirler (Dias vd., 2021). Bu çalışmadaki bileşiğin; X-ışınları, IR-Raman spektroskopisi, ¹H-NMR ve ¹³C-NMR'ı çalışılmıştır. Kristal yapısı çözülmüş, molekülün iç yapısı hakkındaki bilgiler ise spektroskopik yöntemler kullanılarak aydınlatılmıştır. Bununla birlikte, hesaplamalı kimyada çok kullanılan yoğunluk fonksiyoneli yönteminden faydalanılarak deneysel sonuçlar yorumlanmıştır. Moleküler titreşim bantlarının atanması (IR ve Raman) için normal koordinat analizi (NCA) kullanılmıştır. IR ve Raman spektrumlarının teorik ve deneysel grafikleri karşılaştırmalı olarak verilmiş olup teorik sonuçların deneysel sonuçlarla uyumlu olduğu görülmüştür (RMS=10 cm⁻¹). Fenolik –OH bağ frekansının aşağı frekansa kaydığı gözlenmiştir. Aromatik yapıda olan –OH bağının proton kimyasal kayma değeri DMSO çözücünde 15,92 ppm kloroform çözücünde ise 16,12 ppm bulunmuştur. Bu sonuç, bileşiğin kristal yapısında ortaya çıkan O-H...N atomları arasında güçlü bir hidrojen bağının varlığı ile desteklenmektedir. Bu çalışmanın; kimya, tıp, eczacılık gibi pek çok alanda yeni sentez çalışmalarına ışık tutacağı düşünülmektedir.

KAYNAKLAR

- Abd El-Lateef, H.M., Abu-Dief, A.M., Abdel-Rahman, L.H., Sanuda, E.C., and Aliaga-Akalde, N., (2015). "Electrochemical and Theoretical Quantum Approaches on the Inhibition of C1018 Carbon Steel Corrosion in Acidic Medium Containing Chloride Using Some Newly Synthesized Ahendic Schiff Base Compounds" *Journal of Electro Analytical Chemistry*. 743. 120-133
- Abd El-Wahab, H. (2015). "Synthesis and characterisation of the flame retardant properties and corrosion resistance of Schiff's base compounds incorporated into organic coating" *Pigment&Resin Technology*. 44(2). 101-108
- Anacona, Jr., Rodriguez J. and L., Camus J. (2014). "Synthesis, characterization and antibacterial activity of a Schiff base derived from cephalexin and sulphathiazole and its transition metal complexes" *Spectrochimica acta part A: Molecular and Spectroscopy*. 129. 96-102
- Aslankoç, R., Demirci, D., İnan, Ü., Yıldız, M., Öztürk, A., Çetin, M. ve Ecem, Ş.S. (2019). "Oksidatif stres durumunda antioksidan enzimlerin rolü- süperoksit dismutaz (SOD), katalaz (CAT) ve glutatyon peroksidaz (GPx)" *SDÜ Tıp Fakültesi Dergisi*. 26(3). 362-369
- Atkins, P.,Friedman, R., (2005). *Molecular Quantum Mechanics*. Oxford Univeristy Press Inc, New York
- Baker J., Jarzecki A. A. and Peter, (1998) "Pulay Direct Scaling of primitive valence force constants: an Alternative Approach to scaled Quantum mechanical force fields" *J.Phys. Chem.* (102). 1412-1424.
