

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

Yüksek Lisans Tezi

**BAZI HİDRAZİT TÜREVİ BİLEŞİKLERİN
KURAMSAL VE TİTREŞİM SPEKTROSKOPİK
İNCELENMESİ**

Tuğba ÖZEN

**Tez Danışmanı
Prof. Dr. Talat ÖZPOZAN**

Yozgat 2011

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

Yüksek Lisans Tezi

**BAZI HİDRAZİT TÜREVİ BİLEŞİKLERİN
KURAMSAL VE TİTREŞİM SPEKTROSKOPİK
İNCELENMESİ**

Tuğba ÖZEN

**Tez Danışmanı
Prof. Dr. Talat ÖZPOZAN**

Yozgat 2011

T.C.
BOZOK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

TEZ ONAYI

Enstitümüzün Kimya Anabilim Dalı 7011010012 numaralı öğrencisi Tuğba ÖZEN'in hazırladığı "Bazı Hidrazit Türevi Bileşiklerin Kuramsal ve Titreşim Spektroskopik İncelenmesi" başlıklı YÜKSEK LİSANS tezi ile ilgili TEZ SAVUNMA SINAVI, Lisansüstü Eğitim-Öğretim ve Sınav Yönetmeliği uyarınca 20/06/2011 Pazartesi günü saat 10:00'da yapılmış, tezin onayına OY BİRLİĞİYLE karar verilmiştir.

Başkan : Prof. Dr. Talat ÖZPOZAN (Danışman)

Üye : Prof. Dr. Cengiz SOYKAN

Üye : Doç. Dr. Mustafa SAÇMACI





ONAY:

Bu tezin kabulü, Enstitü Yönetim Kurulu'nun 24.../06.../20... tarih ve 07... sayılı kararı ile onaylanmıştır.

24.../06/20...
Enstitü Müdürü

Yrd. Doç. Dr. Mustafa EROL
Bozok Üniversitesi
Fen Bil. Enst. Müdürü V. :

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET.....	iii
ABSTRACT.....	iv
TEŞEKKÜR.....	v
ŞEKİLLER LİSTESİ.....	vi
TABLolar LİSTESİ	x
KISALTMALAR VE SİMGELER.....	xii
1. GİRİŞ.....	1
2. KURAMSAL TEMELLER.....	3
2.1. Titreşim Spektroskopisi.....	3
2.1.1. Infrared Spektroskopisi.....	3
2.1.2. Raman Spektroskopisi.....	5
2.2. Moleküler Titreşimler.....	6
2.2.1. Titreşim Türleri.....	6
2.3. Normal Titreşim Modlarının Tanımlanmasında Kullanılan Koordinat Türleri...7	
2.3.1. Kartezyen Koordinatları.....	7
2.3.2. İç Koordinatlar.....	7
2.3.3. Normal Koordinatlar.....	8
2.3.4. Simetri Koordinatları.....	8
2.3.5. Titreşimlerin Infrared ve Raman Aktivitesi.....	8
2.3.6. Normal Koordinat Analizi.....	9
2.3.7. Normal Titreşimlerin Hesabı.....	10
2.3.8. Titreşim Spektrumunun Hesaplanmasına Yönelik Çalışmalar.....	13
2.4. SPSIM Paket Programı.....	14
2.5. Elektronik Yapı Hesaplama Metotları.....	17
2.5.1. Ab Initio Yöntemleri.....	17
2.5.1.1. Hartree-Fock Yöntemi (HF).....	17
2.5.2. Yoğunluk Fonksiyonel Teori (DFT).....	18
2.5.2.1. B3LYP Karma Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi.....	20
2.5.3. Semi-Empirik Metotlar.....	20

2.6. Moleküler Geometri Optimizasyonu.....	21
2.7. H bağı ve NBO Analizi.....	21
3. MATERYAL VE YÖNTEM.....	26
3.1.1. Kullanılan Kimyasal Maddelerin Sentezlenmesi.....	26
3.1.2. Kullanılan Cihazlar ve Spektrum Ölçümü	26
3.1.3. Hesaplamalarda Kullanılan Yöntemler	26
3.2. Deneysel, Teorik Çalışmalarla Spektrumun Hesaplanması	33
3.2.1. BAFH İçin Konformasyon Analizi	33
3.2.2. FD İçin Konformasyon Analizi	36
3.2.3. AHD İçin Konformasyon Analizi.....	44
3.3. Bileşiklerin Geometrilerinin Optimize Edilmesi	59
3.4. H - Bağı ve NBO Analiz Verileri.....	67
3.5. Bileşiklerin Normal Koordinat Analizi	74
3.5.1. BAFH Bileşiğinin Normal Koordinat Analizi	74
3.5.2. FD Bileşiğinin Normal Koordinat Analizi	79
3.5.3. AHD Bileşiğinin Normal Koordinat Analizi	85
4. SONUÇLAR VE TARTIŞMALAR.....	93
4.1. Deneysel Sonuçlar.....	93
4.2. Bileşiklerin Normal Koordinat Analizi.....	93
4.2.1. BAFH Bileşiğinin Normal Koordinat Analizi	93
4.2.2. FD Bileşiğinin Normal Koordinat Analizi.....	102
4.2.3. AHD Bileşiğinin Normal Koordinat Analizi	112
KAYNAKLAR.....	126
ÖZGEÇMİŞ.....	131

BAZI HİDRAZİT TÜREVİ BİLEŞİKLERİN KURAMSAL VE TİTREŞİM SPEKTROSKOPİK İNCELENMESİ

Tuğba ÖZEN

Bozok Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Kimya Anabilim Dalı
Yüksek Lisans Tezi

2011; Sayfa: 131

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Talat ÖZPOZAN

ÖZET

Bu çalışmada bazı hidrazit türevi bileşiklerin kuramsal ve titreşim spektroskopik incelenmesi FT-IR ve RAMAN spektrumu ölçülüp bu bileşiklere ait titreşim spektrumu SPSIM paket programı kullanılarak teorik olarak hesaplanmış; bilinmeyen bantlar aydınlatılmaya çalışılmıştır. Ayrıca bileşiklerin geometrileri Gaussian programında DFT metodu kullanılarak konformer analizi yapılmış, bileşiklerin minimum enerjileri hesaplanmış ve yapılarında hidrojen bağları NBO analizi ile araştırılmıştır. Daha sonra bileşiklerin geometrisi, her bir bağın uzunluğu, bağ açısı ve kuvvet sabiti gibi veriler kullanılarak titreşim frekansları, atom yarıçapları ve elektronegatiflikler kullanılarak da IR ve RAMAN aktiflikleri hesaplanmıştır. Bileşiklere ait nokta grubu simetrisi belirlenip normal koordinat analizi yoluyla da spektrumlar yorumlanmıştır. Hesaplamalarda Wilson'un GF Matris yöntemini temel alan SPSIM paket programı kullanılmıştır.

Anahtar Kelimeler: Normal Koordinat Analizi, Titreşim Spektroskopisi, Hidrazit Türevleri, DFT, NBO

**VIBRATIONAL SPECTROSCOPIC AND THEORETICAL
INVESTIGATION OF SOME HYDRAZIDE
DERIVATIVES**

Tuğba ÖZEN

**Bozok University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Chemistry
Master of Science Thesis**

2011; Page: 131

Thesis Supervisor: Prof. Dr. Talat ÖZPOZAN

ABSTRACT

In this thesis, the vibrational spectroscopical and theoretical investigation of some hidrazide derivatives were made. Vibrational spectra were measured experimentally and also calculated theoretically to assign unknown bands. In addition compound's geometries were optimized trough conformation analysis by Gaussian programe using DFT method. The minimum energies of the compounds have been calculated and Hydrogen bonds were searched by the NBO analysis. Using the optimized geometry (bond lengths, bond angles), atomic masses and force constants as input the vibrational frequencies were calculated. Atomic radii and electronegativities were used additionally as input data to calculate IR and RAMAN activities. Point group symmetries were employed primarily for normal coordinate treatment of the related compounds. Wilson's GF Matrix method was used for the calculation of vibrational frequencies and the program package SPSIM was employed for these calculations.

Keywords: Normal Coordinate Analysis, Vibrational Spectroscopy, hyrazoide derivate, DFT, NBO

TEŐEKKÜR

Çalıőmalarımnda bilgileriyle beni yönlendiren ve her konuda desteęini esirgemeyen sayın hocam, tez danıőmanım Prof. Dr. Talat ÖZPOZAN 'a,

Bilgileriyle beni aydınlatan, hesaplamalarımnda yardımını esirgemeyen sayın hocam, Araő. Gör. Hatice ARI' ya,

Maddi ve manevi her türlü desteęini eksik etmeyen ve her zaman ilgisini yanımda hissettięim niőanlım Kürőad PEKDEMİR' e,

Ayrıca tüm çalıőmalarım boyunca desteklerini hep yanımda hissettięim aile fertlerimin her birine ayrı ayrı teőekkürü bir borç bilirim.

ŞEKİLLER LİSTESİ

Sayfa

Şekil 2.1. SPSIM Paket Program Dosyaları ve İlişkileri.....	16
Şekil 3.1. Benzaldehit Fenilhidrazon (BAFH) Bileşiğinin Deneysel FT-IR Spektrumu.....	27
Şekil 3.2. 4-(4-Metoksibenzoil)-5-(4-Metoksifenil)-2,3-Dihidro-2,3-Furandion (FD) Bileşiğinin Deneysel FT-IR Spektrumu	27
Şekil 3.3. N-Benziliden-N-Fenil-p,p'-Dimetoksidibenzoil–Asetasidi Hidraziti (AHD) Bileşiğinin Deneysel FT-IR Spektrumu.....	28
Şekil 3.4. Benzaldehit Fenil hidrazon (BAFH) Bileşiğinin Deneysel Raman Spektrumu.....	28
Şekil 3.5. 4-(4-Metoksibenzoil)-5-(4-Metoksifenil)-2,3-Dihidro-2,3-Furandion (FD) Bileşiğinin Deneysel Raman Spektrumu.....	29
Şekil 3.6. N-Benziliden-N-Fenil-p,p'-Dimetoksidibenzoil–Asetasidi Hidraziti (AHD) Bileşiğinin Deneysel Raman Spektrumu.....	29
Şekil 3.7.1. BAFH Bileşiğinin Şekli.....	30
Şekil 3.7.2. FD Bileşiğinin Şekli.....	31
Şekil 3.7.3. AHD Bileşiğinin Şekli.....	32
Şekil 3.8. C ₁ -N ₇ Bağının 18°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi.....	33
Şekil 3.9. C ₁ -N ₇ Bağının 2°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi.....	34
Şekil 3.10. N ₈ -N ₉ Bağının 18°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi.....	34
Şekil 3.11. N ₈ -N ₉ Bağının 2°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi.....	35
Şekil 3.12. N ₉ -C ₁₀ Bağının 18°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi.....	35
Şekil 3.13. N ₉ -C ₁₀ Bağının 2°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi.....	36
Şekil 3.14. C ₆ -C ₉ Bağının 18°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi.....	37
Şekil 3.15. C ₆ -C ₉ Bağının 2°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi.....	37

Şekil 3.16. C ₁₈ -C ₁₇ Bağının 18°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi.....	38
Şekil 3.17. C ₁₈ -C ₁₇ Bağının 2°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi.....	38
Şekil 3.18. C ₂₁ -O ₂₄ Bağının 18°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi.....	39
Şekil 3.19. C ₂₁ -O ₂₄ Bağının 2°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	39
Şekil 3.20. O ₂₄ -C ₂₅ Bağının 18°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	40
Şekil 3.21. O ₂₄ -C ₂₅ Bağının 2°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	40
Şekil 3.22. C ₉ -C ₁₁ Bağının 18°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	41
Şekil 3.23. C ₉ -C ₁₁ Bağının 2°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	41
Şekil 3.24. C ₃ -O ₂ Bağının 18°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	42
Şekil 3.25. C ₃ -O ₂ Bağının 2°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	42
Şekil 3.26. O ₂ -C ₁ Bağının 18°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	43
Şekil 3.27. O ₂ -C ₁ Bağının 2°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	43
Şekil 3.28. O ₂₀ -C ₁₇ Bağının 18°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	44
Şekil 3.29. O ₂₀ -C ₁₇ Bağının 2°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	45
Şekil 3.30. C ₂₁ -O ₂₀ Bağının 18°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	45
Şekil 3.31. C ₂₁ -O ₂₀ Bağının 2°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	46
Şekil 3.32. C ₁₄ -C ₁₂ Bağının 18°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	46
Şekil 3.33. C ₁₄ -C ₁₂ Bağının 2°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	47
Şekil 3.34. C ₁₂ -C ₁₁ Bağının 18°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişim	47
Şekil 3.35. C ₁₂ -C ₁₁ Bağının 2°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	48
Şekil 3.36. C ₁₁ -C ₉ Bağının 18°'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	48

Şekil 3.37. C ₁₁ -C ₉ Bağının 2° 'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	49
Şekil 3.38. N ₂₄ -N ₃₁ Bağının 18° 'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	49
Şekil 3.39. N ₂₄ -N ₃₁ Bağının 2° 'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	50
Şekil 3.40. N ₂₄ -C ₂₅ Bağının 18° 'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	50
Şekil 3.41. N ₂₄ -C ₂₅ Bağının 2° 'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	51
Şekil 3.42. C ₁₁ -C ₂₂ Bağının 18° 'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	51
Şekil 3.43. C ₁₁ -C ₂₂ Bağının 2° 'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	52
Şekil 3.44. C ₂₂ -N ₂₄ Bağının 18° 'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	52
Şekil 3.45. C ₂₂ -N ₂₄ Bağının 2° 'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	53
Şekil 3.46. C ₃₂ -C ₃₃ Bağının 18° 'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	53
Şekil 3.47. C ₃₂ -C ₃₃ Bağının 2° 'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	54
Şekil 3.48. C ₆ -C ₉ Bağının 18° 'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	54
Şekil 3.49. C ₆ -C ₉ Bağının 2° 'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	55
Şekil 3.50. O ₂ -C ₃ Bağının 18° 'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	55
Şekil 3.51. O ₂ -C ₃ Bağının 2° 'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	56
Şekil 3.52. C ₂ -C ₁ Bağının 18° 'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi.....	56
Şekil 3.53. C ₂ -C ₁ Bağının 2° 'lik Açılarla Dönmesine Bağlı Enerji Değişimi	57
Şekil 4.1. BAFH Bileşiği İçin Deneysel Ve SPSIM İle Hesaplanan Frekanslar Arasındaki Korelasyon Grafiği.....	101
Şekil 4.2. BAFH Bileşiği İçin Deneysel Ve DFT İle Hesaplanan Frekanslar Arasındaki Korelasyon Grafiği.....	101

Şekil 4.3. BAFH Bileşigi İçin Deneysel Ve HF İle Hesaplanan Frekanslar Arasındaki Korelasyon Grafiği.....	102
Şekil 4.4. FD Bileşigi İçin Deneysel Ve SPSIM İle Hesaplanan Frekanslar Arasındaki Korelasyon Grafiği.....	111
Şekil 4.5. FD Bileşigi İçin Deneysel Ve DFT İle Hesaplanan Frekanslar Arasındaki Korelasyon Grafiği.....	111
Şekil 4.6. FD Bileşigi İçin Deneysel Ve HF İle Hesaplanan Frekanslar Arasındaki Korelasyon Grafiği.....	112
Şekil 4.7. AHD Bileşigi İçin Deneysel Ve SPSIM İle Hesaplanan Frekanslar Arasındaki Korelasyon Grafiği.....	124
Şekil 4.8. AHD Bileşigi İçin Deneysel Ve DFT İle Hesaplanan Frekanslar Arasındaki Korelasyon Grafiği.....	124
Şekil 4.9. AHD Bileşigi İçin Deneysel Ve HF İle Hesaplanan Frekanslar Arasındaki Korelasyon Grafiği.....	125

TABLolar LİSTESİ

Sayfa

Tablo 2.1. IR ve RAMAN Spektroskopilerinin Karşılaştırılması	6
Tablo 2.2. Bazı İndirgenabilir Gösterimlerin (Simetri İşlemlerinin) Karakterleri.....	10
Tablo 2.3. Jeffrey' in Hidrojen Bağı Sınıflandırması.....	23
Tablo 3.1. BAFH, FD ve AHD Moleküllerinin Torsiyon Açığı Taraması Öncesi Enerji ve Dipol Momentleri.....	58
Tablo 3.2. BAFH, FD ve AHD Moleküllerinin Torsiyon Açığı Taraması Sonrası Enerji ve Dipol Momentleri.....	58
Tablo 3.3. BAFH Bileşimi İçin Bağ Uzunlukları.....	59
Tablo 3.4. BAFH Bileşimi İçin Bağ Açıkları.....	60
Tablo 3.5. FD Bileşimi İçin Bağ Uzunlukları.....	61
Tablo 3.6. FD Bileşimi İçin Bağ Açıkları.....	62
Tablo 3.7. AHD Bileşimi İçin Bağ Uzunlukları.....	63
Tablo 3.8. AHD Bileşimi İçin Bağ Açıkları.....	65
Tablo 3.9. BAFH A – H...B açıları.....	67
Tablo. 3.10. BAFH Bileşimi için NBO.....	68
Tablo 3.11. FD A – H...B Açıkları.....	68
Tablo. 3.12. FD Bileşimi için NBO.....	69
Tablo 3.13. AHD A – H...B Açıkları.....	71
Tablo. 3.14. AHD Bileşimi için NBO.....	72
Tablo 3.15. Cs nokta grubu karakter tablosu ve BAFH bileşiminin simetri türlerinin hesaplanması.....	74

Tablo 3.16. BAFH Bileşiminin Kuvvet Sabitleri.....	75
Tablo 3.17. BAFH Bileşiminin Etkileşim Kuvvet Sabitleri.....	76
Tablo 3.18. BFH Kuvvet Sabitleri Değerleri.....	78
Tablo 3.19. C_1 nokta grubu karakter tablosu ve FD bileşiminin simetri türlerinin hesaplanması.....	79
Tablo 3.20. FD Bileşiminin Kuvvet Sabitleri.....	80
Tablo 3.21. FD Bileşiminin Etkileşim Kuvvet Sabitleri.....	82
Tablo 3.22. FD Bileşiminin Kuvvet Sabitleri Değerleri.....	83
Tablo 3.23. C_1 nokta grubu karakter tablosu ve AHD bileşiminin simetri türlerinin hesaplanması.....	85
Tablo 3.24. AHD Bileşiminin Kuvvet Sabitleri.....	86
Tablo 3.25. AHD Bileşiminin Etkileşim Kuvvet Sabitleri.....	89
Tablo 3.26. AHD Bileşiminin Kuvvet Sabitleri Değerleri.....	90
Tablo 4.1. BAFH için FIT İşlemi Uygulanan Kuvvet Sabitleri ve Hesaplanan Frekanslara Etkileri.....	94
Tablo 4.2. BAFH Bileşiminin Titreşim Frekansları, PED ve Yorumları.....	96
Tablo 4.3. FD için FIT İşlemi Uygulanan Kuvvet Sabitleri ve Hesaplanan Frekanslara Etkileri.....	103
Tablo 4.4. FD Bileşiminin Frekansları, PED ve Yorumları.....	105
Tablo 4.5. AHD için FIT İşlemi Uygulanan Kuvvet Sabitleri ve Hesaplanan Frekanslara Etkileri.....	113
Tablo 4.6. AHD Bileşiminin Frekans, PED ve Yorumları.....	114

KISALTMALAR VE SİMGELER

VFF	Kuvvet Değerlik Alanı
DFT	Yoğunluk Fonksiyonel Teori (Density Functional Theory)
FT-IR	Fourier Dönümlü Infrared Spektroskopisi
HF	Hartree-Fock Yaklaşımı
NBO	Natural Bond Orbital
BAFH	Benzaldehit fenilhidrazon
FD	4-p-metoksibenzoil-5-p-metoksifenil-2,3-furandion
AHD	N-benziliden-N-fenil-p,p'-dimetoksibenzoil -asetasidi hidraziti
SPSIM	SPectrum SIMulation
VEDA4	Vibrational Energy Distribution Analysis
NKA	Normal Koordinat Analizi
PED	Potansiyel Enerji Dağılımı
B3LYP	Becke's 3-parameter hybrid method with the Lee, Yang, and Parr correlation functional method

1. GİRİŞ

Hidrazin kuvvetli indirgeme vasıtasıdır. Bu yüzden gümüş aynası yapımında, cam ve plastikler üzerinde metal filmleri meydana getirmekte, kaynayan sudaki oksijeni uzaklaştırmakta ve paslanmayı önlemekte kullanılır. İkinci Dünya Harbinde hidrazin, su ve metil alkol, jet ve roketleri ittirici yakıt olarak kullanılmıştır [1].

Son yıllarda hidrazin ve hidrazon türevlerinin geniş bir alanda kullanılabilme özelliğinden dolayı konu ile ilgili çalışmaların hızla arttığı görülmektedir. Hidrazin grubu içeren bileşiklerin sitostatik etki gösterdiği bilinirken hidrazon türevlerinin de farmakolojik aktiviteye sahip olduğu bilinmektedir [2]. Ayrıca hidrazonlar, biyolojik sistemlerde, analitik kimyada ve doğrusal olmayan optik sistemlerde (NLO) kullanıldıkları için, bunlar üzerine pek çok çalışma yapılmaktadır. Aril hidrazonların metal kompleksleri, tümör [3], tüberküloz [4], lepra ve zihin bozuklukları gibi hastalıklarda tedavi amaçlı kullanılmaktadır [5]. Hidrazon türevlerinin iyi bir şelat oluşturabilmeleri nedeniyle geçiş metalleri ile kararlı bileşikler oluşturduğu görülmektedir [6].

Pek çok hidrazon, tüberküloz, cüzam ve zihinsel rahatsızlıklar gibi çeşitli hastalıkların teşhis ve tedavisinde kullanılmaktadır [7]. Ayrıca, yapısında siklobütan, tiyazol ve Schiff bazı gibi farklı fonksiyonel gruplar içeren hidrazonların bitkileri, böcekleri, kemirgen hayvanları, nematodları öldüren ve bitkilerin büyümesini düzenleyen ilaçların yapımı ve çeşitli kimyasal modifikasyonlar için uygun bileşikler olduğunu gösteren çalışmalara rastlanmaktadır [8].

Asit hidrazitler ($RCON_2H_3$) asid klorürlere veya esterlere hidrazinin etki ettirilmesi ile elde edilebilir. En iyi bilinen asit hidrazit karbonik asidin hidrazin türevleridirler ki bunlar; semikarbazid, karbon hidrazit, biuri ve aminoguanidindir. Organik hidrazin bileşiklerinin analitik kimyada uygulama alanları vardır. Nikotinik asit hidrazit tüberküloz tedavisinde kullanılır. Ayrıca, özel yakıtlar üretiminde, plastik ve

reçinemsiz maddelerde fotoğraf eczalarının yapımında ve köpük kauçuk imalatında şişirici madde olarak kullanılır [9].

Araştırma laboratuvarında sentezlenmiş olunan 4-p-metoksibenzoil-5-p-metoksifenil-2,3-furandion (FD), lakton halkası ihtiva eden yani heteroksilik bileşiklerin sentezinde kullanılan aktif bir maddedir. FD bileşiğinin karbonil grupları ve bilhassa lakton halkası ihtiva etmesi nedeniyle oldukça aktif bileşik olup, birçok heteroksilik bileşiklerin sentez edilmesinde, başlangıç maddesi olarak kullanılmıştır. 4-p-metoksibenzoil-5-p-metoksifenil-2,3-furandion (FD) ile Benzaldehit Fenilhidrazon (BAFH) reaksiyonundan N-benziliden-N-fenil-p,p'-dimetoksidibenzoil -asetasidi hidraziti (AHD) bileşiği sentezlenmiştir [10].

Bütün hesaplamalar, Gaussian 09 [11] ve Gaussview 3.09 [50] moleküler görüntüleme programları kullanılarak yapılmıştır. Moleküllerin yapısı ve elektronik özellikleri DFT/B3LYP metotlarından olan Hartree Fock (HF) yöntemleri ile geometri optimizasyonu yapıldıktan sonra incelenmiştir. HF ve DFT/B3LYP metotlarında taban küme olarak 6-31G(d,p) kullanılmıştır.

Hesaplanan dalga sayılarının işaretlenmesi DFT metodu ile 6-31G(d,p) taban kümesi kullanılarak aynı programın titreşim modlarının bir gösterimini veren animasyon seçeneği yardımıyla yapılmıştır. DFT ile hesaplanan titreşim frekansları için 0.961 çarpanı ve diğer titreşim frekansları için 0.903 çarpanı kullanılmıştır [12].

Bu çalışmada sentezlenmiş olan bu moleküllerin deneysel spektrumu (FT-IR) 400-4000 cm^{-1} aralığında ölçülerek spektrum Normal Koordinat Analizi (NKA) yöntemiyle aydınlatılmaya ve yapı spektrum ilişkileri çözümlenmeye çalışılmıştır.

Sentezlenen moleküllerinin enerjisinin kuramsal hesaplanmasında ve geometri optimizasyonunda Gaussian 09 paket programı [11] ve titreşim spektroskopik özelliklerin hesaplanmasında Wilson'un GF matris yöntemi temel alan SPSIM paket programı [13] kullanılmıştır.

2. KURAMSAL TEMELLER

2.1. Titreşim Spektroskopisi

Spektroskopi elektromagnetik ışımının madde ile etkileşimini konu alan bilim dalıdır. Spektroskopi maddeleri tanımamıza yardımcı olan, çeşitli özellikleri hakkında bilgiler veren çeşitli dallara ayrılmıştır. Elektromagnetik spektrumun farklı bölgelerindeki ışık madde ile farklı şekillerde etkileşir ve farklı bilgiler verir.

Ultraviyole ve görünür bölge ışığı madde ile etkileştiğinde değerlik tabakası elektronlarını daha yüksek enerjili bir düzeye uyarır. İnfrared ışığın enerjisi ise elektronları uyarmaya yetmez, moleküllerdeki titreşim hareketlerini uyarabilir. Mikrodalga ışığı ise moleküllerin dönme enerjilerini uyarabilir.

Bir molekülün titreşim frekansları temelde iki farklı spektroskopik teknik ile incelenebilir: İnfrared ve Raman spektroskopisi. Bu sebeple bu iki spektroskopi dalına Titreşim Spektroskopisi de denir. Homonükleer moleküller hariç bütün moleküller infrared ışınlarını absorblar ve infrared spektrumunda sinyal verirken homonükleer moleküller ramanda iyi sinyal verirler. Bu iki spektroskopik teknik birbirini tamamlar [14].

2.1.1. İnfrared Spektroskopisi

İNfrared bölge elektromagnetik spektrumda görünür ve mikrodalga bölgeler arasında bulunur ve dalga boyu $0,8 - 500 \mu\text{m}$ (dalga sayısı $12500 - 20 \text{ cm}^{-1}$) olan ışımadır. $0,8 - 2,5 \mu\text{m}$ ($12500 - 4000 \text{ cm}^{-1}$) bölgesine yakın IR, $2,5 - 25 \mu\text{m}$ ($4000 - 400 \text{ cm}^{-1}$) bölgesine IR ve $25 - 500 \mu\text{m}$ ($400 - 20 \text{ cm}^{-1}$) bölgesine uzak IR denir.

Fonksiyonel gruplar IR spektrumlarında sürekli aynı bölgede sinyal oluşturdukları için IR spektroskopisi, bir molekülde hangi fonksiyonel grupların bulunduğu veya bir fonksiyonel grubun bulunup bulunmadığı hakkında bilgiler verir. İnfrared bölgesinin

4000 cm^{-1} ile 1300 cm^{-1} arasında kalan kısmında karşılaşılan bantlar moleküllerde bulunan çeşitli fonksiyonel gruplara ait belirgin bantlardır. Bu bantlar molekülün yapısında sadece o grubun varlığı ile ortaya çıkarlar ve molekülün yapısından çok az etkilenirler. Bu nedenle bu bölgeye Belirgin fonksiyonel grup bölgesi denir.

İnfrared bölgesinin 1300 cm^{-1} - 650 cm^{-1} arasındaki frekans aralığında gözlenen bantlar fonksiyonel grup bölgesindeki bantların aksine, molekülün yapısından çok etkilenir. Bu bölgedeki bantların tümü incelenen moleküle özgüdür ve bu nedenle bu bölgeye molekülün parmak izi bölgesi adı verilir [15].

Bir temel titreşimin uyarılması; bir temel titreşim enerji düzeyinden, bir kuantumluk ışığın absorpsiyonu ile, bir sonraki enerji düzeyine geçiş olarak tanımlanabilir. Bu geçiş ancak iki titreşim düzeyi arasındaki enerji farkının, fotonun enerjisine eşit olması ile gerçekleşebilir. (Rezonans durumu)

$$E_1 - E_0 = h\nu_{\text{vib}} = E_{\text{ph}} = h\nu_{\text{ph}} \quad (\text{ph} = \text{Foton}) \quad (2.1)$$

Buradaki temel koşul, $\nu_{\text{vib}} = \nu_{\text{ph}}$ olarak görülmektedir. Bir örneğin infrared spektrumu, polikromatik IR ışıkla etkileştirilmesi yoluyla ölçülür. Titreşim frekansları, absorblanan radyasyonun mutlak frekansı olarak, şiddetleri her dalga boyu için uygun bir referans ışınla karşılaştırılması ile elde edilir. Temel geçişler (seçim kuralı çerçevesinde $\Delta v = +1$) yanında, uyumsuzluğa (anharmonisiteye) bağlı olarak $\Delta v = +2$, $+3$, ... geçişleri de mümkündür. Bununla birlikte başlangıç ve uyarılmış düzeyler arası enerji farkının artmasına bağlı olarak, geçiş olasılığı ve ilgili absorpsiyon bandının şiddeti azalır. $v = 0$ ' dan $v = 1$ düzeyine geçiş temel titreşime, $v = 0$ ' dan $v = 2$ ' ye geçiş birinci overton bandına karşılık gelir. Overton bandı çok zayıf bir absorpsiyonla temel titreşim frekansının iki katının biraz altında bir yerde gözlenir [16].

2.1.2. RAMAN Spektroskopisi

Bir madde üzerine absorblayamayacağı yüksek enerjili bir ışık gönderildiğinde gelen ışığın az bir kısmı her yönde saçılır (Scattering) ve saçılan Raman ışığına bağlı olarak, spektrum da ν_0 ve buna ek olarak ta bandlar gözlenir. Saçılma üç farklı şekilde gerçekleşir.

(a) Bir fotonla uyarılıp üst titreşim düzeylerine geçen molekül, temel düzeyde ($v=0$) değil birinci düzeye ($v = 1$) döner ve bir kısım enerjiyi tutar. Fotonun enerjisi çarpışma sonucu azalarak ($\nu_2 = \nu_0 - \nu_{vib}$) **stoke hatlarını** (bandlarını) oluşturur.

$$(\nu_2 = \nu_0 - \nu_{vib}) \quad (2.2)$$

(b) Bir molekül, $E = h\nu_0$ fotonuyla etkileşmesi ile temel titreşim düzeyinden daha yüksek, kararsız düzeylere uyarılır ve hemen kendi düzeyine geri döner. Enerji değişimi olmaz ve saçılan fotonun frekansı aynı kalır.

$$(\nu = \nu_0) \quad (2.3)$$

Bu saçılma, spektrumda en şiddetli “ **Rayleigh hattı** ” nın oluşumunu sağlar.

(c) Bir fotonla $v=1$ düzeyinde uyarılmış bir molekülün bir fotonla etkileşmesinden sonra, molekülünün temel titreşim düzeyine dönmesi halinde, saçılan foton daha yüksek enerjili olarak spektrumda gözlenecektir. Saçılan fotonun frekansı;

$$(\nu_3 = \nu_0 + \nu_{vib}) \text{ şeklinde verilir.} \quad (2.4)$$

Anti-stoke bantları denen bu bantlar stoke bantlarından daha zayıftır. Normalde yalnız stoke bantları kaydedilir ve frekans eksenini mutlak olmayıp uyarım frekansına;

$$\nu_{vib} = \nu_0 - \nu \quad (2.5)$$

Eşitliğiyle bağıl olarak bulunur [16].

Tablo 2.1. de IR ve RAMAN Spektroskopilerinin karşılaştırılması yapılmıştır.

Tablo 2.1. IR ve RAMAN Spektroskopilerinin karşılaştırılması

Karşılaştırılan Parametre	IR	Raman
Etkileşim (molekül+ışık)	Absorbsiyon	Saçılma
Titreşim uyarma kaynağı	Polikromatik IR ışık	Monokromatik görünür bölge, yakın IR ışık
Frekans ölçümü	Mutlak	Uyarma frekansına bağlı
Bir titreşimi aktive etme koşulu	Dipol moment değişimi $\partial\mu/\partial Q \neq 0$	Polarlaşabilme değişimi $\partial\alpha/\partial Q \neq 0$
Band şiddeti	$I \propto (\partial\mu/\partial Q)^2$	$I \propto (\partial\alpha/\partial Q)^2$
Spektrum gösterimi	%Geçirgenlik, logaritmik	Şiddet, doğrusal
Kullanım alanı	Rutin Analiz, gaz analizi	Sulu çözeltilerin, tek kristallerin, polimerlerin incelenmesi

2.2. Moleküler Titreşimler

Titreşim Spektroskopisi daha çok yapı analizinde ve çoğu kez elektronik ve NMR Spektroskopisi ile birlikte kullanılır. Molekül içindeki atomların titreşimleri sırasındaki uzaklık devamlı değiştiğinden iki atom arasındaki titreşim halinde bir elektriksel alanın titreşime uygun IR ışını molekül tarafından absorplanır yâda bu titreşime uygun IR ışını yayar. Yani titreşim spektroskopisinde absorplanan yâda saçılan ışınların enerjileri söz konusu moleküllerin titreşimleri kadardır [14].

2.2.1. Titreşim Türleri

Bir molekülün uzaydaki konumunu üç tür hareket değiştirir: Bunlar Ötelenme, Dönme ve Titreşim hareketleridir. İzole bir molekülün IR ve RAMAN' da sinyale yol açan hareketleri, titreşim hareketleridir. N atomlu bir moleküldeki titreşim hareketleri sayısı $3N-6$, molekül doğrusal ise titreşim hareketleri sayısı $3N-5$ tir [17].

2.3. Normal Titreşim Modlarının Tanımlanmasında Kullanılan Koordinat Türleri

Titreşim hareketinin $3N-6$ ya da $3N-5$ modunu karakterize etmek için; Kartezyen koordinatlar, İç koordinatlar, Simetri koordinatları ve Normal koordinatlar kullanılabilir [14].

2.3.1. Kartezyen Koordinatlar

Kartezyen koordinatlar, kullanılan her atomal kütleinin denge pozisyonundan sapmasını, referans olarak alınan orjin noktasına göre, bağıl olarak ölçer. Bu koordinat sistemi, her bir atomun x , y ve z eksenlerine olan uzaklığın tanımlandığı bir koordinat sistemidir. Orjin, genellikle molekülün ağırlık merkezi olarak seçilir. N sayıda atoma sahip bir molekül için 3 boyutlu uzayda $3N$ tane kartezyen koordinat vardır [14].

2.3.2. İç Koordinatlar

Titreşim hareketinde serbestlik derecesinin kolay tanımı için Kartezyen koordinatlar yerine İç koordinatların kullanımı daha yaygındır. İç koordinatlar, bağ uzunluğu ve bağ açısındaki değişme olarak tanımlanır ve dört çeşidi vardır:

a. Gerilme ya da valans (Stretching) titreşimi (ν): Titreşim sırasında bir ya da daha fazla sayıdaki bağın uzunluğu değişir.

b. Düzlem içi bükülme (In-plane bending) titreşimi (δ): Bir ya da daha fazla sayıda bağ açısı değişirken bağ uzunlukları aynı kalır.

c. Düzlem dışı bükülme (Out of plane bending) titreşimi (γ): Tek bir atomun, komşu en az üç atomun belirlediği düzleme doğru yaptığı salınım hareketidir.

d. Kıvrılma (Torsion) titreşimi (τ): Dihedral açı (bir bağı ortaklaşa kullanan iki komşu düzlem arasındaki açı) değişimidir.

Bu dört titreşim frekansı, $\nu > \delta > \gamma > \tau$ sırasına göre azalır. Büyük moleküllerde gözlenen özel tip titreşimler bu dört temel titreşim tipinden türetilebilir. Mesela, organik bileşiklerdeki metil grubunun bükülme titreşimleri, yalpalama (rocking, r), adımlama (twisting, t), dalgalanma (wagging, w) olmak üzere alt sınıflara ayrılabilir [14].

2.3.3. Normal Koordinatlar

Her normal titreşim modu, periyodik olarak değişen tek bir koordinat (Q) ile karakterize edilebilir. Bu normal titreşimde, her Kartezyen ve İç koordinat, normal koordinatın genliğine belirli bir oranda (+ ya da -) katkıda bulunur. Normal koordinat, toplam potansiyel ve kinetik enerjiye ayrı ayrı ve birbirinden bağımsız olarak katkıda bulunur. Bu da her normal koordinatın katkısının ayrı ayrı değerlendirilebildiği kuantum mekaniksel formülasyonu kolaylaştırır [14].

2.3.4. Simetri Koordinatları

Simetri koordinatları, simetri temeline dayanan iç koordinatlarının uygun doğrusal kombinasyonlarıdır. Bir molekülün bazı simetrilere sahip olması halinde simetri koordinatları seküler determinantın çözümü için kullanılabilir. Bir titreşim belirli bir simetri türüne sahipken, bu simetrinin her koordinatı aynı simetri türündeki normal koordinatın genliği ile orantılı bir genlikle titreşir. Bu simetri koordinatları, veri sayılarını azaltarak hesaplamalarda kolaylık sağlar [14].

2.3.5. Titreşimlerin İnfrared ve Raman Aktivitesi

3N-6 ya da 3N-5 normal titreşim bandlarının her biri IR ve Raman spektrumunda gözlenemeyebilir. Simetrik moleküllerde, genelde bazı titreşimler aktif değildir ve bunlar, her iki spektrumda da (IR, RAMAN) görülemeyebilir. (Her iki spektrumda da görülmemesine ender rastlanır.)

Genelde, IR ve Raman aktifliđi için ařađıdaki temel kurallar geerlidir:

-Eđer bir titreřim molekölünün dipol momentinde (μ) deđişiklik yapıyorsa bu titreřim IR aktiftir.

$$(\partial\mu / \partial Q) \neq 0 \quad (2.6)$$

Burada Q, titreřimin normal koordinatıdır. Molekölün kalıcı bir dipol momentinin var olması önemli deđildir.

Benzer řekilde, eđer bir titreřim, molekölün polarlařabilirliđini (α) deđiřtirebiliyorsa bu titreřim Raman aktiftir [14].

$$(\partial\alpha / \partial Q) \neq 0 \quad (2.7)$$

2.3.6. Normal Koordinat Analizi

Titreřim spektrumlarının aydınlatılması amacıyla kullanılan normal koordinat analizi, molekölün ait olduđu nokta grubu simetrisinin bulunması ve normal modlarının ka farklı simetri türü ierdiđinin belirlenmesi, her bir simetri türüne ait titreřimlerinin sayısının hesaplanması, her bir modun seim kuralına göre IR & Raman aktifliklerinin belirlenmesini ve normal frekanslarının hesaplanması basamaklarını ierir.

Grup teori yardımıyla hazırlanan karakter tabloları, molekölün nokta grubu simetrisine ait farklı simetri türüne dűřen titreřim sayısının bulunmasına da yardımcı olur [17, 18, 19, 20].

Grup teoriye göre, her bir farklı simetri türüne ait normal titreřim modlarının sayısı eřitlik (2.8) ile verilir.

$$n_i = n_i = (1/g) \cdot \sum k(R) \cdot \chi_i(R) \cdot \chi_t(R) \cdot U(R) \quad (2.8)$$

burada;

- i** İndirgenemez gösterimini (A_t, E_t vb.),
- g** Grup derecesini (Grup işlem sayısını),
- k(R)** Simetri sınıf boyutunu (Simetri işlem sayısı),
- $\chi_i(\mathbf{R})$ İndirgenmez gösterime ait (k) işlemimin karakterini,
- $\chi_t(\mathbf{R})$ (k) ' nıncı indirgenbilir gösterim karakterini,
- U(R)** R simetri işlemi uygulandığında koordinatları değişmeden kalan atom sayısını gösterir

Yukarıdaki eşitlik için $\chi_t(R)$ değerleri Tablo 2.2 ' den bulunabilir.

Tablo 2.2. Bazı indirgenbilir gösterimlerin (simetri işlemlerinin) karakterleri

R	E	C ₂	C ₃	C ₄	C ₆	Σ	i	S ₃	S ₄	S ₆
$\chi_t(\mathbf{R})$	3	-1	0	1	2	1	-3	-2	-1	0

2.3.7. Normal Titreşimlerin Hesabı

Doğrusal olmayan bir molekül, $3N-6$ tane normal titreşim moduna sahiptir. Titreşimin normal modlarının, formlarının ve frekanslarının matematiksel olarak hesaplanmasında molekülün konfigürasyonunun (bağ uzunlukları ve açıları) ve atomlar arası kuvvetlerin (kuvvet sabitleri) bilinmesi gereklidir. Bazı hesaplamaların, matriks cebiri ve grup teorisi yardımıyla yapılmasına karşılık bu konularda çok az ön bilgi gereklidir. Hesaplamalarda gerekli titreşim teorisi ve ileri matematiksel prensiplerle ilgili daha ayrıntılı ön bilgi çeşitli kaynaklarda bulunabilir [17, 21, 22, 23, 24].

N atomlu bir molekülün titreşimleri, Kartezyen koordinatların bir seti ile $X_1, Y_1, Z_1, X_2, Y_2, Z_2, \dots, X_n, Y_n, Z_n$ veya genel olarak $q_1, q_2, q_3, \dots, q_{3N}$ şeklinde temsil edilebilir.

Bu koordinatlar cinsinden potansiyel enerji (V) ve kinetik enerji (T) aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$2V = \sum_{i=1}^{3N} \sum_{j=1}^{3N} f_{ij} q_i q_j \quad \text{ve} \quad 2T = \sum_{i=1}^{3N} \sum_{j=1}^{3N} m_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j \quad (2.9)$$

Burada q_i ve q_j , i ' inci ve j ' inci koordinatlar; f_{ij} , değerleri kuvvet sabitleri; m_{ij} değerleri ise atomik kütlelerin fonksiyonlarıdır.

Newton ' un hareket eşitliği Lagrange formunda q ' un bir fonksiyonu olarak (T) ve (V) ' nin her ikisini içine alacak şekilde yazılabilir ve q_i ' nin her bir değeri için (2.9) eşitliğinden, (2.10) eşitliği elde edilebilir:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} \right) = \sum_{j=1}^{3N} m_{ij} \dot{q}_j \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} \right) + \frac{\partial V}{\partial q_i} = 0 \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial V}{\partial q_i} = \sum_{j=1}^{3N} f_{ij} q_j \quad \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} = \sum_{j=1}^{3N} m_{ij} \dot{q}_j \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} \right) = \sum_{j=1}^{3N} m_{ij} \ddot{q}_j \quad (2.11)$$

(2.11) eşitliğindeki değerleri (2.10) eşitliğinde yerine koyarsak (2.12) eşitliğini elde ederiz.

$$\sum_{j=1}^{3N} m_{ij} \ddot{q}_j + \sum_{j=1}^{3N} f_{ij} q_j = 0 \quad \sum_{j=1}^{3N} m_{ij} \ddot{q}_j + \sum_{j=1}^{3N} f_{ij} q_j = 0 \quad (2.12)$$

(2.12) eşitliğindeki durum genelleştirilirse; kütle x ivme artışı (mq)–kuvvet (fq)=0 'dır. (2.12) eşitliğinde belirtilen 3N tane eşitliğin genel çözümü aşağıda verilmiştir.

$$q_j = A_j \sin(\lambda^{1/2} t + \alpha) \quad \text{ve} \quad \lambda^{1/2} = 2\pi v \quad (2.13)$$

Harmonik hareketin karakteristiğini belirleyen (2.13) eşitliğinde; $v = \lambda^{1/2} / (2\pi)$, frekansı; A_j maksimum genliği; α ise faz sabitini gösterir.

(2.13) eşitliğinin zamana göre iki kere diferansiyeli alınırsa (2.14) eşitliği elde edilir.

$$\ddot{q}_j = \lambda^{1/2} A_j \sin(\lambda^{1/2} t + \alpha) \quad \ddot{q}_j = -\lambda A_j \sin(\lambda^{1/2} t + \alpha) \quad (2.14)$$

(2.12) eşitliğinde q_j ve \ddot{q}_j değerlerini yerine koyarsak i ' nin her bir $3N$ değeri için (2.15) eşitliği elde edilir.

$$\sum_{j=1}^{3N} \sum_{i=1}^{3N} f_{ij} A_j \sin(\lambda^{1/2} t + \alpha) - \sum_{j=1}^{3N} m_{ij} \lambda A_j \sin(\lambda^{1/2} t + \alpha) = 0 \quad (2.15)$$

$$\sum_{j=1}^{3N} (f_{ij} - m_{ij} \lambda) A_j = 0$$

Bu denklem açık yazıldığında, homojen lineer denklemlerin bir seti elde edilir.

$$\begin{aligned} (f_{11} - m_{11} \lambda) A_1 + (f_{12} - m_{12} \lambda) A_2 + \dots + (f_{1,3N} - m_{1,3N} \lambda) A_{3N} &= 0 \\ (f_{21} - m_{21} \lambda) A_1 + (f_{22} - m_{22} \lambda) A_2 + \dots + (f_{2,3N} - m_{2,3N} \lambda) A_{3N} &= 0 \\ \dots & \\ (f_{3N,1} - m_{3N,1} \lambda) A_1 + (f_{3N,2} - m_{3N,2} \lambda) A_2 + \dots + (f_{3N,3N} - m_{3N,3N} \lambda) A_{3N} &= 0 \end{aligned} \quad (2.16)$$

Bunlar, seküler eşitlik diye adlandırılır ve λ' nın sadece belirli değerleri için, A değerlerinin sıfır olmayan çözümlerinin determinantı sıfıra eşit olmalıdır.

$$\begin{array}{ccccccc}
 f_{11} - m_{11} \lambda & f_{12} - m_{12} \lambda & \dots\dots\dots & f_{1,3N} - m_{1,3N} \lambda & & & \\
 f_{21} - m_{21} \lambda & f_{22} - m_{22} \lambda & \dots\dots\dots & f_{2,3N} - m_{2,3N} \lambda & = 0 & (2.17) & \\
 \dots\dots\dots & \dots\dots\dots & \dots\dots\dots & \dots\dots\dots & & & \\
 f_{3N,1} - m_{3N,1} \lambda & f_{3N,2} - m_{3N,2} \lambda & \dots\dots\dots & f_{3N,3N} - m_{3N,3N} \lambda & & &
 \end{array}$$

(2.17) eşitliği seküler determinant diye adlandırılır. Genişletildiği zaman, λ için 3N karakteristik eşitlik elde edilir. Bu eşitlikler çözüldüğünde f ve m değerleri cinsinden λ' nın 3N karakteristik değeri bulunur. λ' nın her bir değeri (2.16) eşitliğinde yerine konularak karşılık gelen A_j değerleri hesaplanabilir.