- Bal, S. (2016). "A Novel Azo- Schiff Base ligand and its Cobalt, Copper, Nickel complexes: synthesis, characterization, antimicrobial, catalytic, and elektrochemical features" *Anadolu Üniversitesi Bilim ve Teknoloji Dergisi*. 17 (2). 315-326
- Balcı, M. (2000). *Nükleer Manyetik Rezonans Spektroskopisi*. ODTÜ Geliştirme Vakfı Yayıncılık ve İletişim A.Ş. Ankara
- Berber, H., Erdönmez, A.A. ve Uysal, U.D. (2020) "2-Etoksi-6[(E)-[(2-Hidroksifenil)imino]metil]fenol türevi Schiff bazlarının sentezi ve teorik çalışmaları" *Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi*. 24(2). 419-431
- Berhanu, L.A., G., Mohiuddin, I., Malik, K.A., Aulakh, S.J., Kumar, V. and Kim, H.K. (2019) "A review of the applications of Schiff bases as optical chemical sensors" *TrAC Trends in Analytical Chemistry*. 116. 74-91
- Birbiçer, N., (1998). *Suda çözünebilir boyar maddelerin metal komplekslerinin sentezi ve boyar madde özelliklerinin incelenmesi*. Çukurova Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü. Doktora Tezi. 69s. Adana
- Buldurun, K., Turan, N., Çolak, N. and Özdemir, İ. (2019). "Schiff Base and Its Fe(II), Zn(II), Ru(II), Pd(II) complexes containing ONS donor atoms: Synthesis, characterization and catalytic studies" *Dokuz Eylül University Faculty of Engineering Journal of Science and Engineering*. 21(61).73-82
- Bülbül A.B. and Akyüz S. (2015) "The Vibrational Analysis of Pyridoxine and Its H₂O Clusters by ab-initio Density Functional Method" (2015). *Sigma J Eng & Nat Sci* 6 (1), 139-147
- Charisiadis, P., Kontogianni V.G., Tsiafoulis C.G., Tzakos A.G., Siskos M. and Gerathanassis I.P. (2014) "¹H-NMR as a Structural and Analytical Tool of Intra- and Intermolecular Hydrogen Bonds of Phenol-Containing Natural Products and Model Compounds" *Mdpi*. 19. 13643- 13682

- Cozzi, P.G. (2004). "Metal-Salen Schiff base complexes in catalysis: practical aspects" *Chemical Society Reviews*. 33(7). 410-421
- Demirci, S., Doğan, A., Türkmen, B.N., Telci, D., Çağlayan, A.B., Beker, M.Ç and Şahin F. (2017a) "Poloxamer P85 increases anticancer activity of Schiff base against prostate cancer in vitro and in vivo" *Anti-Cancer Drugs*. 28(8) 869-879
- Demirci, S., Doğan, A., Türkmen, B.N., Telci, D., Dede, B., Orhan C., Tuzcu, M., Şahin, K., Şahin, N., Özeran İ.H., and Şahin F. (2015b) "A Schiff Base derivative for effective treatment of diethylnitrosamine- induced liver cancer in vivo" *Anti Cancer Drugs*. 26(5). 555-564
- Desai, S.B., Desai P., and Desai K.R., (2001) "Synthesis of some Schiff Bases, thiazolidanes and azotidinones deived from 2,6- diaminobenzo [1,2-d:4,5-d'] bisthiazole and their anticancer activities" *Heterocyclic Communications*.7. 83-90
- Dias, J.S.M., Martins, F.T., Neto, J.H.A., Castellano, E.E., Viana, R.B., Teixeira J.S., Guimaraes, E.T., Soares, M.I.F.B., Barbosa, I.F., and Doriguetto, A.C. (2021) 45. 7501