Genliği A_j , frekansı $\nu = \lambda' / (2 \pi)$ ve faz farkı α olan atomların denge pozisyonundan hareketi titreşim normal modu olarak adlandırılır.

2.3.8. Titreşim Spektrumunun Hesaplanmasına Yönelik Çalışmalar

1960' lı yılların başından başlayarak gelişen model hesaplamalar yardımıyla spektrum aydınlatma tekniklerinde hızlı bir gelişme kaydedilmiştir. Moleküllerin titreşim frekanslarının hesaplanması ve bu moleküller için kuvvet alanlarının geliştirilmesi çalışmalarına önemli katkılar sağlayan araştırma grupları oluşmuştur [17, 24, 25].

Bu hesaplamalar için geliştirilen moleküler titreşimlerinin frekansının yanında IR ve Raman aktivitelerinin de (şiddetlerinin de) hesaplanmasını sağlayan semi-empririk kuantum mekaniksel temeline dayalı bilgisayar programları bilimin hizmetine sunulmuştur [13,17, 26, 27, 28, 29, 30, 31].

2.4. SPSIM paket programı

Bu program, bağlar arasındaki ilişkileri yay kuvveti vasıtasıyla tanımlar ve Hook Yasası' nın geçerli olduğu harmonik potansiyeli kullanılır. Normal koordinatları Wilson' un GF-matris yöntemi ($|GF - E\lambda| = 0$) yardımıyla hesaplanan ve titreşim frekanslarının aktivitelerinin hesaplanıp spektrumun simulasyonunu sağlamak üzere hazırlanan SPSIM paket programı birçok farklı hesaplama yapan modüllerden oluşmuştur [13]. Tek bir veri dosyasından okuma yaparak gerekli hesaplama ve grafiksel çıktılar veren programın blok diyagramı Şekil 2.1' de verilmiştir:

SPSIM programının modülleri aşağıda tanımlanmıştır:

CTR (Coordinate **TR**ansformation): Bu programın iç koordinatlar cinsinden verilen geometrik parametreleri (bağ uzunlukları, bağ açıları, dihedral açısı) Kartezyen koordinatlara çevirir, bütün atomlar arasındaki uzaklıklar hesaplanır ve diğer programlar tarafından kullanılacak bilgiler hazırlanır.

AXS (Calculation of **AXSM**-Matriks): Asıl normal koordinat analizi AXS ve NCF programlarında yapılır. Matris şeklinde koordinat dönüşümlerini içeren kuvvet sabitlerinin sayısal değerlerinin yer almadığı bütün hesaplamalar AXS de yapılır. AXS' deki dönüşüm ve hesaplamaları NCF programı izler.

NCF (**N**ormal **C**oordinates and **F**requencies): NCF, titreşim türleri ve her bir titreşim için potansiyel enerji dağılımını ve Jacobi matrisi (frekans ve kuvvet sabitine bağlıdır) Kartezyen koordinat sistemine bağlı olarak hesaplanır. Hem AXS hem de NCF programları, gerekli hesaplamalar için iç koordinatlar, atomik kütleler ve kuvvet sabiti gibi verilere gerek duyarlar.

VPL (**V**ibrational **PL**ot): Molekülün titreşim şekilleri atomların salınımlarının oklarla gösterimi şeklinde resimlenir. Ayrıca, elde edilen resimler yazıya

aktarılabılır. Fakat önceden CTR, AXS ve NCF programlarının çalıştırılmış olması gerekmektedir.

VMV (**V**ibrational **M**o**V**e): Program belirli dalga sayısındaki molekül titreşimlerini titreşim animasyonu olarak ekranda gösterir. Ama önceden CTR, AXS ve NCF programlarının çalıştırılmış olması gerekir.

VMP-P (**V**ibrational **M**o**V**e on **P**rinter): Belirli dalga sayılarındaki molekül titreşimlerinin yazıcıya aktarılmasını sağlar.

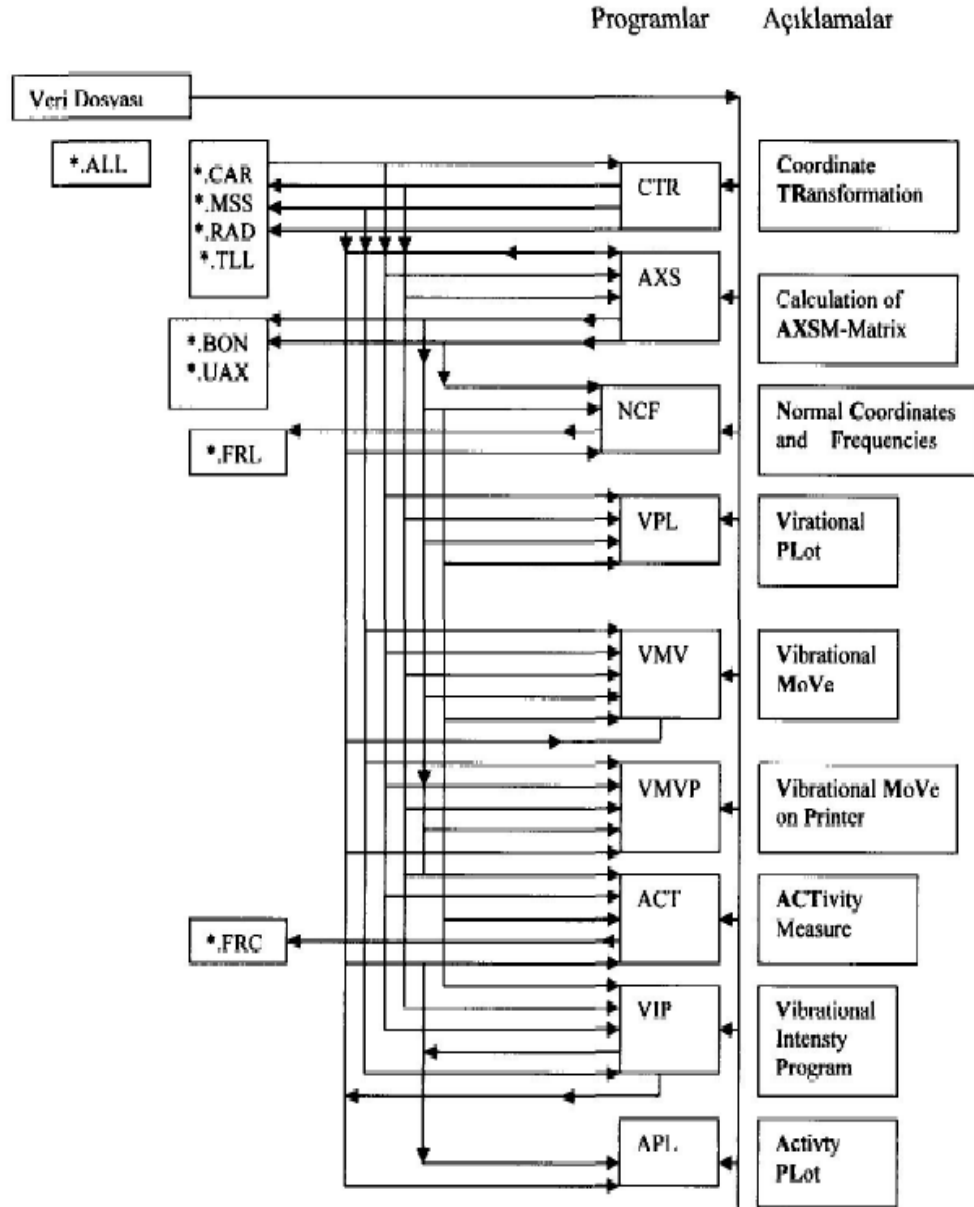
ACT (**A**CTivity Measure): Bu program atom yükü ve polarlaşabilme ile dipol momentleri arasındaki ilişki yardımıyla bir titreşim frekansının aktivitesini hesaplar. Aktivite, IR ve RAMAN spektrumlarında gözlenen sinyalin şiddeti ile orantılıdır.

VIP (**V**ibrational **I**ntensity **P**rogram): Moleküler titreşim frekanslarının hesaplanmasını sağlar. Titreşim frekansının şiddeti normal koordinatlara dipol momentindeki (IR) ve polarlaşabilmesindeki (RAMAN) değişimin karesi ile orantılıdır. Bu hesaplamalar ya kuantum mekaniği ya da büyük sistemler için parametrik yöntemler yardımıyla gerçekleştirilir. MNDO yöntemine göre, sonlu pertürbasyon yönteminin kullanıldığı kuantum mekaniksel hesaplamalar VIP programında gerçekleştirilir.

APL (**A**ctivity **PL**t): Program, ACT ve VIP programlarından elde edilen sonuçlar ile AXS ve NCF programlarında hesaplanan frekanslarla birleştirilerek IR ve RAMAN spektrumlarını grafik olarak gösterir. Bunun için, CTR, AXS ve NCF programlarının önceden çalıştırılmış olması gerekir.

AXSI (**A**XS **I**nput Control): Bu program verilerin doğruluğunu kontrol etmekte kullanılır.

Örnek **AXSF** (**AXS F**- Matrix): Program, kuvvet sabiti ile ilgili olan F matrisi için tablo hazırlanır.



Şekil 2.1. SPSIM Paket Program Dosyaları ve İlişkiler

2.5. Elektronik Yapı Hesaplama Metotları

Elektronik yapı metotları kuantum mekaniği kuralları üzerine kuruludur. Kuantum mekaniğinin en temel eşitliği bir diferansiyel denklem olan Schrödinger eşitliğidir:

$$H\Psi = E\Psi \quad (2.18)$$

Birden fazla elektron içeren atomik sistemler için Schrödinger denkleminin mutlak çözümü mümkün değildir. Daha fazla elektron ihtiva eden atomlar için çözümler ancak çeşitli yaklaşık metotlar kullanılarak yapılabilir. Bu çözümler hidrojen atomu için Schrödinger denkleminin çözümünde elde edilen dalga fonksiyonları üzerine kuruludur. Bazı sistemler için analitik çözüme eşdeğer sayılabilecek sonuçlar elde edilebilir. Çok elektronlu atomik sistemler için problemi karmaşık hale getiren elektronlar arası etkileşimlerdir. Negatif yüklü elektronlar birbirlerini iter. Elektronik yapı metotları, elektronlar arası etkileşimleri bazı matematiksel yaklaşımlarla ifade eder. Elektronik yapı metotları Ab initio, DFT ve semiempirik metotlar olmak üzere üç büyük sınıfa ayrılır. Bazı bilim adamları DFT'yi de ab initio metotlar içerisinde kabul eder [32].

2.5.1. Ab Initio Yöntemler

Ab initio kelime anlamı olarak başlangıçtan anlamına gelmektedir. Ab initio, Schrödinger denklemini deneysel parametreleri kullanmaksızın doğrudan çözmeye çalışır. Hesaplamalar az sayıdaki fiziksel sabitlere ve kuantum mekaniğinin kurallarına dayandırır [32].

2.5.1.1. Hartree-Fock Yöntemi (HF)

En yaygın olarak kullanılan ab initio hesaplamalarında en temel yaklaşım merkezi alan yaklaşımı üzerine kurulu olan Hartree-Fock (HF) hesaplamasıdır. Bu hesaplamalarda Coulombic elektron-elektron itmesinin, itme teriminin integralinin alınmasıyla hesaba katılması söz konusudur. Ancak bu itmenin etkisi ortalama olarak ele alınır, net bir şekilde ele alınmaz. Bu yaklaşık enerjinin mutlak enerjiden yüksek

veya eşit olarak hesaplandığı varyasyonel hesaplamadır. Merkezi alan yaklaşımından dolayı, HF hesaplamalarından elde edilen değerler daima mutlak enerji değerinden yüksek olur ve taban seti genişletildikçe Hartree-Fock limiti olarak adlandırılan limit değere doğru yönelir.

Bu metodun avantajlarından biri çözümü çok zor olan çok-elektronlu Schrödinger denklemini birçok basit tek elektron denklemine bölerek basitleştirmesidir. Her bir tek elektron denklemini tek-elektronlu dalga fonksiyonunu elde etmek üzere çözülür. Buradan diğer elektronların oluşturduğu ortalama bir alanda hareket eden elektronun tavrını anlatan orbitaller elde edilir.

İkinci yaklaşım ise dalga fonksiyonunun bazı matematiksel fonksiyonlarla ifade edilmesi gereğinden kaynaklanır. Bu fonksiyonlar ise tam olarak sadece birkaç elektronlu sistemler için bilinir. Bu amaçla kullanılan fonksiyonlardan birisi de Gaussian tipi orbitallerin (GTO) $\exp(-ar^2)$ doğrusal kombinasyonundan oluşur. Dalga fonksiyonu atomik orbitallerin taban fonksiyonlarının doğrusal kombinasyonundan oluşur. Bu yaklaşımdan dolayı birçok HF hesaplamaları sonucu elde edilen enerji değerleri HF limitinin üzerinde olacaktır [33].

2.5.2. Yoğunluk Fonksiyonel Teori (DFT)

Son yıllarda DFT (Yoğunluk Fonksiyonel Teori) moleküler hesaplamalarda da oldukça popüler oldu. Doğruluk düzeyi yakın diğer ab initio metotlara nazaran daha kısa sürede hesaplama yapması kullanım yaygınlığının artmasında önemli bir faktör oldu. Bu teori diğer ab initio metotlara nazaran çok daha yakın zamanda geliştirildi. Bundan dolayı henüz bu teori ile incelenmeyen birçok kimyasal problem bulunmaktadır. Bu da birçok bilimsel makalede yaygın olarak kullanılmasında etkin bir faktördür.

DFT'nin dayandığı temel düşünce molekülün enerjisinin dalga fonksiyonu yerine elektron yoğunluğu kullanılarak belirlenebileceğidir. Hohenberg ve Kohn'un bunun mümkün olduğunu ortaya atmasından sonra bu teori geliştirilmiştir. Orijinal teorem

molekölün temel hal enerjisini bulmaya yöneliktir. Bu teörinin pratik uygulaması Hartree-Fock'a benzer bir yapıda metodu formüle eden Kohn ve Sham tarafından geliştirildi. Bu formülasyonda, matematiksel olarak HF orbitallerine benzer bir şekilde, elektron yoğunluğu taban fonksiyonlarının lineer kombinasyonları şeklinde ifade edildi. Bu fonksiyonlardan oluşan determinant Kohn-Sham orbitalleri olarak adlandırılır. Bu orbital determinantından elektron yoğunluğu elde edilir buradan da enerji hesaplanır. Yarım-spinli parçacıklardan oluşan sistemlerin antisimetrik dalga fonksiyonlarından kaynaklanan elektron yoğunluklarına sahiptirler. Bundan dolayı bu işlemin yapılması gereklidir. Kohn-Sham orbitallerinin fiziksel yorumlanması konusunda tartışma vardır.

Matematiksel olarak HF orbitallerine veya uygun hesaplamalardan elde edilen natürel orbitallerle eşdeğer olmadığı muhakkaktır. Bununla birlikte, Kohn-Sham orbitalleri de diğer orbitallerin yaptığı gibi elektronun molekül içerisindeki tavrını ifade etmektedir. DFT orbital özdeğerleri, HF orbital enerjileriyle uyuşmadığı gibi foto elektron spektroskopisinden elde edilen değerlerle de uyuşmamaktadır. Benzerliklerin nasıl ifade edileceği ve farklılıkların fiziksel olarak nasıl açıklanacağı hala tartışılan bir konudur.

Burada fonksiyonel fonksiyonun (elektron yoğunluğu fonksiyonunun) fonksiyonu anlamında kullanılmaktadır. Mutlak fonksiyonel bilinmemektedir. Bunun için, avantaj ve dezavantajlara sahip olan birçok fonksiyonel söz konusudur. Bu fonksiyonların bazıları temel kuantum mekaniğinden türetilmektedir bazıları ise deneysel sonuçlarla en uyumlu sonuçları vermek için fonksiyonları parametreye ederek geliştirilmiştir. Bundan dolayı DFT'nin ab initio ve semiempirik versiyonları mevcuttur. Bununla birlikte DFT ya ab initio olarak sınıflandırılır ya da kendi sınıfına konulur.

Dalga fonksiyonu yerine elektron yoğunluğu kullanmanın avantajı Coulomb itmesini hesaplamak için gerekli integrallerin üç boyutlu fonksiyon olan elektron yoğunluğu üzerinden yapılmasıdır. Ek olarak elektron korelasyonu da hesaplamaya dahil

edilebilir. Performansı yüksek DFT fonksiyonelleri MP2 hesaplama sonuçlarına benzer düzeyde doğruluğa sahip sonuçlar verir [33].

2.5.2.1. B3LYP Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi

Dalga mekaniğine dayanan HF teorisinin değiş tokuş enerjisi için iyi sonuç vermemesi ve korelasyon enerjilerini hesaplayamaması ancak kinetik enerji için uygun bir ifade vermesi, buna karşılık saf DFT modellerinin ise değiş tokuş ve korelasyon enerjilerini daha iyi vermesi nedeniyle tam enerji ifadesi için saf HF veya saf DFT modelleri yerine toplam elektronik enerji ifadesinde bu iki modelin güçlü yönleri kullanılarak karma (hibrit, melez) modeller türetilmiştir. Bu modeller toplam enerji, bağ uzunlukları, iyonizasyon enerjileri vb. gibi büyüklükleri saf modellere göre daha iyi hesaplamaktadır [34].

2.5.3. Semi-Empirik Metotlar

Ab initio metotları özellikle elektron korelasyonunu da kapsadığı zaman, hesaplamalar çok büyük boyutlara ulaşır. Hesaplamalardaki bu tür bir zorluk metodun büyük moleküllere uygulanmasını sınırlar. Yarı-deneysel metotlarda ise integrallerin çoğu, spektroskopik veriler veya iyonlaşma enerjileri gibi fiziksel özelliklerden yararlanarak ve belli integralleri sıfıra eşitlemek için bir dizi kurallar kullanarak hesaplanır. Yarı deneysel metotlar Hartree-Fock teorisinin deneysel düzeltmeler kullanmak suretiyle basitleştirilmiş bir versiyonu olarak düşünülebilir. Yarı deneysel metotlar sırasıyla ZNDO, CNDO, NDO, NDDO, MINDO/3, MNDO, AM1, PM3, PM5 ve PM6 şeklinde sıralayabiliriz. MNDO (Modified Neglect of Differential Overlap) metodu diferansiyel diatomik çakışmanın ihmali (NDDO: Neglect of Differential Diatomic Overlap) üzerine kurulmuştur. Bunlardan PM3 metodu ise (Parametric Method 3) J. J. P. Stewart tarafından MNDO metodu üzerine kurulmuştur. Yarı-ampirik metotlarda hesaplamaları hızlandırmak ve kuantum yaklaşık mekaniksel metodu düzeltmek amacıyla birçok yaklaşımlar gerçekleştirilir. Parametrizasyonun nasıl yapıldığı metodun karakteristiğini ifade eder. MNDO, AM1 (Austin Model 1) ve PM3 metotlarında parametrizasyon hesaplanan enerjilerin toplam enerji yerine ısı enerjisi olması üzerine dayanır. AM1 ve PM3 metotları,

termodinamik ve yapısal özellikleri hesaplamada yaklaşık olarak aynı doğruluk düzeyine sahiptir [35, 36, 37].

2.6. Moleküler Geometri Optimizasyonu

Optimizasyon işlemi molekülü tanımlayan kartezyen ya da iç koordinatlarla verilmiş yaklaşık bir geometri ile başlar. Bu geometri bilgilerinden başlanarak molekülün geometrisi potansiyel enerji yüzeyinde bölgesel bir minimuma indirilerek optimize edilir. Elde edilen geometri global minimumda da olabilir. Ancak global minimumu bulmak için farklı başlangıç geometrilerinden başlayarak optimizasyon yapılmalıdır. Elde edilen en düşük enerjili minimum global minimum olarak adlandırılır. Optimizasyon işlemi sırasında geometri, enerji değeri verilen kritere göre sabit kalıncaya kadar belli kurallar çerçevesinde değiştirilir. Enerjinin sabit kalmasının dolayısıyla minimize edilmesinin ölçüsü de gradient norm değerlerinin sıfır olmasıdır. Gradient norm, atomik konumların bir fonksiyonu olarak moleküler sistemin enerjisinin değişim hızıdır. Bu şekilde bulunan Sıfır gradient değeri değişim hızının sıfırlandığını dolayısıyla geometrinin minimum enerjide olduğunu gösterir. Gerçek anlamda gradient normu sıfıra düşürmek oldukça zordur. Genel olarak daha ileri teori düzeyinde çalışılacak bir molekül için uygun bir semiempirik metotla ön optimizasyon gerçekleştirilir. Elde edile optimize yapı daha ileri teori düzeyinde bir optimizasyon için başlangıç yapısı olarak kullanılır. Optimizasyon işlemi bittikten sonra program kendiliğinden bazı moleküler nicelikleri hesaplar ve çıktı dosyasında verir. Programın kendiliğinden hesapladığı bu niceliklere ek olarak kullanıcının istediği diğer nicelikleri de gerekli anahtar kelimeler yazılmasına bağlı olarak hesaplayabilir [37, 38].

2.7. H bağı ve NBO Analizi

Klasik hidrojen bağı tanımına göre ortaklaşmamış elektron çifti bulunduran ve elektronegatifliği yüksek olan F, N, O atomlarından birine bağlı H atomu ile bu üç atomdan biri arasındaki etkileşim hidrojen bağı olarak adlandırılır. Hidrojen bağı da bir dipol-dipol etkileşimidir ancak diğer dipol-dipol etkileşimlerinden daha güçlüdür. Hidrojen bağı için literatürde birçok tanım yapılmıştır. Örneğin Scheiner, hidrojen

bağının geniş ölçüde elektrostatik bir etkileşim olduğunu belirtmiştir [39]. Hidrojen bağları kimyasal, fiziksel ve biyolojik işlemlerde çok önemli rol oynar. Örneğin; su yaşamımızın vazgeçilmezidir ve yapısında hidrojen bağı vardır. Proteinin şeklini veren hidrojen bağlarıdır. Ağaçları dik tutan hidrojen bağlarıdır. DNA zincirlerini bağlayan hidrojen bağlarıdır. Birçok deneysel ve teorik çalışmalar doğrudan hidrojen bağına anlamaya uğraşırken, aktif bir çalışma alanı sunar. Hidrojen bağlarının yapısal olarak uygunluğu ve reaksiyon katalizi için önemi açısından, son zamanlarda yapılan birçok teorik ve deneysel araştırmalar olduğunu ve bunların genellikle F, N ve O içeren hidrojenli bağlar ile sınırlandırıldığı; zayıf hidrojen bağlar olarak adlandırılanların ise biyolojik makro moleküller için önemli olduğunun açıklayan çalışmalar mevcuttur [40, 41].

Hidrojen bağları meydana gelişlerine göre molekül içi (intramoleküler) ve moleküller arası (intermoleküler) olmak üzere başlıca iki gruba, moleküller arası hidrojen bağları da ayrıca kendi içinde homo-intermoleküler ve hetero-intermoleküler hidrojen bağları olarak ikiye ayrılmaktadır. Hidrojen bağı yüksek elektronlu bir bölge ve düşük elektronlu hidrojen arasındaki bir bağıdır. En çok rastlanan bir hidrojen bağı A-H...B tipidir. A ve B elektronegatif atomlar ve B bir veya daha fazla serbest elektron içeren atomdur. Jeffrey'in yaptığı bir çalışmada [42] hidrojen bağının sınıflandırılmasına esas teşkil edebilecek parametrik değişimleri özetlemiştir.

Hidrojen bağı sınıflandırılmasına göre hidrojen bağı A-H...B şeklinde olup proton verici grup A-H ve sp orbitallerinde serbest elektron içeren proton alıcı B atomudur. Bir hidrojen bağının ($H^{\delta-}$) geometrik tanımı A-H...B de iki bağ mesafesi $R(A-H)$, $r(H^{\delta-} \cdots B)$ ve bağ açısı $\phi \equiv \angle AHB'$ dir.

Tablo 2.3. Jeffrey'in Hidrojen Bağı Sınıflandırması [42].

Hidrojen Bağı Tipi	Güçlü Hidrojen Bağı (proton paylaşımı)	Orta Derece Hidrojen Bağı	Zayıf Hidrojen Bağı
<i>Etkileşim Türü</i>	<i>Güçlü Kovalent ve iyonik</i>	<i>Elektrostatik Baskın</i>	<i>Elektrostatik ve Dağılım</i>
$r(H\cdots B), \text{Å}$	1.2 – 1.5	1.5 – 2.2	≥ 2.2
$\Delta R(A-H), \text{Å}$	0.08–0.25	0.02–0.08	≥ 0.02
$\Delta R(A-H)/r(H\cdots B)$	≈ 1	< 1	$\ll 1$
$r(A\cdots B), \text{Å}$	2.2–2.5 (2.6)	2.5 (2.6)–3.2	≥ 3.2
$\phi H (< AHB)$	170–180°	130–170°	90–130°
$ E_{HB} , \text{kcal.mol}^{-1}$	15–40	4–15	≤ 4
$\Delta v(A-H)/v(A-H), \%$	25	10–25	10

A-H bağ mesafesinin uzamasını ise monomerde kovalent bağ karakterinin görece olarak zayıflamasına bağlı olarak bağın uzadığını açıklamıştır. A–H bağ mesafesindeki değişimin sıfırdan büyük $\Delta R(A-H) > 0$ ve A-H bağ mesafesindeki değişimi;

$$\Delta R(A-H) \equiv R_{A-H\cdots B}^{(A-H)} - R_{A-H}^{(A-H)} \quad \text{olarak verilmiştir.} \quad (2.19)$$

Bu değişim $\Delta R(A-H)$ 0.08 - 0.25 Å ise güçlü kovalent veya iyonik, 0.02 – 0.08 Å civarındaki ise değişim baskın elektrostatik, 0.02 Å ise zayıf olarak tanımlamıştır. $r(H\cdots B)$ proton alıcı B atomu ile proton köprüsü arasındaki mesafedir. $r(H\cdots B)$ arasındaki mesafe 1,2 -1,5 Å Güçlü kovalent veya iyonik, 1,5-2,2 Å baskın elektrostatik etkileşim, ≥ 2.2 Å ise zayıf elektrostatik etkileşimler olarak sınıflandırmıştır. Kovalent A-H bağ uzaklığı ile H...B bağı arasındaki oran 1'den çok küçükse bu orta veya zayıf bir etkileşim olarak tanımlanmıştır. Jeffrey' in yaptığı sınıflandırmaya göre H-bağı açısı ϕH ; lineer etkileşimlerde 170-180° güçlü kovalent veya iyonik, 130-170° baskın elektrostatik etkileşim, 90-130° açıdaki etkileşimler ise zayıf elektrostatik etkileşimler olarak sınıflandırılmaktadır. H-bağı etkileşimi en iyi A-H...B açısının 180 derece olması durumunda gerçekleşir.

A-H bağındaki protonun gerilme titreşim modu,

$$\Delta\nu(\text{A-H}) \equiv \nu_{\text{A-H}\dots\text{B}}(\text{A-H}) - \nu_{\text{A-H}}(\text{A-H}) \quad (2.20)$$

Denklemiyle gösterilir ve klasik H-bağlarında negatif yönde değişim gösterir. IR absorpsiyon şiddetindeki değişimi de aşağıdaki denklemlerle verebiliriz.

$$\text{IR}_{\text{A-H}\dots\text{B}}(\nu(\text{A-H}))/\text{IR}_{\text{A-H}}(\nu(\text{A-H})) \quad (2.21)$$

Bu değişim de pozitif olur ve bu artış değeri hidrojen bağının aydınlatılmasında büyük rol oynar.

Bir hidrojen bağında hidrojen bağı kararlılık enerjisi E_{HB} aşağıdaki şekilde tanımlanır:

$$E_{\text{HB}} \equiv E(\text{A-H}\dots\text{B}) - [E(\text{A-H}) + E(\text{B})] \quad (2.22)$$

Bu denkleme göre kompleksin kararlı olabilmesi için hidrojen bağı enerjisi E_{HB} 0'dan küçük olmalıdır. Mutlak değer olarak Hidrojen bağı enerjisi ($|E_{\text{HB}}|$); güçlü etkileşimlerde 15-40 kcal.mol⁻¹, orta seviyedeki etkileşimler için 4-15 kcal. mol⁻¹ ve zayıf etkileşimler için 4 kcal.mol⁻¹ olarak tanımlanmıştır.

Hidrojen bağının en yaygın olanı orta kuvvette olan hidrojen bağıdır. En yüksek elektronegativiteye sahip olan F atomunun bulunduğu FH⁺...F⁻ hidrojen bağı enerjisi yaklaşık 40 kcal.mol⁻¹ olan en kuvvetli hidrojen bağıdır.

A-H...B şeklinde gösterilen hidrojen bağları sıradan bir kovalent bağa (70-80 kcal.mol⁻¹) göre çok daha zayıf olduklarından direkt olarak uzak infrared bölgesinde ve bağın kuvvetine göre 300-10 cm⁻¹ aralığında incelenirler [43].

İçinde hidrojen bağı olan bir molekülde ve bağlarında başlıca su değişmeler meydana gelir.

1. A – H bağıının uzunluğu artar gerilme titreşimi frekansı azalır (bağ zayıflar).
2. A – H bağıının bükülme titreşimi frekansı artar.
3. A – H bağıının bant genişliği ve bant şiddeti artar.
4. A – H ve B' nin polarlıkları artar.
5. Hidrojen çekirdeğinin etrafındaki elektron yoğunluğu azalır, çünkü A–H' e yaklaşan B' nin üzerinde bulunan yalnız elektron çifti hidrojenle A arasındaki bağıın elektron yoğunluğunu bozar ve elektron bulutu büyük ölçüde A' nın üzerine kayar.
6. A ve B atomları arasındaki uzaklık bu atomların Van der Waals yarıçaplarının toplamından daha azdır.

Hidrojen bağı incelemelerinde pratik olarak en çok dikkate alınan özellik gerilme titreşimi frekansının azalmasıdır ve bu kırmızıya kayma olarak adlandırılır.

NBO (Natural Bond Orbital) analizi, çok-elektron moleküler dalga fonksiyonunun yerleşik elektron çiftleri, “bağ” birimleri cinsinden analizini yapar. Bu analiz sonucunda nötral atomik orbitaller melez orbitaller, bağ orbitalleri, ve yerleşik moleküler orbitaller belirlenir. Daha sonra bu popülasyon ve enerji analizi yapmak için kullanılır. Özellikle hidrojen bağı kompleksleri için önemli olan hiperkonjugatif etkileşimlerin de bu analiz aracılığıyla belirlenmesi mümkündür [32].

3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1.1. Kullanılan Kimyasal Maddelerin Sentezlenmesi

Çalışılan moleküller Bozok Üniversitesi Fen- Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü Organik Kimya Laboratuvarında sentezlenmiştir.

3.1.2. Kullanılan Cihazlar ve Spektrum Ölçümü

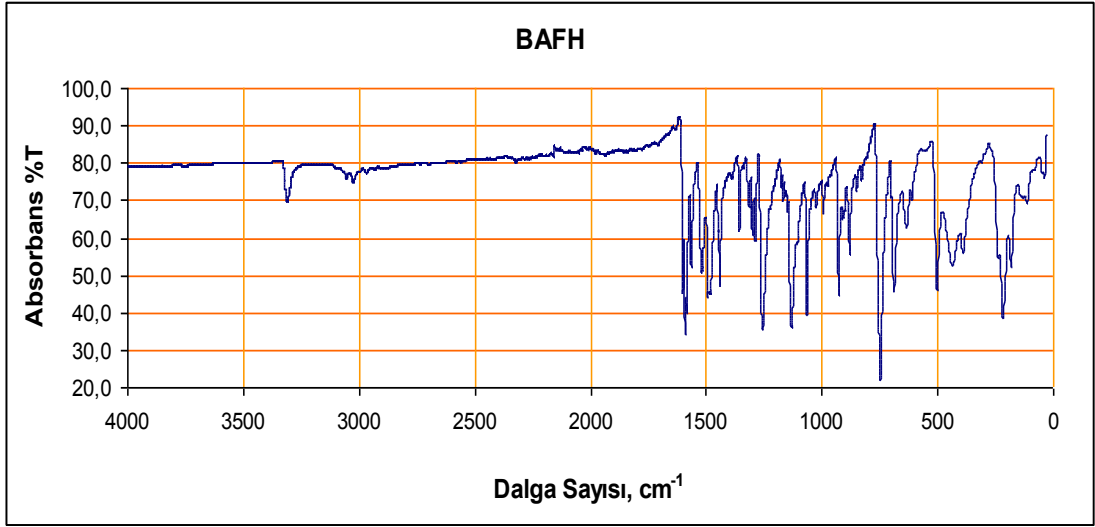
Spektra Bilkent Üniversitesi Fen Fakültesinde BOMEM 102 MB model spektrometre ile çekilmiştir. Spektra KBr içinde yaklaşık %1-3 (w/w)'lik tabletler halinde hazırlanıp preslenip IR absorpsiyon sinyalleri elde edilmiştir.

400-4000 cm^{-1} dalga sayısı bölgesi her spektrum için 30 kez tarandı ve bu tarama yaklaşık 2 dakika sürmüştür. Elde edilen spektrumlar referans olarak alınan KBr spektrumundan çıkarılarak kayıt edilmiştir.

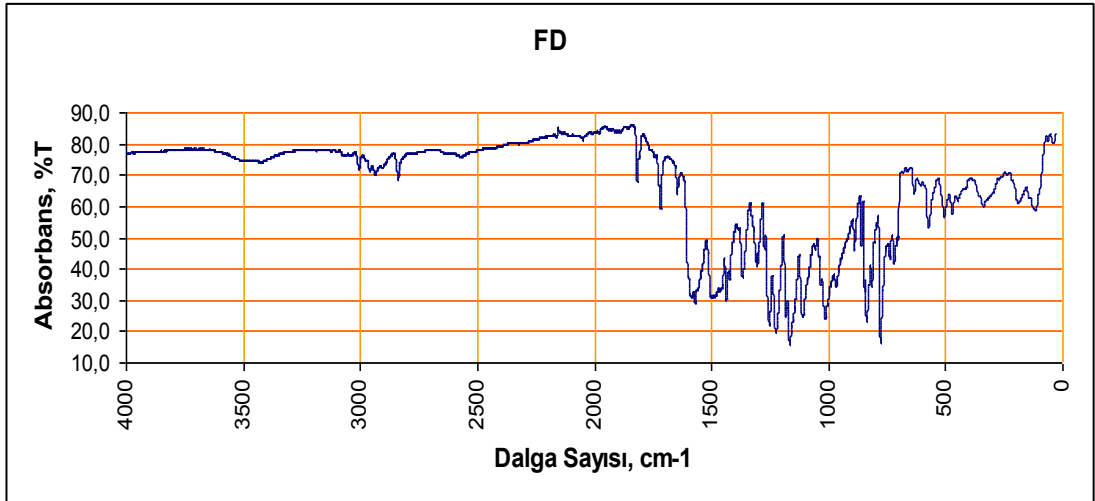
Raman spektra Bilkent Üniversitesi Fen Fakültesinde Jobin Yvon Labram 5/203 IM model spektrometre ile kaydedilmiştir. Raman spektra 632,81 cm^{-1} dalga boyunda, He-Ne 20 mW lazer kullanarak çekilmiştir.

3.1.3. Hesaplamalarda Kullanılan Yöntemler

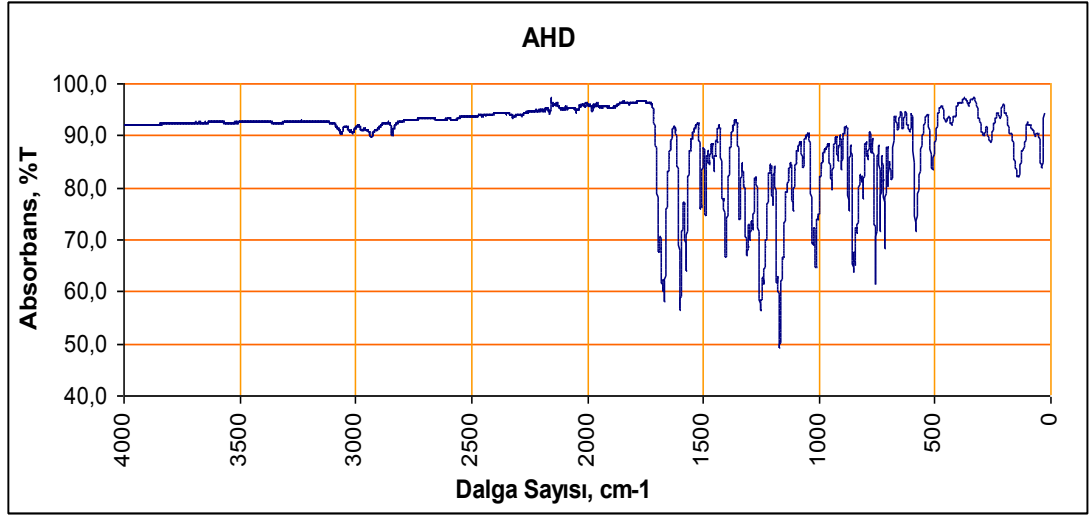
Bileşiklere ait titreşim spektrası Wilson'un GF matris yöntemini temel alan yarı deneysel (semiempirik) yaklaşımla SPSIM paket programı kullanılarak hesaplanmıştır [13]. Frekansların hesaplanmasında değerlik kuvvet alanı (Valence Force Field) türü kuvvet sabitleri tercih edilmiştir. IR ve Raman aktiflikler ise CNDO/2 yaklaşımıyla SPSIM programının ACT program modülü kullanılarak hesaplanmıştır [44]. İncelenen moleküller GaussView 3.09[50] programı aracılığıyla başlangıç geometrileri oluşturulmuştur ve Gaussian 09 [11] ile geometri optimizasyonu yapılmıştır.



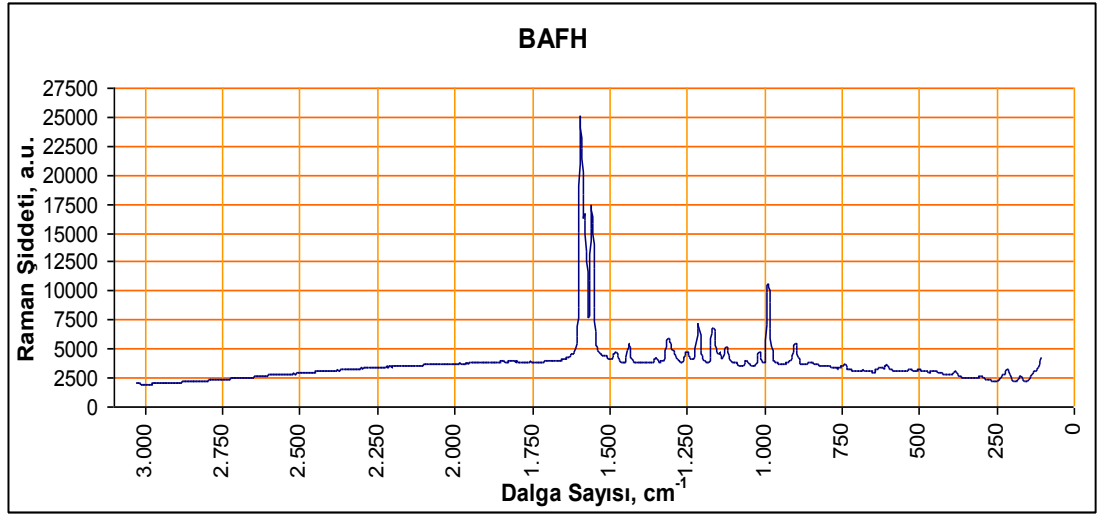
Şekil 3.1. Benzaldehit Fenilhidrazon (BAFH) Bileşiğinin Deneysel FT-IR Spektrumu



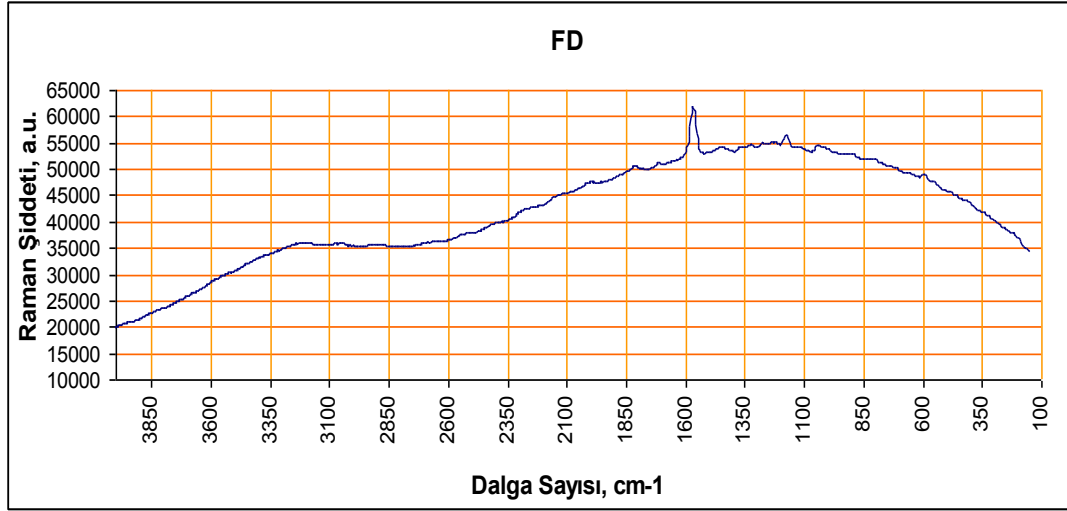
Şekil 3.2. 4-(4-metoksibenzoil)-5-(4-metoksifenil)-2,3-dihidro-2,3-furandion (FD) Bileşiğinin Deneysel FT-IR Spektrumu



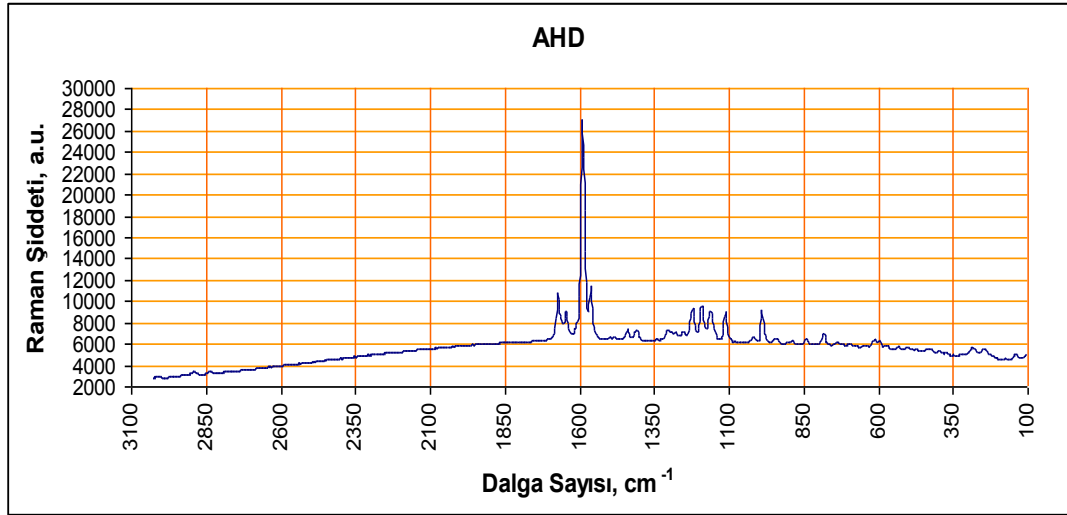
Şekil 3.3. N-benziliden-N-fenil-p,p'-dimetoksidibenzoil-asetasidi hidraziti (AHD) Bileşiğinin Deneysel FT-IR Spektrumu



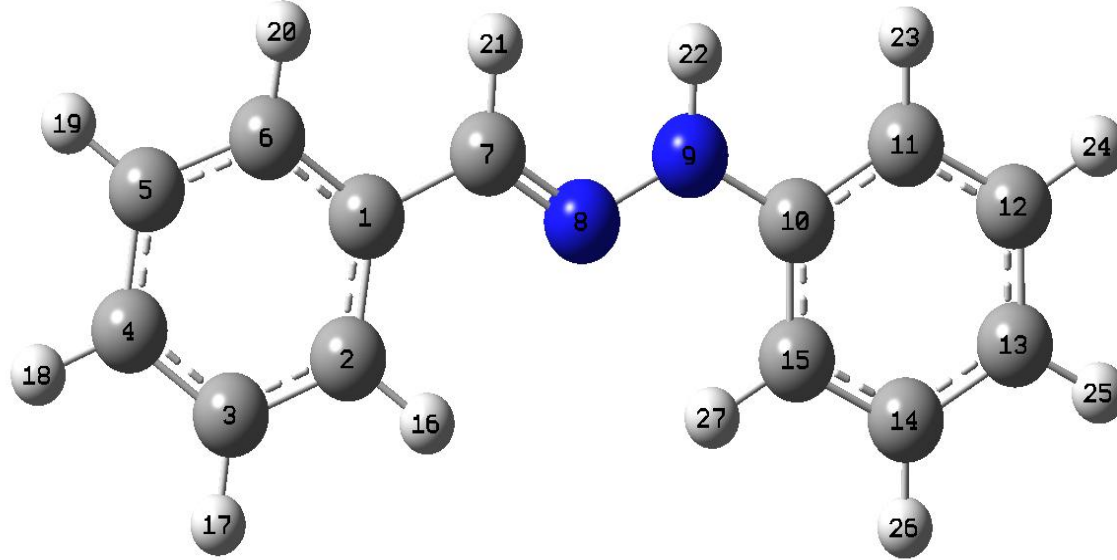
Şekil 3.4. Benzaldehit Fenilhidrazon (BAFH) Bileşiğinin Deneysel Raman Spektrumu



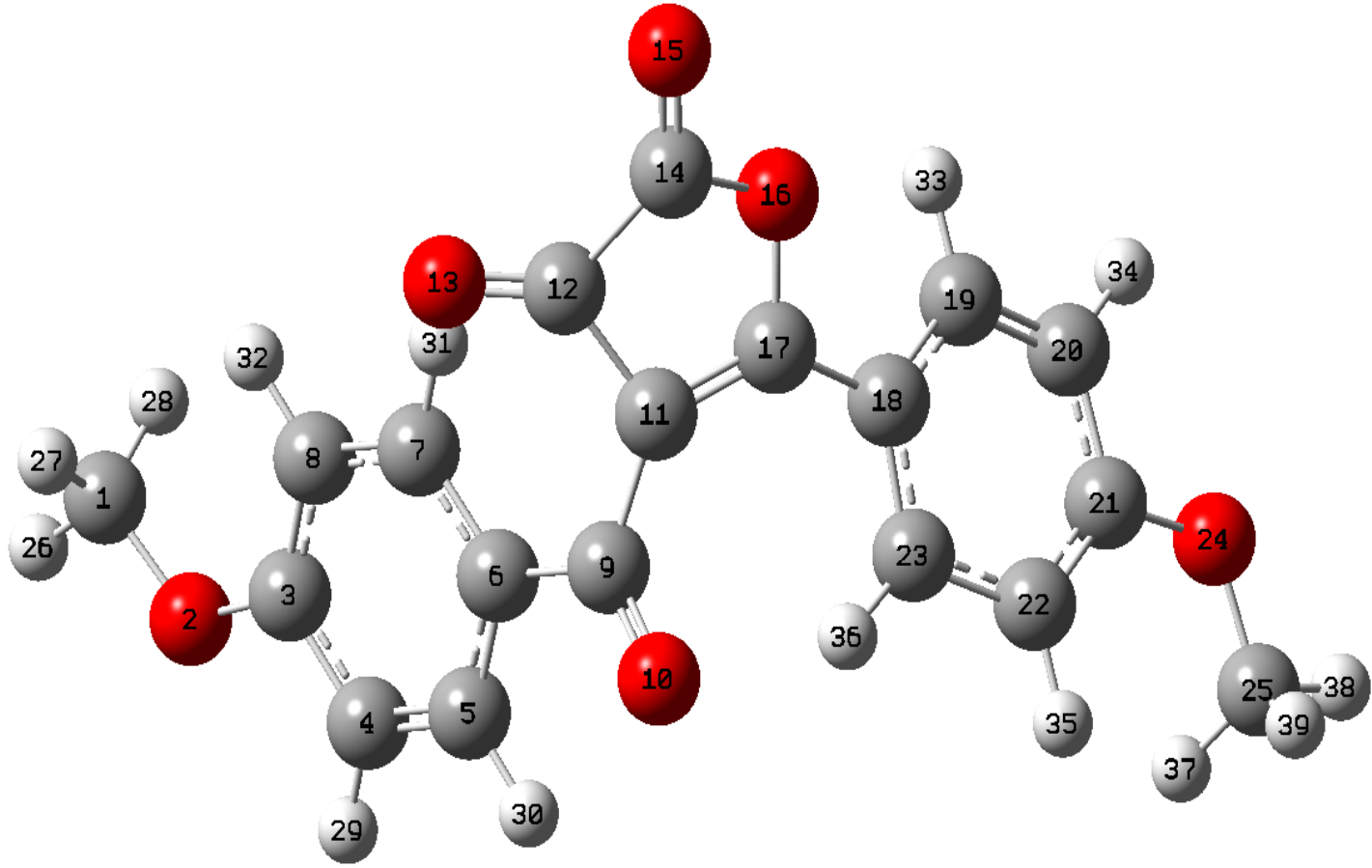
Şekil 3.5. 4-(4-metoksibenzoil)-5-(4-metoksifenil)-2,3-dihidro-2,3-furandion (FD) Bileşiğinin Deneysel Raman Spektrumu



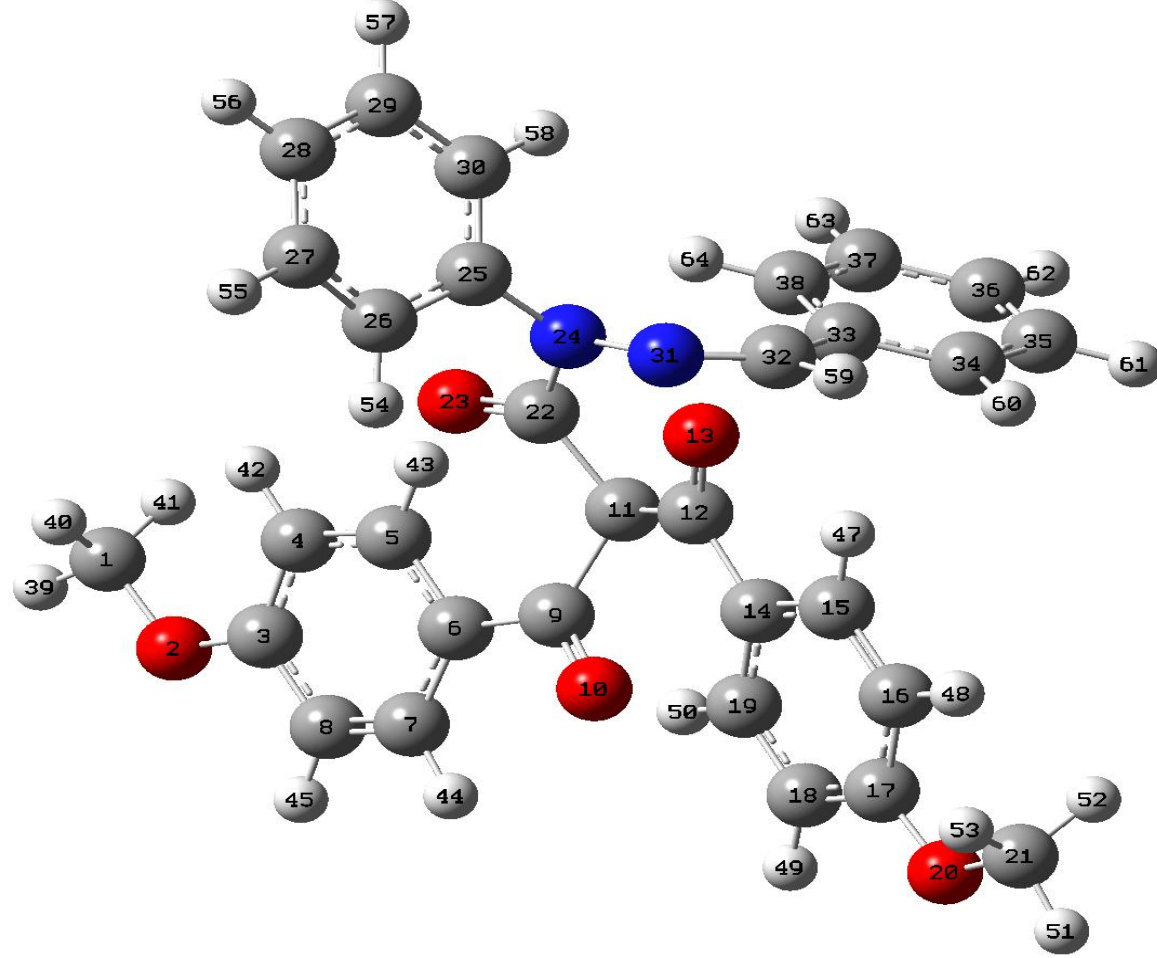
Şekil 3.6. N-benziliden-N-fenil-p,p'-dimetoksibenzoiil-asetasidi hidraziti (AHD) Bileşiğinin Deneysel Raman Spektrumu



Şekil 3.7.1. BAFH Bileşiğinin Şekli



Şekil 3.7.2. FD Bileşiğinin Şekli



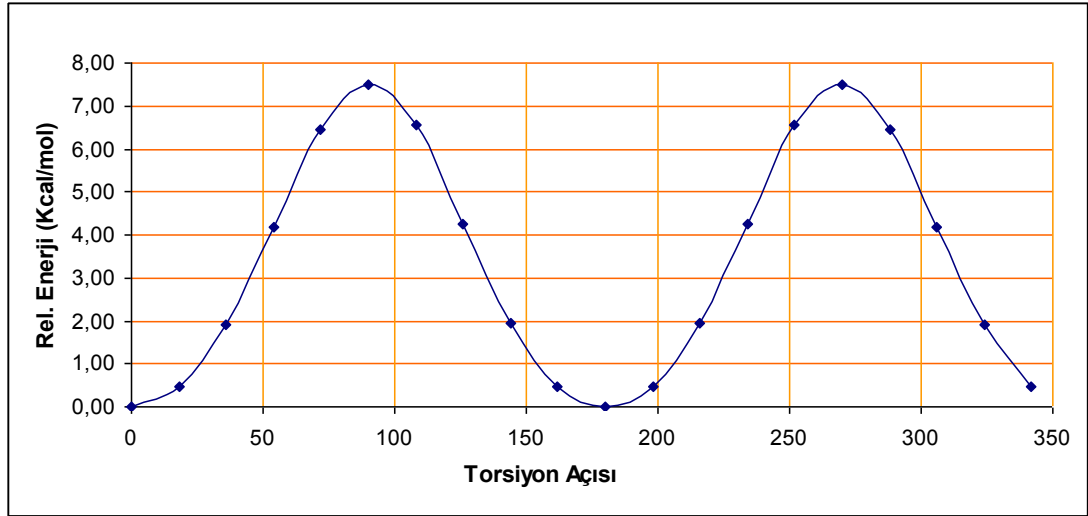
Şekil 3.7.3. AHD Bileşiğinin Şekli

3.2. Deneysel, Teorik Çalışmalarla Spektrumun Hesaplanması

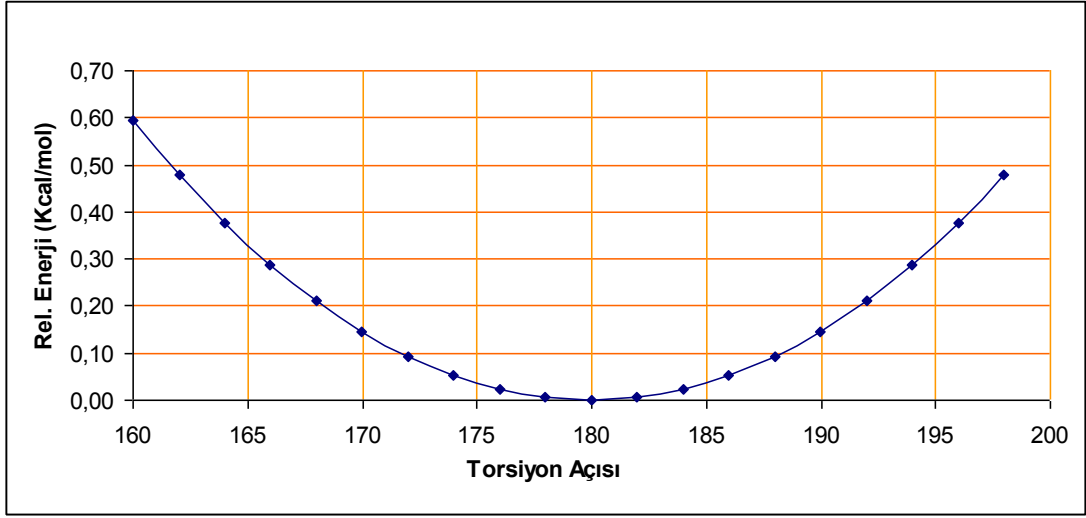
3.2.1. BAFH İçin Konformasyon Analizi

BAFH, FD, AHD bileşiklerinin kararlı konformer yapısına etki edebilecek kritik torsiyon açıları belirlenmiştir. Açılar için önce 18° 'lik 20 kez çevirme ile tarama yapıлып, torsiyon açısı - enerji grafikleri çizilmiştir. Minimum enerjili torsiyon açı aralığı tespit edilmiş; bu aralık 2° 'lik taramalarla Gaussian 09 [11] programında taratılıp molekülün bulunabileceği en kararlı yapı tespit edilmeye çalışılmıştır.

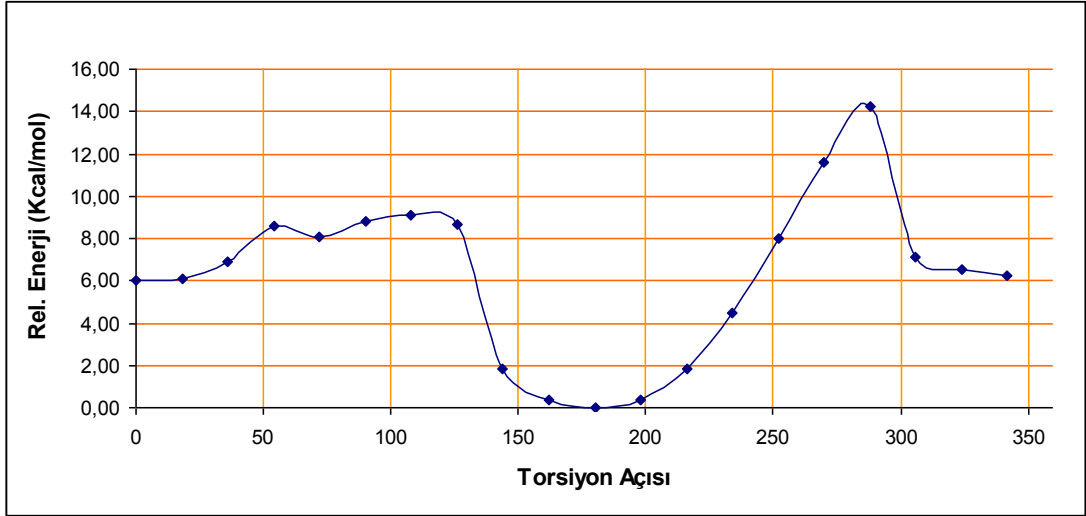
BAFH bileşiği için molekülün dönebileceği kritik torsiyon açıları olan $T(C_2C_1N_7N_8)$, $T(C_7N_8N_9C_{10})$ ve $T(N_8N_9C_{10}C_{11})$ numaralı açılar için Açı – Enerji grafikleri aşağıdaki verilmiştir.



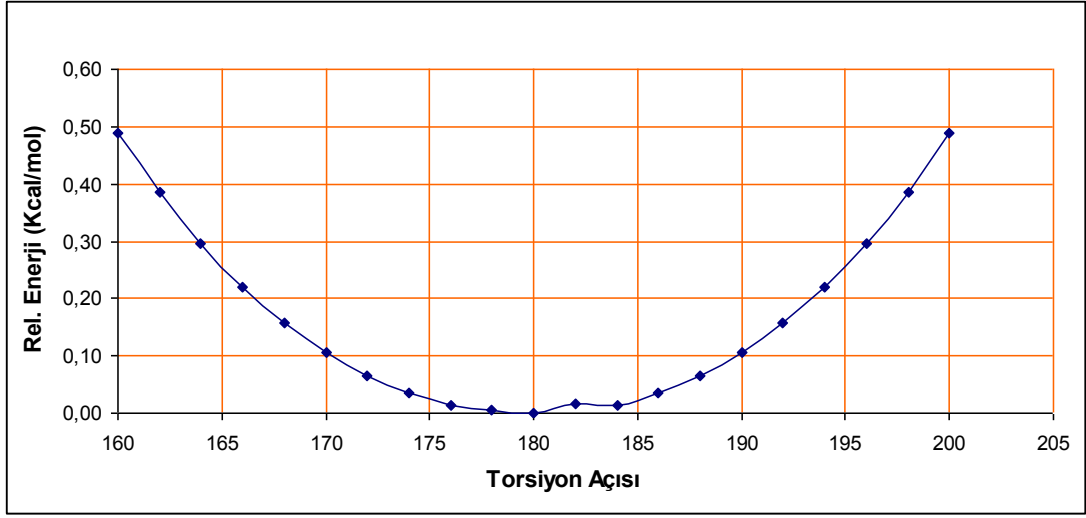
Şekil 3.8. C_1-N_7 bağının 18° 'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



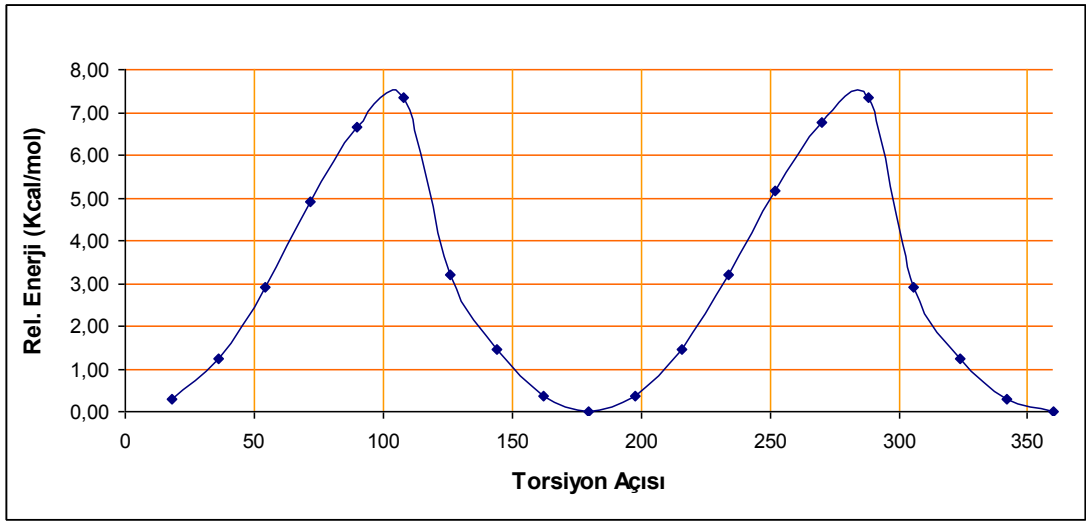
Şekil 3.9. C₁-N₇ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



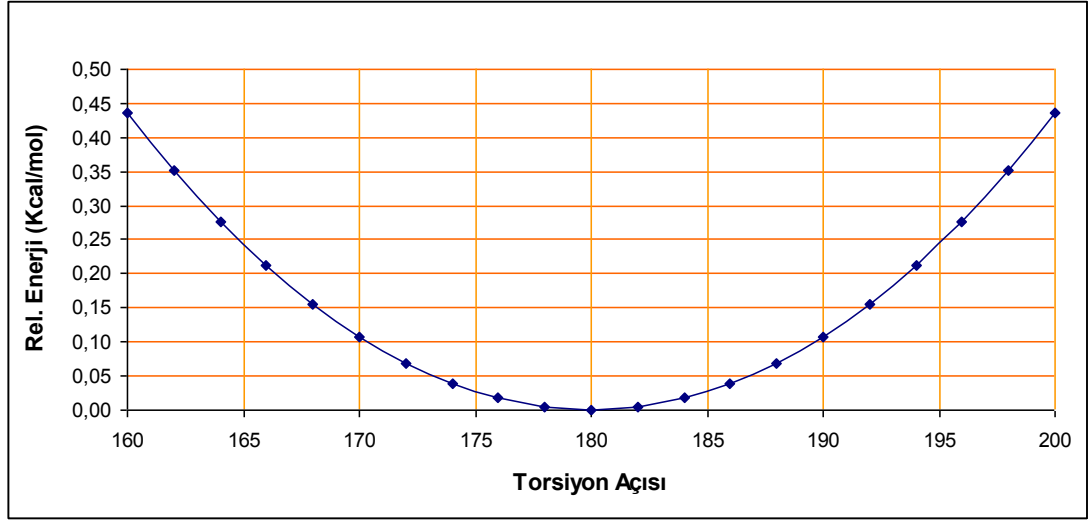
Şekil 3.10. N₈-N₉ bağının 18°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



Şekil 3.11. N₈-N₉ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



Şekil 3.12. N₉-C₁₀ bağının 18°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



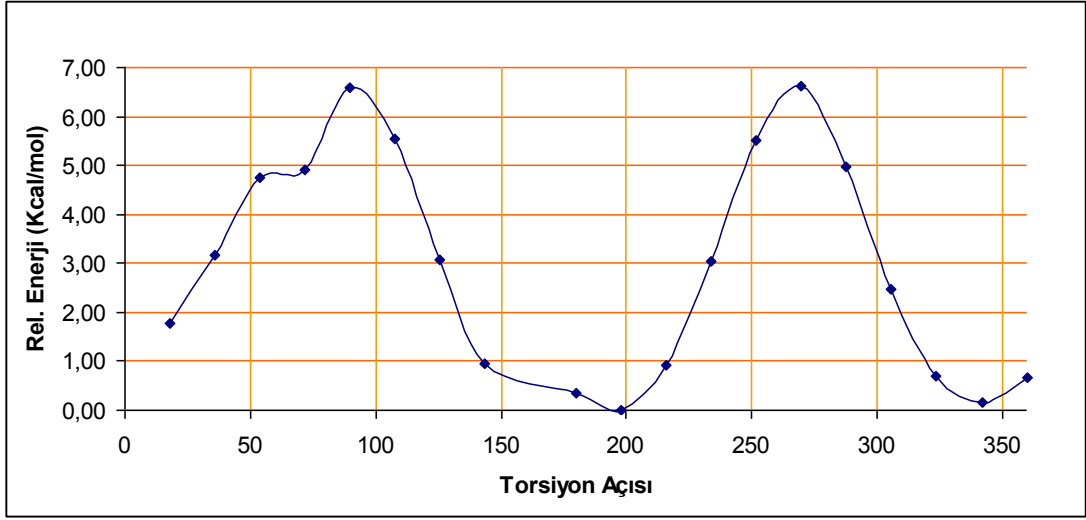
Şekil 3.13. N₉-C₁₀ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi

Şekil 3.8-3.13' de görülebileceği gibi BAFH molekülünün kritik torsiyon açıları en düşük enerjili geometriyi vermek üzere aşağıda sıralanmıştır.

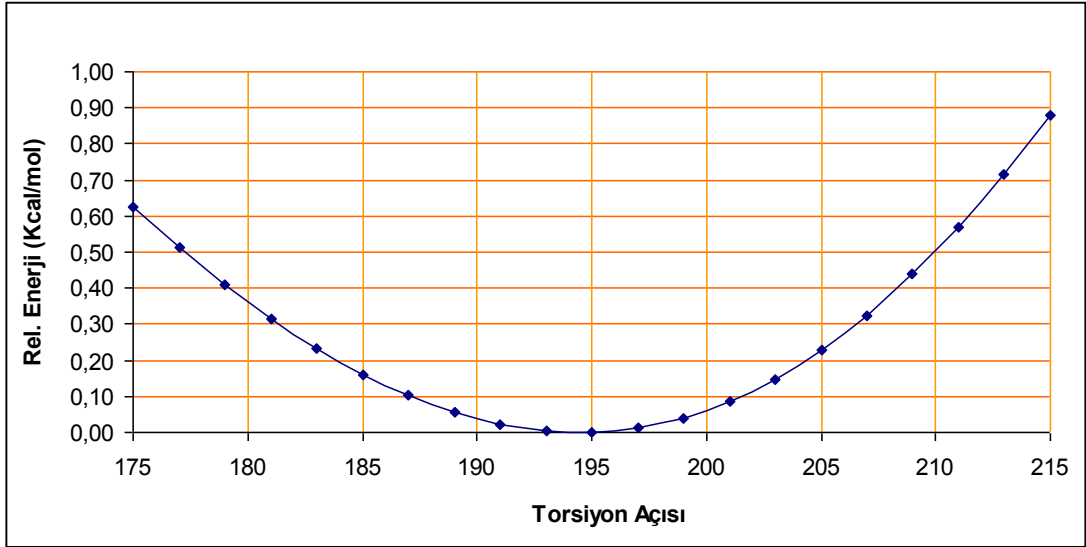
<u>Torsiyon Koordinatı</u>	<u>Açısı</u>
T(C ₂ C ₁ N ₇ N ₈)	180,00000
T(N ₈ N ₉ C ₁₀ C ₁₁)	180,00000
T(C ₇ N ₈ N ₉ C ₁₀)	180,00000

3.2.2 FD İçin Konformasyon Analizi

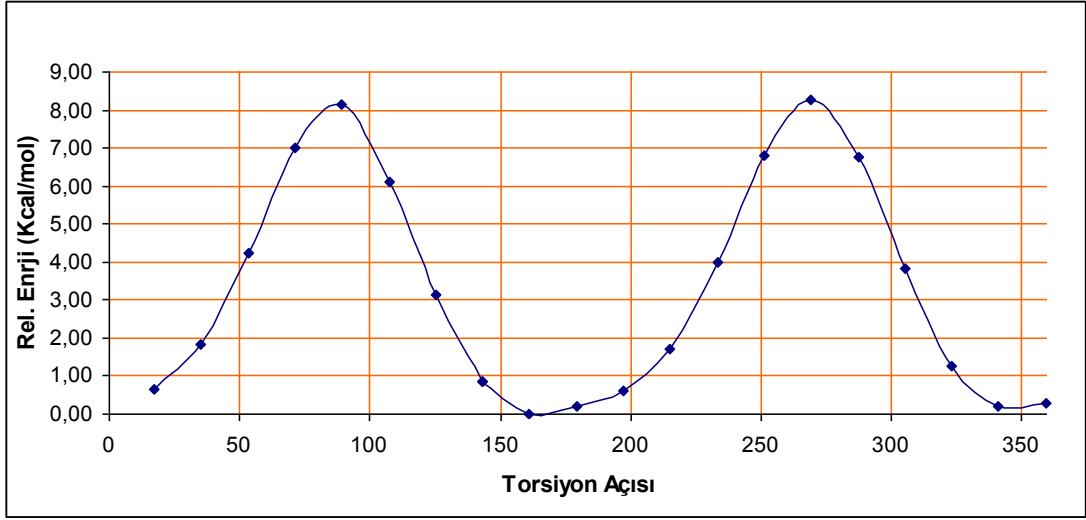
FD bileşiği için molekülün dönebileceği kritik torsiyon açıları olan T(C₇C₆C₉C₁₁), T(C₁₉C₁₈C₁₇O₁₆), T(C₂₂C₂₁O₂₄C₂₅), T(C₂₁O₂₄C₂₅H₃₇), T(C₆C₉C₁₁C₁₂), T(C₈C₃O₂C₁), T(C₃O₂C₁H₂₆) numaralı açılar için Açılı – Enerji grafikleri aşağıdaki verilmiştir.



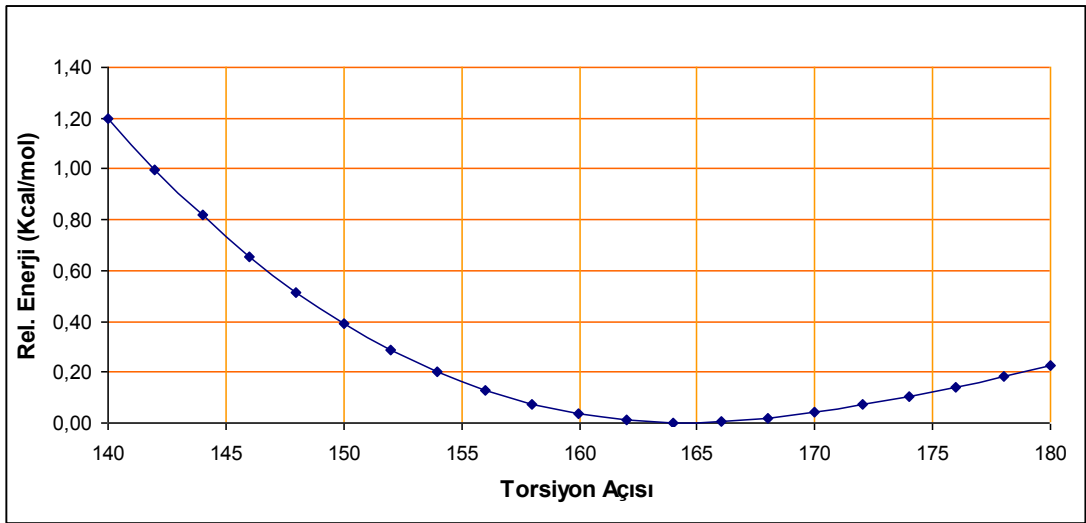
Şekil 3.14. C₆-C₉ bağının 18°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



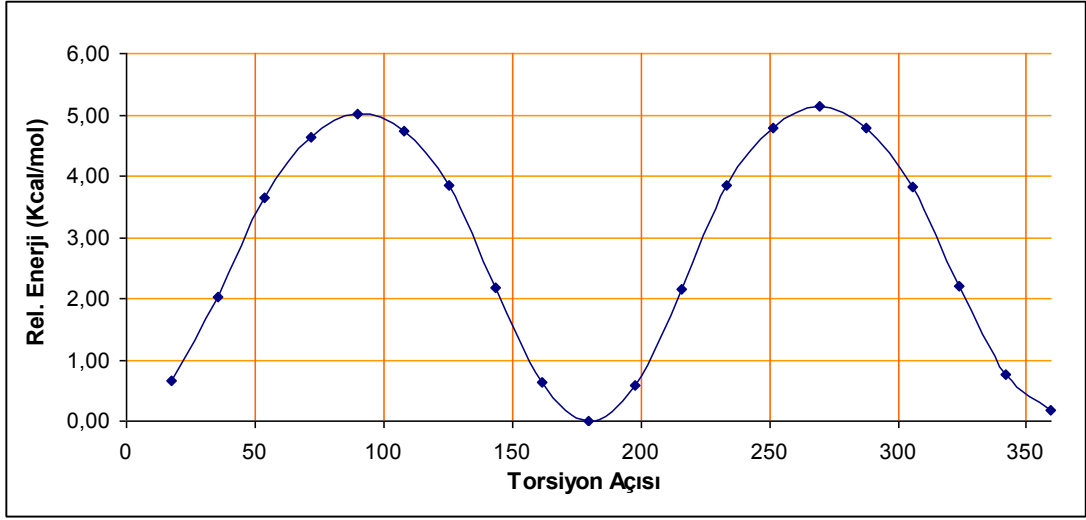
Şekil 3.15. C₆-C₉ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



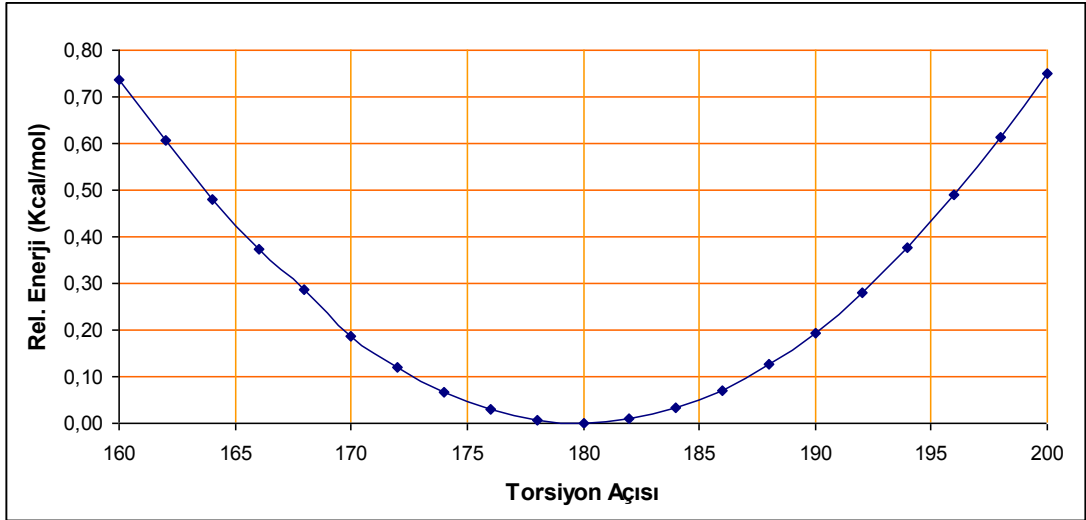
Şekil 3.16. C₁₈-C₁₇ bağının 18°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



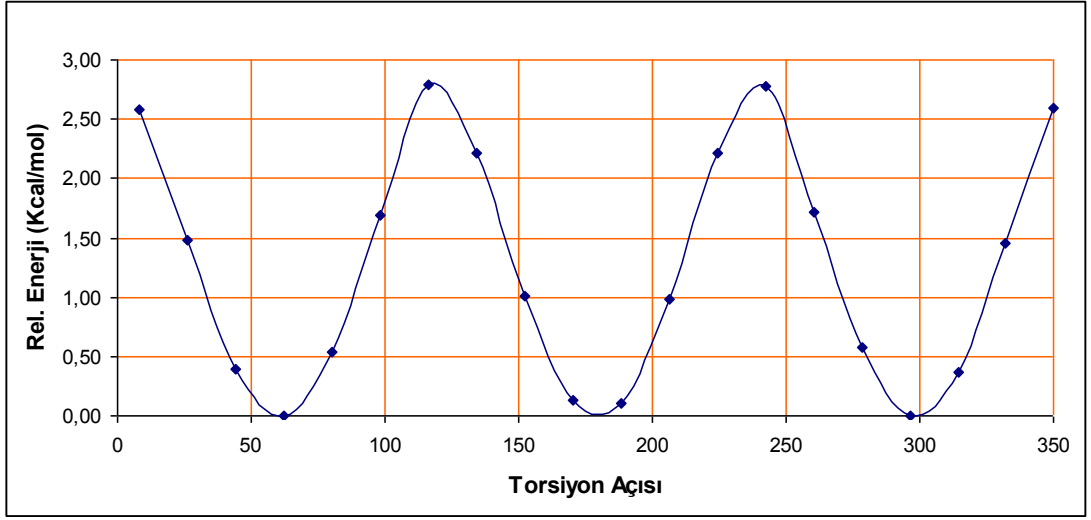
Şekil 3.17. C₁₈-C₁₇ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



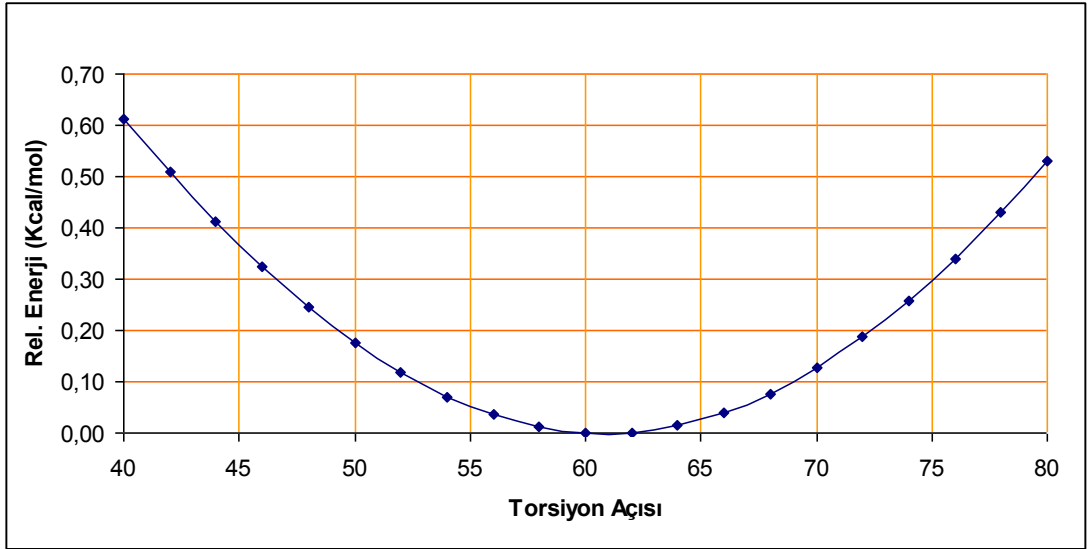
Şekil 3.18. C₂₁-O₂₄ bağının 18°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



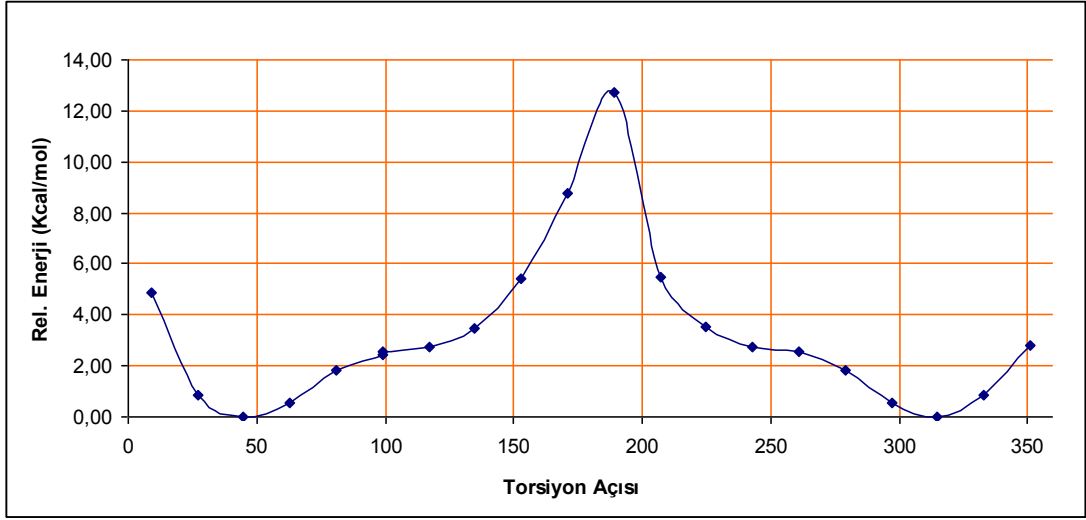
Şekil 3.19. C₂₁-O₂₄ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



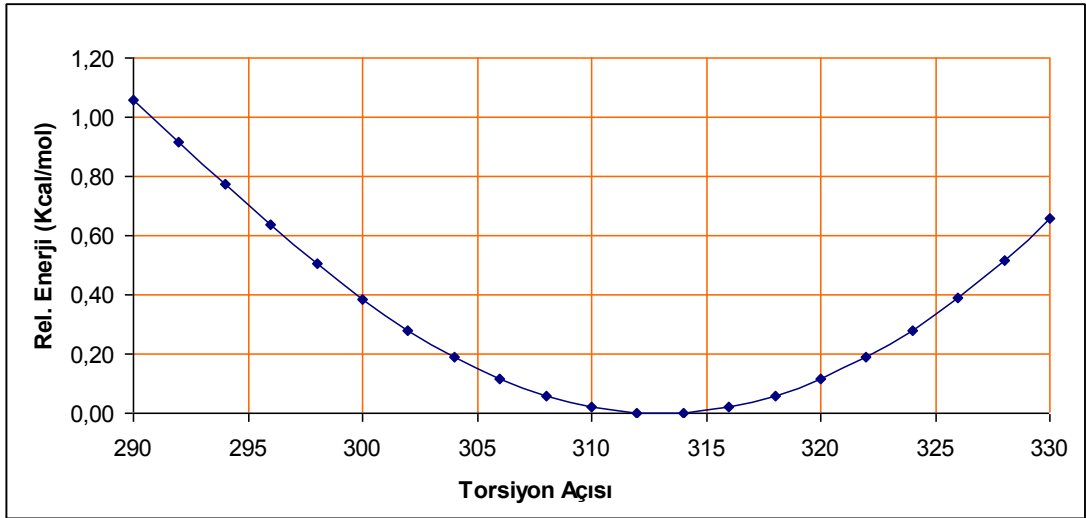
Şekil 3.20. O₂₄-C₂₅ bağının 18°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



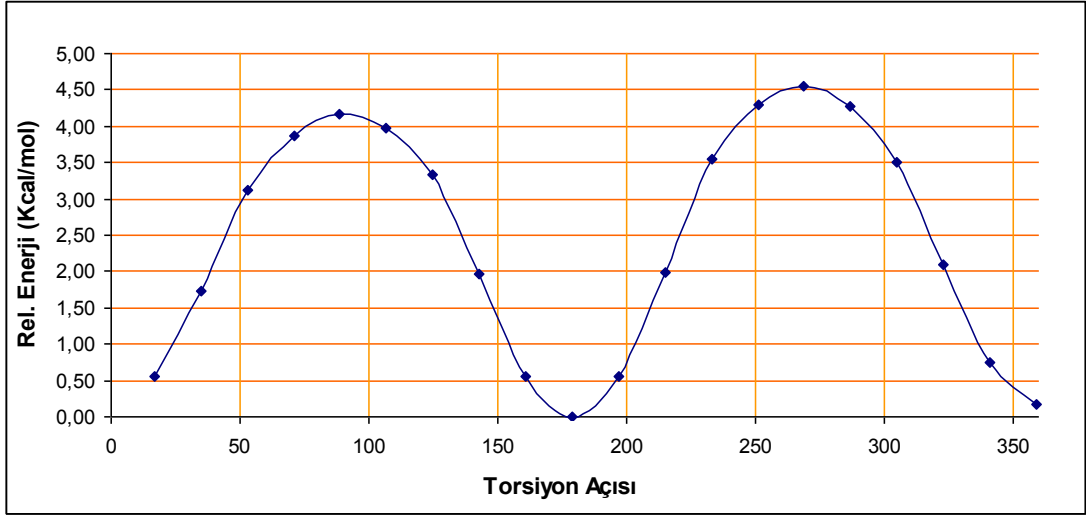
Şekil 3.21. O₂₄-O₂₅ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



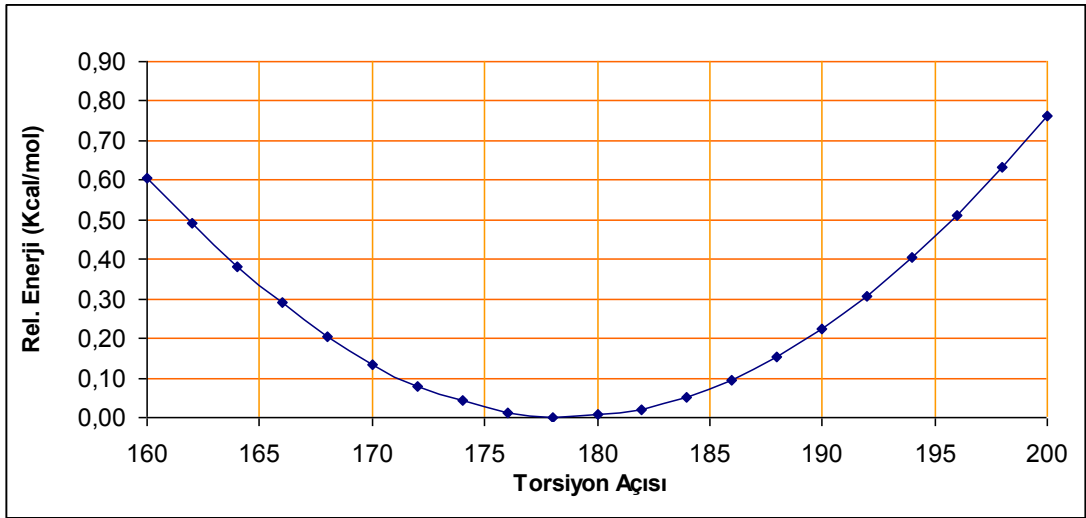
Şekil 3.22. C₉-C₁₁ bağının 18°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



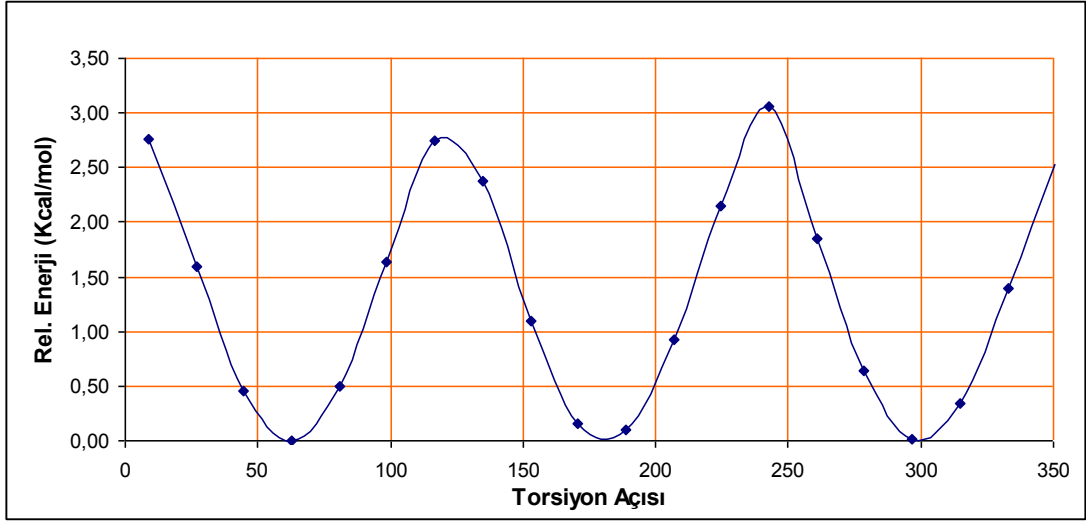
Şekil 3.23. C₉-C₁₁ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



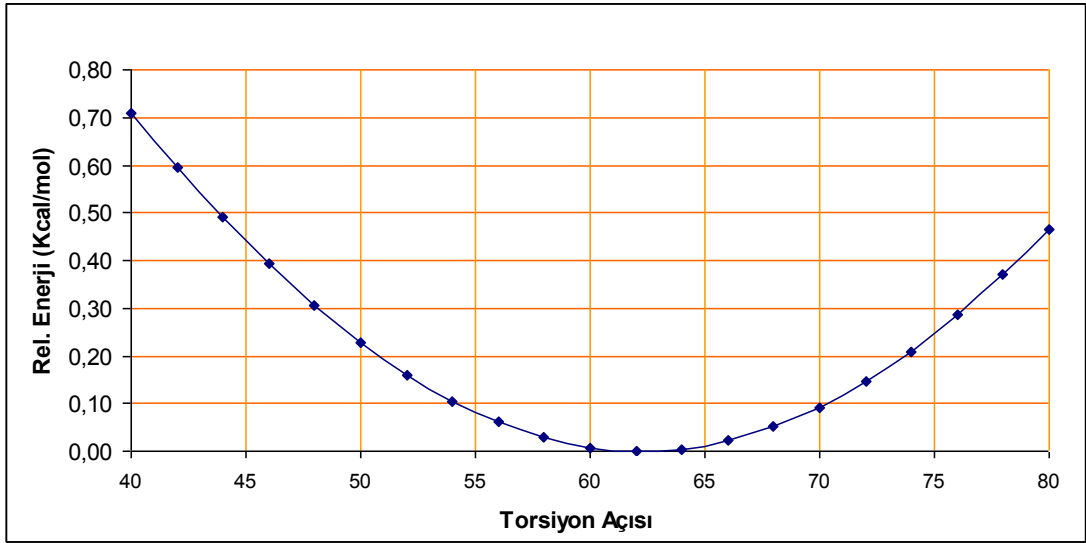
Şekil 3.24. C₃-O₂ bağının 18°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



Şekil 3.25. C₃-O₂ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



Şekil 3.26. O₂-C₁ bağının 18°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



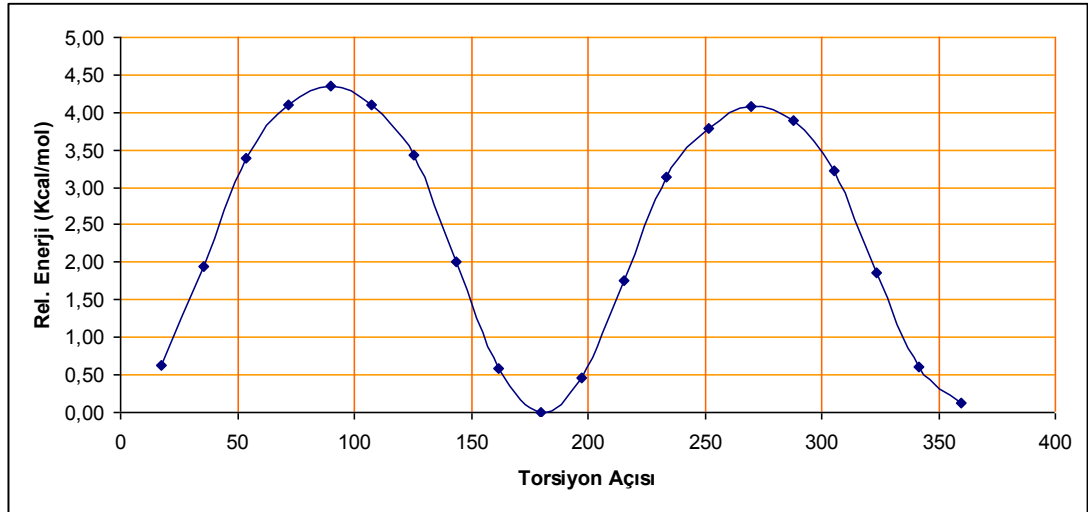
Şekil 3.27. O₂-C₁ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi

Şekil 3.14-3.27.' de görülebileceği gibi FD molekülünün kritik torsiyon açıları en düşük enerjili geometriyi vermek üzere aşağıda sıralanmıştır.