- Durmuş, S., Dalmaz, A., Özdiñer, M. and Sivrikaya, S., (2017) "Preparation of cerium oxide nanoparticles: an efficient catalyst to the synthesis of dimeric disulphide Schiff bases" *CBU J. Of Sci.*, 13(1)
- Erdik, E. (1993). *Organik Kimyada Spektroskopik Yöntemler*. Gazi Büro Kitapevi
- Frisch, M.J., Trucks, G.W., Schlegel, H.B., Scuseria, G.E., Robb, M.A., Cheeseman, J.R., Montgomery Jr., J.A., Vreven, T., Kudin, K.N., Burant, J.C., Millam, J.M., Iyengar, S.S., Tomasi, J., Barone, V., Mennucci, B., Cossi, M., Scalmani, G., Rega ,N., Petersson, G.A., Nakatsuji, H., Hada, M., Ehara, M., Toyata, K., Fukuda, R., Hasegawa, J., Ishida, M., Nakajima, T., Honda, Y., Kitao, O., Nakai, H., Klene, M., Li , X., Knox, J.E., Hratchian, H.P., Cross, J.B., Adamo, C., Jaramillo, J., Gomperts, R., Stratmann, R.E., Yazyev, O., Austin, A.J. , Cammi, R., Pomelli, C., Ochterski, J.W., Ayala, P.Y., Morokuma, K., Voth, G.A., Salvador, P., Dannenberg, J.J., Zakrzewski, V.G., Dapprich, S., Daniels, A.D., Strain, M.C., Farkas, O., Malick, D.K., Rabuck, A.D., Raghavachari, Foresman, K. J.B., Ortiz, J.V., Cui, Q., Baboul, A.G., Clifford, S., Cioslowski, J., Stefanov, B.B., Liu, G., Liashenko, A., Piskorz, P., Komaromi, I., Martin, R.L., Fox, D.J., Keith, T., Al-Laham, M.A., Peng, C.Y., Nanayakkara, A., Challacombe, M., Gill, P.M.W., Johnson, B., Chen, W., Wong, M.W., Gonzalez, C. and People, J.A.(2004) *Gaussian 03W Version 6.0 Gaussian, Inc.*, Wallingford, USA,
- Gan, Li., Chen, Lh. and Nan, Fj. (2017) "Discovery of a novel calcium- sensitive fluorescent probe for α -ketoglutarate" *Acta pharmaca logica sinica*. 38. 1683-1690
- Goca, N. (1993). *Optik*. Celal Çakır (çev.). Aktif yayınevi.
- Hadjoudis, E. and Mavridis, I.M. (2004) "Photochromism and thermochromism of Schiff bases in the solid state structural aspects" *Chemical Society Reviews*. 33. 588-597
- Hegazy, M.A., Hasan, A.M., Emara, M.M., Bakr, M.F., and Youseff, A.H., (2012) "Evaluating four synthesized Schiff bases as corrosion inhibitors on the carbon steel in 1M hydrochloric acid" *Corrosion Science*. 63. 67-76
- Istvan K., (2002). *Simirra*, A Program for Simulation of IR and Raman Spectra, Chemical Research Center, Budapest
- Kamacı, M. (2017) "A fluorescent film probe based on Schiff base for determination of Fe³⁺ ions" *Anadolu University Journal Science and Techonogy*. 18(3). 611-623
- Karaca, E.Ö. (2018). "Yeni Schiff bileşiklerinin sentezi ve yapılarının aydınlatılması" *Politeknik Dergisi*. 21(1). 245-249

- Karakurt, T., Çukurovalı, A., Subaşı, T.N. and Kani, İ. (2016) “Molecular structure and computational studies on 2-((2-(4-(3-(2,5-dimethylphenyl)-3-methylcyclobutyl)thiazol-2-yl)hydrazono)methyl)phenol monomer and dimer by DFT calculations” *Journal of Molecular Structure*. 1125. 433-442