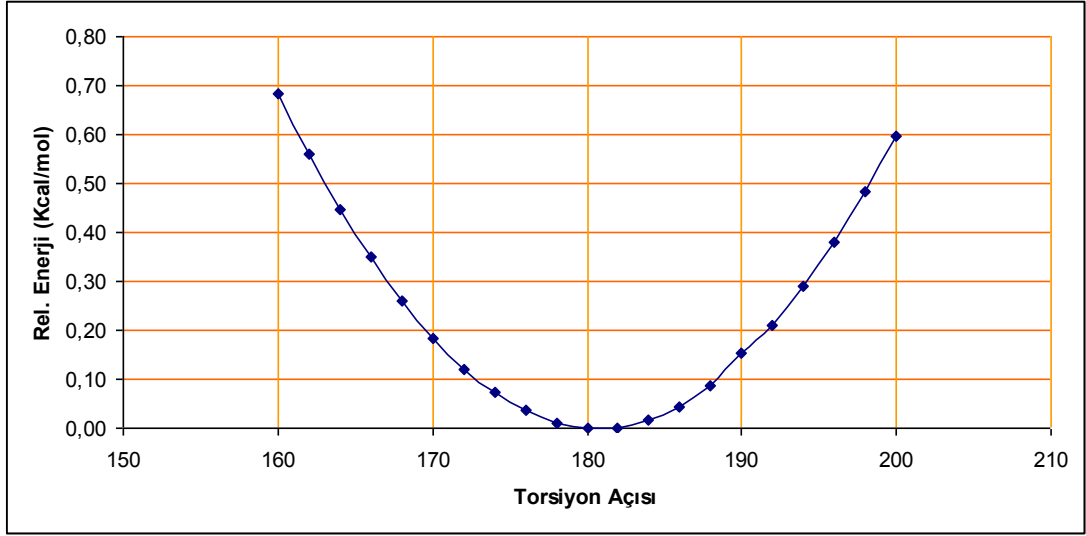
<u>Torsiyon Koordinatı</u>	<u>Açısı</u>	<u>Torsiyon Koordinatı</u>	<u>Açısı</u>
T(C ₇ C ₆ C ₉ C ₁₁)	194,99982	T(C ₆ C ₉ C ₁₁ C ₁₂)	313,99992
T(C ₁₉ C ₁₈ C ₁₇ O ₁₆)	163,99990	T(C ₈ C ₃ O ₂ C ₁)	178,00001
T(C ₂₂ C ₂₁ O ₂₄ C ₂₅)	180,00000	T(C ₃ O ₂ C ₁ H ₂₆)	62,00014
T(C ₂₁ O ₂₄ C ₂₅ H ₃₇)	60,00019		

3.2.3. AHD İçin Konformasyon Analizi

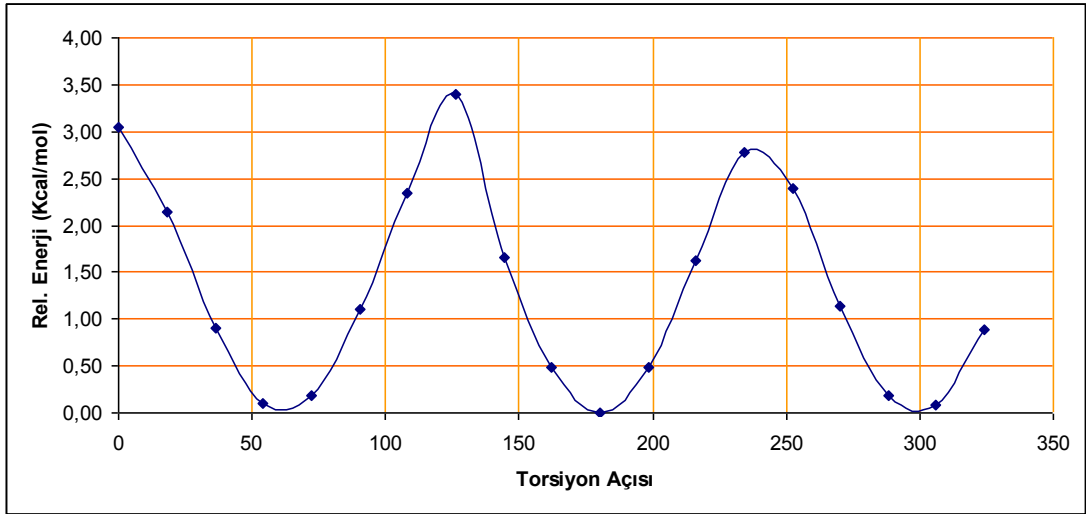
HD bileşiği için molekülün dönebileceği kritik torsiyon açıları olan T(C₂₁O₂₀C₁₇C₁₈) T(H₅₁C₂₁O₂₀C₁₇), T(C₁₅C₁₄C₁₂C₁₁), T(C₁₄C₁₂C₁₁C₂₂), T(C₁₂C₁₁C₉C₆), T(C₂₂N₂₄N₃₁C₃₂), T(C₂₂N₂₄C₂₅C₂₆), T(C₉C₁₁C₂₂N₂₄), T(C₁₁C₂₂N₂₄N₃₁), T(N₃₁C₃₂C₃₃C₃₄), T(C₇C₆C₉C₁₁), T(C₁O₂C₃C₄), T(C₃C₂C₁H₃₉) numaralı açılar için Açılı – Enerji grafikleri aşağıdaki verilmiştir.



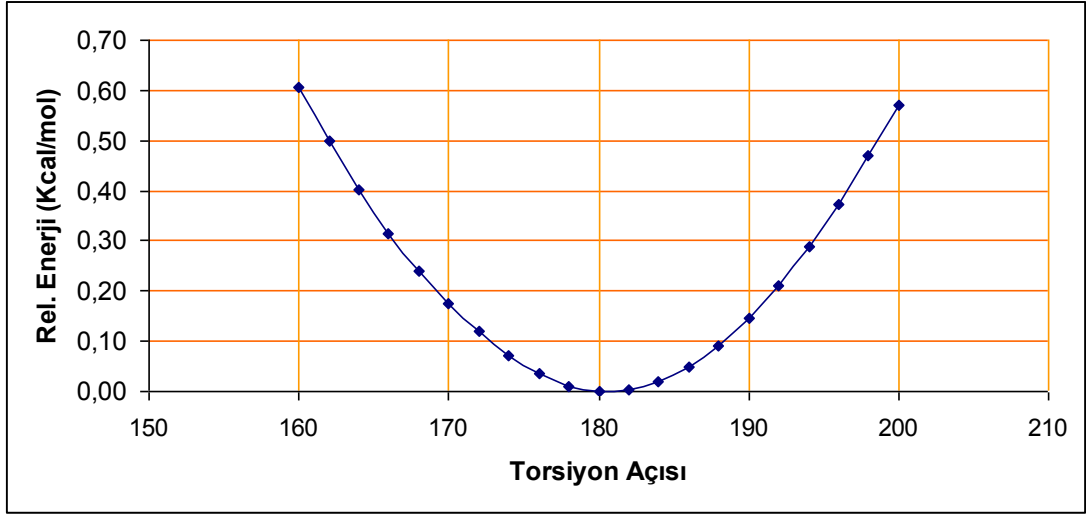
Şekil 3.28. O₂₀-C₁₇ bağının 18°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



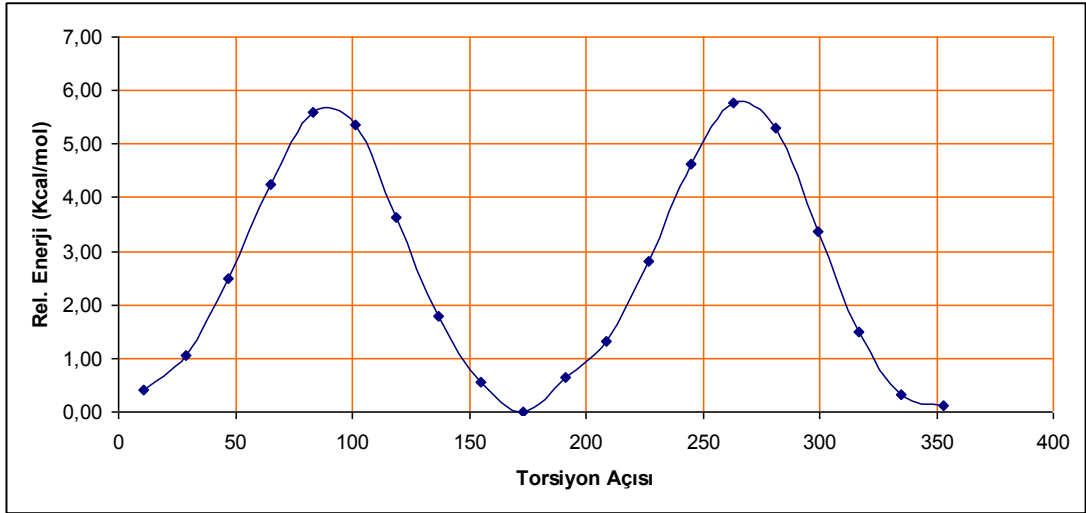
Şekil 3.29. O₂₀-C₁₇ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



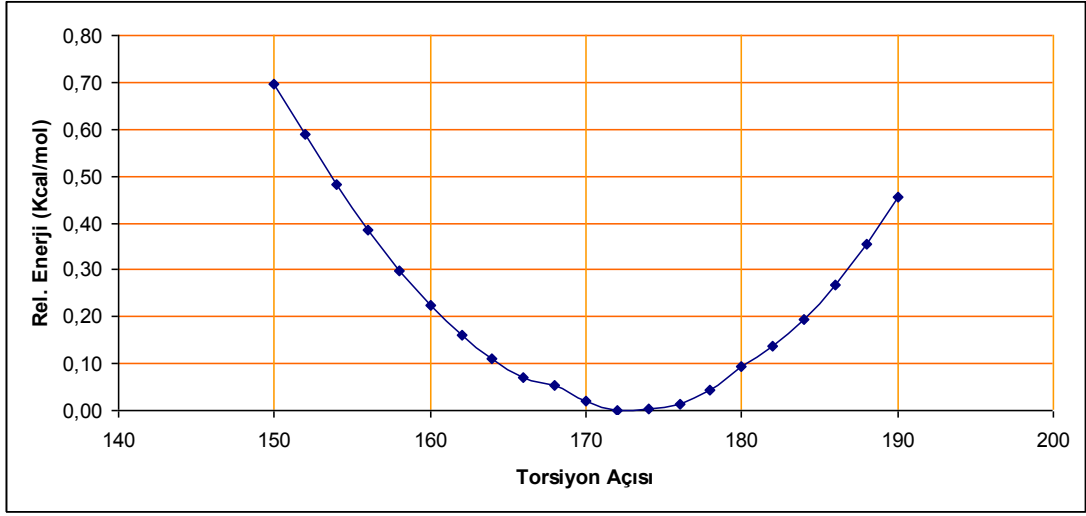
Şekil 3.30. C₂₁-O₂₀ bağının 18°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



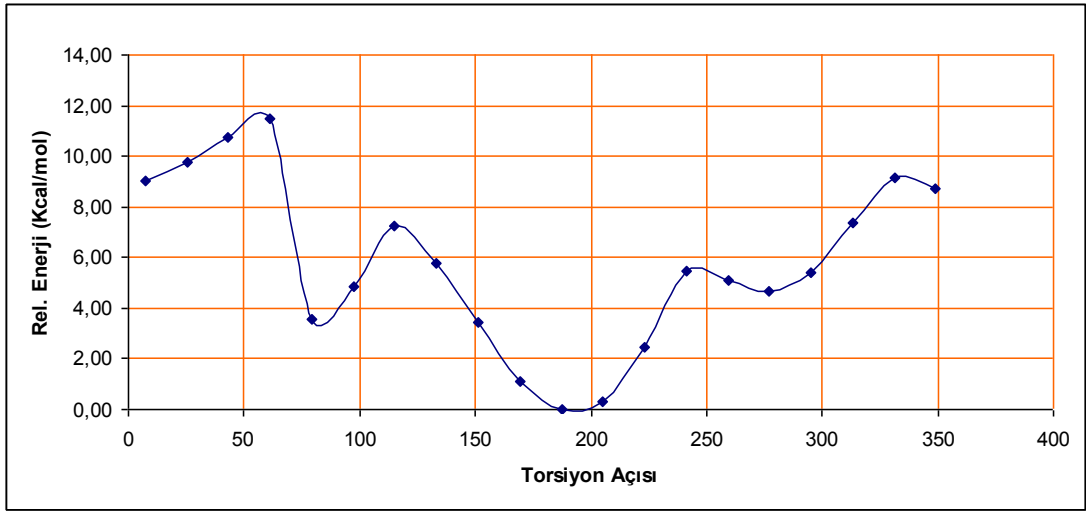
Şekil 3.31. C₂₁-O₂₀ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



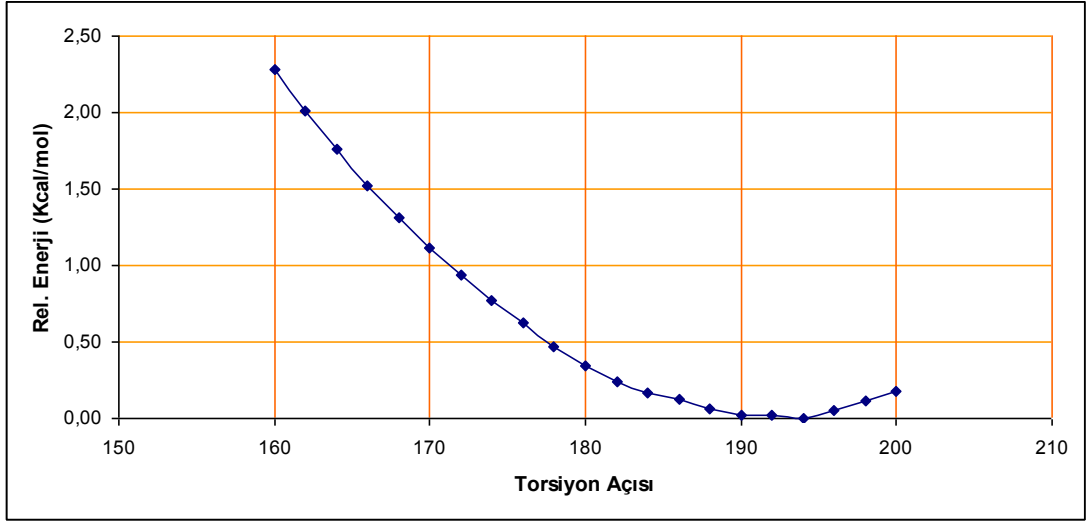
Şekil 3.32. C₁₄-C₁₂ bağının 18°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



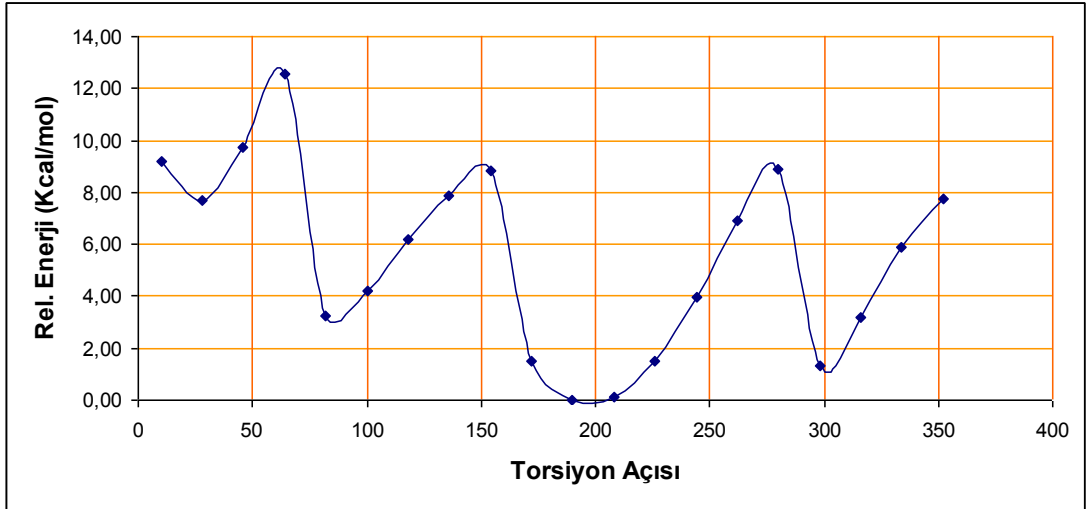
Şekil 3.33. C₁₄-C₁₂ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



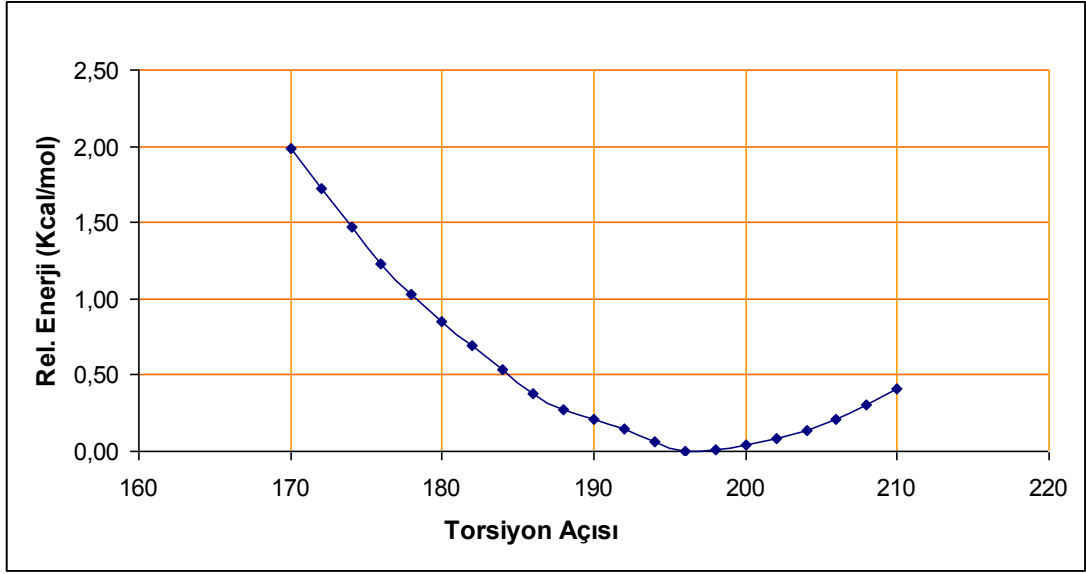
Şekil 3.34. C₁₂-C₁₁ bağının 18°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



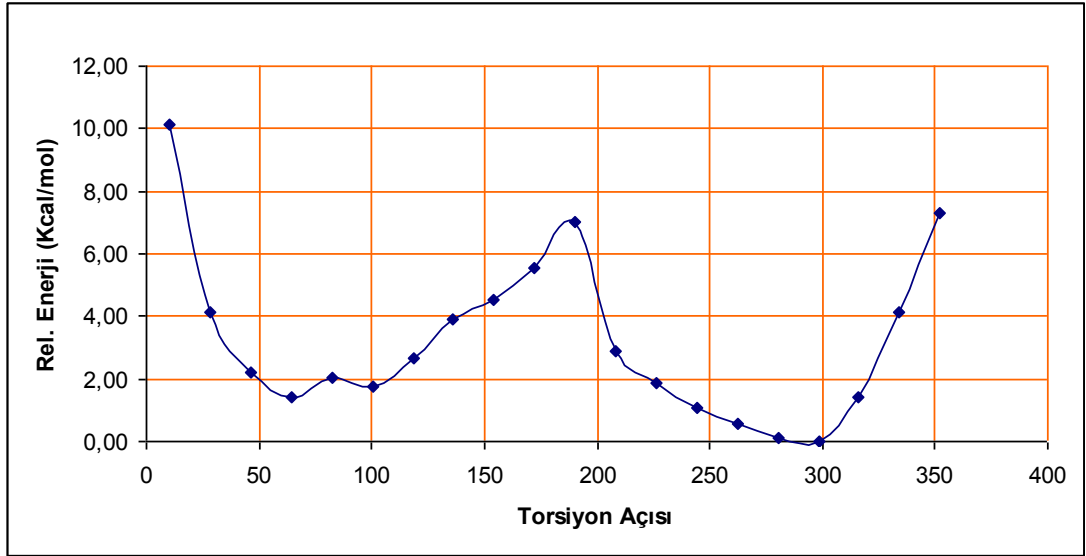
Şekil 3.35. C₁₂-C₁₁ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



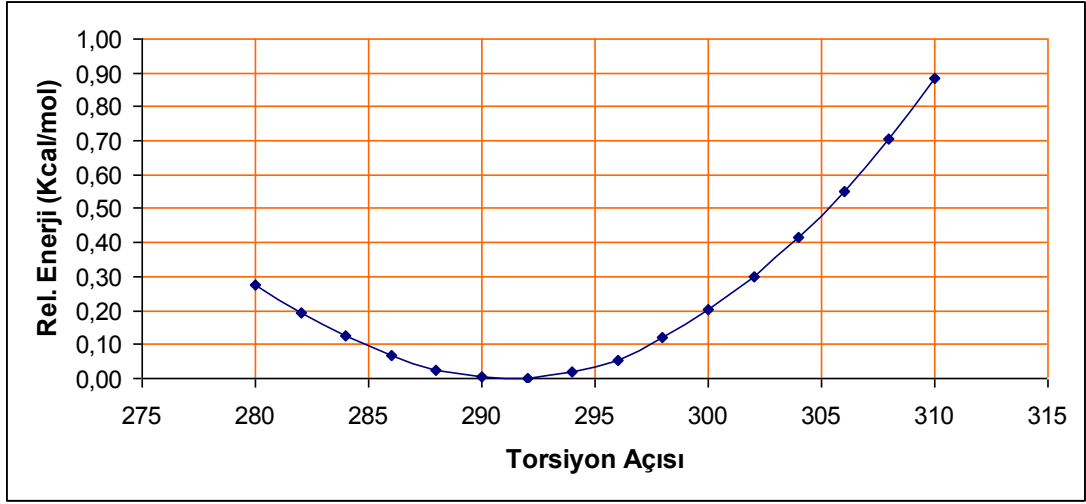
Şekil 3.36. C₁₁-C₉ bağının 18°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



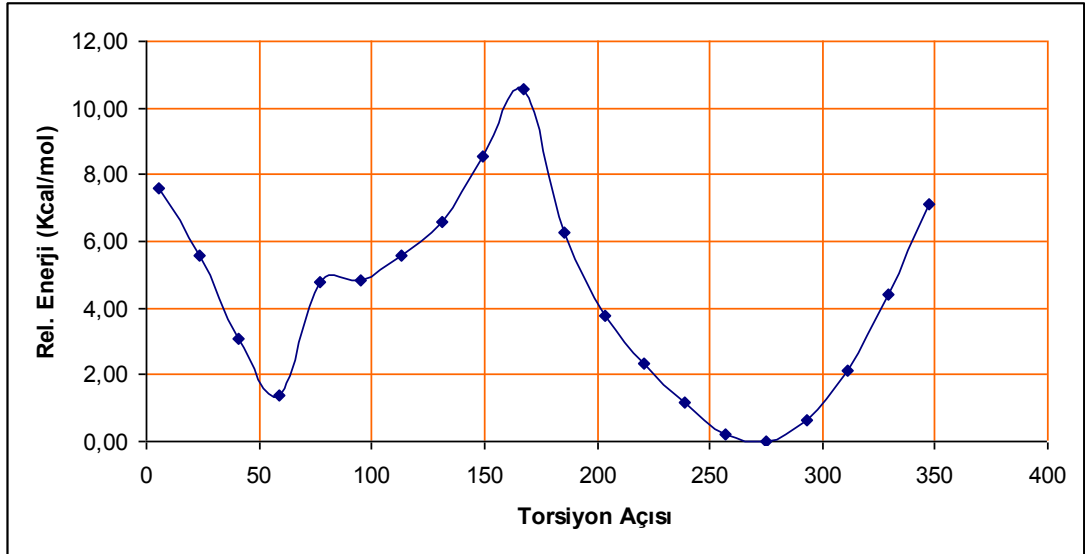
Şekil 3.37. C₁₁-C₉ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



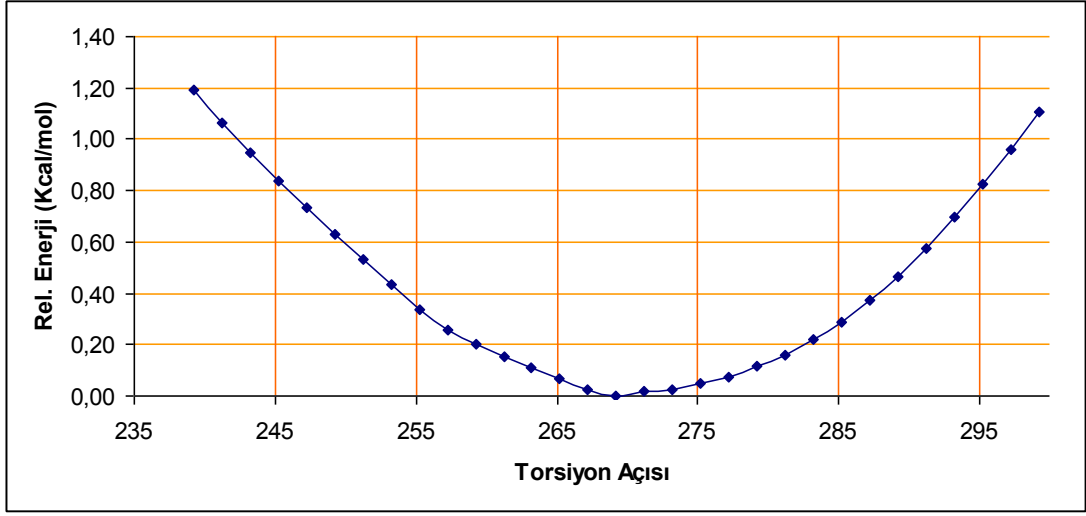
Şekil 3.38. N₂₄-N₃₁ bağının 18°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



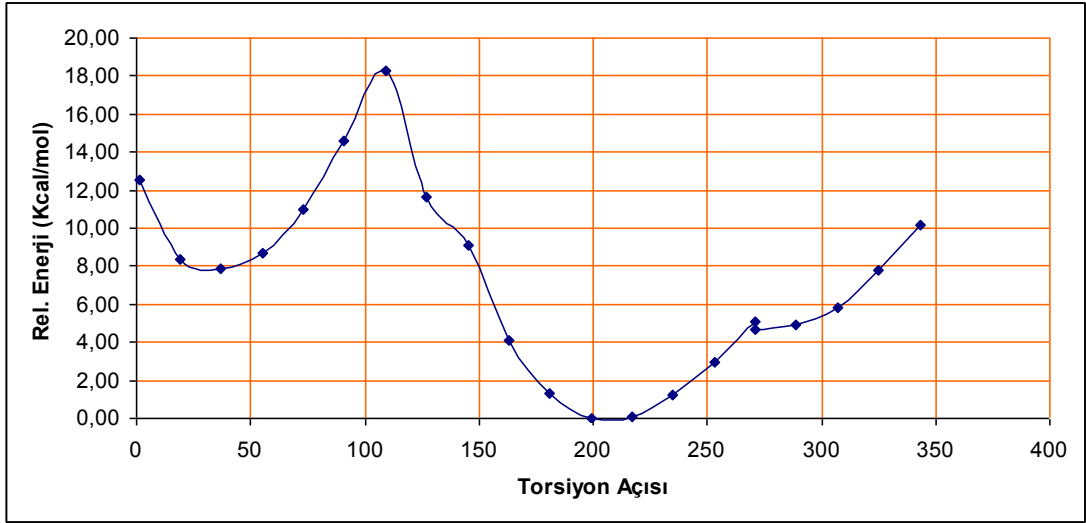
Şekil 3.39. N₂₄-N₃₁ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



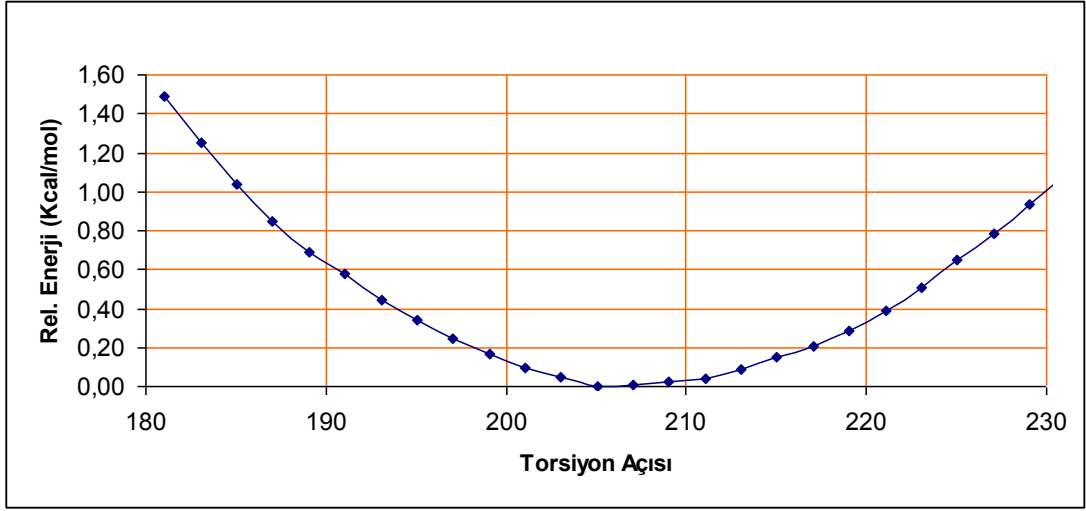
Şekil 3.40. N₂₄-C₂₅ bağının 18°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



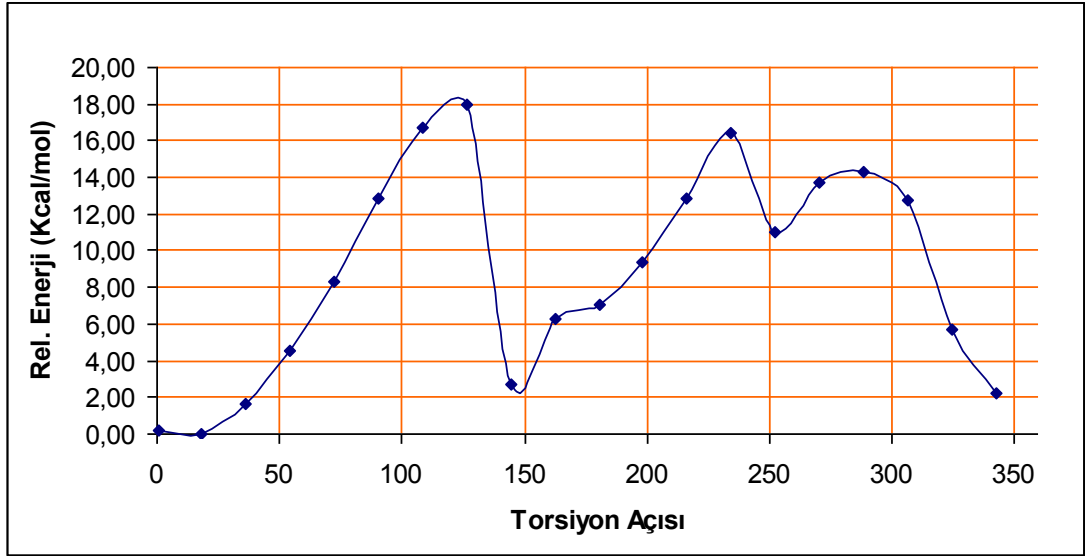
Şekil 3.41. N₂₄-C₂₅ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



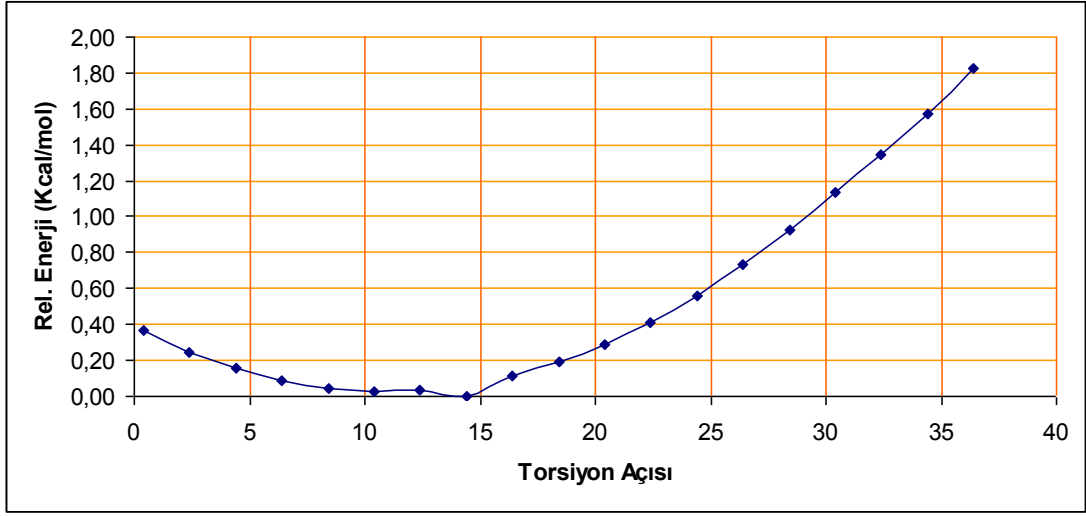
Şekil 3.42. C₁₁-C₂₂ bağının 18°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



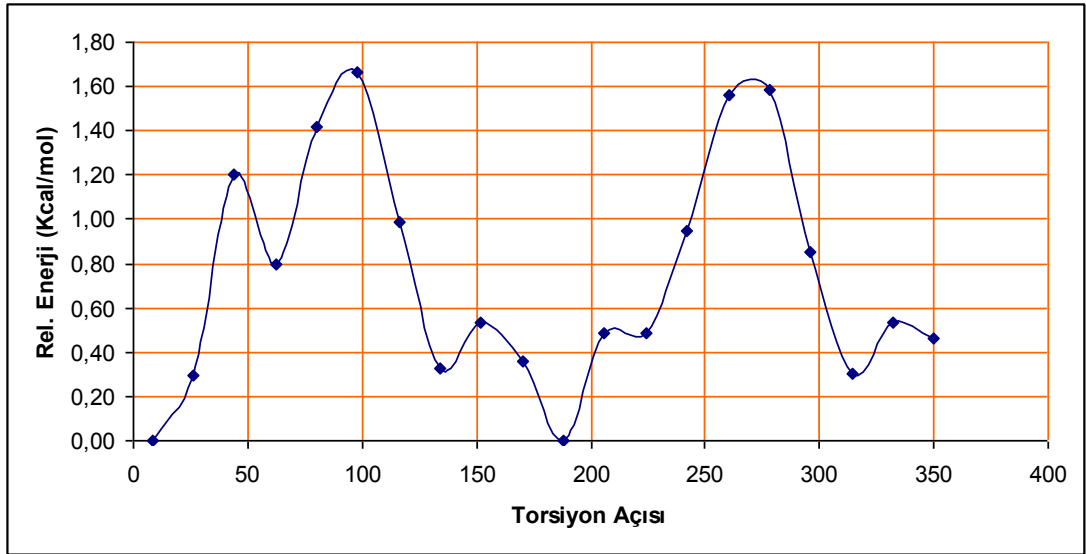
Şekil 3.43. C₁₁-C₂₂ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



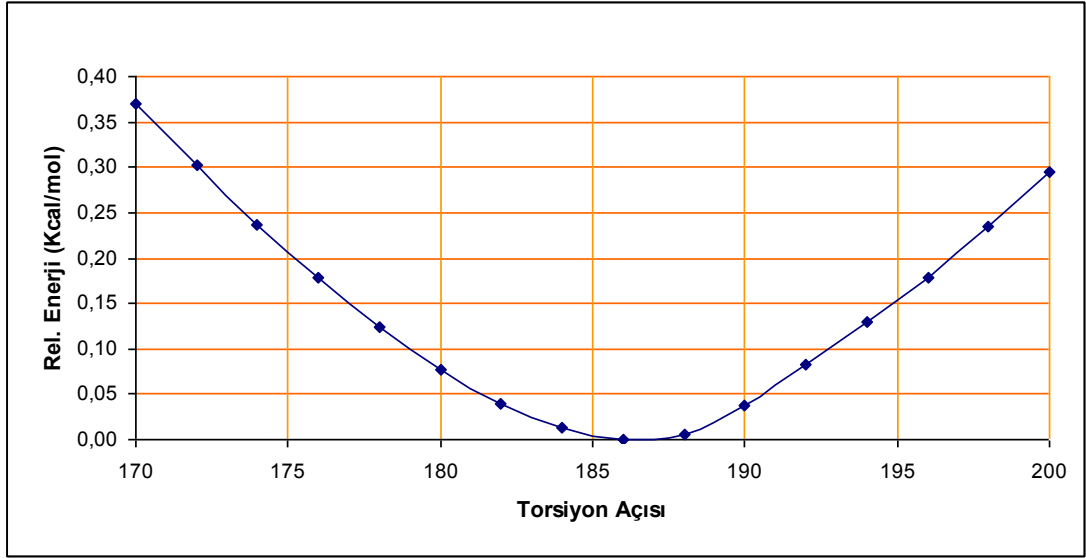
Şekil 3.44. C₂₂-N₂₄ bağının 18°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



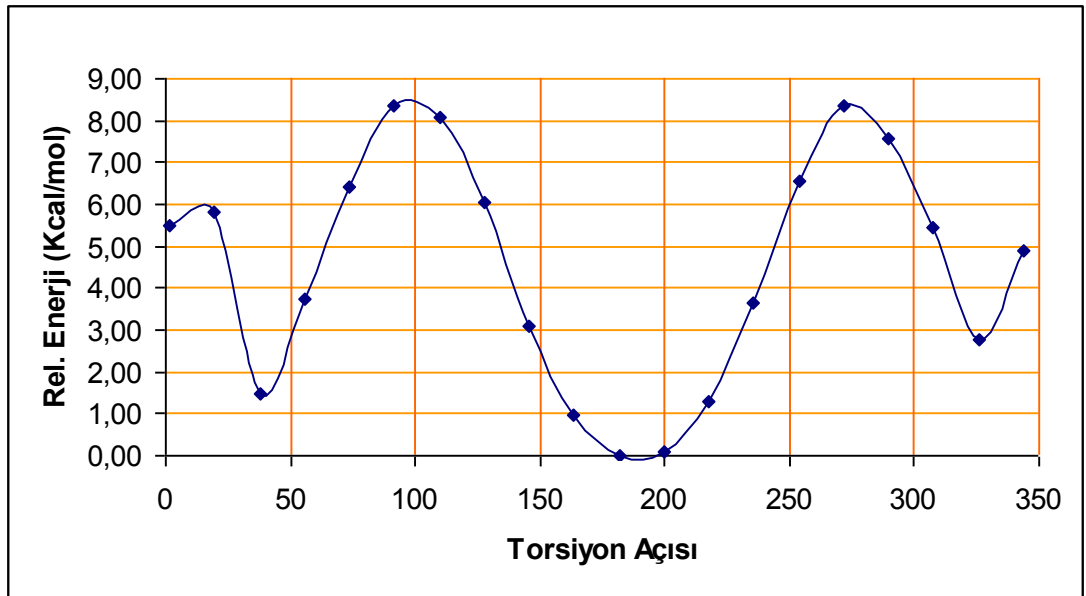
Şekil 3.45. C₂₂-N₂₄ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



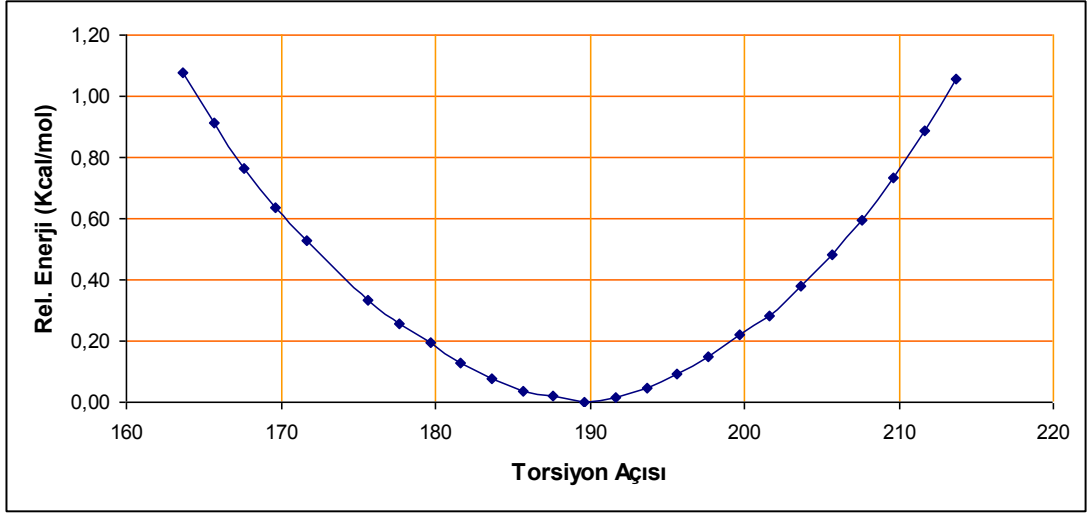
Şekil 3.46. C₃₂-C₃₃ bağının 18°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



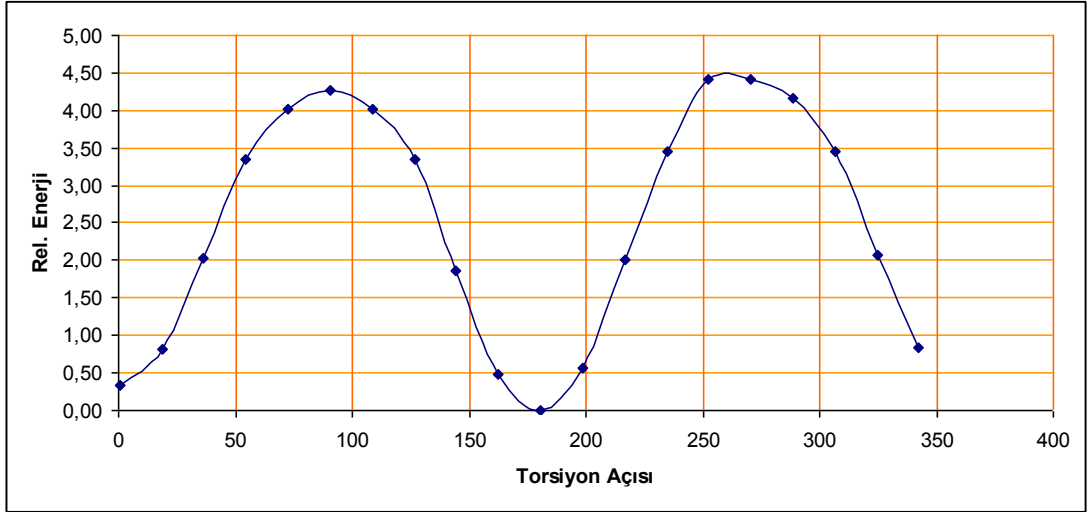
Şekil 3.47. C₃₂-C₃₃ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



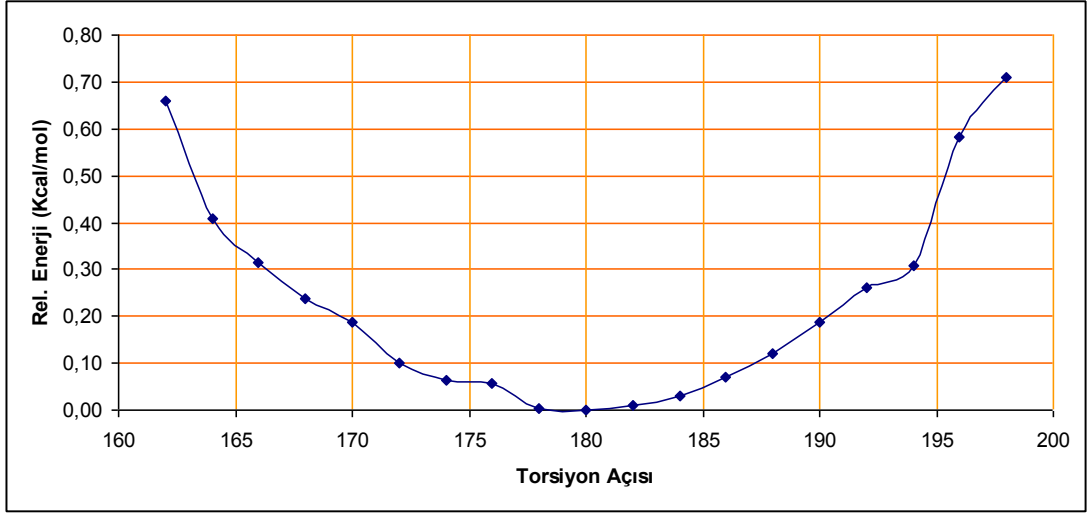
Şekil 3.48. C₆-C₉ bağının 18°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



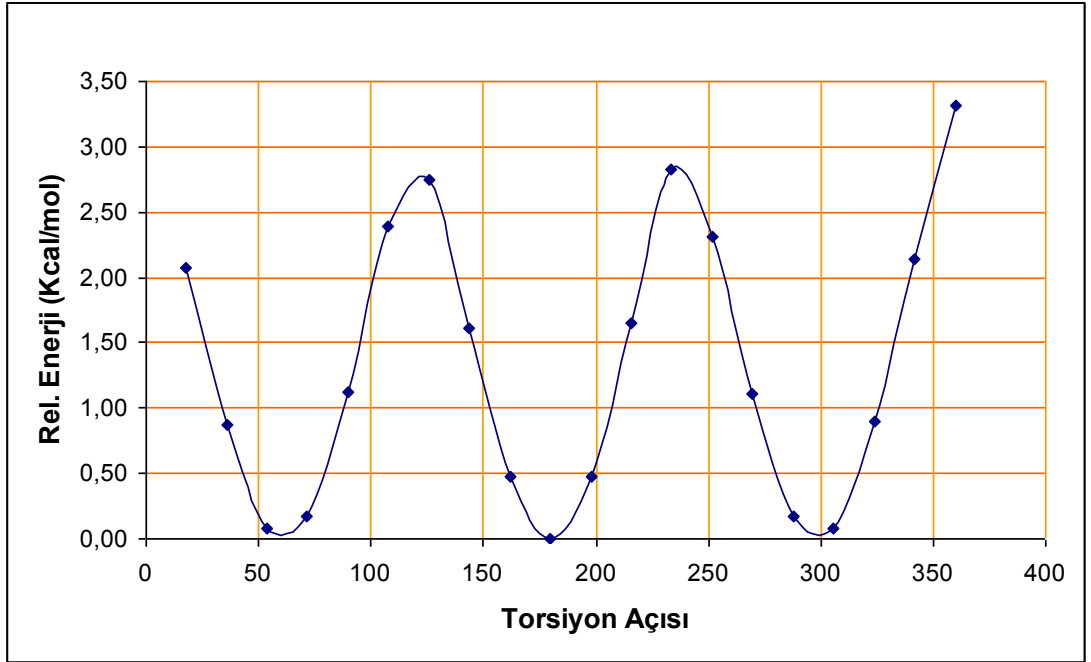
Şekil 3.49. C₆-C₉ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



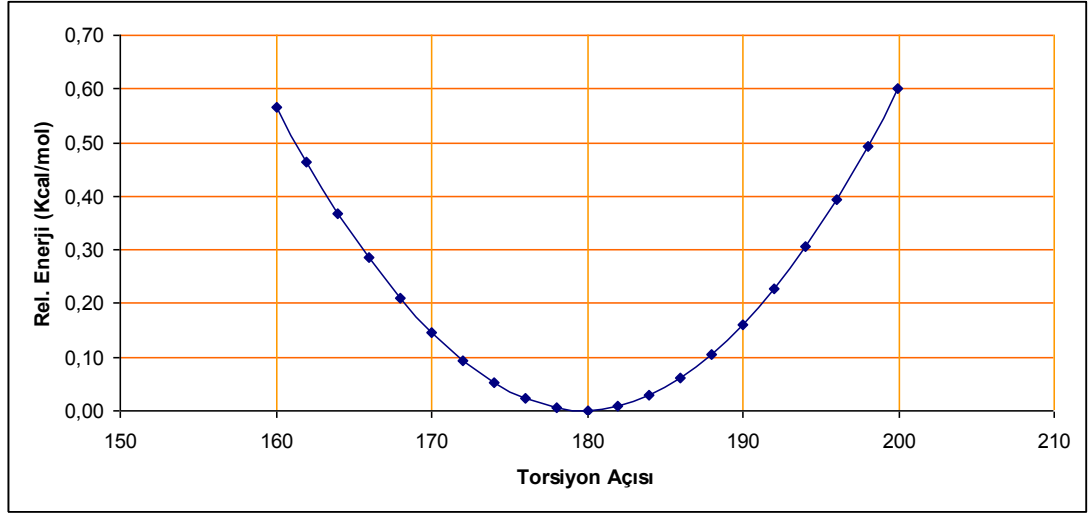
Şekil 3.50. O₂-C₃ bağının 18°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



Şekil 3.51. O₂-C₃ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



Şekil 3.52. C₂-C₁ bağının 18°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi



Şekil 3.53. O₂-C₃ bağının 2°'lik açılarla dönmesine bağlı enerji değişimi

Şekil 3.28-3.53.' de görülebileceği gibi AHD molekülünün kritik torsiyon açıları en düşük enerjili geometriyi vermek üzere aşağıda sıralanmıştır.

<u>Torsiyon Koordinatı</u>	<u>Açısı</u>	<u>Torsiyon Koordinatı</u>	<u>Açısı</u>
T(C ₂₁ O ₂₀ C ₁₇ C ₁₈)	180,00000	T(C ₉ C ₁₁ C ₂₂ N ₂₄)	205,05790
T(H ₅₁ C ₂₁ O ₂₀ C ₁₇)	180,00000	T(C ₁₁ C ₂₂ N ₂₄ N ₃₁)	14,40520
T(C ₁₅ C ₁₄ C ₁₂ C ₁₁)	171,99992	T(N ₃₁ C ₃₂ C ₃₃ C ₃₄)	185,00000
T(C ₁₄ C ₁₂ C ₁₁ C ₂₂)	194,00004	T(C ₇ C ₆ C ₉ C ₁₁)	189,6641
T(C ₁₂ C ₁₁ C ₉ C ₆)	196,00001	T(C ₁ O ₂ C ₃ C ₄)	180,0000
T(C ₂₂ N ₂₄ N ₃₁ C ₃₂)	291,99998	T(C ₃ C ₂ C ₁ H ₃₉)	180,0000
T(C ₂₂ N ₂₄ C ₂₅ C ₂₆)	269,21344		

Moleküllerin en kararlı bulunabileceği kritik açılar tespit edildikten sonra, moleküllerin geometri optimizasyon işlemine geçilmiştir. Bu işlem Gaussian 09 için gerekli olan iş dosyaları (.gif uzantılı dosyalar) ise GaussView 3.09 programı ile hazırlanmıştır.

3.3. Bileşiklerin Geometrilerinin Optimize Edilmesi

Her bir kritik torsiyon açıları belirlenip, bu açılar kullanılarak geometri optimizasyonu işlemine geçilmiştir. Molekül optimizasyonu Gaussian 09 [11] kuantum kimyasal hesaplama program paketi kullanılarak yapılmıştır. Gaussian 09 için gerekli olan iş dosyaları (.gjf uzantılı dosyalar) ise GaussView 3.09[48] programı ile yapılmıştır. İncelenen moleküller HF/631G(d,p) ve DFT/B3LYP/631G(d,p) ile optimize edilmiştir. Konformer analizi öncesi ve sonrası yapıların optimizasyonu sonrası enerjilerinde çok büyük bir değişim gözlenmemiştir. Moleküllerin torsiyon açıları değişmiş bu durum yapıda olabilecek molekül içi hidrojen bağlarının araştırılmasını etkileyecektir.

Tablo 3.1. BAFH, FD ve AHD Moleküllerinin Torsiyon Açısı Taraması Öncesi Enerji ve Dipol Momentleri

Moleküller	Dipol moment (Debye)		Enerji (kcal/mol)	
	DFT	HF	DFT	HF
(BAFH)	1,7148	2,0275	-384094,37047	-381619,22271
(FD)	6,6142	6,5433	-742823,58058	-738458,41066
(AHD)	4,3775	5,8126	-1055800,96163	-1049339,68739

Tablo 3.2. BAFH, FD ve AHD Moleküllerinin Torsiyon Açısı Taraması Sonrası Enerji ve Dipol Momentleri

Moleküller	Dipol moment (Debye)		Enerji (kcal/mol)	
	DFT	HF	DFT	HF
(BAFH)	1,7150	2,0430	-384470,87057	-381619,39136
(FD)	6,5446	6,5455	-738458,41067	-738458,41066
(AHD)	7,3425	8,2140	-1055803,84936	-1049344,48002

Hesaplanan bileşiklere ait bağ uzunlukları ve bağ açıları sırasıyla Tablo 3.3., Tablo 3.4., Tablo 3.5., Tablo 3.6., Tablo 3.7., ve Tablo 3.8'.da verilmiştir.

Tablo 3.3. BAFH Bileşigi İçin Bağ Uzunlukları

Bağ Oluşturan Atomlar	Bağ Uzunluğu (Å)	Kaynak	DFT/ 6-31G(d,p)	HF / 6-31G(d,p)
C ₂ C ₁	1,3920000	[45]	1,40778	1,39452
C ₃ C ₂	1,3880000	[45]	1,38999	1,38016
C ₄ C ₃	1,3880000	[45]	1,39938	1,38928
C ₅ C ₄	1,3880000	[45]	1,39501	1,38241
C ₆ C ₅	1,3880000	[45]	1,39387	1,38641
C ₇ C ₁	1,4660000	[45]	1,46136	1,47516
N ₈ C ₇	1,2770000	[45]	1,28903	1,25583
N ₉ N ₈	1,3790000	[46]	1,34192	1,34933
C ₁₀ N ₉	1,4020000	[47]	1,39388	1,39383
C ₁₁ C ₁₀	1,4000000	[47]	1,40430	1,39259
C ₁₂ C ₁₁	1,3940000	[47]	1,39223	1,38220
C ₁₃ C ₁₂	1,3960000	[47]	1,39600	1,38508
C ₁₄ C ₁₃	1,3960000	[47]	1,39700	1,38503
C ₁₅ C ₁₀	1,4000000	[47]	1,40368	1,39110
H ₁₆ C ₂	0,9500000	[46]	1,08457	1,07370
H ₁₇ C ₃	0,9500000	[46]	1,08634	1,07577
H ₁₈ C ₄	0,9500000	[46]	1,08593	1,07565
H ₁₉ C ₅	0,9500000	[46]	1,08617	1,07564
H ₂₀ C ₆	0,9500000	[46]	1,08739	1,07690
H ₂₁ C ₇	0,9500000	[46]	1,09909	1,08592
H ₂₂ N ₉	1,0010000	[47]	1,01690	0,99759
H ₂₃ C ₁₁	1,0820000	[47]	1,08768	1,07717
H ₂₄ C ₁₂	1,0830000	[47]	1,08625	1,07612
H ₂₅ C ₁₃	1,0800000	[47]	1,08524	1,07498
H ₂₆ C ₁₄	1,0830000	[47]	1,08646	1,07627
H ₂₇ C ₁₅	1,0820000	[47]	1,08267	1,07172

Tablo 3.4. BAFH Bileşigi İçin Bağ Açılıarı

Bağ Açısını Oluşturan Atomlar	Bağ Açısı (Derece)	Kaynak	DFT/ 6-31G(d,p)	HF / 6-31G(d,p)
C ₃ C ₂ C ₁	120,6500000	[45]	120,39602	120,24409
C ₄ C ₃ C ₂	120,0400000	[45]	120,50299	120,41033
C ₅ C ₄ C ₃	119,8700000	[45]	119,57880	119,69858
C ₆ C ₅ C ₄	120,0400000	[45]	120,08765	119,94982
C ₇ C ₁ C ₆	122,0100000	[45]	119,17978	119,02872
N ₈ C ₇ C ₁	121,1000000	[45]	122,37228	122,47671
N ₉ N ₈ C ₇	115,5000000	[46]	118,33333	118,60152
C ₁₀ N ₉ N ₈	121,6345400	[48]	122,35397	119,74610
C ₁₁ C ₁₀ N ₉	120,7200000	[47]	118,63434	118,42890
C ₁₂ C ₁₁ C ₁₀	120,8350000	[47]	120,10440	120,29664
C ₁₃ C ₁₂ C ₁₁	120,1010000	[47]	120,60005	120,68124
C ₁₄ C ₁₃ C ₁₂	119,5670000	[47]	119,03383	118,76911
C ₁₅ C ₁₀ C ₁₁	118,5610000	[47]	119,56625	119,31354
H ₁₆ C ₂ C ₁	119,8000000	[46]	118,88190	119,27203
H ₁₇ C ₃ C ₂	119,7000000	[46]	119,60239	119,68241
H ₁₈ C ₄ C ₃	120,2000000	[46]	120,19286	120,10793
H ₁₉ C ₅ C ₄	120,0000000	[46]	120,15953	120,21815
H ₂₀ C ₆ C ₅	119,5000000	[46]	119,83392	119,55210
H ₂₁ C ₇ C ₁	120,0000000	[46]	116,74578	116,36819
H ₂₂ N ₉ C ₁₀	117,4090000	[47]	118,27952	116,34818
H ₂₃ C ₁₁ C ₁₂	119,5140000	[47]	120,13222	119,88540
H ₂₄ C ₁₂ C ₁₃	120,2030000	[47]	120,18668	120,10890
H ₂₅ C ₁₃ C ₁₄	120,2160000	[47]	120,50994	120,63214
H ₂₆ C ₁₄ C ₁₅	119,6960000	[47]	118,94303	118,86809
H ₂₇ C ₁₅ C ₁₀	119,6520000	[47]	119,19105	119,69608

Tablo 3.5. FD Bileşigi İçin Bağ Uzunlukları

Bağı Oluşturan Atomlar	Bağ Uzunluğu (Å)	Kaynak	DFT/ 6-31G(d,p)	HF / 6-31G(d,p)
O ₂ C ₁	1,4250000	[49]	1,4225	1,40258
C ₃ O ₂	1,3620000	[49]	1,3573	1,33963
C ₄ C ₃	1,3870000	[49]	1,4016	1,39770
C ₅ C ₄	1,3770000	[49]	1,3925	1,37051
C ₆ C ₅	1,3970000	[49]	1,4006	1,40010
C ₇ C ₆	1,3970000	[49]	1,4098	1,38469
C ₈ C ₇	1,3770000	[49]	1,3817	1,38640
C ₉ C ₆	1,4620000	[49]	1,4835	1,48469
O ₁₀ C ₉	1,2150000	[49]	1,2322	1,20046
C ₁₁ C ₉	1,5010000	[49]	1,4942	1,49669
C ₁₂ C ₁₁	1,4350000	[49]	1,4596	1,45830
O ₁₃ C ₁₂	1,2100000	[49]	1,2164	1,18565
C ₁₄ C ₁₂	1,5280000	[49]	1,5423	1,53336
O ₁₅ C ₁₄	1,1900000	[49]	1,1938	1,16863
O ₁₆ C ₁₄	1,3840000	[49]	1,3871	1,35520
C ₁₇ O ₁₆	1,4140000	[49]	1,3923	1,36839
C ₁₈ C ₁₇	1,4360000	[49]	1,4499	1,46003
C ₁₉ C ₁₈	1,3950000	[49]	1,4096	1,40483
C ₂₀ C ₁₉	1,3720000	[49]	1,389	1,36985
C ₂₁ C ₂₀	1,3920000	[49]	1,4035	1,39716
C ₂₂ C ₂₁	1,3920000	[49]	1,4072	1,38900
C ₂₃ C ₂₂	1,3720000	[49]	1,3798	1,38353
O ₂₄ C ₂₁	1,3550000	[49]	1,3523	1,33571
C ₂₅ O ₂₄	1,4350000	[49]	1,4252	1,40464
H ₂₆ C ₁	0,9600000	[49]	1,0968	1,08488
H ₂₇ C ₁	0,9600000	[49]	1,0965	1,07967
H ₂₈ C ₁	0,9600000	[49]	1,0905	1,08512
H ₂₉ C ₄	0,9300000	[49]	1,0828	1,07389
H ₃₀ C ₅	0,9300000	[49]	1,0836	1,07346
H ₃₁ C ₇	0,9300000	[49]	1,0844	1,07357

Tablo 3.5. (Devamı) FD Bileşiği İçin Bağ Uzunlukları

Bağı Oluşturan Atomlar	Bağ Uzunluğu (Å)	Kaynak	DFT/ 6-31G(d,p)	HF / 6-31G(d,p)
H ₃₂ C ₈	0,9300000	[49]	1,0848	1,0739
H ₃₃ C ₁₉	0,9300000	[49]	1,0823	1,0702
H ₃₄ C ₂₀	0,9300000	[49]	1,083	1,0720
H ₃₅ C ₂₂	0,9300000	[49]	1,0845	1,0736
H ₃₆ C ₂₃	0,9300000	[49]	1,0828	1,0725
H ₃₇ C ₂₅	0,9600000	[49]	1,0961	1,0846
H ₃₈ C ₂₅	0,9600000	[49]	1,0901	1,0794
H ₃₉ C ₂₅	0,9600000	[49]	1,0961	1,0846

Tablo 3.6. FD Bileşiği İçin Bağ Açılı

Bağ Açısını Oluşturan Atomlar	Bağ Açısı (Derece)	Kaynak	DFT/ 6-31G(d,p)	HF / 6-31G(d,p)
C ₃ O ₂ C ₁	117,4000000	[49]	118,6154	120,1654
C ₄ C ₃ O ₂	115,8000000	[49]	124,5705	124,4701
C ₅ C ₄ C ₃	120,3000000	[49]	119,5255	119,386
C ₆ C ₅ C ₄	121,3000000	[49]	121,292	121,4421
C ₇ C ₆ C ₅	117,1000000	[49]	118,3716	118,357
C ₈ C ₇ C ₆	121,3000000	[49]	121,0165	120,9662
C ₉ C ₆ C ₇	122,6000000	[49]	118,0544	118,2838
O ₁₀ C ₉ C ₆	122,4000000	[49]	120,2505	120,6544
C ₁₁ C ₉ C ₆	119,6000000	[49]	119,0692	118,9111
C ₁₂ C ₁₁ C ₉	121,6000000	[49]	123,5726	123,5914
O ₁₃ C ₁₂ C ₁₁	132,6000000	[49]	132,1694	132,2695
C ₁₄ C ₁₂ C ₁₁	104,8000000	[49]	104,8972	104,1786
O ₁₅ C ₁₄ C ₁₂	130,7000000	[49]	130,9797	130,3141
O ₁₆ C ₁₄ C ₁₂	107,1000000	[49]	106,2991	106,0498
C ₁₇ O ₁₆ C ₁₄	107,4000000	[49]	109,2756	110,2367
C ₁₈ C ₁₇ C ₁₁	134,0000000	[49]	135,2611	134,8826
C ₁₉ C ₁₈ C ₁₇	121,8000000	[49]	123,0431	122,9313
C ₂₀ C ₁₉ C ₁₈	121,1000000	[49]	120,9772	121,0299
C ₂₁ C ₂₀ C ₁₉	120,4000000	[49]	120,0583	119,8843

Tablo 3.6. (Devamı) FD Bileşiği İçin Bağ Açılıarı

Bağ Açısını Oluşturan Atomlar	Bağ Açısı (Derece)	Kaynak	DFT/ 6-31G(d,p)	HF / 6-31G(d,p)
C ₂₂ C ₂₁ C ₂₀	119,7000000	[49]	119,6265	119,6886
C ₂₃ C ₂₂ C ₂₁	120,4000000	[49]	120,1683	120,1060
O ₂₄ C ₂₁ C ₂₀	115,4000000	[49]	124,7317	124,5558
C ₂₅ O ₂₄ C ₂₁	117,5000000	[49]	118,848	120,3176
H ₂₆ C ₁ O ₂	109,0000000	[49]	111,5313	111,3548
H ₂₇ C ₁ O ₂	109,0000000	[49]	111,4632	111,3245
H ₂₈ C ₁ O ₂	109,0000000	[49]	105,8767	106,1304
H ₂₉ C ₄ C ₃	120,0000000	[49]	121,0708	121,3525
H ₃₀ C ₅ C ₄	119,0000000	[49]	118,521	118,1334
H ₃₁ C ₇ C ₆	119,0000000	[49]	118,2845	118,8131
H ₃₂ C ₈ C ₇	120,0000000	[49]	121,5978	121,5093
H ₃₃ C ₁₉ C ₁₈	119,0000000	[49]	119,2636	119,981
H ₃₄ C ₂₀ C ₁₉	120,0000000	[49]	118,9802	118,8462
H ₃₅ C ₂₂ C ₂₁	120,0000000	[49]	118,5364	118,6298
H ₃₆ C ₂₃ C ₂₂	119,0000000	[49]	119,5417	119,2267
H ₃₇ C ₂₅ O ₂₄	109,0000000	[49]	111,3783	111,2616
H ₃₈ C ₂₅ O ₂₄	109,0000000	[49]	105,7725	106,0428
H ₃₉ C ₂₅ O ₂₄	109,0000000	[49]	111,3715	111,2623

Tablo 3.7. AHD Bileşiği İçin Bağ Uzunlukları

Bağı Oluşturan Atomlar	Bağ Uzunluğu (Å)	Kaynak	DFT/ 6-31G(d,p)	HF / 6-31G(d,p)
O ₂ C ₁	1,4250000	[49]	1,4211	1,4012
C ₃ O ₂	1,3620000	[49]	1,3591	1,3416
C ₄ C ₃	1,3870000	[49]	1,4011	1,3865
C ₅ C ₄	1,3770000	[49]	1,3945	1,388
C ₆ C ₅	1,3970000	[49]	1,4000	1,3843
C ₇ C ₆	1,3970000	[49]	1,4088	1,3995
C ₈ C ₇	1,3770000	[49]	1,3822	1,3712
C ₉ C ₆	1,4620000	[49]	1,4893	1,491
O ₁₀ C ₉	1,2150000	[49]	1,2204	1,1936
C ₁₁ C ₉	1,5010000	[49]	1,543	1,5343

Tablo 3.7. (Devamı) AHD Bileşiği İçin Bağ Uzunlukları

Bağı Oluşturan Atomlar	Bağ Uzunluğu (Å)	Kaynak	DFT/ 6-31G(d,p)	HF / 6-31G(d,p)
C ₁₂ C ₁₁	1,5010000	[49]	1,5452	1,5352
O ₁₃ C ₁₂	1,2150000	[49]	1,2200	1,1939
C ₁₄ C ₁₂	1,4620000	[49]	1,4881	1,4899
C ₁₅ C ₁₄	1,3970000	[49]	1,4016	1,3876
C ₁₆ C ₁₅	1,3770000	[49]	1,3906	1,3837
C ₁₇ C ₁₆	1,3870000	[49]	1,403	1,3893
C ₁₈ C ₁₇	1,3870000	[49]	1,4039	1,3933
C ₁₉ C ₁₈	1,3770000	[49]	1,3861	1,3754
O ₂₀ C ₁₇	1,3620000	[49]	1,36	1,3424
C ₂₁ O ₂₀	1,4250000	[49]	1,4213	1,4016
C ₂₂ C ₁₁	1,5210100	[48]	1,5323	1,5275
O ₂₃ C ₂₂	1,2300000	[50]	1,2144	1,1899
N ₂₄ C ₂₂	1,3623000	[47]	1,4104	1,3887
C ₂₅ N ₂₄	1,4020000	[47]	1,4442	1,4405
C ₂₆ C ₂₅	1,4000000	[47]	1,3961	1,3856
C ₂₇ C ₂₆	1,3940000	[47]	1,3948	1,3839
C ₂₈ C ₂₇	1,3960000	[47]	1,3950	1,3852
C ₂₉ C ₂₈	1,3960000	[47]	1,3963	1,3845
C ₃₀ C ₂₉	1,3880000	[45]	1,3932	1,3844
N ₃₁ N ₂₄	1,3790000	[46]	1,387	1,3867
C ₃₂ N ₃₁	1,2770000	[45]	1,2877	1,2579
C ₃₃ C ₃₂	1,4660000	[45]	1,4760	1,4853
C ₃₄ C ₃₃	1,3920000	[45]	1,4061	1,3907
C ₃₅ C ₃₄	1,3880000	[45]	1,3922	1,3835
C ₃₆ C ₃₅	1,3880000	[45]	1,3964	1,3851
C ₃₇ C ₃₆	1,3880000	[45]	1,3962	1,3856
C ₃₈ C ₃₇	1,3880000	[45]	1,3929	1,3833
H ₃₉ C ₁	0,9600000	[49]	1,0905	1,0798
H ₄₀ C ₁	0,9600000	[49]	1,0969	1,0852
H ₄₁ C ₁	0,9600000	[49]	1,097	1,0854
H ₄₂ C ₄	0,9300000	[49]	1,0832	1,0723
H ₄₃ C ₅	0,9300000	[49]	1,0852	1,0747
H ₄₄ C ₇	0,9300000	[49]	1,0845	1,0733

Tablo 3.7. (Devamı) AHD Bileşiği İçin Bağ Uzunlukları

Bağı Oluşturan Atomlar	Bağ Uzunluğu (Å)	Kaynak	DFT/ 6-31G(d,p)	HF / 6-31G(d,p)
H ₄₅ C ₈	0,9300000	[45]	1,0849	1,074
H ₄₆ C ₁₁	0,9500000	[56]	1,0922	1,0805
H ₄₇ C ₁₅	0,9300000	[49]	1,0847	1,0734
H ₄₈ C ₁₆	0,9300000	[49]	1,0834	1,0724
H ₄₉ C ₁₈	0,9300000	[49]	1,0847	1,0739
H ₅₀ C ₁₉	0,9300000	[49]	1,085	1,0745
H ₅₁ C ₂₁	0,9600000	[49]	1,0906	1,0799
H ₅₂ C ₂₁	0,9600000	[49]	1,097	1,0853
H ₅₃ C ₂₁	0,9600000	[49]	1,0968	1,0851
H ₅₄ C ₂₆	1,0820000	[47]	1,0834	1,0742
H ₅₅ C ₂₇	1,0830000	[47]	1,0859	1,0755
H ₅₆ C ₂₈	1,0800000	[47]	1,0858	1,0756
H ₅₇ C ₂₉	1,0800000	[47]	1,0859	1,0755
H ₅₈ C ₃₀	1,0800000	[47]	1,0843	1,0733
H ₅₉ C ₃₂	0,9500000	[46]	1,0917	1,0796
H ₆₀ C ₃₄	0,9500000	[46]	1,087	1,0765
H ₆₁ C ₃₅	0,9500000	[46]	1,0859	1,0753
H ₆₂ C ₃₆	0,9500000	[46]	1,086	1,0756
H ₆₃ C ₃₇	0,9500000	[46]	1,0859	1,0754
H ₆₄ C ₃₈	0,9500000	[46]	1,0829	1,0737

Tablo 3.8. AHD Bileşiği İçin Bağ Açıları

Bağ Açısını Oluşturan Atomlar	Bağ Açısı (Derece)	Kaynak	DFT/ 6-31G(d,p)	HF / 6-31G(d,p)
C ₃ O ₂ C ₁	117,4000000	[49]	118,5853	120,1188
C ₄ C ₃ O ₂	115,8000000	[49]	124,6067	124,504
C ₅ C ₄ C ₃	120,3000000	[49]	119,4693	119,4048
C ₆ C ₅ C ₄	121,3000000	[49]	121,3589	121,5369
C ₇ C ₆ C ₅	117,1000000	[49]	118,2977	118,1784
C ₈ C ₇ C ₆	121,3000000	[49]	121,0637	121,0686

Tablo 3.8. (Devamı) AHD Bileşiği İçin Bağ Açıları

Bağ Açısını Oluşturan Atomlar	Bağ Açısı (Derece)	Kaynak	DFT/ 6-31G(d,p)	HF / 6-31G(d,p)
C ₉ C ₆ C ₇	122,6000000	[49]	117,9129	117,9855
O ₁₀ C ₉ C ₆	122,4000000	[49]	121,3737	121,18
C ₁₁ C ₉ C ₆	119,6000000	[49]	118,8083	119,2856
C ₁₂ C ₁₁ C ₉	123,9564000	[48]	110,4339	110,1609
O ₁₃ C ₁₂ C ₁₁	121,6000700	[48]	119,716	119,3506
C ₁₄ C ₁₂ C ₁₁	119,6000000	[49]	118,6247	119,1493
C ₁₅ C ₁₄ C ₁₂	122,6000000	[51]	117,857	117,9393
C ₁₆ C ₁₅ C ₁₄	121,3000000	[51]	121,5423	121,6072
C ₁₇ O ₁₆ C ₁₅	120,3000000	[51]	119,4177	119,4057
C ₁₈ C ₁₇ C ₁₆	120,8159000	[51]	119,7575	119,7261
C ₁₉ C ₁₈ C ₁₇	120,3000000	[51]	120,0865	120,0649
O ₂₀ C ₁₇ C ₁₈	115,8000000	[51]	115,6359	115,7873
C ₂₁ O ₂₀ C ₁₇	117,4000000	[51]	118,487	120,0516
C ₂₂ C ₁₁ C ₁₂	123,9564000	[48]	110,4339	108,629
O ₂₃ C ₂₂ C ₁₁	121,1000000	[45]	122,4594	121,4001
N ₂₄ C ₂₂ C ₁₁	113,6000000	[48]	116,0255	116,7431
C ₂₅ N ₂₄ C ₂₂	117,5000000	[49]	117,4342	116,7508
C ₂₆ C ₂₅ N ₂₄	120,7200000	[47]	120,241	119,5483
C ₂₇ C ₂₆ C ₂₅	120,8350000	[47]	119,6048	119,6652
C ₂₈ C ₂₇ C ₂₆	120,1010000	[47]	120,34	120,242
C ₂₉ C ₂₈ C ₂₇	119,5670000	[47]	119,7192	119,7555
C ₃₀ C ₂₉ C ₂₈	120,0400000	[45]	120,3326	120,2385
N ₃₁ N ₂₄ C ₂₅	121,6345400	[48]	122,6451	120,0613
C ₃₂ N ₃₁ N ₂₄	115,5000000	[46]	123,3614	122,1024
C ₃₃ C ₃₂ N ₃₁	121,1000000	[45]	134,7732	132,9876
C ₃₄ C ₃₃ C ₃₂	122,0100000	[45]	117,6668	118,3549
C ₃₅ C ₃₄ C ₃₃	120,6500000	[45]	120,906	120,5916
C ₃₆ C ₃₅ C ₃₄	120,0400000	[45]	119,9003	119,8713
C ₃₇ C ₃₆ C ₃₅	119,8700000	[45]	119,7624	119,8958
C ₃₈ C ₃₇ C ₃₆	120,0400000	[45]	120,3948	120,2085
H ₃₉ C ₁ O ₂	109,0000000	[49]	105,9313	106,1823
H ₄₀ C ₁ O ₂	109,0000000	[49]	111,5444	111,3811
H ₄₁ C ₁ O ₂	109,0000000	[49]	111,5609	111,4043
H ₄₂ C ₄ C ₃	120,0000000	[49]	121,0331	121,327
H ₄₃ C ₅ C ₄	119,0000000	[49]	118,1637	117,6358

Tablo 3.8. (Devamı) AHD Bileşiği İçin Bağ Açıları

Bağ Açısını Oluşturan Atomlar	Bağ Açısı (Derece)	Kaynak	DFT/ 6-31G(d,p)	HF / 6-31G(d,p)
H ₄₄ C ₇ C ₆	119,0000000	[49]	118,0484	118,5915
H ₄₅ C ₈ C ₇	120,0000000	[49]	121,5725	121,4428
H ₄₆ C ₁₁ C ₁₂	123,9564000	[49]	108,5028	108,8963
H ₄₇ C ₁₅ C ₁₄	119,0000000	[49]	117,9576	118,5426
H ₄₈ C ₁₆ C ₁₅	120,0000000	[49]	119,5672	119,3292
H ₄₉ C ₁₈ C ₁₇	120,0000000	[49]	118,4893	118,6121
H ₅₀ C ₁₉ C ₁₈	119,0000000	[49]	118,3936	118,0115
H ₅₁ C ₂₁ O ₂₀	109,0000000	[49]	105,9156	106,1644
H ₅₂ C ₂₁ O ₂₀	109,0000000	[49]	111,5779	111,4196
H ₅₃ C ₂₁ O ₂₀	109,0000000	[49]	111,5567	111,3939
H ₅₄ C ₂₆ C ₂₅	119,6520000	[47]	119,6704	119,7012
H ₅₅ C ₂₇ C ₂₆	119,6960000	[47]	119,4792	119,5843
H ₅₆ C ₂₈ C ₂₇	120,2160000	[47]	120,1615	120,1177
H ₅₇ C ₂₉ C ₂₈	120,2030000	[47]	120,1598	120,1536
H ₅₈ C ₃₀ C ₂₉	119,5140000	[47]	120,7548	120,5979
H ₅₉ C ₃₂ N ₃₁	119,8000000	[46]	111,3373	112,5539
H ₆₀ C ₃₄ C ₃₃	119,7000000	[46]	119,197	119,6504
H ₆₁ C ₃₅ C ₃₄	120,2000000	[46]	119,8867	119,9156
H ₆₂ C ₃₆ C ₃₅	120,0000000	[46]	120,1341	120,0642
H ₆₃ C ₃₇ C ₃₆	119,5000000	[46]	120,0285	120,0505
H ₆₄ C ₃₈ C ₃₇	119,5000000	[46]	119,7739	119,9596

3.4. H - Bağı ve NBO Analiz Verileri

Tablo 3.9.- 3.14.' de sırayla BAFH, FD, AHD moleküllerinde olası H bağları için bağ uzunlukları, bağ açıları ve bileşiklerin NBO analizi verileri bulunmaktadır.

Tablo 3.9. BAFH A-H...B açıları

Bağ	Bağ Açısı	Bağ	Bağ Uzunluğu
C ₂ -H ₁₆N ₈	66.43414	H ₁₆N ₈	3.95798
C ₁₅ -H ₂₇N ₉	65.94166	H ₂₇ ...N ₉	2.67697
C ₇ - H ₂₁ N ₈	119.40061	H ₂₁ C ₇	1.09914
H ₂₂ - N ₉ N ₈	120.93982	H ₂₂N ₉	1.01687

Tablo 3.10. BAFH Bileşiđi için NBO

Verici NBO (i) Elektron	Alıcı NBO (J) Elektron	¹ E(2) ^a (kcal/mol)	² E(i)-E(j) ^b a.u.	³ F(i,j) ^c a.u
LP (1) N ₈	BD*(1) C ₇ -H ₂₁	10,36	0,80	0,083
LP (1) N ₈	BD*(1) C ₇ -C ₁	2,00	0,87	0,038
LP (1) N ₈	BD*(1) H ₂₂ -N ₉	9,53	0,80	0,079
LP (1) N ₈	BD*(1) C ₁₅ -H ₂₇	0,56	0,87	0,020
LP (1) N ₉	BD*(2) N ₈ -C ₇	35,57	0,28	0,090
LP (1) N ₉	BD*(2) C ₁₀ -C ₁₁	35,93	0,30	0,094

1 E(2) Hiperkonjugatif etkileşimler

2 Alıcı verici NBO orbitalleri arası enerji farkı

3 F(i,j) Alıcı verici NBO orbitalleri arası Fock matris enerjisi

BAFH bileşiđinde NBO analizi sonucunda elektronegatif atomda (N) bulunan eşleşmemiş elektron çiftleri C-H anti bağlarına aktarılmıştır. Bu enerjilerin büyüklüğü H bađı kuvveti hakkında bilgi verir. Bu da H bağlarının oluştuđuna işaret edebilir.

Jeffrey' in sınıflandırmasına göre r(H...B) arasındaki mesafe 1,2 -1,5 Å Güçlü kovalent veya iyonik, 1,5-2,2 Å baskın elektrostatik etkileşim, ≥2.2 Å ise zayıf elektrostatik etkileşimler olarak sınıflandırmıştır [32]. Buna göre, bu BAFH bileşiđi yapıyı bir arada tutan etkileşimi H-bađı etkileşimi olarak kabul edersek, sınıf olarak da zayıf hidrojen bađı olduğunu söyleyebiliriz.

BAFH Bileşiđi için molekül içi hidrojen bađı olabileceđi öncelikle bađ uzunlukları ve bađ açıları yardımıyla öngörölmüş sonra NBO analizi ile yapıda molekül içi hidrojen bađı olduđu kanısına varılmıştır.

Tablo 3.11. FD A-H...B açıları

Bađ	Bađ Açısı	Bađ	Bađ Uzunluđu
C ₄ -H ₂₉ ...O ₂	62,64533	H ₂₉ ...O ₂	2,70979
C ₅ -H ₈ ...O ₁₃	98,67240	H ₈ ...O ₁₃	2,90145
C ₇ -H ₃₁ ...O ₁₀	95,22773	H ₃₁ ...O ₁₀	2,46919
C ₅ -H ₃₀ ...O ₁₀	63,67853	H ₃₀ ...O ₁₀	3,93153

Tablo 3.11. (Devamı) FD A-H...B açılırları

Bağ	Bağ Açısı	Bağ	Bağ Uzunluğu
C5-H ₃₀ ... O ₁₃	98,67240	H ₃₀ ... O ₁₃	2,90145
C ₈ -H ₃₂ ...O ₂	67,54033	H ₃₂ ...O ₂	2,50448
C ₁₉ -H ₃₃ ... O ₁₆	61,76487	H ₃₃ ... O ₁₆	4,01681
C ₁₉ -H ₃₃ ... O ₁₀	141,88545	H ₃₃ ... O ₁₀	2,13286
C ₂₀ -H ₃₄ ...O ₂₄	62,62074	H ₃₄ ...O ₂₄	2,70928
C ₂₂ -H ₃₅ ...O ₂₄	67,34240	H ₃₅ ...O ₂₄	2,50555
C ₁ - H ₂₈ O ₂	38.64625	H ₂₈ O ₂	2.08541
C ₁ - H ₂₇ O ₂	38.60525	H ₂₇ O ₂	2.08622
C ₁ - H ₂₆ O ₂	44.69106	H ₂₆ O ₂	1.95566
C ₂₅ - H ₃₇ O ₂₄	38.64984	H ₃₇ O ₂₄	2.08583
C ₂₅ - H ₃₈ O ₂₄	38.64065	H ₃₈ O ₂₄	2.08602
C ₂₅ - H ₃₉ O ₂₄	102.13438	H ₃₉ O ₂₄	1.95542

Tablo. 3.12. FD Bileşiği için NBO

Verici NBO (i) Elektron	Alıcı NBO (J) Elektron	¹ E(2) ^a (kcal/mol)	² E(i)-E(j) ^b a.u.	³ F(i,j) ^c a.u
LP (1) O ₂	BD*(1) C ₄ - C ₃	7,56	1,10	0,082
LP (1) O ₂	BD*(1) C ₈ - C ₃	0,70	1,10	0,025
LP (1) O ₂	BD*(1) C ₁ - H ₂₈	1,83	1,00	0,038
LP (1) O ₂	BD*(1) C ₁ - H ₂₇	1,23	0,98	0,031
LP (1) O ₂	BD*(1) C ₁ - H ₂₆	1,22	0,98	0,031
LP (2) O ₂	BD*(1) C ₁ - H ₂₇	5,20	0,74	0,058
LP (2) O ₂	BD*(1) C ₁ - H ₂₆	5,30	0,74	0,058
LP (1) O ₁₀	BD*(1) C ₆ - C ₉	1,53	1,15	0,038
LP (1) O ₁₀	BD*(1) C ₉ - C ₁₁	2,04	1,12	0,043
LP (1) O ₁₀	BD*(1) C ₁₉ - H ₃₃	3,19	1,20	0,055
LP (2) O ₁₀	BD*(1) C ₆ - C ₉	17,96	0,72	0,103
LP (2) O ₁₀	BD*(1) C ₉ - C ₁₁	19,06	0,69	0,104
LP (2) O ₁₀	BD*(1) C ₁₉ - H ₃₃	2,23	0,77	0,038
LP (1) O ₁₅	BD*(1) C ₁₄ - O ₁₆	1,26	1,01	0,033
LP (1) O ₁₅	BD*(1) C ₁₄ - C ₁₂	3,02	1,04	0,051
LP (2) O ₁₅	BD*(1) C ₁₄ - O ₁₆	39,42	0,59	0,138
LP (2) O ₁₅	BD*(1) C ₁₄ - C ₁₂	21,75	0,61	0,104
LP (1) O ₂₄	BD*(1) C ₂₀ - C ₂₁	7,71	1,10	0,082
LP (1) O ₂₄	BD*(1) C ₂₂ - C ₂₁	0,73	1,10	0,025
LP (1) O ₂₄	BD*(1) C ₂₅ - H ₃₇	1,21	0,98	0,031
LP (1) O ₂₄	BD*(1) C ₂₅ - H ₃₈	1,81	1,01	0,038
LP (1) O ₂₄	BD*(1) C ₂₅ - H ₃₉	1,16	0,98	0,030

Tablo. 3.12. (Devamı) FD Bileşiği için NBO

Verici NBO (i) Elektron	Alıcı NBO (J) Elektron	¹ E(2) ^a (kcal/mol)	² E(i)-E(j) ^b a.u.	³ F(i,j) ^c a.u
LP (2) O ₂₄	BD*(2) C ₂₀ – C ₂₁	34,35	0,34	0,101
LP (2) O ₂₄	BD*(1) C ₂₅ – H ₃₇	5,04	0,75	0,057
LP (2) O ₂₄	BD*(1) C ₂₅ – H ₃₉	5,10	0,75	0,058
LP (1) O ₁₆	BD*(1) C ₁₁ – C ₁₇	3,91	1,18	0,061
LP (1) O ₁₆	BD*(1) C ₁₄ – O ₁₅	0,88	1,23	0,030
LP (1) O ₁₆	BD*(1) C ₁₄ – C ₁₂	3,54	0,94	0,053
LP (1) O ₁₆	BD*(1) C ₂₃ – H ₃₆	0,59	1,09	0,023
LP (2) O ₁₆	BD*(1) C ₁₁ – C ₁₇	29,42	0,36	0,092
LP (2) O ₁₆	BD*(1) C ₁₄ – O ₁₅	35,90	0,35	0,102
LP (1) O ₁₃	BD*(1) C ₁₄ – C ₁₂	1,80	1,02	0,039
LP (1) O ₁₃	BD*(1) C ₁₁ – C ₁₂	3,15	1,15	0,054
LP (2) O ₁₃	BD*(1) C ₁₁ – C ₁₂	19,84	0,72	0,109
LP (2) O ₁₃	BD*(1) C ₁₄ – O ₁₆	0,87	0,57	0,020
LP (2) O ₁₃	BD*(1) C ₁₄ – C ₁₂	27,70	0,60	0,115

1 E(2) Hiperkonjugatif etkileşimler

2 Alıcı verici NBO orbitalleri arası enerji farkı

3 F(i,j) Alıcı verici NBO orbitalleri arası Fock matriks enerjisi

FD bileşiğinde NBO analizi sonucunda elektronegatif atomda (O) bulunan eşleşmemiş elektron çiftleri C-H anti bağlarına aktarılmıştır. Bu enerjilerin büyüklüğü H bağı kuvveti hakkında bilgi verir. Bu da H bağlarının oluştuğuna işaret edebilir.

Bu bileşik için molekül içi hidrojen bağı olabileceği öncelikle bağ uzunlukları ve bağ açıları yardımıyla öngörülmüş sonra NBO analizi ile yapıda molekül içi hidrojen bağı olduğu kanısına varılmıştır.

Jeffrey H bağı sınıflandırılması baz alınarak kritik bu atomlar için NBO analizi yapılmıştır. Jeffrey tarafından öngörülen H bağı sınıflandırması NBO ile doğrulanmaya çalışılmıştır.

Jeffrey' in sınıflandırmasına göre, FD bileşiği yapıyı bir arada tutan etkileşimi H-bağı etkileşimi olarak kabul edersek, sınıf olarak da zayıf hidrojen bağı olduğunu söyleyebiliriz.

Tablo 3.13. AHD A-H...B açıları.

Bağ	Bağ Açısı	Bağ	Bağ Uzunluğu
C ₁₈ -H ₄₉ ...O ₂₀	67,71315	H ₄₉ ...O ₂₀	2,52447
C ₁₆ -H ₄₈ ...O ₂₀	62,97921	H ₄₈ ...O ₂₀	2,74022
C ₁₉ -H ₅₀ ...O ₁₃	62,96981	H ₅₀ ...O ₁₃	4,01656
C ₁₅ -H ₄₇ ...O ₁₃	97,38607	H ₄₇ ...O ₁₃	2,43543
C ₄ -H ₄₂ ...O ₂	62,95616	H ₄₂ ...O ₂	2,73808
C ₈ -H ₄₅ ...O ₂	67,75926	H ₄₅ ...O ₂	2,52435
C ₅ -H ₄₃ ...O ₁₀	63,11310	H ₄₃ ...O ₁₀	4,00593
C ₇ -H ₄₄ ...O ₁₀	97,19504	H ₄₄ ...O ₁₀	2,44008
C ₂₆ -H ₅₄ ...N ₂₀	66,89785	H ₅₄ ...N ₂₀	2,67734
C ₂₆ -H ₅₄ ...O ₂₃	91,81438	H ₅₄ ...O ₂₃	2,68825
C ₃₀ -H ₅₈ ...N ₂₄	67,21221	H ₅₈ ...N ₂₄	2,65976
C ₃₀ -H ₅₈ ...N ₃₁	92,50338	H ₅₈ ...N ₃₁	2,74408
C ₃₂ -H ₅₉ ...N ₂₄	27,08920	H ₅₉ ...N ₂₄	3,27397
C ₃₄ -H ₆₀ ...N ₃₁	73,05347	H ₆₀ ...N ₃₁	3,85744
C ₃₈ -H ₆₄ ...N ₃₁	89,84550	H ₆₄ ...N ₃₁	3,04128
C ₁₈ -H ₄₉ ...O ₂₀	67,71315	H ₄₉ ...O ₂₀	2,52447
C ₁₆ -H ₄₈ ...O ₂₀	62,97921	H ₄₈ ...O ₂₀	2,74022
C ₁₉ -H ₅₀ ...O ₁₃	62,96981	H ₅₀ ...O ₁₃	4,01656
C ₁₅ -H ₄₇ ...O ₁₃	97,38607	H ₄₇ ...O ₁₃	2,43543
C ₄ -H ₄₂ ...O ₂	62,95616	H ₄₂ ...O ₂	2,73808
C ₈ -H ₄₅ ...O ₂	67,75926	H ₄₅ ...O ₂	2,52435
C ₅ -H ₄₃ ...O ₁₀	63,11310	H ₄₃ ...O ₁₀	4,00593
C ₇ -H ₄₄ ...O ₁₀	97,19504	H ₄₄ ...O ₁₀	2,44008
C ₂₆ -H ₅₄ ...N ₂₀	66,89785	H ₅₄ ...N ₂₀	2,67734
C ₂₆ -H ₅₄ ...O ₂₃	91,81438	H ₅₄ ...O ₂₃	2,68825
C ₃₀ -H ₅₈ ...N ₂₄	67,21221	H ₅₈ ...N ₂₄	2,65976
C ₃₀ -H ₅₈ ...N ₃₁	92,50338	H ₅₈ ...N ₃₁	2,74408
C ₃₂ -H ₅₉ ...N ₂₄	27,08920	H ₅₉ ...N ₂₄	3,27397
C ₃₄ -H ₆₀ ...N ₃₁	73,05347	H ₆₀ ...N ₃₁	3,85744

Tablo 3.13. (Devamı) AHD A-H...B açıları.