- Karakurt, T., Meral, S. ve Açar, A.A. (2019) “Schiff baz içeren tek kristal bileşik üzerinde X- ışınları, spektroskopik ve moleküler doking çalışmaları” *Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi*. 23(2). 505-514
- Kardaş, F. ve Topcu C. (2018) “Schiff bazı temelli geliştirilmiş Cu^{2+} seçici elektro kullanılarak çevresel örneklerdeki Cu^{2+} iyonlarının potansiyometrik tayini” *Pamukkale Üniversitesi Mühendislik Bilimleri Dergisi*. 24(7). 1325-1331
- Ke, H., Zhang, Q., Zhang, X., Cheng, G., Sun, Y., Li, J. and Cheng, H., (2021) “Hydroquinone- based conjugated Schiff Base as anode material for lithium ion batteries” *Materials Letters*. 286. 1-5
- Kostova, I. and Saso, L. (2013) “Advances in research of Schiff-base complexes as potent antioxidants” *Curr Med Chem*. 20(36). 4609-32
- Kurt, B.Z. (2018). “Sinnamaldehytin yeni Schiff bazlarının sentezi ve antioksidan özelliklerinin incelenmesi” *Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi*. 22(3). 1024-1032
- Kuru A.Ü. ve S. Serin (2018) “Schiff Bazı ve Metal Kompleksleri” *Ç.Ü. Fen ve Mühendislik Bilimleri Dergisi* 36(9). 1-10
- Li, K., Li, Y., Tao, J., Liu, L., Wang, L., Hou, H. and Tong, A.(2015) “Crystal Violet Lacone salicylaldehyde Hyfrozone Zn(II) complex: a Reversible Photochromic material both in Solution and in Solid Matix” *Scientific Reports*. 5(14467). 1-8
- Macho, V., Kralik, M., Hudec, J., and Cingelova, J. (2004). “One stage preparation of Schiff’s bases from nitroarenes, aldehydess and carbon monoxide at presence of water” *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*. 209 (1-2).69-73
- Magalhaes, TFF., Silva, CM., Santos, LBF., Santos, DA., Silva, LM., Fruchs, BB., Mylonokis, E., Martinler, CVB., Stoianoff, R. and Fatima, A. (2020). “Synthesis, Cytotoxi affects and activity of clinical interest” *Letters in Microbiology*. 71. 490-497
- Manjuraj, T., Juvaraj, T. and Jayanna, N. (2020) “Spectral, DFT, molecular docking and antibacterial activity studies of Schiff base derived from furan -2- carbaldehyde and their metal (II) complexes” *JOTCSA*. 7(2). 449-462
- Meral, S. (2019). *Benzofenon Türevi Schiff bazı ve bakır Komplekslerinin Liyotropik Sıvı Kristallere Etkisi*. Ondokuz Mayıs Üniversitesi. Fen Bilimleri Enstitüsü Doktora Tezi. 129s, Samsun
- Mohammed, Si J. , Salih, A. K., Rashid, M.A.M., Omer, K. M. and Abdalkarim, K.A. (2020). “Synthesis, Spectroscopic Studies and Keto-Enol Tautomerism of Novel 1,3,4-Thiadiazole Derivative Containing 3-Mercaptobutan-2-one and Quinazolin-4-one Moieties”. *MDPI*. 25. 5441
- Mohapatra, K.R., Sarangi, A.K., Azam, M., El-ajaily, M.M., Kudrat-E-Zahan, Md., Patjoshi, S.B. and Dash, D.C. (2019) “Synthesis, structural investigations, DFT, molecular docking and antifungal studies of transition metal complexes with benzothiazole based Schiff base ligands” *Journal of Molecular Structure*. 1179. 65-75