Bağ	Bağ Açısı	Bağ	Bağ Uzunluğu
C ₃₈ -H ₆₄ ...N ₃₁	89.84550	H ₆₄ ...N ₃₁	3.04128
C ₁₈ -H ₄₉ ...O ₂₀	67.71315	H ₄₉ ...O ₂₀	2.52447
C ₁₆ -H ₄₈ ...O ₂₀	62.97921	H ₄₈ ...O ₂₀	2.74022

Tablo. 3.14. AHD Bileşiği için NBO

Verici NBO (i) Elektron	Alıcı NBO (j) Elektron	¹ E(2) ^a (kcal/mol)	² E(i)-E(j) ^b a.u.	³ F(i,j) ^c a.u
LP (1) O ₂₀	BD*(1) C ₂₁ - H ₅₁	1.83	1.00	0.039
LP (1) O ₂₀	BD*(1) C ₂₁ - H ₅₂	1.24	0.98	0.031
LP (1) O ₂₀	BD*(1) C ₂₁ - H ₅₃	1.23	0.98	0.031
LP (1) O ₂₀	BD*(1) C ₁₇ - C ₁₈	0.68	1.11	0.025
LP (1) O ₂₀	BD*(1) C ₁₇ - C ₁₆	7.51	1.10	0.081
LP (2) O ₂₀	BD*(1) C ₂₁ - H ₅₂	5.35	0.74	0.058
LP (2) O ₂₀	BD*(1) C ₂₁ - H ₅₃	5.32	0.74	0.058
LP (2) O ₂₀	BD*(2) C ₁₇ - C ₁₈	29.34	0.34	0.095
LP (1) O ₁₃	BD*(1) C ₁₄ - C ₁₂	2.05	1.13	0.043
LP (1) O ₁₃	BD*(1) C ₁₂ - C ₁₁	1.51	1.04	0.036
LP (2) O ₁₃	BD*(1) C ₁₄ - C ₁₂	18.93	0.71	0.105
LP (2) O ₁₃	BD*(1) C ₁₂ - C ₁₁	23.24	0.62	0.109
LP (2) O ₁₃	BD*(2) C ₂₂ - O ₂₃	2.08	0.27	0.022
LP (1) O ₂₃	BD*(1) C ₂₂ - N ₂₄	1.53	1.08	0.037
LP (1) O ₂₃	BD*(1) C ₂₂ - C ₁₁	2.30	1.04	0.044
LP (2) O ₂₃	BD*(1) C ₂₂ - N ₂₄	29.22	0.66	0.125
LP (2) O ₂₃	BD*(1) C ₂₂ - C ₁₁	21.49	0.62	0.105
LP (2) O ₂₃	BD*(1) N ₂₄ - N ₃₁	0.51	0.59	0.016
LP (2) O ₂₃	BD*(1) C ₂₆ - C ₂₇	0.65	0.29	0.013
LP (2) O ₂₃	BD*(1) C ₉ - O ₁₀	1.69	0.27	0.019
LP (1) N ₂₄	BD*(2) C ₂₂ - O ₂₃	44.15	0.30	0.105
LP (1) N ₂₄	BD*(2) N ₃₁ - C ₃₂	22.31	0.29	0.074
LP (1) N ₂₄	BD*(1) C ₂₅ - C ₂₆	2.43	0.85	0.044
LP (1) N ₂₄	BD*(1) C ₂₅ - C ₃₀	4.31	0.85	0.059
LP (1) N ₂₄	BD*(2) C ₂₅ - C ₃₀	8.77	0.31	0.047
LP (1) N ₃₁	BD*(2) C ₁₂ - O ₁₃	1.00	0.41	0.018
LP (1) N ₃₁	BD*(1) C ₂₂ - N ₂₄	0.68	0.79	0.021
LP (1) N ₃₁	BD*(1) N ₂₄ - C ₂₅	6.95	0.76	0.065
LP (1) N ₃₁	BD*(1) C ₁₈ - O ₁₉	3.16	0.83	0.047
LP (2) N ₃₁	BD*(1) C ₁₈ - N ₂₀	12.88	0.84	0.094
LP (2) N ₃₁	BD*(1) C ₉ - C ₁₁	1.28	0.76	0.028
LP (1) O ₁₀	BD*(1) C ₉ - C ₆	2.05	1.13	0.043

Tablo. 3.14. (Devamı) AHD Bileşiği için NBO

Verici NBO (i) Elektron	Alıcı NBO (J) Elektron	¹ E(2) ^a (kcal/mol)	² E(i)-E(j) ^b a.u.	³ F(i,j) ^c a.u
LP (1) O ₁₀	BD*(1) C ₉ – C ₁₁	1.51	1.05	0.036
LP (2) O ₁₀	BD*(2) C ₁₂ – O ₁₃	1.83	0.28	0.020
LP (2) O ₁₀	BD*(1) C ₉ – C ₆	19.08	0.71	0.105
LP (2) O ₁₀	BD*(1) C ₉ – C ₁₁	22.61	0.63	0.108
LP (1) O ₂	BD*(1) C ₄ – C ₃	7.55	1.10	0.082
LP (1) O ₂	BD*(1) C ₈ – C ₃	0.69	1.10	0.025
LP (1) O ₂	BD*(1) C ₁ – C ₃₉	1.84	1.00	0.039
LP (1) O ₂	BD*(1) C ₁ – H ₄₀	1.24	0.98	0.031
LP (1) O ₂	BD*(1) C ₁ – H ₄₁	1.24	0.97	0.031
LP (2) O ₂	BD*(1) C ₉ – C ₁₁	2.41	2.97	0.069
LP (2) O ₂	BD*(2) C ₄ – C ₃	32.71	0.34	0.099
LP (2) O ₂	BD*(1) C ₉ – C ₁₁	5.32	0.74	0.058
LP (2) O ₂	BD*(1) C ₉ – C ₁₁	5.36	0.74	0.059

1 E(2) Hiperkonjugatif etkileşimler

2 Alıcı verici NBO orbitalleri arası enerji farkı

3 F(i,j) Alıcı verici NBO orbitalleri arası Fock matris enerjisi

AHD bileşiğinde NBO analizi sonucunda elektronegatif atomda (N, O) bulunan eşleşmemiş elektron çiftleri C-H anti bağlarına aktarılmıştır. Bu enerjilerin büyüklüğü H bağı kuvveti hakkında bilgi verir. Bu da H bağlarının oluştuğuna işaret edebilir.

Jeffrey' in sınıflandırmasına göre, AHD bileşiği yapıyı bir arada tutan etkileşimi H-bağı etkileşimi olarak kabul edersek, sınıf olarak da zayıf hidrojen bağı olduğunu söyleyebiliriz.

AHD Bileşiği için molekül içi hidrojen bağı olabileceği öncelikle bağ uzunlukları ve bağ açıları yardımıyla öngörölmüş sonra NBO analizi ile yapıda molekül içi hidrojen bağı olduğu kanısına varılmıştır.

3.5. Bileşiklerin Normal Koordinat Analizi

Deneysel FT-IR spektra sırasıyla Şekil 3.1.'de, Şekil 3.2.'de ve Şekil 3.3.'de, RAMAN spektra sırasıyla Şekil 3.4.'de, Şekil 3.5.'de ve Şekil 3.6.'da, bileşiklerin numaralandırılmış şekilleri ise Şekil 3.7., Şekil 3.8., Şekil 3.9.'da görülmektedir. Bileşiklere ait normal koordinat analizi yapılmış, SPSIM paket programı yardımıyla hesaplanan teorik titreşim frekanslarının deneysel frekanslara olan yakınlığı tartışılmıştır.

3.5.1. BAFH Bileşiğinin Normal Koordinat Analizi

BAFH bileşiğinde 27 atom bulunmaktadır. BAFH, C_s simetri türüne uyacak şekilde hesaplanmıştır. Bileşiğin 75 (3N-6) titreşim hareket serbestliği vardır ve hepsi de hem IR hem de Raman aktif titreşimlerdir.

C_s nokta grubuna sahip BAFH bileşiğine ait karakter tablosu ve aynı tür simetrik titreşimlerin sayısının bulunması aşağıda gösterilmektedir.

Tablo 3.15. C_s nokta grubu karakter tablosu ve BAFH bileşiğinin simetri türlerinin hesaplanması

C_s	E	σ	IR	RAMAN
A'	1	1	x, y, Rz	x^2, y^2, z^2, xy
A''	1	-1	z, Rx, Ry	Yz, xz
$k_{(R)}$	1	1		
$x_{t(R)}$	3	1		
$U_{(R)}$	27	27		
Π	81	27		

$$n(A') = 1/2[81.1 + 27.1] = 54A'$$

$$n(A'') = 1/2[81.1 + 27.(-1)] = 27A''$$

Sonuç olarak $\Gamma_{3N} = 54A' + 27A'' = 81$ hareket serbestliği vardır.

Bu 3N titreşim modundan Γ dönme ve Γ ötelenme titreşim sayıları çıkarılırsa temel titreşimlerin sayısı bulunur.

$$\Gamma_{\text{dönme}} = A' + 2A'' \quad \Gamma_{\text{ötelenme}} = 2A' + A''$$

$$\Gamma_{\text{titreşim}} = \Gamma_{3N} - (\Gamma_{\text{dönme}} + \Gamma_{\text{ötelenme}}) = 54A' + 27A'' - (3A' + 3A'') = 51A' + 24A''$$

(3N-6 temel titreşim). Sonuçta 75 titreşim hem IR hem de Raman aktiftir.

Tablo 3.16. BAFH Bileşiğinin Kuvvet Sabitleri

Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No	Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No
1/1	C ₁ -C ₂	K01	29/29	C ₁ -C ₂ -C ₃	H19
2/2	C ₁ -C ₆	K01	30/30	C ₁ -C ₂ -H ₁₆	H20
3/3	C ₁ -C ₇	K02	31/31	C ₁ -C ₆ -C ₅	H19
4/4	C ₂ -C ₃	K03	32/32	C ₁ -C ₆ -H ₂₀	H20
5/5	C ₂ -H ₁₆	K04	33/33	C ₁ -C ₇ -N ₈	H21
6/6	C ₃ -C ₄	K05	34/34	C ₁ -C ₇ -H ₂₁	H22
7/7	C ₃ -H ₁₇	K06	35/35	C ₂ -C ₁ -C ₆	H23
8/8	C ₄ -C ₅	K05	36/36	C ₂ -C ₁ -C ₇	H24
9/9	C ₄ -H ₁₈	K07	37/37	C ₂ -C ₃ -C ₄	H25
10/10	C ₅ -C ₆	K03	38/38	C ₂ -C ₃ -H ₁₇	H26
11/11	C ₅ -C ₁₉	K06	39/39	C ₃ -C ₂ -H ₁₆	H27
12/12	C ₆ -H ₂₀	K04	40/40	C ₃ -C ₄ -C ₅	H28
13/13	C ₇ -N ₈	K08	41/41	C ₃ -C ₄ -H ₁₈	H29
14/14	C ₇ -H ₂₁	K09	42/42	C ₄ -C ₃ -H ₁₇	H30
15/15	N ₈ -N ₉	K10	43/43	C ₄ -C ₅ -C ₆	H25
16/16	N ₉ -C ₁₀	K11	44/44	C ₄ -C ₅ -H ₁₉	H30
17/17	C ₉ -H ₂₂	K12	45/45	C ₅ -C ₄ -H ₁₈	H29
18/18	C ₁₀ -C ₁₁	K13	46/46	C ₅ -C ₆ -H ₂₀	H27
19/19	C ₁₀ -C ₁₅	K13	47/47	C ₆ -C ₁ -C ₇	H24
20/20	C ₁₁ -C ₁₂	K14	48/48	C ₆ -C ₅ -H ₁₉	H26
21/21	C ₁₁ -H ₂₃	K15	49/49	C ₇ -N ₈ -N ₉	H31
22/22	C ₁₂ -C ₁₃	K16	50/50	N ₈ -C ₇ -H ₂₁	H32
23/23	C ₁₂ -H ₂₄	K17	51/51	N ₈ -N ₉ -C ₁₀	H33
24/24	C ₁₃ -C ₁₄	K16	52/52	N ₈ -N ₉ -H ₂₂	H34
25/25	C ₁₃ -H ₂₅	K18	53/53	N ₉ -C ₁₀ -C ₁₁	H35
26/26	C ₁₄ -C ₁₅	K14	54/54	N ₉ -C ₁₀ -C ₁₅	H35
27/27	C ₁₄ -H ₂₆	K17	55/55	C ₁₀ -N ₉ -H ₂₂	H36
28/28	C ₁₅ -H ₂₇	K15	56/56	C ₁₀ -C ₁₁ -C ₁₂	H37

Tablo 3.16. (Devamı) BAFH Bileşiminin Kuvvet Sabitleri

Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No	Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No
57/57	C ₁₀ -C ₁₁ -H ₂₃	H38	80/80	C ₁₀ -N ₉ -C ₁₁ -C ₁₅	P52
58/58	C ₁₀ -C ₁₅ -C ₁₄	H37	81/81	C ₁₁ -C ₁₀ -C ₁₂ -H ₂₃	P53
59/59	C ₁₀ -C ₁₅ -H ₂₇	H38	82/82	C ₁₂ -C ₁₁ -C ₁₃ -H ₂₄	P54
60/60	C ₁₁ -C ₁₀ -C ₁₅	H39	83/83	C ₁₃ -C ₁₂ -C ₁₄ -H ₂₅	P55
61/61	C ₁₁ -C ₁₂ -C ₁₃	H40	84/84	C ₁₄ -C ₁₃ -C ₁₅ -H ₂₆	P54
62/62	C ₁₁ -C ₁₂ -H ₂₄	H41	85/85	C ₁₅ -C ₁₀ -C ₁₄ -H ₂₇	P53
63/63	C ₁₂ -C ₁₁ -H ₂₃	H42	86/86	T(C ₁ -C ₂)	T56
64/64	C ₁₂ -C ₁₃ -C ₁₄	H43	87/87	T(C ₁ -C ₆)	T56
65/65	C ₁₂ -C ₁₃ -H ₂₅	H44	88/88	T(C ₁ -C ₇)	T57
66/66	C ₁₃ -C ₁₂ -H ₂₄	H45	89/89	C ₂ -C ₃	T58
67/67	C ₁₃ -C ₁₄ -C ₁₅	H40	90/90	C ₃ -C ₄	T59
68/68	C ₁₃ -C ₁₄ -H ₂₆	H45	91/91	C ₄ -C ₅	T59
69/69	C ₁₄ -C ₁₃ -H ₂₅	H44	92/92	C ₅ -C ₆	T58
70/70	C ₁₄ -C ₁₅ -H ₂₇	H42	93/93	C ₇ -N ₈	T60
71/71	C ₁₅ -C ₁₄ -H ₂₆	H41	94/94	N ₈ -N ₉	T61
72/72	C ₁ -C ₂ -C ₆ -C ₇	P46	95/95	N ₉ -C ₁₀	T62
73/73	C ₂ -C ₁ -C ₃ -H ₁₆	P47	96/96	T(C ₁₀ -C ₁₁)	T63
74/74	C ₃ -C ₂ -C ₄ -H ₁₇	P48	97/97	T(C ₁₀ -C ₁₅)	T63
75/75	C ₄ -C ₃ -C ₅ -H ₁₈	P49	98/98	T(C ₁₁ -C ₁₂)	T64
76/76	C ₅ -C ₄ -C ₆ -H ₁₉	P48	99/99	T(C ₁₂ -C ₁₃)	T65
77/77	C ₆ -C ₁ -C ₅ -H ₂₀	P47	100/100	T(C ₁₃ -C ₁₄)	T65
78/78	C ₇ -C ₁ -N ₈ -H ₂₁	P50	101/101	T(C ₁₄ -C ₁₅)	T64
79/79	N ₉ -N ₈ -C ₁₀ -H ₂₂	P51			

Tablo 3.17. BAFH Bileşiminin Etkileşim Kuvvet Sabitleri

Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No	Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No
1/2	C ₁ -C ₂ / C ₁ -C ₆	F66	6/10	C ₃ -C ₄ / C ₅ -C ₆	F67
1/4	C ₁ -C ₂ / C ₂ -C ₃	F66	19/20	C ₁₀ -C ₁₅ / C ₁₁ -C ₁₂	F67
4/6	C ₂ -C ₃ / C ₃ -C ₄	F66	18/22	C ₁₀ -C ₁₁ / C ₁₂ -C ₁₃	F67
6/8	C ₃ -C ₄ / C ₄ -C ₅	F66	19/24	C ₁₀ -C ₁₅ / C ₁₃ -C ₁₄	F67
2/10	C ₁ -C ₆ / C ₅ -C ₆	F66	20/24	C ₁₁ -C ₁₂ / C ₁₃ -C ₁₄	F67
8/10	C ₄ -C ₅ / C ₅ -C ₆	F66	18/26	C ₁₀ -C ₁₁ / C ₁₄ -C ₁₅	F67
18/19	C ₁₀ -C ₁₁ / C ₁₀ -C ₁₅	F66	22/26	C ₁₂ -C ₁₃ / C ₁₄ -C ₁₅	F67
18/20	C ₁₀ -C ₁₁ / C ₁₁ -C ₁₂	F66	1/6	C ₁ -C ₂ / C ₃ -C ₄	F67
20/22	C ₁₁ -C ₁₂ / C ₁₂ -C ₁₃	F66	2/8	C ₁ -C ₆ / C ₄ -C ₅	F67
22/24	C ₁₂ -C ₁₃ / C ₁₃ -C ₁₄	F66	4/8	C ₂ -C ₃ / C ₄ -C ₅	F67

Tablo 3.17. (Devamı) BAFH Bileşiğinin Etkileşim Kuvvet Sabitleri

Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No	Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No
4/10	C ₂ -C ₃ / C ₅ -C ₆	F68	20/63	C ₁₁ -C ₁₂ / C ₁₂ -C ₁₁ -H ₂₃	F70
19/22	C ₁₀ -C ₁₅ / C ₁₂ -C ₁₃	F68	22/65	C ₁₂ -C ₁₃ / C ₁₂ -C ₁₃ -H ₂₅	F70
18/24	C ₁₀ -C ₁₁ / C ₁₃ -C ₁₄	F68	8/44	C ₄ -C ₅ / C ₄ -C ₅ -H ₁₉	F70
2/26	C ₁₁ -C ₁₂ / C ₁₄ -C ₁₅	F68	8/45	C ₄ -C ₅ / C ₅ -C ₄ -H ₁₈	F70
1/29	C ₁ -C ₂ / C ₁ -C ₂ -C ₃	F69	10/46	C ₅ -C ₆ / C ₅ -C ₆ -H ₂₀	F70
4/29	C ₂ -C ₃ / C ₁ -C ₂ -C ₃	F69	10/48	C ₅ -C ₆ / C ₆ -C ₅ -H ₁₉	F70
2/31	C ₁ -C ₆ / C ₁ -C ₆ -C ₅	F69	18/53	C ₁₀ -C ₁₁ / N ₉ -C ₁₀ -C ₁₁	F70
1/31	C ₅ -C ₆ / C ₁ -C ₆ -C ₅	F69	22/66	C ₁₂ -C ₁₃ / C ₁₃ -C ₁₂ -H ₂₄	F70
1/35	C ₁ -C ₂ / C ₂ -C ₁ -C ₆	F69	24/68	C ₁₃ -C ₁₄ / C ₁₃ -C ₁₄ -H ₂₆	F70
2/35	C ₁ -C ₆ / C ₂ -C ₁ -C ₆	F69	24/69	C ₁₃ -C ₁₄ / C ₁₄ -C ₁₃ -H ₂₅	F70
4/37	C ₂ -C ₃ / C ₂ -C ₃ -C ₄	F69	26/70	C ₁₄ -C ₁₅ / C ₁₄ -C ₁₅ -H ₂₇	F70
6/37	C ₃ -C ₄ / C ₂ -C ₃ -C ₄	F69	26/71	C ₁₄ -C ₁₅ / C ₁₅ -C ₁₄ -H ₂₆	F70
18/60	C ₁₀ -C ₁₁ / C ₁₁ -C ₁₀ -C ₁₅	F69	29/35	C ₁ -C ₂ -C ₃ / C ₂ -C ₁ -C ₆	F71
19/60	C ₁₀ -C ₁₅ / C ₁₁ -C ₁₀ -C ₁₅	F69	31/35	C ₁ -C ₆ -C ₅ / C ₂ -C ₁ -C ₆	F71
20/61	C ₁₁ -C ₁₂ / C ₁₁ -C ₁₂ -C ₁₃	F69	29/37	C ₁ -C ₂ -C ₃ / C ₂ -C ₃ -C ₄	F71
22/61	C ₁₂ -C ₁₃ / C ₁₁ -C ₁₂ -C ₁₃	F69	37/40	C ₂ -C ₃ -C ₄ / C ₃ -C ₄ -C ₅	F71
26/58	C ₁₄ -C ₁₅ / C ₁₀ -C ₁₅ -C ₁₄	F69	31/43	C ₁ -C ₆ -C ₅ / C ₄ -C ₅ -C ₆	F71
22/64	C ₁₂ -C ₁₃ / C ₁₂ -C ₁₃ -C ₁₄	F69	40/43	C ₃ -C ₄ -C ₅ / C ₄ -C ₅ -C ₆	F71
24/64	C ₁₃ -C ₁₄ / C ₁₂ -C ₁₃ -C ₁₄	F69	56/60	C ₁₀ -C ₁₁ -C ₁₂ / C ₁₁ -C ₁₀ -C ₁₅	F71
24/67	C ₁₃ -C ₁₄ / C ₁₃ -C ₁₄ -C ₁₅	F69	58/60	C ₁₀ -C ₁₅ -C ₁₄ / C ₁₁ -C ₁₀ -C ₁₅	F71
26/67	C ₁₄ -C ₁₅ / C ₁₃ -C ₁₄ -C ₁₅	F69	56/61	C ₁₀ -C ₁₁ -C ₁₂ / C ₁₁ -C ₁₂ -C ₁₃	F71
6/40	C ₃ -C ₄ / C ₃ -C ₄ -C ₅	F69	61/64	C ₁₁ -C ₁₂ -C ₁₃ / C ₁₂ -C ₁₃ -C ₁₄	F71
8/40	C ₄ -C ₅ / C ₃ -C ₄ -C ₅	F69	58/67	C ₁₀ -C ₁₅ -C ₁₄ / C ₁₃ -C ₁₄ -C ₁₅	F71
8/43	C ₄ -C ₅ / C ₄ -C ₅ -C ₆	F69	64/67	C ₁₂ -C ₁₃ -C ₁₄ / C ₁₃ -C ₁₄ -C ₁₅	F71
10/43	C ₅ -C ₆ / C ₄ -C ₅ -C ₆	F69	5/7	C ₂ -H ₁₆ / C ₃ -H ₁₇	F72
18/56	C ₁₀ -C ₁₁ / C ₁₀ -C ₁₁ -C ₁₂	F69	7/9	C ₃ -H ₁₇ / C ₄ -H ₁₈	F72
20/56	C ₁₁ -C ₁₂ / C ₁₀ -C ₁₁ -C ₁₂	F69	9/11	C ₄ -H ₁₈ / C ₅ -H ₁₉	F72
19/58	C ₁₀ -C ₁₅ / C ₁₀ -C ₁₅ -C ₁₄	F69	11/12	C ₅ -H ₁₉ / C ₆ -H ₂₀	F72
1/30	C ₁ -C ₂ / C ₁ -C ₂ -H ₁₆	F70	21/23	C ₁₁ -H ₂₃ / C ₁₂ -H ₂₄	F72
2/32	C ₁ -C ₆ / C ₁ -C ₆ -H ₂₀	F70	23/25	C ₁₂ -H ₂₄ / C ₁₃ -H ₂₅	F72
2/47	C ₁ -C ₆ / C ₆ -C ₁ -C ₇	F70	25/27	C ₁₃ -H ₂₅ / C ₁₄ -H ₂₆	F72
1/36	C ₁ -C ₂ / C ₂ -C ₁ -C ₇	F70	27/28	C ₁₄ -H ₂₆ / C ₁₅ -H ₂₇	F72
4/18	C ₂ -C ₃ / C ₂ -C ₃ -H ₁₇	F70	1/3	C ₁ -C ₂ / C ₁ -C ₇	F73
4/39	C ₂ -C ₃ / C ₃ -C ₂ -H ₁₆	F70	2/3	C ₁ -C ₆ / C ₁ -C ₇	F73
6/41	C ₃ -C ₄ / C ₃ -C ₄ -H ₁₈	F70	72/73	PC ₁ / PC ₂	F74
6/42	C ₃ -C ₄ / C ₄ -C ₃ -H ₁₇	F70	72/77	PC ₁ / PC ₆	F74
19/54	C ₁₀ -C ₁₅ / N ₉ -C ₁₀ -C ₁₅	F70	72/74	PC ₁ / PC ₃	F75
18/57	C ₁₀ -C ₁₁ / C ₁₀ -C ₁₁ -H ₂₃	F70	72/76	PC ₁ / PC ₅	F75
19/59	C ₁₀ -C ₁₅ / C ₁₀ -C ₁₅ -H ₂₇	F70	72/86	PC ₁ / TC ₁ -C ₂	F76
20/62	C ₁₁ -C ₁₂ / C ₁₁ -C ₁₂ -H ₂₄	F70	72/87	PC ₁ / TC ₁ -C ₆	F76

Tablo 3.17. (Devamı) BAFH Bileşiğinin Etkileşim Kuvvet Sabitleri

Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No	Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No
72/89	PC ₁ / TC ₂ -C ₃	F77	72/91	PC ₁ / TC ₄ -C ₅	F78
72/92	PC ₁ / TC ₅ -C ₆	F77	13/33	C ₇ -N ₈ / C ₁ -C ₇ -N ₈	F79
72/90	PC ₁ / TC ₃ -C ₄	F78	13/50	C ₇ -N ₈ / N ₈ -C ₇ -H ₂₁	F80
19/26	C ₁₀ -C ₁₅ / C ₁₄ -C ₁₅	F66	1/10	C ₁ -C ₂ / C ₅ -C ₆	F67
24/26	C ₁₃ -C ₁₄ / C ₁₄ -C ₁₅	F66	2/6	C ₁ -C ₆ / C ₃ -C ₄	F68
2/4	C ₁ -C ₆ / C ₂ -C ₃	F67	1/8	C ₁ -C ₂ / C ₄ -C ₅	F68

Tablo 3.18. BAFH Kuvvet Sabitleri Değerleri

Kuvvet Sabit Simgesi	Kuvvet Sabit Değeri	Kaynak	Kuvvet Sabit Simgesi	Kuvvet Sabit Değeri	Kaynak
K01	6,4560	[52]	H31	1,3916	[48]
K02	5,4290	[47]	H32	54,5000	[17]
K03	6,4560	[52]	H33	86,1000	[48]
K04	5,1010	[52]	H34	64,8000	[48]
K05	6,4560	[52]	H35	84,9000	[48]
K06	5,1010	[52]	H36	64,8000	[48]
K07	5,1010	[52]	H37	92,0000	[48]
K08	6,3000	[48]	H38	50,8000	[48]
K09	498,0000	[17]	H39	73,5000	[48]
K10	7,0000	[48]	H40	92,0000	[48]
K11	5,1258	[48]	H41	50,8000	[48]
K12	5,9064	[48]	H42	50,8000	[48]
K13	6,4540	[48]	H43	92,0000	[48]
K14	6,4540	[48]	H44	50,8000	[48]
K15	5,1010	[48]	H45	50,8000	[48]
K16	6,4540	[48]	P46	49,5000	[47]
K17	5,1010	[48]	P47	78,4000	[48]
K18	5,1010	[48]	P48	78,4000	[48]
H19	0,9200	[52]	P49	78,4000	[48]
H20	0,5080	[52]	P50	29,6000	[17]
H21	79,8000	[17]	P51	20,6400	[48]
H22	0,5080	[52]	P52	51,9000	[48]
H23	0,9200	[52]	P53	78,4000	[48]
H24	0,9200	[52]	P54	78,4000	[48]
H25	0,9200	[52]	P55	78,4000	[48]
H26	0,5080	[52]	T56	27,8400	[48]
H27	0,5080	[52]	T57	20,0000	[60]
H28	0,9200	[52]	T58	27,8400	[48]
H29	0,5080	[52]	T59	27,8400	[48]
H30	0,5080	[52]	T60	49,1000	[48]

Tablo 3.18. (Devamı) BAFH Kuvvet Sabitleri Değerleri

Kuvvet Sabiti Simgesi	Kuvvet Sabiti Değeri	Kaynak	Kuvvet Sabiti Simgesi	Kuvvet Sabiti Değeri	Kaynak
T61	3,0000	[48]	F71	0.063	[52]
T62	1,9000	[48]	F72	0.017	[52]
T63	27,8400	[48]	F73	0.081	[52]
T64	27,8400	[48]	F74	0.018	[47]
T65	27,8400	[48]	F75	0.021	[47]
F66	0.784	[52]	F76	0.179	[47]
F67	0.336	[52]	F77	0.085	[47]
F68	0.312	[52]	F78	-0,0270	[47]
F69	0.180	[52]	F79	31.200	[17]
F70	0.176	[52]	F80	69.100	[17]

*K gerilme, H: düzlem içi bükülme, P:düzlem dışı bükülme, T: torsiyon ve F etkileşim kuvvet sabitini göstermektedir.

*Birimler; K için N / m; H ve P Nm/rad²; Gerilme bükülme etkileşimi N/rad

3.5.2 FD Bileşiminin Normal Koordinat Analizi

FD bileşiminde 39 atom bulunmaktadır. FD, C₁ simetri türüne uyacak şekilde hesaplanmıştır. Bileşimin 111 (3N-6) titreşim hareket serbestliği vardır ve hepsi de hem IR hem de Raman aktif titreşimlerdir.

C₁ nokta grubuna sahip FD bileşimine ait karakter tablosu ve aynı tür simetrik titreşimlerin sayısının bulunması aşağıda gösterilmektedir.

Tablo 3.19. C₁ nokta grubu karakter tablosu ve FD bileşiminin simetri türlerinin hesaplanması

C ₁	E
A'	1
k _(R)	1
x _{i(R)}	3
U _(R)	39
Π	117

$$n(A') = 1/1[117.1] = 117A'$$

Sonuç olarak $\Gamma_{3N} = 117A' = 117$ hareket serbestliği vardır.

Bu 3N titreşim modundan Γ dönme ve Γ ötelenme titreşim sayıları çıkarılırsa temel titreşimlerin sayısı bulunur.

$$\Gamma_{3N-6} = 117 - 6$$

$$\Gamma_{3N-6} = 111 \text{ Temel titreşim}$$

Sonuçta 111 titreşim hem IR hem de Raman aktiftir.

Tablo 3.20. FD Bileşiminin Kuvvet Sabitleri

Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No	Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No
1 1	C ₁ -O ₂	K01	25 25	O ₁₆ -C ₁₇	K18
2 2	C ₁ -H ₂₆	K02	26 26	C ₁₇ -C ₁₈	K19
3 3	C ₁ -H ₂₇	K02	27 27	C ₁₈ -C ₁₉	K20
4 4	C ₁ -H ₂₈	K02	28 28	C ₁₈ -C ₂₃	K20
5 5	O ₂ -C ₃	K03	29 29	C ₁₉ -C ₂₀	K21
6 6	C ₃ -C ₄	K04	30 30	C ₁₉ -H ₃₃	K22
7 7	C ₃ -C ₈	K04	31 31	C ₂₀ -C ₂₁	K23
8 8	C ₄ -C ₅	K05	32 32	C ₂₀ -H ₃₄	K24
9 9	C ₄ -H ₂₉	K06	33 33	C ₂₁ -C ₂₂	K23
10 10	C ₅ -C ₆	K07	34 34	C ₂₁ -O ₂₄	K25
11 11	C ₅ -H ₃₀	K08	35 35	C ₂₂ -C ₂₃	K21
12 12	C ₆ -C ₇	K07	36 36	C ₂₂ -H ₃₅	K24
13 13	C ₆ -C ₉	K09	37 37	C ₂₃ -H ₃₆	K22
14 14	C ₇ -C ₈	K05	38 38	O ₂₄ -C ₂₅	K26
15 15	C ₇ -H ₃₁	K08	39 39	C ₂₅ -H ₃₇	K27
16 16	C ₈ -H ₃₂	K06	40 40	C ₂₅ -H ₃₈	K27
17 17	C ₉ -O ₁₀	K10	41 41	C ₂₅ -H ₃₉	K27
18 18	C ₉ -C ₁₁	K11	42 42	C ₁ -O ₂ -C ₃	H28
19 19	C ₁₁ -C ₁₂	K12	43 43	O ₂ -C ₁ -H ₂₆	H29
20 20	C ₁₁ -C ₁₇	K13	44 44	O ₂ -C ₁ -H ₂₇	H29
21 21	C ₁₂ -O ₁₃	K14	45 45	O ₂ -C ₁ -H ₂₈	H29
22 22	C ₁₂ -H ₁₄	K15	46 46	O ₂ -C ₃ -C ₄	H30
23 23	C ₁₄ -O ₁₅	K16	47 47	O ₂ -C ₃ -C ₈	H30
24 24	C ₁₄ -O ₁₆	K17	48 48	C ₃ -C ₄ -C ₅	H31

Tablo 3.20. (Devamı) FD Kuvvet Sabitleri

Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No	Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No
49 49	C ₃ -C ₄ -H ₂₉	H32	90 90	C ₂₀ -C ₂₁ -C ₂₂	H63
50 50	C ₃ -C ₈ -C ₇	H31	91 91	C ₂₀ -C ₂₁ -O ₂₄	H64
51 51	C ₃ -C ₈ -H ₃₂	H32	92 92	C ₂₁ -C ₂₀ -H ₃₄	H65
52 52	C ₄ -C ₃ -C ₈	H33	93 93	C ₂₁ -C ₂₂ -C ₂₃	H60
53 53	C ₄ -C ₅ -C ₆	H34	94 94	C ₂₁ -C ₂₂ -H ₃₅	H65
54 54	C ₄ -C ₅ -H ₃₀	H35	95 95	C ₂₁ -O ₂₄ -C ₂₅	H66
55 55	C ₅ -C ₄ -H ₂₉	H36	96 96	C ₂₂ -C ₂₁ -O ₂₄	H64
56 56	C ₅ -C ₆ -C ₇	H37	97 97	C ₂₂ -C ₂₃ -H ₃₆	H62
57 57	C ₅ -C ₆ -C ₉	H38	98 98	C ₂₃ -C ₂₂ -H ₃₅	H61
58 58	C ₆ -C ₅ -H ₃₀	H39	99 99	O ₂₄ -C ₂₅ -H ₃₇	H67
59 59	C ₆ -C ₇ -C ₈	H34	100 100	O ₂₄ -C ₂₅ -H ₃₈	H67
60 60	C ₆ -C ₇ -H ₃₁	H39	101 101	O ₂₄ -C ₂₅ -H ₃₉	H67
61 61	C ₆ -C ₉ -O ₁₀	H40	102 102	H 26 C1 H27	H68
62 62	C ₆ -C ₉ -C ₁₁	H41	103 103	H26 C1 H28	H68
63 63	C ₇ -C ₆ -C ₉	H38	104 104	H27 C1 H28	H68
64 64	C ₇ -C ₈ -H ₃₂	H36	105 105	H 37 C25 H38	H68
65 65	C ₈ -C ₇ -H ₃₁	H35	106 106	H37 C25 H39	H68
66 66	C ₉ -C ₁₁ -C ₁₂	H42	107 107	H38 C25 H39	H68
67 67	C ₉ -C ₁₁ -C ₁₇	H43	108 108	C ₃ -O ₂ -C ₄ -C ₈	P69
68 68	O ₁₀ -C ₉ -C ₁₁	H44	109 109	C ₄ -C ₃ -C ₅ -H ₂₉	P70
69 69	C ₁₁ -C ₁₂ -O ₁₃	H45	110 110	C ₅ -C ₄ -C ₆ -H ₃₀	P71
70 70	C ₁₁ -C ₁₂ -C ₁₄	H46	111 111	C ₆ -C ₅ -C ₇ -C ₉	P72
71 71	C ₁₁ -C ₁₇ -O ₁₆	H47	112 112	C ₇ -C ₆ -C ₈ -H ₃₁	P73
72 72	C ₁₁ -C ₁₇ -C ₁₈	H48	113 113	C ₈ -C ₃ -C ₇ -H ₃₂	P70
73 73	C ₁₂ -C ₁₁ -C ₁₇	H49	114 114	C ₉ -C ₆ -O ₁₀ -C ₁₁	P73
74 74	C ₁₂ -C ₁₄ -O ₁₅	H50	115 115	C ₁₁ -C ₉ -C ₁₂ -C ₁₇	P74
75 75	C ₁₂ -C ₁₄ -O ₁₆	H51	116 116	C ₁₂ -C ₁₁ -O ₁₃ -C ₁₄	P75
76 76	O ₁₃ -C ₁₂ -C ₁₄	H52	117 117	C ₁₄ -C ₁₂ -O ₁₅ -C ₁₆	P76
77 77	C ₁₄ -O ₁₆ -C ₁₇	H53	118 118	C ₁₇ -C ₁₁ -O ₁₆ -C ₁₈	P77
78 78	O ₁₅ -C ₁₄ -O ₁₆	H54	119 119	C ₁₈ -C ₁₇ -C ₁₉ -C ₂₃	P78
79 79	O ₁₆ -C ₁₇ -C ₁₈	H55	120 120	C ₁₉ -C ₁₈ -C ₂₀ -H ₃₃	P79
80 80	C ₁₇ -C ₁₈ -C ₁₉	H56	121 121	C ₂₀ -C ₁₉ -C ₂₁ -H ₃₄	P80
81 81	C ₁₇ -C ₁₈ -C ₂₃	H56	122 122	C ₂₁ -C ₂₀ -C ₂₂ -O ₂₄	P81
82 82	C ₁₈ -C ₁₉ -C ₂₀	H57	123 123	C ₂₂ -C ₂₁ -C ₂₃ -H ₃₅	P80
83 83	C ₁₈ -C ₁₉ -H ₃₃	H58	124 124	C ₂₃ -C ₁₈ -C ₂₂ -H ₃₆	P79
84 84	C ₁₈ -C ₂₃ -C ₂₂	H57	125 125	C ₁ -O ₂	T82
85 85	C ₁₈ -C ₂₃ -H ₃₆	H58	126 126	O ₂ -C ₃	T83
86 86	C ₁₉ -C ₁₈ -C ₂₃	H59	127 127	C ₃ -C ₄	T84
87 87	C ₁₉ -C ₂₀ -C ₂₁	H60	128 128	C ₃ -C ₈	T84
88 88	C ₁₉ -C ₂₀ -H ₃₄	H61	129 129	C ₄ -C ₅	T85
89 89	C ₂₀ -C ₁₉ -H ₃₃	H62	130 130	C ₅ -C ₆	T86

Tablo 3.20. (Devamı) FD Kuvvet Sabitleri

Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No	Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No
131 131	C ₆ -C ₇	T86	140 140	C ₁₇ -C ₁₈	T94
132 132	C ₆ -C ₉	T87	141 141	C ₁₈ -C ₁₉	T95
133 133	C ₇ -C ₈	T85	142 142	C ₁₈ -C ₂₃	T95
134 134	C ₉ -C ₁₁	T88	143 143	C ₁₉ -C ₂₀	T96
135 135	C ₁₁ -C ₁₂	T89	144 144	C ₂₀ -C ₂₁	T97
136 136	C ₁₁ -C ₁₇	T90	145 145	C ₂₁ -C ₂₂	T97
137 137	C ₁₂ -C ₁₄	T91	146 146	C ₂₁ -O ₂₄	T98
138 138	C ₁₄ -O ₁₆	T92	147 147	C ₂₂ -C ₂₃	T96
139 139	O ₁₆ -C ₁₇	T93	148 148	O ₂₄ -C ₂₅	T99

Tablo 3.21. FD Bileşiminin Etkileşim Kuvvet Sabitleri

Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No	Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No
13 19	C ₆ -C ₉ /C ₉ -C ₁₁	F100	44 46	O ₂ C ₁ H ₂₆ /O ₂ C ₁ H ₂₈	F109
1 5	C ₁ -O ₂ / O ₂ -C ₃	F101	100 101	O ₂₄ C ₂₅ H ₃₇ /O ₂₄ C ₂₅ H ₃₈	F109
35 39	C ₂₁ -O ₂₄ / O ₂₄ -C ₂₅	F101	100 102	O ₂₄ C ₂₅ H ₃₇ /O ₂₄ C ₂₅ H ₃₉	F109
5 6	O ₂ -C ₃ /C ₃ -C ₄	F102	13 18	C ₆ -C ₉ /C ₉ -O ₁₀	F110
34 35	C ₂₁ -C ₂₂ /C ₂₁ -O ₂₄	F102	10 12	C ₅ -C ₆ /C ₆ -C ₇	F110
2 3	C ₁ -H ₂₆ /C ₁ H ₂₇	F103	12 14	C ₆ -C ₇ /C ₇ -C ₈	F110
2 4	C ₁ -H ₂₆ /C ₁ H ₂₈	F103	8 10	C ₄ -C ₅ /C ₅ -C ₆	F110
40 41	C ₂₅ -H ₃₇ /C ₂₅ H ₃₈	F103	7 14	C ₃ -C ₈ /C ₇ C ₈	F110
40 42	C ₂₅ -H ₃₇ /C ₂₅ H ₃₉	F103	6 7	C ₃ -C ₈ /C ₃ C ₄	F110
5 47	O ₂ -C ₃ /O ₂ -C ₃ -C ₄	F104	6 8	C ₃ -C ₄ /C ₄ C ₅	F110
5 48	O ₂ -C ₃ /O ₂ -C ₃ -C ₈	F104	13 62	C ₆ -C ₉ /C ₆ C ₉ O ₁₀	F111
35 92	C ₂₁ -O ₂₄ /C ₂₀ C ₂₁ O ₂₄	F104	13 58	C ₆ -C ₉ /C ₅ C ₆ C ₉	F112
5 43	O ₂ -C ₃ /C ₁ -O ₂ -C ₃	F105	13 64	C ₆ -C ₉ /C ₇ C ₆ C ₉	F112
35 96	C ₂₁ -O ₂₄ /C ₂₁ O ₂₄ C ₂₅	F105	7 12	C ₃ -C ₈ /C ₆ -C ₇	F113
1 44	C ₁ O ₂ /O ₂ C ₁ H ₂₆	F106	8 12	C ₄ -C ₅ /C ₆ -C ₇	F113
1 45	C ₁ O ₂ /O ₂ C ₁ H ₂₇	F106	10 14	C ₅ -C ₆ /C ₇ C ₈	F113
1 46	C ₁ O ₂ /O ₂ C ₁ H ₂₈	F106	6 14	C ₃ -C ₄ /C ₇ -C ₈	F113
39 100	O ₂₄ -C ₂₅ /O ₂₄ C ₂₅ H ₃₇	F106	18 62	C ₉ -O ₁₀ /C ₆ C ₉ O ₁₀	F114
39 101	O ₂₄ -C ₂₅ /O ₂₄ C ₂₅ H ₃₈	F106	12 13	C ₆ -C ₉ /C ₆ -C ₇	F115
39 102	O ₂₄ -C ₂₅ /O ₂₄ C ₂₅ H ₃₉	F106	10 13	C ₆ -C ₉ /C ₅ -C ₆	F115
48 52	O ₂ C ₃ C ₈ /C ₃ C ₈ H ₃₂	F107	13 14	C ₆ -C ₉ /C ₇ -C ₈	F116
92 93	C ₂₀ C ₂₁ O ₂₄ /C ₂₁ C ₂₀ H ₃₄	F107	8 13	C ₆ -C ₉ /C ₄ -C ₅	F116
43 48	C ₁ O ₂ C ₃ /O ₂ C ₃ C ₈	F108	7 13	C ₆ -C ₉ /C ₃ -C ₈	F117
92 96	C ₂₀ C ₂₁ O ₂₄ /C ₂₁ O ₂₄ C ₂₅	F108	6 13	C ₆ -C ₉ /C ₃ -C ₄	F117
44 45	O ₂ C ₁ H ₂₆ /O ₂ C ₁ H ₂₇	F109	15 17	C ₇ -H ₃₁ /C ₈ -H ₃₂	F118

Tablo 3.21. FD Bileşiminin Etkileşim Kuvvet Sabitleri

Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No	Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No
9 11	C ₄ -H ₂₉ /C ₅ -H ₃₀	F118	12 57	C ₆ C ₇ /C ₅ C ₆ C ₇	F120
57 60	C ₅ -C ₆ -C ₇ /C ₆ -C ₇ -C ₈	F119	12 60	C ₆ C ₇ /C ₆ C ₇ C ₈	F120
54 57	C ₅ -C ₆ -C ₇ /C ₄ -C ₅ -C ₆	F119	10 57	C ₅ C ₆ /C ₅ C ₆ C ₇	F120
51 60	C ₆ C ₇ C ₈ /C ₃ C ₇ C ₈	F119	10 54	C ₅ C ₆ /C ₄ C ₅ C ₆	F120
53 60	C ₆ C ₇ C ₈ /C ₄ C ₃ C ₈	F119	9 48	C ₄ -H ₂₉ /C ₃ -C ₄ -C ₅	F121
4954	C ₃ C ₄ C ₅ /C ₄ C ₅ C ₆	F119	11 53	C ₅ -H ₃₀ /C ₄ -C ₅ -C ₆	F121
60 64	C ₉ C ₆ C ₇ /C ₆ C ₇ C ₈	F119	16 50	C ₈ -H ₃₂ /C ₃ -C ₈ -C ₇	F122
54 58	C ₉ C ₆ C ₅ /C ₄ C ₅ C ₆	F119	15 59	C ₇ -H ₃₁ /C ₆ -C ₇ -C ₈	F122

Tablo 3.22. FD Bileşiminin Kuvvet Sabitleri Değerleri

Kuvvet Sabit Simgesi	Kuvvet Sabit Değeri	Kaynak	Kuvvet Sabit Simgesi	Kuvvet Sabit Değeri	Kaynak
K01	5,0618	[53]	K21	6,4330	[54]
K02	4,6384	[53]	K22	5,0550	[54]
K03	4,1938	[53]	K23	6,4330	[54]
K04	6,4330	[53]	K24	5,0550	[54]
K05	6,4330	[54]	K25	4,1938	[53]
K06	5,0550	[54]	K26	5,0618	[53]
K07	6,4330	[54]	K27	4,6384	[53]
K08	5,0550	[54]	H28	1,8157	[53]
K09	5,7440	[53]	H29	0,8612	[53]
K10	8,5900	[54]	H30	1,1760	[53]
K11	5,7440	[54]	H31	0,9340	[53]
K12	5,6925	[55]	H32	0,5110	[54]
K13	5,6925	[55]	H33	0,8527	[53]
K14	10,9876	[55]	H34	0,9340	[54]
K15	5,5710	[55]	H35	0,5110	[54]
K16	10,9876	[55]	H36	0,5110	[54]
K17	5,9886	[55]	H37	0,9340	[54]
K18	5,9886	[55]	H38	0,9340	[54]
K19	5,5710	[55]	H39	0,5110	[54]
K20	6,4330	[54]	H40	0,5491	[54]

Tablo 3.22. (Devamı) FD Kuvvet Sabitleri Değerleri

Kuvvet Sabiti Simgesi	Kuvvet Sabiti Değeri	Kaynak	Kuvvet Sabiti Simgesi	Kuvvet Sabiti Değeri	Kaynak
H41	0,5110	[48]	P78	0,2860	[54]
H42	0,9340	[48]	P79	0,2860	[54]
H43	0,9340	[48]	P80	0,2860	[54]
H44	0,5110	[48]	P81	0,3231	[54]
H45	0,5491	[48]	T82	0,0178	[55]
H46	100,800	[55]	T83	0,0306	[55]
H47	90,800	[55]	T84	0,0390	[55]
H48	86,800	[55]	T85	0,0390	[55]
H49	0,5491	[55]	T86	0,0390	[55]
H50	0,5491	[55]	T87	0,0090	[55]
H51	1,3254	[55]	T88	5,0000	[55]
H52	0,8810	[55]	T89	5,0000	[55]
H53	86,800	[55]	T90	4,7450	[55]
H54	0,8964	[55]	T91	6,3000	[55]
H55	64,800	[55]	T92	6,1175	[55]
H56	0,7566	[55]	T93	4,9660	[55]
H57	84,900	[55]	T94	4,5000	[55]
H58	1,3916	[55]	T95	0,0390	[55]
H59	86,100	[55]	T96	0,0390	[55]
H60	92,000	[55]	T97	0,0390	[55]
H61	50,800	[55]	T98	0,0306	[55]
H62	73,500	[55]	T99	0,0178	[55]
H63	92,000	[55]	F100	0,0089	[55]
H64	50,800	[55]	F101	0,2403	[54]
H65	50,800	[55]	F102	0,2579	[54]
H66	92,000	[55]	F103	0,0041	[54]
H67	50,800	[55]	F104	0,5336	[55]
H68	54,100	[48]	F105	0,4492	[55]
P69	0,3231	[55]	F106	0,2932	[55]
P70	0,2860	[55]	F107	0,0983	[55]
P71	0,2860	[55]	F108	0,1383	[55]
P72	0,2860	[54]	F109	0,0529	[55]
P73	0,2860	[54]	F110	0,7500	[55]
P74	75,800	[54]	T111	0,0648	[55]
P75	70,800	[54]	F112	0,1640	[55]
P76	70,800	[54]	F113	-0,3160	[54]
P77	51,900	[54]	F114	0,1778	[55]

Tablo 3.22. (Devamı) FD Kuvvet Sabitleri Değerleri

Kuvvet Sabiti Simgesi	Kuvvet Sabiti Değeri	Kaynak	Kuvvet Sabiti Simgesi	Kuvvet Sabiti Değeri	Kaynak
F115	0,7000	[55]	F119	-0,0450	[54]
F116	-0,3160	[55]	F120	0,1640	[54]
F117	0,342	[54]	F121	-0,0680	[54]
F118	0,4667	[54]	F122	-0,0640	[47]

*K gerilme, H: düzlem içi bükülme, P:düzlem dışı bükülme, T: torsion ve Fetkileşim kuvvet sabitini göstermektedir.

*Birimler; K için N / m ; H ve P Nm/rad²; Gerilme bükülme etkileşimi N/rad

3.5.3 AHD Bileşiğinin Normal Koordinat Analizi

AHD bileşiğinde 64 atom bulunmaktadır. AHD, C₁ simetri türüne uyacak şekilde hesaplanmıştır. Bileşiğin 186 (3N-6) titreşim hareket serbestliği vardır ve hepsi de hem IR hem de Raman aktif titreşimlerdir.

C₁ nokta grubuna sahip AHD bileşiğine ait karakter tablosu ve aynı tür simetrik titreşimlerin sayısının bulunması aşağıda gösterilmektedir.

Tablo 3.23. C₁ nokta grubu karakter tablosu ve AHD bileşiğinin simetri türlerinin hesaplanması

C ₁	E
A	1
k _(R)	1
x _{i(R)}	3
U _(R)	64
Π	192

$$n(A') = 1/1[192.1] = 192A'$$

Sonuç olarak $\Gamma_{3N} = 192A' = 192$ hareket serbestliği vardır.

Bu 3N titreşim modundan Γ dönme ve Γ ötelenme titreşim sayıları çıkarılırsa temel titreşimlerin sayısı bulunur.

$$\Gamma_{3N-6} = 192 - 6$$

$$\Gamma_{3N-6} = 186 \text{ Temel titreşim}$$

Sonuç olarak 186 titreşim hem IR hem de Raman aktiftir.

Tablo 3.24. AHD Bileşiğinin Kuvvet Sabitleri

Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No	Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No
1/1	C ₁ -O ₂	K01	29/29	C ₁₆ -H ₄₈	K06
2/2	C ₁ -H ₃₉	K02	30/30	C ₁₇ -C ₁₈	K04
3/3	C ₁ -H ₄₀	K02	31/31	C ₁₇ -O ₂₀	K03
4/4	C ₁ -H ₄₁	K02	32/32	C ₁₈ -C ₁₉	K05
5/5	O ₂ -C ₃	K03	33/33	C ₁₈ -H ₄₉	K06
6/6	C ₃ -C ₄	K04	34/34	C ₁₉ -H ₅₀	K08
7/7	C ₃ -C ₈	K04	35/35	O ₂₀ -C ₂₁	K01
8/8	C ₄ -C ₅	K05	36/36	C ₂₁ -H ₅₁	K02
9/9	C ₄ -H ₄₂	K06	37/37	C ₂₁ -H ₅₂	K02
10/10	C ₅ -C ₆	K07	38/38	C ₂₁ -H ₅₃	K02
11/11	C ₅ -H ₄₃	K08	39/39	C ₂₂ -O ₂₃	K14
12/12	C ₆ -C ₇	K07	40/40	C ₂₂ -N ₂₄	K15
13/13	C ₆ -C ₉	K09	41/41	N ₂₄ -C ₂₅	K16
14/14	C ₇ -C ₈	K05	42/42	N ₂₄ -N ₃₁	K17
15/15	C ₇ -H ₄₄	K08	43/43	C ₂₅ -C ₂₆	K18
16/16	C ₈ -H ₄₅	K06	44/44	C ₂₅ -C ₃₀	K18
17/17	C ₉ -O ₁₀	K10	45/45	C ₂₆ -C ₂₇	K19
18/18	C ₉ -C ₁₁	K11	46/46	C ₂₆ -H ₅₄	K20
19/19	C ₁₁ -C ₁₂	K11	47/47	C ₂₇ -C ₂₈	K21
20/20	C ₁₁ -C ₂₂	K12	48/48	C ₂₇ -H ₅₅	K22
21/21	C ₁₁ -H ₄₆	K13	49/49	C ₂₈ -C ₂₉	K21
22/22	C ₁₂ -O ₁₃	K10	50/50	C ₂₈ -H ₅₆	K23
23/23	C ₁₂ -C ₁₄	K09	51/51	C ₂₉ -C ₃₀	K19
24/24	C ₁₄ -C ₁₅	K07	52/52	C ₂₉ -H ₅₇	K22
25/25	C ₁₄ -C ₁₉	K07	53/53	C ₃₀ -H ₅₈	K20
26/26	C ₁₅ -C ₁₆	K05	54/54	N ₃₁ -C ₃₂	K24
27/27	C ₁₅ -H ₄₇	K08	55/55	C ₃₂ -C ₃₃	K25
28/28	C ₁₆ -H ₁₇	K04	56/56	C ₃₂ -H ₅₉	K26

Tablo 3.24. (Devamı) AHD Bileşiminin Kuvvet Sabitleri

Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No	Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No
57/57	C ₃₃ -C ₃₄	K27	100/100	C ₁₂ -C ₁₄ -C ₁₅	H43
58/58	C ₃₃ -C ₃₈	K27	101/101	C ₁₂ -C ₁₄ -C ₁₉	H43
59/59	C ₃₄ -C ₃₅	K28	102/102	O ₁₃ -C ₁₂ -C ₁₄	H45
60/60	C ₃₄ -H ₆₀	K29	103/103	C ₁₄ -C ₁₅ -C ₁₆	H39
61/61	C ₃₅ -C ₃₆	K30	104/104	C ₁₄ -C ₁₅ -H ₄₇	H44
62/62	C ₃₅ -H ₆₁	K31	105/105	C ₁₄ -C ₁₉ -C ₁₈	H39
63/63	C ₃₆ -C ₃₇	K30	106/106	C ₁₄ -C ₁₉ -H ₅₀	H44
64/64	C ₃₆ -H ₆₂	K32	107/107	C ₁₅ -C ₁₄ -C ₁₉	H42
65/65	C ₃₇ -C ₃₈	K28	108/108	C ₁₅ -C ₁₆ -C ₁₇	H36
66/66	C ₃₇ -H ₆₃	K31	109/109	C ₁₅ -C ₁₆ -H ₄₈	H41
67/67	C ₃₈ -H ₆₄	K29	110/110	C ₁₆ -C ₁₅ -H ₄₇	H40
68/68	C ₁ -O ₂ -C ₃	H33	111/111	C ₁₆ -C ₁₇ -C ₁₈	H38
69/69	O ₂ -C ₁ -H ₃₉	H34	112/112	C ₁₆ -C ₁₇ -O ₂₀	H35
70/70	O ₂ -C ₁ -H ₄₀	H34	113/113	C ₁₇ -C ₁₆ -H ₄₈	H37
71/71	O ₂ -C ₁ -H ₄₁	H34	114/114	C ₁₇ -C ₁₈ -C ₁₉	H36
72/72	O ₂ -C ₃ -C ₄	H35	115/115	C ₁₇ -C ₁₈ -H ₄₉	H37
73/73	O ₂ -C ₃ -C ₈	H35	116/116	C ₁₇ -O ₂₀ -C ₂₁	H33
74/74	C ₃ -C ₄ -C ₅	H36	117/117	C ₁₈ -C ₁₇ -O ₂₀	H35
75/75	C ₃ -C ₄ -H ₄₂	H37	118/118	C ₁₈ -C ₁₉ -H ₅₀	H40
76/76	C ₃ -C ₈ -C ₇	H36	119/119	C ₁₉ -C ₁₈ -H ₄₉	H41
77/77	C ₃ -C ₈ -H ₄₅	H37	120/120	O ₂₀ -C ₂₁ -H ₅₁	H34
78/78	C ₄ -C ₃ -C ₈	H38	121/121	O ₂₀ -C ₂₁ -H ₅₂	H34
79/79	C ₄ -C ₅ -C ₆	H39	122/122	O ₂₀ -C ₂₁ -H ₅₃	H34
80/80	C ₄ -C ₅ -H ₄₃	H40	123/123	C ₂₂ -C ₁₁ -H ₄₆	H53
81/81	C ₅ -C ₄ -H ₄₂	H41	124/124	C ₂₂ -N ₂₄ -C ₂₅	H54
82/82	C ₅ -C ₆ -C ₇	H42	125/125	C ₂₂ -N ₂₄ -N ₃₁	H55
83/83	C ₅ -C ₆ -C ₉	H43	126/126	O ₂₃ -C ₂₂ -N ₂₄	H56
84/84	C ₆ -C ₅ -H ₄₃	H44	127/127	N ₂₄ -C ₂₅ -C ₂₆	H57
85/85	C ₆ -C ₇ -C ₈	H39	128/128	N ₂₄ -C ₂₅ -C ₃₀	H57
86/86	C ₆ -C ₇ -H ₄₄	H44	129/129	N ₂₄ -N ₃₁ -C ₃₂	H58
87/87	C ₆ -C ₉ -O ₁₀	H45	130/130	C ₂₅ -N ₂₄ -N ₃₁	H59
88/88	C ₆ -C ₉ -C ₁₁	H46	131/131	C ₂₅ -C ₂₆ -C ₂₇	H60
89/89	C ₇ -C ₆ -C ₉	H43	132/132	C ₂₅ -C ₂₆ -H ₅₄	H61
90/90	C ₇ -C ₈ -H ₄₅	H41	133/133	C ₂₅ -C ₃₀ -C ₂₉	H60
91/91	C ₈ -C ₇ -H ₄₄	H40	134/134	C ₂₅ -C ₃₀ -H ₅₈	H61
92/92	C ₉ -C ₁₁ -C ₁₂	H47	135/135	C ₂₆ -C ₂₅ -C ₃₀	H62
93/93	C ₉ -C ₁₁ -H ₄₆	H48	136/136	C ₂₆ -C ₂₇ -C ₂₈	H63
94/94	O ₁₀ -C ₉ -C ₁₁	H49	137/137	C ₂₆ -C ₂₇ -H ₅₅	H64
95/95	C ₁₁ -C ₁₂ -O ₁₃	H49	138/138	C ₂₇ -C ₂₆ -H ₅₄	H65
96/96	C ₁₁ -C ₁₂ -C ₁₄	H46	139/139	C ₂₇ -C ₂₈ -C ₂₉	H66
97/97	C ₁₁ -C ₂₂ -O ₂₃	H50	140/140	C ₂₇ -C ₂₈ -H ₅₆	H67
98/98	C ₁₁ -C ₂₂ -N ₂₄	H51	141/141	C ₂₈ -C ₂₇ -H ₅₅	H68
99/99	C ₁₂ -C ₁₁ -C ₂₂	H52	142/142	C ₂₈ -C ₂₉ -C ₃₀	H63

Tablo 3.24. (Devamı) AHD Bileşiğinin Kuvvet Sabitleri

Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No	Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No
143/143	C ₂₈ -C ₂₉ -H ₅₇	H68	185/185	C ₁₇ -C ₁₆ -C ₁₈ -O ₂₀	P83
144/144	C ₂₉ -C ₂₈ -H ₅₆	H67	186/186	C ₁₈ -C ₁₇ -O ₂₀ -H ₄₉	P84
145/145	C ₂₉ -C ₃₀ -H ₅₈	H65	187/187	C ₁₉ -C ₁₈ -C ₁₄ -H ₅₀	P87
146/146	C ₃₀ -C ₂₉ -H ₅₇	H64	188/188	C ₂₂ -C ₁₁ -O ₂₃ -N ₂₄	P88
147/147	N ₃₁ -C ₃₂ -C ₃₃	H69	189/189	N ₂₄ -C ₂₂ -C ₂₅ -N ₃₁	P89
148/148	N ₃₁ -C ₃₂ -H ₅₉	H70	190/190	C ₂₅ -N ₂₄ -C ₂₆ -C ₃₀	P90
149/149	C ₃₂ -C ₃₃ -C ₃₄	H71	191/191	C ₂₆ -C ₂₅ -C ₂₇ -H ₅₄	P91
150/150	C ₃₂ -C ₃₃ -C ₃₈	H71	192/192	C ₂₇ -C ₂₆ -C ₂₈ -H ₅₅	P92
151/151	C ₃₃ -C ₃₂ -H ₅₉	H72	193/193	C ₂₈ -C ₂₇ -C ₂₉ -H ₅₆	P91
152/152	C ₃₃ -C ₃₄ -C ₃₅	H73	194/194	C ₂₉ -C ₂₈ -C ₃₀ -H ₅₇	P90
153/153	C ₃₃ -C ₃₄ -H ₆₀	H74	195/195	C ₃₀ -C ₂₉ -C ₂₅ -H ₅₈	P93
154/154	C ₃₃ -C ₃₈ -C ₃₇	H73	196/196	C ₃₂ -N ₃₁ -C ₃₃ -H ₅₉	P94
155/155	C ₃₃ -C ₃₄ -H ₆₄	H74	197/197	C ₃₃ -C ₃₂ -C ₃₄ -C ₃₈	P95
156/156	C ₃₄ -C ₃₃ -C ₃₈	H75	198/198	C ₃₄ -C ₃₃ -C ₃₅ -H ₆₀	P96
157/157	C ₃₄ -C ₃₅ -C ₃₆	H76	199/199	C ₃₅ -C ₃₄ -C ₃₆ -H ₆₁	P97
158/158	C ₃₄ -C ₃₅ -H ₆₁	H77	200/200	C ₃₆ -C ₃₅ -C ₃₇ -H ₆₂	P96
159/159	C ₃₅ -C ₃₄ -H ₆₀	H78	201/201	C ₃₇ -C ₃₆ -C ₃₈ -H ₆₃	P95
160/160	C ₃₅ -C ₃₆ -C ₃₇	H79	202/202	C ₃₈ -C ₃₇ -C ₃₃ -H ₆₄	P98
161/161	C ₃₅ -C ₃₆ -H ₆₂	H80	203/203	C ₁ -O ₂	T99
162/162	C ₃₆ -C ₃₅ -H ₆₁	H81	204/204	O ₂ -C ₃	T100
163/163	C ₃₆ -C ₃₇ -C ₃₈	H76	205/205	C ₃ -C ₄	T101
164/164	C ₃₆ -C ₃₇ -H ₆₃	H81	206/206	C ₃ -C ₈	T101
165/165	C ₃₇ -C ₃₆ -H ₆₂	H80	207/207	C ₄ -C ₅	T102
166/166	C ₃₇ -C ₃₈ -H ₆₄	H78	208/208	C ₅ -C ₆	T103
167/167	C ₃₈ -C ₃₇ -H ₆₃	H77	209/209	C ₆ -C ₇	T103
168/168	H ₃₉ C ₁ H ₄₀	H82	210/210	C ₆ -C ₉	T104
169/169	H ₃₉ C ₁ H ₄₁	H82	211/211	C ₇ -C ₈	T102
170/170	H ₄₀ C ₁ H ₄₁	H82	212/212	C ₉ -C ₁₁	T105
171/171	H ₅₁ C ₂₁ H ₅₂	H82	213/213	C ₁₁ -C ₁₂	T105
172/172	H ₅₁ C ₂₁ H ₅₃	H82	214/214	C ₁₁ -C ₂₂	T106
173/173	H ₅₂ C ₂₁ H ₅₃	H82	215/215	C ₁₂ -C ₁₄	T104
174/174	C ₃ -O ₂ -C ₄ -C ₈	P83	216/216	C ₁₄ -C ₁₅	T103
175/175	C ₄ -C ₃ -C ₅ -H ₄₂	P84	217/217	C ₁₄ -C ₁₉	T103
176/176	C ₅ -C ₄ -C ₆ -H ₄₃	P85	218/218	C ₁₅ -C ₁₆	T102
177/177	C ₆ -C ₅ -C ₇ -C ₉	P84	219/219	C ₁₆ -H ₁₇	T101
178/178	C ₇ -C ₆ -C ₈ -H ₄₄	P83	220/220	C ₁₇ -C ₁₈	T101
179/179	C ₈ -C ₃ -C ₇ -H ₄₅	P86	221/221	C ₁₇ -O ₂₀	T100
180/180	C ₉ -C ₆ -O ₁₀ -C ₁₁	P86	222/222	C ₁₈ -C ₁₉	T102
181/181	C ₁₂ -C ₁₁ -O ₁₃ -C ₁₄	P85	223/223	O ₂₀ -C ₂₁	T99
182/182	C ₁₄ -C ₁₂ -C ₁₅ -C ₁₉	P84	224/224	C ₂₂ -N ₂₄	T107
183/183	C ₁₅ -C ₁₄ -C ₁₆ -H ₄₇	P83	225/225	N ₂₄ -C ₂₅	T108
184/184	C ₁₆ -C ₁₅ -C ₁₇ -H ₄₈	P82	226/226	N ₂₄ -N ₃₁	T109

Tablo 3.24. (Devamı) AHD Bileşiminin Kuvvet Sabitleri

Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No	Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No
227/227	C ₂₅ -C ₂₆	T110	234/234	C ₃₂ -C ₃₃	T114
228/228	C ₂₅ -C ₃₀	T110	235/235	C ₃₃ -C ₃₄	T115
229/229	C ₂₆ -C ₂₇	T111	236/236	C ₃₃ -C ₃₈	T115
230/230	C ₂₇ -C ₂₈	T112	237/237	C ₃₄ -C ₃₅	T116
231/231	C ₂₈ -C ₂₉	T112	238/238	C ₃₅ -C ₃₆	T117
232/232	C ₂₉ -C ₃₀	T111	239/239	C ₃₆ -C ₃₇	T117
233/233	N ₃₁ -C ₃₂	T113	240/240	C ₃₇ -C ₃₈	T116

Tablo 3.25. AHD Bileşiminin Etkileşim Kuvvet Sabitleri

Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No	Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No
1/5	C ₁ -O ₂ /O ₂ -C ₃	F118	6/8	C ₃ -C ₄ /C ₄ -C ₅	F125
31/35	C ₁₇ -O ₂₀ /O ₂₀ -C ₂₁	F119	13/87	C ₆ -C ₉ /C ₆ C ₉ O ₁₀	F126
2/3	C ₁ -H ₃₉ /C ₁ H ₄₀	F119	15/16	C ₇ H ₄₄ /C ₈ H ₄₅	F127
2/4	C ₁ -H ₃₉ /C ₁ H ₄₁	F119	9/11	C ₄ H ₄₂ /C ₅ H ₄₃	F127
36/37	C ₂₁ -H ₅₁ /C ₂₁ -H ₅₂	F119	63/65	C ₃₆ -C ₃₇ /C ₃₇ -C ₃₈	F128
36/38	C ₂₁ -H ₅₁ /C ₂₁ -H ₅₃	F119	58/65	C ₃₃ -C ₃₈ /C ₃₇ C ₃₈	F128
5/6	O ₂ -C ₃ /C ₃ -C ₄	F120	61/63	C ₃₅ C ₃₆ /C ₃₆ -C ₃₇	F128
30/31	C ₁₇ -C ₁₈ /C ₁₇ -O ₂₀	F120	59/61	C ₃₄ -C ₃₅ /C ₃₅ -C ₃₆	F128
5/72	O ₂ -C ₃ /O ₂ C ₃ C ₄	F121	57/59	C ₃₃ -C ₃₄ /C ₃₄ -C ₃₅	F128
5/73	O ₂ -C ₃ /O ₂ C ₃ C ₈	F121	57/58	C ₃₃ -C ₃₄ /C ₃₃ -C ₃₈	F128
31/112	C ₁₇ -O ₂₀ /C ₁₆ C ₁₇ O ₂₀	F121	44/51	C ₂₅ -C ₃₀ /C ₂₉ -C ₃₀	F128
5/68	O ₂ -C ₃ /C ₁ O ₂ C ₃	F122	44/49	C ₂₈ -C ₂₉ /C ₃₀ -C ₂₅	F128
31/116	C ₁₇ -O ₂₀ /C ₁₇ O ₂₀ C ₂₁	F122	45/49	C ₂₆ -C ₂₇ /C ₂₈ -C ₂₉	F128
13/18	C ₆ -C ₉ /C ₉ -C ₁₁	F123	43/45	C ₃₅ -C ₃₆ /C ₃₆ C ₃₇	F128
73/77	O ₂ C ₃ C ₈ /C ₃ C ₅ H ₄₅	F124	61/63	C ₂₅ -C ₂₆ /C ₂₆ C ₃₀	F128
112/113	C ₁₆ C ₁₇ O ₂₀ /C ₁₇ C ₁₆ H ₄₈	F124	61/63	C ₃₅ -C ₃₆ /C ₃₇ -C ₃₈	F128
13/17	C ₆ -C ₉ /C ₉ O ₁₀	F125	44/45	C ₂₅ -C ₃₀ /C ₂₆ C ₂₇	F129
10/12	C ₅ -C ₆ /C ₆ -C ₇	F125	43/47	C ₂₅ -C ₂₆ /C ₂₇ -C ₂₈	F129
12/14	C ₆ -C ₇ /C ₇ -C ₈	F125	44/49	C ₂₅ -C ₃₀ /C ₂₈ -C ₂₉	F129
8/10	C ₄ -C ₅ /C ₅ -C ₆	F125	45/49	C ₂₆ -C ₂₇ /C ₂₈ -C ₂₉	F129
7/14	C ₃ -C ₈ /C ₇ -C ₈	F125	43/51	C ₂₅ -C ₂₆ /C ₂₉ -C ₃₀	F129
6/7	C ₃ -C ₈ /C ₃ -C ₄	F125	47/51	C ₂₇ -C ₂₈ /C ₂₉ -C ₃₀	F129

Tablo 3.25. (Devamı) AHD Bileşiğinin Etkileşim Kuvvet Sabitleri

Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No	Satır/ Sütun No	İç Koordinat	KS No
58/59	$C_{33}-C_{38}/C_{34}C_{35}$	F129	58/155	$C_{33}-C_{38}/C_{33}C_{38}H_{64}$	F132
57/61	$C_{33}-C_{34}/C_{35}-C_{36}$	F129	58/156	$C_{33}C_{38}/C_{38}C_{33}C_{34}$	F132
58/63	$C_{33}-C_{38}/C_{36}-C_{37}$	F129	59/158	$C_{34}C_{35}/C_{34}-C_{35}H_{61}$	F132
59/63	$C_{34}-C_{35}/C_{36}-C_{37}$	F129	61/161	$C_{35}-C_{36}/C_{35}C_{36}H_{62}$	F132
57/65	$C_{33}-C_{34}/C_{37}-C_{38}$	F129	63/170	$C_{36}-C_{37}/C_{36}-C_{37}-H_{63}$	F132
58/61	$C_{33}-C_{38}/C_{35}-C_{36}$	F130	65/172	$C_{37}-C_{38}/C_{37}C_{38}H_{64}$	F132
57/63	$C_{33}-C_{34}/C_{36}-C_{37}$	F130	152/156	$C_{33}C_{34}C_{35}/C_{34}C_{33}C_{38}$	F133
59/65	$C_{34}-C_{35}/C_{37}-C_{38}$	F129	154/156	$C_{33}C_{38}C_{37}/C_{34}C_{33}C_{38}$	F133
57/152	$C_{33}-C_{34}/C_{33}-C_{34}-C_{35}$	F131	157/160	$C_{34}C_{35}C_{36}/C_{35}C_{36}C_{37}$	F133
59/152	$C_{34}-C_{35}/C_{33}-C_{34}-C_{35}$	F131	160/163	$C_{35}C_{36}C_{37}/C_{36}C_{37}C_{38}$	F133
58/154	$C_{33}-C_{38}/C_{33}-C_{38}-C_{37}$	F131	128/131	$C_{25}C_{26}C_{27}/N_{24}C_{25}C_{30}$	F133
65/154	$C_{37}-C_{38}/C_{33}-C_{38}-C_{37}$	F131	131/136	$C_{25}C_{26}C_{27}/C_{26}C_{27}C_{28}$	F133
61/157	$C_{35}-C_{36}/C_{34}-C_{35}-C_{36}$	F131	139/142	$C_{27}C_{28}C_{29}/C_{28}C_{29}C_{30}$	F133
63/163	$C_{36}-C_{37}/C_{36}-C_{37}-C_{38}$	F131	191/192	P_{33}/P_{34}	F134
43/31	$C_{25}-C_{26}/C_{25}-C_{26}-C_{27}$	F131	191/196	P_{33}/P_{38}	F134
45/136	$C_{26}-C_{27}/C_{26}-C_{27}-C_{28}$	F131	191/193	P_{33}/P_{35}	F135
47/139	$C_{27}-C_{28}/C_{27}-C_{28}-C_{29}$	F131	191/195	P_{33}/P_{37}	F135
49/142	$C_{28}-C_{29}/C_{28}-C_{29}-C_{30}$	F131	191/229	P_{33}/T_{33-34}	F136
51/142	$C_{29}-C_{30}/C_{28}-C_{29}-C_{30}$	F131	191/230	P_{33}/T_{33-38}	F136
57/153	$C_{33}-C_{34}/C_{33}C_{34}H_{60}$	F132			

Tablo 3.26. AHD Bileşiğinin Kuvvet Sabitleri Değerleri

Kuvvet Sabit Simgesi	Kuvvet Sabit Değeri	Kaynak	Kuvvet Sabit Simgesi	Kuvvet Sabit Değeri	Kaynak
K01	5,0618	[53]	K08	5,0550	[53]
K02	4,6384	[53]	K09	5,7440	[53]
K03	4,1938	[53]	K10	8,5900	[53]
K04	6,4330	[53]	K11	5,7440	[53]
K05	6,4330	[53]	K12	5,7440	[53]
K06	5,0550	[53]	K13	6,2141	[53]
K07	6,4330	[53]	K14	8,5900	[53]

Tablo 3.26. (Devamı) AHD Bileşiminin Kuvvet Sabitleri Değerleri

Kuvvet Sabiti Simgesi	Kuvvet Sabiti Değeri	Kaynak	Kuvvet Sabiti Simgesi	Kuvvet Sabiti Değeri	Kaynak
K15	630,000	[53]	H57	84,900	[48]
K16	5,1258	[53]	H58	1,3916	[48]
K17	7,0000	[53]	H59	86,100	[48]
K18	6,4540	[53]	H60	92,000	[48]
K19	6,4540	[48]	H61	50,800	[48]
K20	5,1010	[48]	H62	73,500	[48]
K21	6,4540	[48]	H63	92,000	[48]
K22	5,1010	[48]	H64	50,800	[48]
K23	5,1010	[48]	H65	50,800	[48]
K24	6,3000	[48]	H66	92,000	[48]
K25	5,4290	[53]	H67	50,800	[48]
K26	498,000	[17]	H68	50,800	[48]
K27	6,4560	[52]	H69	79,800	[17]
H28	6,4560	[52]	H70	54,500	[17]
H29	5,1010	[52]	H71	0,9200	[59]
H30	6,4560	[52]	H72	84,900	[48]
H31	5,1010	[52]	H73	1,3916	[48]
H32	5,1010	[52]	H74	86,100	[48]
H33	1,8157	[53]	H75	92,000	[48]
H34	0,8612	[53]	H76	50,800	[48]
H35	1,1760	[53]	H77	73,500	[48]
H36	0,9340	[54]	H78	92,000	[48]
H37	0,5110	[54]	H79	50,800	[48]
H38	0,8527	[53]	H80	50,800	[48]
H39	0,9340	[54]	H81	0,5080	[59]
H40	0,5110	[54]	H82	0,7500	[48]
H41	0,5110	[54]	P83	0,3231	[53]
H42	0,9340	[54]	P84	0,2860	[54]
H43	0,9340	[54]	P85	0,2860	[54]
H44	0,5110	[54]	P86	0,2860	[54]
H45	0,5491	[54]	P87	0,6074	[54]
H46	100,800	[48]	P88	70,800	[48]
H47	90,800	[48]	P89	20,640	[48]
H48	86,800	[48]	P90	51,900	[48]
H49	0,5491	[54]	P91	78,400	[48]
H50	0,5491	[54]	P92	78,400	[48]
H51	1,3254	[50]	P93	78,400	[48]
H52	0,8810	[50]	P94	29,600	[48]
H53	86,800	[48]	P95	49,500	[17]
H54	0,8964	[50]	P96	78,400	[48]
H55	64,800	[48]	P97	78,400	[48]
H56	0,7566	[48]	T98	78,400	[48]

Tablo 3.26. (Devamı) AHD Bileşiminin Kuvvet Sabitleri Değerleri

Kuvvet Sabiti Simgesi	Kuvvet Sabiti Değeri	Kaynak	Kuvvet Sabiti Simgesi	Kuvvet Sabiti Değeri	Kaynak
T99	0,0178	[48]	F118	0,2403	[48]
T100	0,0306	[48]	F119	0,0410	[48]
T101	0,0390	[54]	F120	0,2579	[48]
T102	0,0390	[54]	F121	0,5336	[48]
T103	0,0390	[54]	F122	0,4492	[48]
T104	0,0090	[54]	F123	0,0089	[48]
T105	5,0000	[48]	F124	0,0983	[48]
T106	5,0000	[48]	F125	0,7500	[54]
T107	5,0000	[48]	F126	0,0648	[54]
T108	1,9000	[48]	F127	0,4667	[54]
T109	3,0000	[48]	F128	0,7840	[54]
T110	27,8400	[48]	F129	-0,3360	[54]
T111	27,8400	[48]	F130	0,3120	[54]
T112	27,840	[48]	F131	0,1800	[54]
T113	49,1000	[48]	F132	0,1760	[54]
T114	20,0000	[48]	F133	0,0630	[54]
T115	27,8400	[48]	F134	0,0180	[54]
T116	27,8400	[48]	F135	0,0210	[54]
F117	27,8400	[48]	F136	0,1790	[54]

*K gerilme, H: düzlem içi bükülme, P:düzlem dışı bükülme, T: torsiyon ve F etkileşim kuvvet sabitini göstermektedir.

*Birimler; K için N / m ; H ve P Nm/rad²; Gerilme bükülme etkileşimi N/rad

4. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

4.1. Deneysel Sonuçlar

Bu çalışmada yeni sentezlenmiş olunan 4-p-metoksibenzoil-5-p-metoksifenil-2,3-furandion (FD), Benzaldehit fenilhidrazon (BAFH) ve N-benziliden-N-fenil-p,p'-dimetoksidibenzoil-asetasidi hidraziti (AHD) moleküllerinin deneysel titreşim spektrumları (IR ve RAMAN) yorumlanıp söz konusu bileşiklerin Normal Koordinat Analizi (NKA) yöntemiyle spektrumları aydınlatılmaya çalışılmıştır. NKA sırasında, moleküle ait fiziksel özellikler (bağ uzunlukları, bağ açıları, torsiyon açıları) DFT ve HF yöntemleri kullanılarak hesaplanmış optimize geometriler için kuvvet sabitleri benzer bileşiklerden transfer edilip bilgisayar programı [13] yardımıyla moleküle ait IR, Raman Frekansları, arkasından da atom yarıçapları ve elektronegatiflikler veri olarak kullanılıp titreşimlerin aktiviteleri hesaplanmış ve bileşikler için Değerlik Kuvvet Alanı (Valance Force Field) geliştirilmiştir. Sonuçta elde edilen hesaplanmış frekanslar ve aktiviteler yardımıyla deneysel spektrumlar aydınlatılmaya çalışılmıştır [13].

4.2. Bileşiklerin Normal Koordinat Analizi

4.2.1. BAFH' nin Normal Koordinat Analizi

İncelenen bileşiğin geometrik parametreleri DFT ve HF yöntemleri kullanılarak hesaplanmış Tablo 3.3 ve Tablo 3.4' te verilmiştir. Normal Koordinat Analizinde, Benzen, Anilin, Hidrazit, Benzaldehit gibi bileşiklerinden moleküle uyan kısımlarının kuvvet sabitleri transfer edilerek bileşiğin frekansları hesaplanmıştır. Hesaplamalar için 101 İç koordinat, 65 köşegen, 15 köşegen dışı olmak üzere 80 kuvvet sabiti kullanılmıştır. C_s simetrisi varsayılarak yapılan hesaplamada $\Gamma_{\text{titreşim}} = 51A' + 24A''$ simetrik frekanslar bulunmuştur. Toplam 75 titreşim hareket serbestliğinin hepsi hem IR hemde Raman da aktiftir. Transfer edilen kuvvet sabitlerinden bazıları deneysel frekansları en iyi verecek şekilde iterasyon yoluyla hesaplanan deneysel frekanslara yaklaştırılarak yeni değerlik kuvvet sabitleri (dolayısıyla bileşik için yeni Değerlik Kuvvet Alanı- Valance Force Field)

geliştirilmiştir (Tablo 4.1). Tablolarda kuvvet sabitlerindeki değişime bağlı frekanslardaki değişim de görülmektedir.

Bileşiğe ait gözlenen ve hesaplanan frekanslar, SPSIM programıyla hesaplanan potansiyel enerji dağılımları (PED) toplu olarak Tablo 4.2.'de görülmektedir.

Tablo 4.1. BAFH için FIT İşlemi Uygulanan Kuvvet Sabitleri ve Hesaplanan Frekanslara Etkileri

SİMGE	YENİ KUVVET SABİTİ DEĞERİ	YENİ FREKANS
K01	5,0000	1565, 1312, 1287, 1100, 1013, 985, 806, 583
K02	4,3000	1318, 685, 202
K03	4,8000	1584, 1449, 1148, 989, 985, 929
K04	4,8279	3028
K05	5,8851	1566, 1514, 1177, 1105, 994, 928
K07	4,8800	2999
K08	6,8000	1602, 1520, 1203, 1066
K10	5,8000	1177
K11	4,0000	748, 218
K12	6,0432	3312
K13	5,8676	1602, 1591, 1341, 911, 502
K14	5,0300	1586, 1520, 1442, 1341, 1149, 1133, 964, 911
K15	4,9616	3057, 3028, 3023
K16	6,1409	1591, 1494, 1341, 1203, 1149, 1133, 964, 911
K17	5,0001	3057, 3028, 3023
K18	5,0001	3057, 3028
H20	0,4300	1485, 1391
H26	0,4500	1514, 1449

Tablo 4.1. (Devamı) BAFH için FIT İşlemi Uygulanan Kuvvet Sabitleri ve Hesaplanan Frekanslara Etkileri

SİMGE	YENİ KUVVET SABİTİ DEĞERİ	YENİ FREKANS
H27	0,5268	1485, 1391, 1315, 1301
H29	0,4000	1449, 1105
H30	0,4300	1514, 1449, 1301
H32	0,5000	1485
H34	0,4000	1066
H36	0,4000	1066
H37	0,8500	1358, 566
H38	0,5500	1358
H42	0,5300	1358
H44	0,4500	1442, 1149, 1133
P46	0,5020	648, 438, 430, 114
P47	0,4500	1288, 1133, 1105, 978, 881
P48	0,5500	1288, 978, 881, 648, 374
P49	0,4500	1133, 1105, 881, 374
P50	0,3000	1028, 312, 114
P53	0,5200	1257, 1223, 1168, 1074, 928, 850, 340
P54	0,5200	1257, 1223, 1168, 928, 850, 340
P55	0,5500	1257, 1223, 1074, 850
T56	0,3260	648, 312, 114
T59	0,2000	438, 430, 374, 312
T60	0,8699	1028, 312, 114
T63	0,2500	612, 340, 240, 184
F66	0,7800	1105, 1257
F70	0,1500	1105

Tablo 4.2. BAFH Bileşiminin Titreşim Frekansları, PED ve Yorumları

NO	IR	SPSIM	^DFT	^HF	PED (Ks>%10)	YORUM
1	3312	3311	3369	3440	100 K12	v N-H
2	3070	3066	3110	3076	98 K06	v C-H
3	3070	3063	3091	3059	99 K 06	v C-H
4	3057	3044	3084	3044	52 K17+ 42 K18	v C-H
5	3057	3035	3080	3043	11 K15+ 88 K17	v C-H
6	3028	3027	3067	3031	99 K04	v C-H
7	3028	3025	3067	3027	25 K15+ 24 K17+ 50 K18	v C-H
8	3023	3021	3059	3020	80 K15+ 17 K17	v C-H
9	3023	3020	3058	3017	80 K15+ 17 K17	v C-H
10	2999	2998	3048	3010	97 K07	v C-H
11	2971	2984	3043	3004	98 K09	v C _m -H
12	2971	2982	2915	2915	99 K09	v C _m -H
13	1602	1612	1612	1720	14 K08+ 12 K13	v C=N+ v C-C
14	1591	1590	1599	1635	20 K13+ 49 K16	v C-C
15	1586	1584	1591	1630	13 K03+ 11 K14	v C-C
16	1566	1565	1581	1619	22 K01+ 40 K05	v C-C
17	1520	1540	1564	1607	13 K08+ 14 K14	v C-C
18	1514	1532	1514	1543	13 K05+ 18 H26+ 17 H30	δ CCH
19	1494	1492	1479	1504	18 K16+ 22 H41	δ CCH
20	1485	1490	1477	1503	11 H20+ 27 H22+ 11 H27+ 30 H32	δ CCH
21	1449	1449	1437	1459	11 K03+ 21H26+ 27 H29+ 22 H30	δ CCH
22	1442	1420	1430	1451	16 K14+19 H41+ 21 H44+ 23 H45	δ CCH

Tablo 4.2. (Devamı) BAFH Bileşiğinin Titreşim Frekansları, PED ve Yorumları

NO	IR	SPSIM	^DFT	^HF	PED (Ks>%10)	YORUM
23	1391	1412	1347	1375	37 H20+ 32 H27	δ CCH
24	1358	1342	1315	1329	25 H37+ 20 H38+ 17 H42	δ CCH + δ CCH
25	1341	1316	1312	1316	28 K13+ 12 K14+ 22 K16	ν C-C
26	1315	1312	1300	1267	12 K01+ 15 K02+ 17 H27	ν C-C
27	1301	1287	1278	1219	15 K01+ 11 H27+ 10 H30	δ CCH
28	1288	1271	1251	1207	26 P47+ 51 P48+ 17T58	γ C
29	1257	1263	1207	1198	15 P53+ 41 P54+ 28 P55+ 11 T65- 14 F66	γ C
30	1223	1236	1156	1168	12 P53+ 38 P54+ 33 P55+ 12 T65	γ C
31	1203	1194	1153	1166	13 K08+ 12 K16	ν C-N + ν C-C
32	1177	1168	1140	1138	11 K05+ 21 K10	ν C-C + ν N-N
33	1168	1155	1139	1097	38 P53+ 41 P54+ 15 T64	γ C
34	1159	1148	1137	1091	10 K03+ 10 H37	ν C-C+ δ CCC
35	1149	1123	1066	1069	13 K14+ 17 K16+ 21 H44	ν C-C+ δ CCH
36	1133	1117	1061	1065	13 K14+ 21 K16+ 15 H41+ 14 H44	ν C-C+ δ CCH
37	1105	1112	1012	1018	41 P47+ 27 P49+ 10 F70+ - 13 F66	γ C
38	1105	1100	1011	1017	23 K01+ 28 K05+ 13 H29	ν C-C
39	1074	1079	974	1017	54 P53+ 24 P55	γ C
40	1066	1052	970	1005	32 K08+ 18 H34+ 20 H36	δ NNC + δ NCC
41	1028	1034	960	997	50 P50+ 33 T60	γ C

Tablo 4.2. (Devamı) BAFH bileşiğinin Frekansları, PED ve Yorumları

NO	IR	SPSIM	Δ DFT	Δ HF	PED ($K_s > \%10$)	YORUM
42	1028	1023	948	986	43K14+ 15 H44	ν C-C + δ CCCH
43	994	1013	936	983	12 K01+ 21 K05+ 11 H25	ν C-C
44	978	1005	923	977	30 P47+ 31 P48	γ C
45	964	989	910	974	28 K03+ 21 K16	ν C-C
46	964	985	886	932	11 K01+ 63 K03	ν C-C
47	928	950	880	903	42 P53+ 40 P54	γ C
48	928	929	858	890	25 K03+ 20 K05+12 T65	ν C-C
49	911	915	823	862	13 K13+ 21 K14+ 14 K16+ 11T65	ν C-C
50	881	907	802	841	18 P47+ 42 P48+ 31 P49	γ C
51	850	848	800	800	12 P53+ 43 P54+ 32 P55	γ C
52	830	806	742	767	23 K01+ 15 H31	ν C-C + δ CCN
53	748	719	733	761	15 K11+ 14 K13	ν N-C + ν C-C
54	688	680	680	697	50 P51+ 25 P52	γ C
55	648	622	677	696	36 P46+ 11 P48+ 11 T56+ 19 T58	τ C-C + γ C
56	636	613	633	638	13 H19+ 13 H21+ 12 H25	δ CCC + δ CCN
57	612	590	625	635	30 P51+ 10 T63+ 17 T64+ 14 T65	τ C-C + γ C
58	592	583	608	612	13 K01+ 22 K19+ 26 H25	ν C-C + δ CCC
59	566	566	605	610	15 H37+ 31 H40	δ CCC
60	502	530	504	518	12 K13+ 18 H40	ν C-C + δ CCC
61	438	450	499	509	16 P46+ 18 P52+ 21 T59+ 20 T65	γ C+ τ C-C

Tablo 4.2. (Devamı) BAFH bileşiğinin Frekansları, PED ve Yorumları

NO	IR	SPSIM	[^] DFT	[^] HF	PED (Ks>%10)	YORUM
62	430	445	480	481	14 P46+ 21 P52+ 17 T59+ 20 T65	γ C+ τ C-C
63	390	415	444	413	12 K02+ 12 H35+ 10 H39	ν C-C + δ NCC
64	374	373	402	410	30 H24+ 19 H31+ 28 H35	δ CCC+ δ CCN
65	374	372	399	400	17+ P47+ 48 T58+ 12 T59	τ C-C
66	340	368	378	381	10 P53+ 10 P54+ 13 T63+ 53 T64+ 13 T65	τ C-C
67	312	294	294	311	15 P50+ 31 T56+ 15 T59+ 20 T60	τ C-C
68	240	228	246	253	56 T57+ 15 T63	τ C-C
69	218	202	220	224	14 K02+ 16 K11+ 17 H31	ν N-C+ δ CNN
70	184	195	205	194	23 T57+ 43 T63	τ C-C
71	142	161	174	166	15 H21+ 28 H24+ 15 H33+ 26 H35	γ C+ δ CCC
72	114	109	102	102	16 P46+ 26 P50+ 24 T56+ 15 T57+ 10 T60	γ C+ δ CCC
73	48	51	55	55	22 H21+ 22 H31+ 26 H33	δ CCN+ δ NNC
74	38	23	35	34	89 T62	τ C-N
75	9	9	28	22	50 T61 +43 T57	τ N-N

* ν , Gerilme titreşimini; δ , düzlem içi bükülme titreşimini; P, düzlem dışı bükülme titreşimini; T, torsiyon titreşimini göstermektedir.

* “Den” kısaltması “Deneysel” i, “Hes” kısaltması “Hesaplanan” ı, “PED” kısaltması “Potansiyel enerji dağılımı” nı, ifade etmektedir.

* C_m, Alifatik karbonu göstermektedir.