- Munir, R. (2021) “Novel Quinolinyl- Sulphonamide Hybrid Schiff Bases As Potent Radical Scavengers To Combat Oxidative Stres” *Pakistan Journal of Zoology*. 53(1). 87-92
- Murthy A.S.N. and A.R. Reddy (1981) “Electronic absorption spectroscopic of enolimine-ketoamine equilibria in Schiff bases” *Proc. Indian Acad. Sci. (Chem. Sci)*. 90(6). 519-526

- Osman, M.H., Elsaman, T., Yousef, B.A., Elhadi, E., Ahmed, A.EA., Eltayib, E.M., Mohamed, M.S. and Mohammed, M.A. (2021). "Schiff Bases of Isatin and Adamantane-1-Carbohydrazone Synthesis, Characterization and Anticancer Activity" *Hindawi Journal of Chemistry*. 2021. 1-11
- Özbakır, D., ve Çiftçi, Ö., (2017). "Asidik ortamda yumuşak çeliğin korozyonuna inhibitör olarak 2,5- dikloroanilin türevli bir Schiff bazının adsorpsiyonunun elektrokimyasal yöntemlerle incelenmesi" *Engineering Sciences (NWSAENS)*. 12(2). 97-107
- Özkan, H.E., Kızıllı, E.H., Şakıyan, İ., Nartop, D., Sarı, N. and Açar, G. (2018) "Antigenotoxic effects of Schiff bases and their Mn(III) Complexes Containing L- Aspartic acid and L-Phenylalanine." *Journe of Science*" 31. 408-414
- Pavia, L.D., Lapman, M.G., Kriz, S.G. and Vyvyan, R.J. (2009). *Introduction to Spectroscopy*. L. Lockwood., B. Kirksey., B. Kauser and K. Brown (ed.) Bellingham, Washington
- Phaniband, M., Dhumwad, D.S., Jogul, J. and Avaj, G.P. (2008) "Novel transition complexes of Co(II), Ni(II), Cu(II), and Zn(II) derived from 3-[p-(5-substituted salicylidinehydrazinocarbonyl)]phenylsydnone" *Main Group Chemistry*. 7(4). 285-299
- Rhodes, J., Chen, H., Hall, S.R., Beesley, J.E., Jenkins, D.C., Collins, P. and Zheng, B. (1995). "Therapeutic potentiation of the immune system by costimulatory Schiff Base forming drugs" *Nature Research*. 377. 71-75
- Sadia, M., Khan, J., Naz, R., Zahoor, M., Shah, A.W.S., Ullah, R., Naz, S., Bari, A., Mahmood, M.H., Ali, S.S., Ansari, A.S. and Sohaib, M. (2021) "Schiff base ligand L synthesis and its avaluation as anticancer and antidepressant agent" *Journal of king Saud Üniversity*. 33(2021).1-6
- Sarı, N., Arslan, S., Loğođlu, E., and Şakıyan İ. (2003) "Antibacterial Activities of Some New Amino Acid - Schiff Bases" *G.Ü. Journal of Science*. 16(2). 283-288
- Schiff, H. (1869). Untersuchungen Über Salicindeivate. *Justus Liebigs Annalen der Chemie*. 150 (2). 193-200
- Silva, C.M., Silva, L.D., Modolo, V.L., Alves, B.R., Resende, A.M., Martins, C. and Fatima, A. (2011). "Schiff Bases: A Short Review of Their Antimicrobial Activities" *Journal of Advanced*. 2. 1-8
- Sogukömerogulları, H.G., Sönmez, M. ve Ceyhan, G. (2019) "ONO tip Schiff baz komplekslerinin sentezi, karakterizasyonu, katalitik özellikleri ve termal çalışmaları" *Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi*. 23(3). 707-708
- Stuart, H.B. (2005). *Infrared Spectroscopy: Fundamentals and applications*. John Wiley and sons.
- Subramanian, A., Arunachalam, S., Gowdhami, B., Sundaram, M.K.K., Solomon, V.R., Venuvanalingam, P., Akbarsha, A.M. and Sundararaman, M. (2019) "Biomolecular Interaction, Anti-Cancer and Anti-Angiogenic Properties of Cobalt(III) Schiff Base Complexes" *Scientific Reports*. 9:2721(2019).1-14
- Sundius T., J. *Mol. Struct.* (1990). 218. 321–326 T. Sundius, MOLVIB 7.0, QCPE
- Şener, K. (1999). "Bazı Tridentat Schiff bazları ve geçiş metal şelat komplekslerinin sentezi, Karakterizasyonu ve antimikrobiyal özelliklerinin incelenmesi" Fen Bilimleri Enstitüsü, Yüksek Lisans Tezi, K. Maraş, 60s
- Şenol, D. (2017). "Synthesis and Characterization of Schiff Base Polymer Dyes Containing Electron-Withdrawing and Electron Releasing Groups" *Hacettepe J. Biol. & Chem*. 45(1) 67-80

- T. Sundius, *Vib. Spectrosc.* (2002). 29. 89–95
- Tahtacı, H. (2017). “2- Amino-1,3,4- Tiyadiazol halkası içeren Schiff bazı türevlerinin sentezi ve karakterizasyonu” *Afyon Kocatepe Üniversitesi ve Mühendislik Bilimleri Dergisi*. 17(2017). 460-468
- Tamer, Ö., Avcı, D. and Atalay Y., (2014) “Quantum chemical characterization of N-(2-hydroxybenzylidene)acetohydrazide (HBAH): A detailed vibrational and NLO analysis” *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. 117. 78-86
- Tsuchido, Y., Sasaki, Y., Sawada, Si. and Akiyoshi, K. (2015) “Protein nanogelation using vitamin B6- bearing pullulan: effect of zinc ions” *Polymer Journal*. 47.201-205
- Wang, D., and Cui, S., (2015). “Rh(III)-Catalyzed aldehyde C-H bond functionalization of salicylaldehydes with arylboronic acids” *ELSEVIER*. 71 (2015) 8511-8516
- Wilson, B.E., Decius, J.C. and Cross C.P. (1955). *Molecular Vibrations, The Theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra*. New York
- Xiao M. (2014) “ Research on the Production Reaction Kinetics and Thermochromism of Salicylaldehyde Ethanamine Schiff Base” *2014 7th international conference on intelligent computation technology and automation*. 2014. 591-595
- Xie, W., Huang, S., Tang, D., Liu S., and Zhao J. (2020) “Biomass- derived Schiff base compound enabled fire-safe epoxy thermoset with excellent mechanical properties and high glass transition temperature” *Chemical Engineering Journal*. 394. 1385-8947
- Yeap, G.Y., Ha, S.T., Ishizawa, N., Suda, K., Boey, P.L., and Mahmood, W.A.K. (2003). “Synthesis, crystal structure and spectroscopic study of para substituted 2-hydroxy-3-methoxybenzalideneanilines” *Journal of Molecular Structure*. 68(1-2). 87-99
- Yıldırım, T.S., (2019) “Salisilaldehit türevinden Schiff baz ligandının sentezi, karakterizasyonu ve bazı geçiş metal komplekslerinin incelenmesi” *Erzincan Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi*. 12(3). 1329-1340
- Yılmaz, E. (2016). “4- siyano grubu içeren Schiff bazı bileşiklerin sentezi ve karakterizasyonu ve teorik hesaplamalar” *Afyon Kocatepe Üniversitesi Fen ve Mühendislik Bilimleri Dergisi*. 16(2016). 561-568
- Yılmaz, İ. ve Çukurovalı A.. (2019). “Tiyazol tabanlı Schiff bazı ve metal komplekslerinin sentezi ve antimikrobiyal aktivite çalışmaları” *Afyon Kocatepe Üniversitesi Fen ve Mühendislik Bilimleri Dergisi*. 19(2019). 580-585
- Zhang, J., Xu, L. and Wong, W.Y., (2018) “Energy materials based on metal Schiff base complexes” *Coordination Chemistry Reviews*. 355. 180-198

ÖZ GEÇMİŞ

Huriye GÜNER, Samsun Mithatpaşa Lisesi'ni bitirdikten sonra Atatürk Üniversitesi Fen Fakültesi'nden 2011 yılında mezun oldu. 2019 yılında OMÜ LEE Fizik Yüksek Lisans programına girdi. Orta derecede İngilizce bilmektedir. Temel ilgi alanları, seyahat etmek, kitap okumak (13.01.2022).

İletişim Bilgileri

ORCID ID : 0000-0003-3664-5516