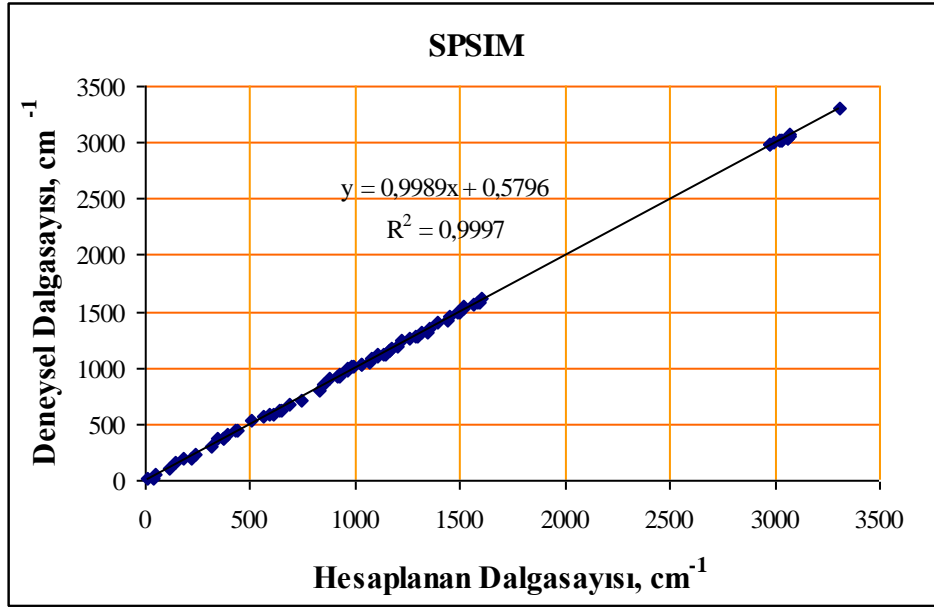
[^]DFT ve HF düzeltme faktörü ile çarpılmıştır.

Burada BAFH' nın hidrazin grubundaki N-H gerilme titreşimi SPSIM, DFT ve HF de sırasıyla 3311 cm^{-1} , 3369 cm^{-1} , 3440 cm^{-1} dalga sayılarında hesaplanmış ve deneysel spektrumda 3312 cm^{-1} dalga sayısında gözlenmiştir. C. Ravikumar ve arkadaşları aynı tür bileşiğin aynı titreşimlerini 3448 cm^{-1} dalga sayılarında hesaplamıştır [56]. Bu N-H bandı AHD bileşiğinin oluşumu sırasında kaybolmaktadır.

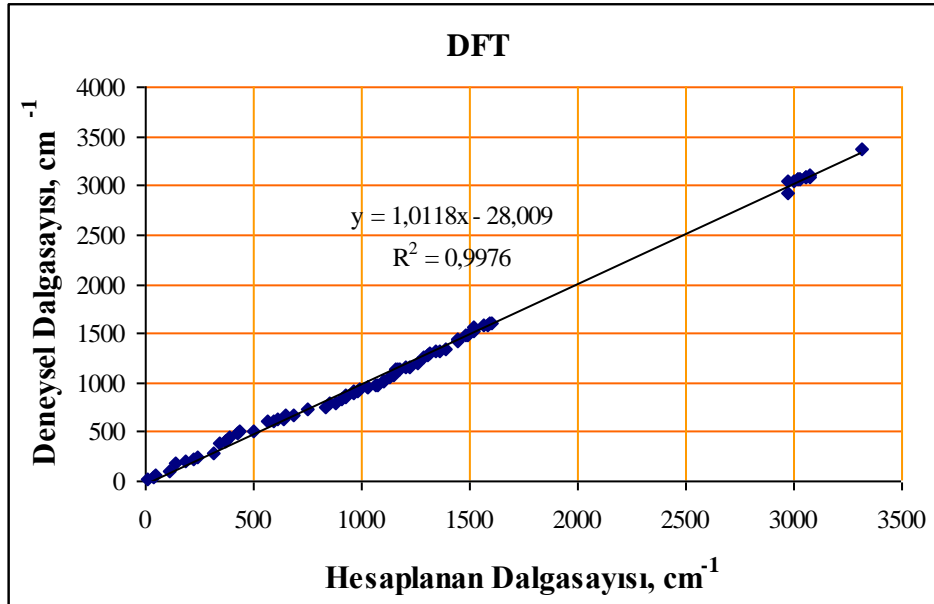
Bu çalışmada benzene bağlı aromatik C-H gerilme titreşimleri teorik olarak SPSIM' de $3066, 3063, 3044, 3035, 3027, 3025, 3021, 3020, 2998\text{ cm}^{-1}$; DFT'de $3110, 3091, 3084, 3080, 3067, 3059, 3058, 3048\text{ cm}^{-1}$; HF' de $3076, 3059, 3044, 3043, 3031, 3027, 3020, 3017, 3010\text{ cm}^{-1}$ dalga sayılarında hesaplanmıştır. Deneysel spektrumda ise $3070, 3091, 3084, 3080, 3067, 3059, 3058, 3048$ ve 3043 cm^{-1} dalga sayılarında gözlenmiştir. C. Ravikumar ve arkadaşları aynı titreşimleri $3072, 3011, 2962$ ve 2886 cm^{-1} dalga sayılarında hesaplamışlardır [56].

Alifatik C-H gerilme titreşimi deneysel spektrumda 2971 cm^{-1} dalga sayısında gözlenmiş ve SPSIM' de $2984, 2982\text{ cm}^{-1}$; DFT' de $3043, 2915\text{ cm}^{-1}$; HF' de $3004, 2915\text{ cm}^{-1}$ dalga sayılarında hesaplanmıştır. C. Ravikumar ve arkadaşları aynı titreşimleri 2839 cm^{-1} dalga sayılarında hesaplamışlardır [56].

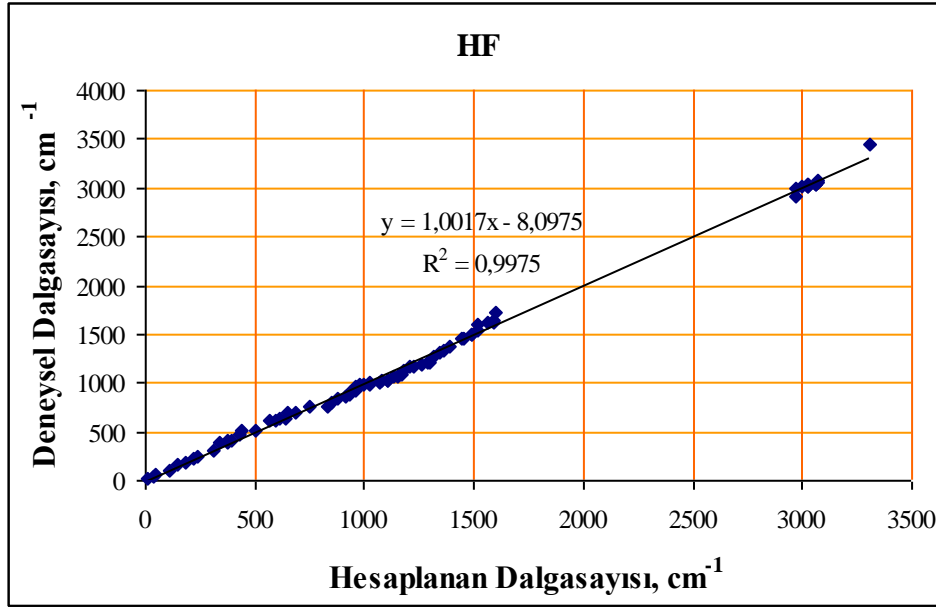
Bu çalışmada aromatik C=C gerilme titreşimleri teorik olarak SPSIM' de $1590, 1584, 1565, 1540\text{ cm}^{-1}$; DFT' de $1599, 1591, 1581, 1564\text{ cm}^{-1}$; $1635, 1630, 1619, 1607\text{ cm}^{-1}$ dalga sayılarında hesaplanmıştır. Deneysel spektrumda ise $1591, 1586, 1566$ ve 1520 cm^{-1} dalga sayılarında gözlenmiştir. BAFH bileşiğinin hesapladığımız frekanslarının uyum içinde olduğu görülmüştür.



Şekil 4.1. BAFH Bileşiği için deneysel ve SPSIM ile hesaplanan frekanslar arasındaki korelasyon grafiği



Şekil 4.2. BAFH Bileşiği için deneysel ve DFT ile hesaplanan frekanslar arasındaki korelasyon grafiği



Şekil 4.3. BAFH Bileşiği için deneysel ve HF ile hesaplanan frekanslar arasındaki korelasyon grafiği

BAFH Bileşiği için hesaplanan (SPSIM, DFT ve HF) ve deneysel frekanslar arasındaki korelasyon lineer olup sırasıyla $y = 0,9989x + 0,5796$ ($R^2 = 0,9997$), $y = 1,0118x - 28,009$, ($R^2 = 0,9976$) ve $y = 1,0017x - 8,0975$ ($R^2 = 0,9975$) eşitlikleri elde edilmiştir. SPSIM ile elde edilen frekans değerleri diğer metotlara göre deneysel verilere daha yakın sonuçlardır. BAFH için hesaplanan % Bağıl Hata SPSIM, DFT ve HF için sırasıyla 2,39; 7,58; 6,27'dir.

4.2.2. FD Bileşiğinin Normal Koordinat Analizi

İncelenen bileşiğin geometrik parametreleri DFT ve HF yöntemleri kullanılarak hesaplanmış Tablo 3.5 ve Tablo 3.6' da verilmiştir. Normal Koordinat Analizinde, Metoksi, Metoksibenzoil, metoksi benzen Furan ve Benzaldehit gibi bileşiklerinden moleküle uyan kısımlarının kuvvet sabitleri transfer edilerek bileşiğin frekansları hesaplanmıştır. Hesaplamalar için 148 İç koordinat, 99 köşegen, 22 köşegen dışı olmak üzere 121 kuvvet sabiti kullanılmıştır. C_1 simetrisi varsayılarak yapılan hesaplamada $\Gamma_{\text{titreşim}} = 117A'$ simetrik frekanslar bulunmuştur. Toplam 111 titreşim hareket serbestliğinin hepsi hem IR hemde Raman da aktiftir. Transfer edilen kuvvet sabitlerinden bazıları deneysel frekansları en iyi verecek şekilde iterasyon yoluyla

hesaplanan deneysel frekanslara yaklaştırılarak yeni değerlik kuvvet sabitleri (dolayısıyla bileşik için yeni Değerlik Kuvvet Alanı- Valance Force Field) geliştirilmiştir (Tablo 4.3). Tablolarda kuvvet sabitlerindeki değişime bağlı frekanslardaki değişim de görülmektedir.

Bileşiğe ait gözlenen ve hesaplanan frekanslar, SPSIM programıyla hesaplanan potansiyel enerji dağılımları (PED) toplu olarak Tablo 4.4.'de görülmektedir.

Tablo 4.3. FD için FIT İşlemi Uygulanan Kuvvet Sabitleri ve Hesaplanan Frekanslara Etkileri

SİMGE	YENİ KUVVET SABİTİ DEĞERİ	YENİ FREKANS
K02	4,6000	2959, 2937, 2839
K03	4,0000	1275, 1183, 722
K05	6,1000	1765, 1602, 1183, 1168, 1115, 1088
K06	5,1000	3102, 3009, 3005
K07	6,5000	1723, 1424, 1034
K08	5,1000	3102, 3009, 3005, 1438, 847
K09	5,5000	1311
K10	8,2500	1806, 1717, 1591, 1438, 1424
K11	5,3000	1717, 1648
K12	5,1000	1311
K14	10,3000	1818, 1806
K15	5,0000	1367
K16	10,5000	1765
K17	6,5000	1367, 1311
K18	6,2000	1591, 1438

Tablo 4.3. (Devamı) FD için FIT İşlemi Uygulanan Kuvvet Sabitleri ve Hesaplanan Frekanslara Etkileri

SİMGE	YENİ KUVVET SABİTİ DEĞERİ	YENİ FREKANS
K20	6,4000	1765, 861
K21	5,8000	1806, 1744, 1179, 1112, 1058
K23	6,2000	1744, 1648, 778
K25	4,3000	1304, 1254, 778, 506
K27	4,6000	2937, 2839
H29	0,8000	1640, 1557, 1504, 1495, 1275, 1254, 1180
H49	0,0934	64
H50	0,9000	827, 340
H61	0,5000	1648, 1490, 1304
H67	0,7500	1499, 1493, 1226, 1179
H68	0,4300	1640, 1602, 1557, 1504, 1499, 1495, 1493, 1254, 1183, 1168
P70	0,3109	893, 822, 794,
P71	0,2985	893, 794
P73	0,6074	1219, 1183, 969, 662, 634
P79	0,3000	948, 891, 816, 738
P80	0,3000	891, 816, 738
T88	0,0050	62, 40
F100	0,0189	157

Tablo 4.4. FD Bileşiminin Titreşim Frekansları, PED ve Yorumları

NO	IR	SPSIM	^DFT	^HF	PED (Ks>%10)	YORUM
1	3102	3125	3114	3102	46 K06+ 46 K08	v CH
2	3102	3125	3113	3074	46 K06+ 46 K08	v CH
3	3077	3067	3107	3071	42 K22+ 57 K24	v CH
4	3077	3066	3100	3068	47 K22+ 52 K24	v CH
5	3038	3065	3099	3067	55 K22+ 44 K24	v CH
6	3038	3065	3092	3054	52 K22+ 48 K24	v CH
7	3009	2977	3090	3051	50 K06+ 50 K08	v CH
8	3005	2976	3084	3049	50 K06+ 50 K08	v CH
9	2959	2949	3039	2994	99 K02	v C _m H
10	2959	2948	3034	2990	99 K02	v C _m H
11	2937	2944	2979	2946	99 K27	v C _m H
12	2937	2942	2970	2941	99 K02	v C _m H
13	2839	2830	2913	2882	99 K02	v C _m H
14	2839	2829	2907	2879	99 K27	v C _m H
15	1818	1840	1841	1931	33 K14	v OC
16	1806	1817	1727	1840	19 K14+ 12 K10+ 13 K21	v OC
17	1765	1763	1646	1751	55 K16	v OC
18	1765	1763	1599	1631	36 K20	v CC
19	1765	1758	1596	1629	28 K05+ 12 H35+ 14 H39	v CC
20	1744	1740	1554	1595	15 K21+ 48 K23	v CC
21	1723	1738	1545	1592	19 K04+ 13 K07+ 13 H32+ 15 H36	v CC
22	1717	1712	1518	1569	12 K10+ 19 K11	v CC
23	1648	1672	1494	1527	15 K04+ 11 K11+ 11 H35	v CC + δ HCC

Tablo 4.4. (Devamı) FD Bileşiminin Titreşim Frekansları, PED ve Yorumları

NO	IR	SPSIM	^DFT	^HF	PED (Ks>%10)	YORUM
24	1648	1669	1485	1520	17 K23+ 17 H61+ 21 H65	v CC + δ HCC
25	1640	1659	1459	1483	64 H29+ 34 H68	δ HCC+ δ HCH
26	1602	1626	1456	1481	62 H68+ 32 H69	HCC+ δ HCH
27	1602	1625	1448	1475	29 K05+ 17 H32+ 16H35+ 20 H38	HCC+ δ HCH
28	1591	1591	1447	1475	20 K10+ 11 K18	v CO
29	1569	1574	1431	1462	15 K13+ 15 K19+ 11 H62	v CC
30	1557	1531	1430	1461	11 H29+ 29 H68	δ HCH
31	1504	1525	1416	1426	14 H29+ 46 H68	δ HCH
32	1499	1518	1408	1423	20 H67+ 79 H68	δ HCH
33	1495	1515	1339	1370	20 H29+ 82 H68	δ HCH
34	1493	1506	1319	1323	16 H67+ 84 H68	δ HCH
35	1490	1481	1309	1308	17 H 61+ 23 H65	δ HCC
36	1467	1460	1296	1304	30 K04+ 12 H30+ 13 H32	v CC
37	1438	1411	1281	1301	12 K08+ 11 K10+ 12 K18+ 15 K19	v CC
38	1424	1400	1268	1263	39 K07+ 15 K10	v CC
39	1367	1368	1255	1237	12 K15+ 30 K17	v OC
40	1311	1334	1226	1208	11 K09+ 12 K12+ 22 K17	v CC+v OC
41	1304	1275	1202	1202	16 K25+ 20 H61+ 12 H65	δ HCC
42	1275	1251	1168	1180	19 K03+ 16 K04+ 18 H29+ 15 H36	δ HCC
43	1254	1236	1164	1178	11 K25+ 11 H62	vOC+ δHCC
44	1254	1232	1164	1170	50 H29+ 15 H68	δ OCH

Tablo 4.4. (Devamı) FD Bileşiminin Titreşim Frekansları, PED ve Yorumları

NO	IR	SPSIM	^DFT	^HF	PED (Ks>%10)	YORUM
45	1226	1209	1154	1165	49 H67	δ OCH
46	1219	1198	1131	1161	78 P73	γ C
47	1183	1193	1130	1161	11 K03+ 17 K05+ 11 H35+ 11 P73	ν CC + δ HCC
48	1183	1180	1121	1143	85 H 29+ 15 H68	δ OCH
49	1179	1174	1103	1110	25 K21+ 14 H67	ν CC
50	1168	1148	1097	1096	85 H68+ 12 H69	δ HCC
51	1168	1142	1030	1072	48 K05	ν CC
52	1115	1124	1025	1059	15 K01+ 23 K05	ν CC
53	1112	1107	1007	1058	39 K21+ 11 K26	ν CC
54	1088	1069	988	1021	51 K01+ 15 K04+ 10 K05	ν CO
55	1058	1052	984	1009	16 K21+ 47 K26	ν CO
56	1034	1032	959	1002	18 K07+ 18 H31+ 18 H34	δ CCC
57	1016	1010	952	999	17 H57+ 17 H60+ 11 H65	δ CCC
58	969	953	951	997	23 P73+ 15 P74	γ C
59	948	920	946	978	40 P78+ 43 P79	γ C
60	893	922	913	973	43 P70+ 45 P71	γ C
61	891	886	854	886	45 P79+ 47 P80	γ C
62	861	882	851	870	13 K20	ν CC
63	847	844	828	860	11 K07	ν CC
64	836	830	825	857	14 P74+ 12 T94	γ C+ τ C-C
65	827	808	801	837	14 H50+ 15 P70	γ C+ δ CCC
66	816	793	791	830	40 P79+ 36 P80	γ C
67	794	769	784	821	22 P70+ 22 P71	γ C

Tablo 4.4. (Devamı) FD Bileşiminin Titreşim Frekansları, PED ve Yorumları

NO	IR	SPSIM	^DFT	^HF	PED (Ks>%10)	YORUM
68	778	754	777	793	16 K23+ 12 K25+ 10 T85+ 10 T86	γ C
69	738	752	770	782	39 P79+ 38 P80	γ C
70	722	740	740	772	23 K03+ 11 K04	ν CC
71	701	673	718	743	18 H28	δ COC
72	682	663	697	718	14 P77	γ C
73	662	641	679	703	15 H66+ 10 P73	δ COC+ γ C
74	634	615	649	672	20 P73+ 11 P75	γ C
75	608	599	632	642	15 H31+ 15 H34	δ CCC
76	592	588	626	633	17 H57+ 16 H60	δ CCC
77	574	565	614	621	14 H52	δ OCC
78	560	541	596	603	15 P77	γ C
79	506	492	580	585	10 K25	ν CC
80	472	482	519	536	10 H34	δ CCC
81	448	467	504	520	12 H54	δ OCO
82	424	430	487	501	78 P81	γ C
83	412	396	474	477	10 P74+ 22 P78	γ C
84	384	363	472	474	28 H54+ 19 P72	δ OCO
85	360	351	433	456	36 P72	γ C
86	340	337	411	420	24 H50+ 11 H52+ 11 P78	δ OCC
87	320	309	406	418	11 H44+ 17 P78	δ OCC + γ C
88	296	273	404	408	15 P78	γ C
89	272	262	351	357	15 H28+ 13 H30+ 10 H44	δ COC
90	258	245	321	332	10 T83	τ C-C
91	240	221	304	307	15 H30+ 12 H38	δ OCC

Tablo 4.4. (Devamı) FD Bileşiminin Titreşim Frekansları, PED ve Yorumları

NO	IR	SPSIM	[^] DFT	[^] HF	PED (K _s >%10)	YORUM
92	216	201	301	304	15 T84+ 22 T85	τ C-C
93	194	180	285	285	16 H64	δCCO
94	190	163	274	273	18 T85+ 35 T96+ 12 T97	τ C-C
95	190	163	248	252	37 T85+ 16 T96	τ C-C
96	166	157	224	233	16 H43+ 10 F100	δ CCC
97	142	151	221	228	16 T96+ 24 T97+ 12 T99	τ CC
98	142	143	219	216	33 T82+ 15 T84	τ CO
99	126	117	197	195	11 T92+ 53 T99	τ CO
100	116	102	171	170	11 T91+ 13 T92+ 21 T99	τ OC
101	112	96	151	147	41 T82+ 14 T86	τ CC
102	94	73	134	127	31 T98	τ OC
103	94	70	114	106	41 T83+ 19 T86	τ CC
104	64	67	109	100	15 H49+ 11 H55+ 16 H56+ 10 T82+ 12 T97	τ OC
105	82	58	90	84	11 H41+ 20 T98	δCCC+τCO
106	62	40	74	69	15 T88+ 11 T90+ 11T91	τ CC
107	40	36	56	53	14 T83+ 24 T84+ 13 T86+ 11 T88	τ CC
108	40	31	55	52	20 T96	τ CC
109	40	22	38	37	39 T93	τ OC
110	13	13	29	27	85 T87	τ C-C
111	8	8	17	15	58 T88	τ C-C

*v, Gerilme titreşimini; δ, düzlem içi bükülme titreşimini; P, düzlem dışı bükülme titreşimini; T, torsiyon titreşimini göstermektedir.

* “Den” kısaltması “Deneysel” i, “Hes” kısaltması “Hesaplanan” ı, “PED” kısaltması “Potansiyel enerji dağılımı” nı ifade etmektedir.

* C_m, Alifatik karbonu göstermektedir.

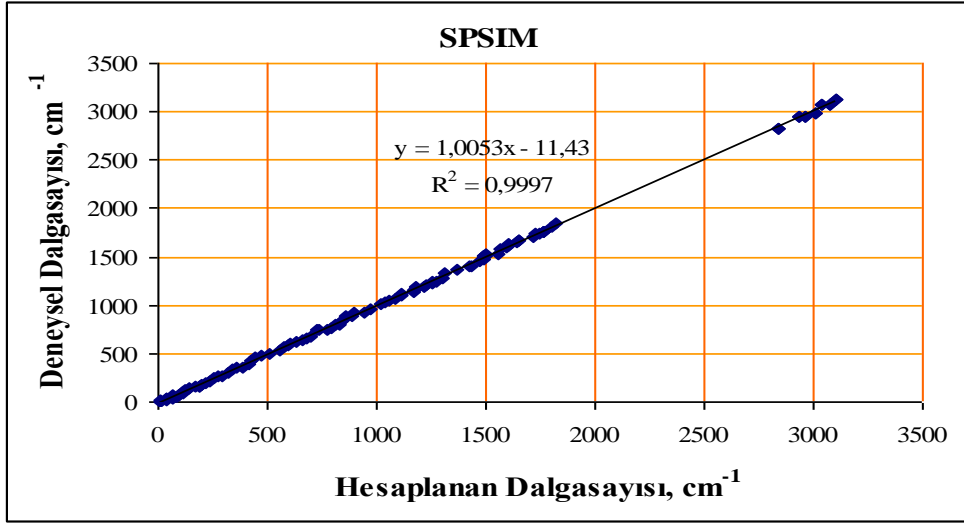
[^]DFT ve HF düzeltme faktörü ile çarpılmıştır.

Burada FD' nin benzen halkasına bađlı aromatik C-H gerilme titreřimleri teorik olarak SPSIM' de 3102, 3077, 3038, 3009, 3005 cm^{-1} ; DFT' de 3125, 3067, 3066, 3065, 2977, 2976 cm^{-1} ; HF' de 3102, 3074, 3071, 3068, 3067, 3054, 3051, 3049 cm^{-1} dalga sayılarında hesaplanmıřtır. Deneysel spektrumda ise 3102, 3077, 3038, 3009, 3005 cm^{-1} dalga sayısında gözlenmiřtir. Aromatik halkada ki C=C gerilme titreřimleri teorik olarak SPSIM' de 1763, 1758, 1740, 1738, 1712 cm^{-1} ; DFT' de 1599, 1596, 1554, 1545, 1518 cm^{-1} ; HF' de 1631, 1629, 1595, 1592, 1569 cm^{-1} dalga sayılarında hesaplanmıřtır. Deneysel spektrumda ise 1765, 1744, 1723, 1717 cm^{-1} dalga sayısında hesaplanmıřtır. L. Aydın tezinde aynı tür titreřimleri 3057, 3056, 3050, 3049, 3038 cm^{-1} dalga sayılarında hesaplanmıřtır [48].

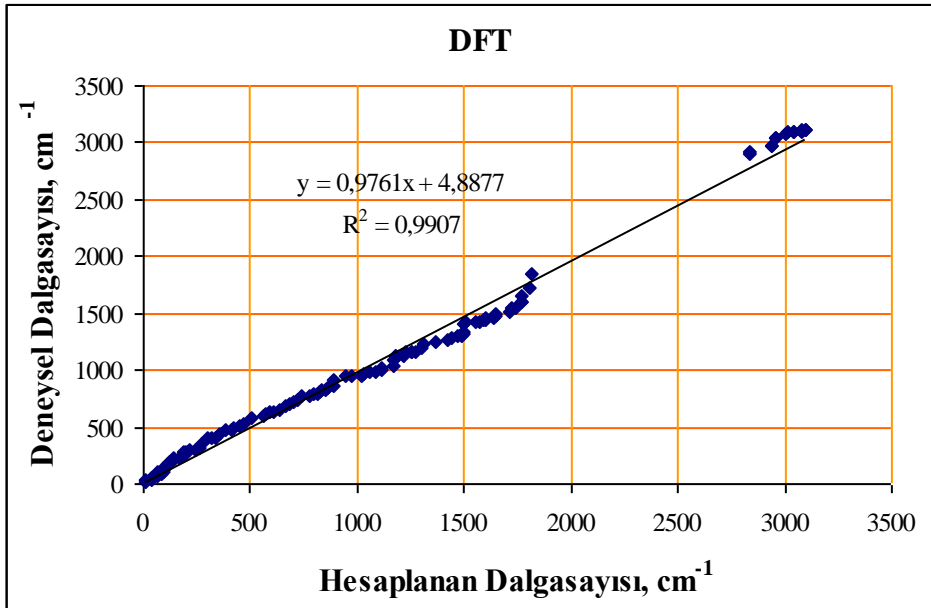
Bu çalıřmada metoksi grubundaki C-H gerilme titreřimleri teorik olarak SPSIM' de 2949, 2948, 2944, 2942, 2830, 2829 cm^{-1} ; DFT' de 3039, 3034, 2979, 2979, 2913, 2907 cm^{-1} ; HF' de 2994, 2990, 2946, 2941, 2882, 2879 cm^{-1} dalga sayılarında hesaplanmıřtır. Deneysel spektrumda ise 2959, 2937, 2839 cm^{-1} dalga sayısında gözlenmiřtir. D. Küçükusta tezinde aynı tür titreřimleri 2848 cm^{-1} dalga sayısında hesaplanmıřtır [17].

FD bileřiğinde C=O gerilme titreřimleri teorik olarak SPSIM' de 1840, 1817, 1763 cm^{-1} ; DFT' de 1841, 1727, 1646 cm^{-1} ; HF' de 1931, 1840, 1751 cm^{-1} dalga sayısında hesaplanmıřtır. Deneysel spektrumda ise 1818, 1806, 1765 cm^{-1} dalga sayısında gözlenmiřtir. L. Aydın tezinde aynı tür gerilme titreřimlerini 1655, 1642 cm^{-1} dalga sayılarında hesaplanmıřtır [48].

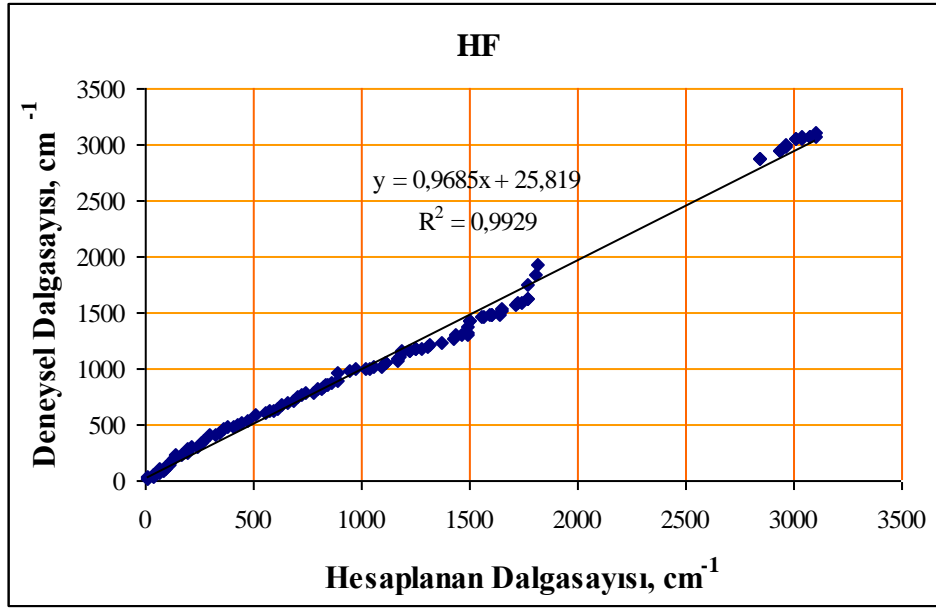
Bu bileřikteki HCH bükülme titreřimleri teorik olarak SPSIM' de 1531, 1525, 1518, 1515, 1506, 1481 cm^{-1} ; DFT' de 1430, 1416, 1408, 1339, 1319, 1309 cm^{-1} ; HF' de 1461, 1426, 1423, 1370, 1323, 1308 cm^{-1} dalga sayılarında hesaplanmıřtır. Deneysel spektrumda ise 1557, 1504, 1499, 1495, 1493, 1490 cm^{-1} dalga sayısında gözlenmiřtir. FD bileřiğinin hesapladığımız frekanslarının uyum içinde olduđu görölmüřtür.



Şekil 4.4. FD Bileşiği için deneysel ve SPSIM ile hesaplanan frekanslar arasındaki korelasyon grafiği



Şekil 4.5. FD Bileşiği için deneysel ve DFT ile hesaplanan frekanslar arasındaki korelasyon grafiği



Şekil 4.6 FD Bileşiği için deneysel ve HF ile hesaplanan frekanslar arasındaki korelasyon grafiği

FD Bileşiği için hesaplanan (SPSIM, DFT ve HF) ve deneysel frekanslar arasındaki korelasyon lineer olup sırasıyla $y = 1,0053x - 11,43$ ($R^2 = 0,9997$), $y = 0,9761x + 4,8877$ ($R^2 = 0,9907$) ve $y = 0,9685x + 25,819$ ($R^2 = 0,9929$) eşitlikleri elde edilmiştir. DFT ve HF metodlarına göre SPSIM ile elde edilen frekans değerleri deneysel verilere daha yakın sonuçlar elde edilmiştir. FD' nin hesaplanan % Bağıl Hata SPSIM, DFT, HF için sırasıyla 3,91; 14,81; 13,84 cm^{-1} dalga sayısıdır.

4.2.3. AHD Bileşiğinin Titreşim Spektrumlarının Değerlendirilmesi

İncelenen bileşiğin geometrik parametreleri DFT ve HF yöntemleri kullanılarak hesaplanmış Tablo 3.7 ve Tablo 3.8' de verilmiştir. Normal Koordinat Analizinde, metoksi, metoksibenzoil, benzaldehit, anilin, benzen ve fenil gibi bileşiklerinden moleküle uyan kısımlarının kuvvet sabitleri transfer edilerek bileşiğin frekansları hesaplanmıştır. Hesaplamalar için 240 İç koordinat, 116 köşegen, 20 köşegen dışı olmak üzere 136 kuvvet sabiti kullanılmıştır. C_1 simetrisi varsayılarak yapılan hesaplamada $\Gamma_{\text{titreşim}} = 192 A'$ simetrikli frekanslar bulunmuştur. Toplam 186 titreşim hareket serbestliğinin hepsi hem IR hemde Raman da aktiftir. Transfer edilen kuvvet

sabitlerinden bazıları deneysel frekansları en iyi verecek şekilde iterasyon yoluyla hesaplanan deneysel frekanslara yaklaştırılarak yeni değerlik kuvvet sabitleri (dolayısıyla bileşik için yeni Değerlik Kuvvet Alanı- Valance Force Field) geliştirilmiştir (Tablo 4.5). Tablolarda kuvvet sabitlerindeki değişime bağlı frekanslardaki değişim de görülmektedir.

Bileşiğe ait gözlenen ve hesaplanan frekanslar, SPSIM programıyla hesaplanan potansiyel enerji dağılımları (PED) toplu olarak Tablo 4.6.'de görülmektedir.

Tablo 4.5. AHD için FIT İşlemi Uygulanan Kuvvet Sabitleri ve Hesaplanan Frekanslara Etkileri

SİMGE	YENİ KUVVET SABİTİ DEĞERİ	YENİ FREKANS
K09	5,0000	1575, 1475, 1414, 1239, 1115
K10	7,8500	1691, 1682, 1675, 1621, 1325
K11	5,0000	1475, 1030
K12	5,0500	1403
K14	8,4500	1691, 1682
K15	5,0000	1562, 1030
K18	4,2000	1511, 1074, 945, 756
K19	4,2000	1453, 1015, 919, 853, 846, 757
K21	4,2000	1562, 1074, 945, 853, 846, 756
K24	6,0000	1182, 1170, 1299
K25	5,0000	2912
K26	4,5500	2912
H51	1,0000	290
H72	0,4900	1299
F128	0,7300	945, 919

Tablo 4.6. AHD Bileşiminin Titreşim Frekans, PED ve Yorumları

No	IR	SPSIM	DFT	HF	PED (Ks>%10) - SPSIM	YORUM
1	3082	3085	3106	3071	49 K06+ 49 K08	v C-H
2	3082	3084	3102	3070	50 K06+ 48 K08	v C-H
3	3075	3066	3101	3066	24 k29+ 10 k31+ 65 k32	v C-H
4	3075	3066	3101	3060	81 K20+ 18 K23	v C-H
5	3075	3065	3100	3057	79 K06+ 20 K08	v C-H
6	3075	3065	3094	3056	79 K06+ 20 K08	v C-H
7	3064	3064	3092	3056	19 K06+ 80 K08	v C-H
8	3064	3064	3088	3055	85 K31+ 13 K32	v C-H
9	3064	3064	3084	3050	21 K06+ 78 K08	v C-H
10	3064	3063	3083	3045	55 K20+ 41 K22	v C-H
11	3064	3063	3081	3041	28 K20+ 70 K22	v C-H
12	3064	3061	3074	3039	26 K29+ 60 K31+ 13 K32	v C-H
13	3064	3061	3073	3038	55 K29+ 39 K31	v C-H
14	3064	3060	3073	3034	19 K20+ 76 K23	v C-H
15	3064	3060	3069	3029	92 K29	v C-H
16	3064	3059	3063	3023	16 K20+ 83 K22	v C-H
17	3045	3047	3059	3018	46 K06+ 51 K08	v C-H
18	3045	3045	3054	3016	49 K06+ 52 K08	v C-H
19	2976	2972	3032	2988	99 K13	v C _m -H
20	2935	2912	3031	2987	100 K02	v C _m -H
21	2935	2912	3005	2986	100 K02	v C _m -H
22	2912	2898	2986	2968	99 K26	v C _m -H
23	2849	2870	2967	2938	93 K02	v C _m -H
24	2849	2870	2966	2937	93 K02	v C _m -H

Tablo 4.6. (Devamı) AHD Bileşiminin Titreşim Frekans, PED ve Yorumları

No	IR	SPSIM	^DFT	^HF	PED (Ks>%10) - SPSIM	YORUM
25	2842	2828	2905	2877	100 K02	v C _m -H
26	2842	2828	2904	2876	K02	v C _m -H
27	1691	1714	1729	1804	33 K10+ 21 K14	v O-C
28	1682	1702	1702	1787	26 K10+ 28 K14	v O-C
29	1675	1682	1692	1780	47 K10+ 15 K16	v O-C
30	1666	1665	1614	1733	18K16+ 12 K27	v N-C
31	1621	1629	1598	1634	11 K16+ 10 K10	vN-C + vC-O
32	1612	1606	1596	1633	14 K28+ 14 K30	v C-C
33	1612	1602	1592	1631	35 K04+ 18 K05	v C-C
34	1599	1579	1589	1630	10 K28+ 11 K27	v C-C
35	1575	1576	1581	1616	22 K05+ 20 K07+ 28 K09	v C-C
36	1562	1560	1568	1607	33 K21	v C-C
37	1562	1558	1560	1597	17 K15+ 30 K17	v C-C
38	1511	1535	1558	1595	17 K16+ 11 K18	v C-C
39	1511	1529	1498	1531	10 H27+ 20 H74+ 15 H77+ 20 H78+ 12 H81	δ HCC
40	1509	1512	1495	1528	81 H80	δ HCC
41	1509	1507	1476	1504	30 K05+ 38 K07	v C-C
42	1509	1501	1475	1502	18 K28+ 11 H74+ 22 H77+ 28 H81	δ HCC
43	1490	1477	1460	1483	26 K05+ 32 K07	v C-C
44	1475	1462	1459	1483	18 K05+ 13 K07+ 16 K09+ 11 K11	v C-C

Tablo 4.6. (Devamı) AHD Bileşiğinin Titreşim Frekans, PED ve Yorumları

No	IR	SPSIM	[^] DFT	[^] HF	PED (Ks>%10) - SPSIM	YORUM
45	1453	1440	1447	1475	24 H74+ 24 H77+ 29 H78+ 20 H81	δ HCC
46	1453	1437	1446	1475	11 K19+ 16 H64+ 18 H68	δ HCH
47	1441	1419	1437	1462	14 H64+ 13 H68	δ HCH
48	1414	1417	1433	1461	11 K09+ 11 H67	ν C-C + δ OCC
49	1403	1386	1432	1459	20 K12+ 13 H61+ 16 H65+ 19 H67	δ HCH
50	1383	1361	1430	1454	28 H64+ 21 H67+ 27 H68	δ HCH
51	1342	1336	1407	1423	28 K27+ 11 H50+ 11 H53+ 10 H56	ν C-C
52	1325	1327	1405	1420	26 K05+ 23 K07	ν C-C
53	1325	1325	1372	1390	13 P91+ 39 P92+ 27 P93	γ C
54	1325	1322	1318	1359	23 K05+ 23 K07+ 10 K10	ν C-C
55	1311	1305	1312	1331	36 P94	γ C
56	1299	1298	1312	1325	11 K03+ 11 K07+ 11 P94	ν OC+ ν CC
57	1299	1297	1308	1323	16 K25+ 12 H72+ 16 P94	ν C-C+ γ C
58	1286	1281	1296	1312	40 P97+ 26 P98	γ C
59	1253	1263	1290	1310	17 K16+ 11 H61+ 15 H65	δ HCC
60	1248	1251	1287	1300	23 H61+ 14 H65	δ HCC
61	1239	1236	1285	1296	22 P96+ 35 P97	γ C
62	1239	1231	1273	1279	10 K03+ 12 K05+ 10 K09	ν C-C
63	1228	1216	1260	1233	34 P91+ 49 P92+ 12 T103	γ C
64	1200	1205	1256	1217	60 K01	ν O-C
65	1182	1189	1252	1210	43 K01+ 11 K24	ν O-C

Tablo 4.6. (Devamı) AHD Bileşiminin Titreşim Frekans, PED ve Yorumları

No	IR	SPSIM	[^] DFT	[^] HF	PED (Ks>%10) - SPSIM	YORUM
66	1170	1158	1241	1208	13 K01+ 16 K24	v NC
67	1155	1137	1200	1203	52 P91+ 22 P93	γ C
68	1115	1122	1179	1193	13 K03+ 23 K05+ 13 K09	v C-C
69	1115	1117	1171	1188	43 P97+ 27 P98	γ C
70	1112	1115	1165	1179	30 K27+ 28 K30	v C-C
71	1074	1105	1164	1174	10 K18+ 11 K21+ 11 H67+ 15 H68	δ HCC
72	1076	1078	1162	1171	12 K03+ 15 K36+ 11 K39	δ CCC
73	1076	1076	1158	1168	14 K03+ 20 K36+ 16 K39	δ CCC
74	1052	1052	1156	1166	40 K28+ 13 K30+ 12 H77	v C-C
75	1030	1018	1147	1165	11 K11+ 11 K15	δ HCC
76	1015	1001	1143	1164	40 K19	v C-C
77	1003	996	1141	1162	44 P76+ 34 P77	γ C
78	986	975	1132	1161	35 K28+ 33 K30	v C-C
79	952	951	1132	1101	23 K28+ 41 K30	v C-C
80	952	943	1130	1098	52 P91+ 30 P93	γ C
81	945	920	1099	1094	18 K18+ 10 K21+ 12 H63+ 13 F128	v C-C
82	919	918	1096	1093	11 K19+ 29 F128	v C-C
83	914	910	1074	1089	26 P96+ 39 P97+ 27 P98	γ C
84	902	902	1068	1066	15 P91+ 38 P92+ 22 P93	γ C
85	890	899	1055	1066	21 H33+ 32 H34	δ OCH
86	890	896	1032	1065	20 H33+ 32 H34	δ OCH
87	877	894	1032	1063	20 K27	v CC
88	872	891	1015	1027	12 H49	δ OCC

Tablo 4.6. (Devamı) AHD Bileşiminin Titreşim Frekans, PED ve Yorumları

No	IR	SPSIM	[^] DFT	[^] HF	PED (Ks>%10) - SPSIM	YORUM
89	853	852	1013	1021	11 K19+ 24 K21	v C-C
90	853	846	998	1020	35 H34+ 32 H82	δ OCH+ δ HCH
91	846	841	992	1019	11 K21+ 26 H34+ 24 H82	δ OCH+δ HCH
92	846	834	981	1014	24 H34+ 20 H82	δ OCH+δ HCH
93	836	827	980	1012	22 H34+ 34 H82	δ OCH+δ HCH
94	836	819	977	1009	16 H34+ 53 H82	δ OCH+δ HCH
95	818	802	976	1005	67 H82	δ HCH
96	811	795	964	1000	32 H82	δ HCH
97	811	794	960	996	27 H33+ 33 H82	δ COC+δ HCH
98	793	791	954	994	30 H34+ 17 H82	δ COC+δ HCH
99	789	789	951	993	18 K22+ 13 H82+ 12 P88	δ HCH+ γ C
100	776	787	940	988	26 H34+ 31 H82	δ COC+δ HCH
101	762	780	931	985	22 H34+ 35 H82	δ COC+δ HCH
102	756	773	930	985	12 K18+ 18 K19+ 27 K21	v C-C
103	736	746	921	974	13 K04+ 13 K07	v C-C
104	724	735	916	973	18 P88	γ C
105	717	717	910	943	12 P87	γ C
106	701	702	887	935	21 H53	δ HCC
107	688	677	883	924	13 H37+ 10 P84	δ HCC+γ C
108	688	682	876	920	11 P84+ 13 P85	γ C
109	664	677	836	867	12 H40+ 24 H44	δ HCC
110	640	664	827	866	19 H37+ 22 H40+ 20 H41	δ HCC

Tablo 4.6. (Devamı) AHD Bileşiminin Titreşim Frekans, PED ve Yorumları

No	IR	SPSIM	[^] DFT	[^] HF	PED (Ks>%10) - SPSIM	YORUM
111	640	662	824	856	21 H37+ 24 H40+ 21 H43	δ HCC
112	640	662	820	854	28 H37+ 17 H39+ 30 H40+ 13 H43	δ HCC
113	638	659	814	844	12 H37+ 24 H40+ 16 H41+.19 H44	δ HCC
114	638	657	814	837	17 H37+ 14 H41	δ HCC
115	638	652	798	834	15 P88	γ C
116	622	640	794	827	11 P87+ 14 P90	γ C
117	620	631	789	805	13 H66	δ CCC
118	608	625	777	791	13 P92	γ C
119	594	597	768	785	28 H36+ 29 H39	δ CCC
120	594	594	741	768	30 H36+ 29 H39	δ CCC
121	584	588	735	757	15 P95	γ C
122	574	578	716	725	14 P85+ 11 P95	γ C
123	558	571	706	725	48 P84+ 46 P85	γ C
124	558	566	705	723	48 P84+ 47 P85	γ C
125	544	565	683	699	11 P85	γ C
126	544	559	679	695	23 H76	δ CCC
127	544	555	648	662	15 H60+ 14 H63+ 12 P85	δ CCC
128	538	551	635	653	10 P 92	γ C
129	538	542	623	638	12 P85	γ C
130	515	528	620	628	11 H75	δ CCC
131	510	517	618	627	11 H34+ 12 T112	δOCH+τ CC
132	510	512	608	614	31 T112	τ CC
133	497	505	606	612	12 T113	τ CC

Tablo 4.6. (Devamı) AHD Bileşiminin Titreşim Frekans, PED ve Yorumları

No	IR	SPSIM	[^] DFT	[^] HF	PED (K _s >%10) - SPSIM	YORUM
134	497	495	590	605	10 H35	δ OCC
135	478	474	585	596	14 H33	δ COC
136	454	453	569	588	14 P84	γ C
137	428	437	559	571	20 P84+ 13 T99	γ C+ τ CO
138	424	434	539	542	18 P84+ 11 T99	γ C+ τ CO
139	412	422	509	518	12 P84+ 12 P85+ 10 T99	γ C+ τ CO
140	412	414	500	512	10 H35	δ OCC
141	412	409	494	509	11 H57+ 13 H71+ 10 T99	δ NCC + δ CCC
142	382	387	492	503	42 P84+ 44 P85	γ C
143	382	386	477	479	20 P84+ 21 P85	γ C
144	382	385	465	469	31 P84+ 30P83	γ C
145	356	370	438	448	11 P95+ 43 T108+ 16 T109	τ NC+τ NN
146	340	356	430	438	13 P92+ 63 T103+ 12 T104	τ C-C
147	340	348	410	420	18 H57	δ NCC
148	312	316	409	419	28 P95+ 22 T109	γ C +τ C-C
149	290	302	405	416	10 H51	δ CCN
150	270	280	400	408	14 P83+ 13 P85+ 29 P86+ 10 T102	γ C
151	270	271	398	401	23 P83+ 27 P86+ 13 T102	γ C
152	258	258	379	396	11 H45+ 18 H49+ 14 P83	δ OCC
153	258	252	322	323	33 P83+ 17 P84+ 10 P85+ 13 P86	γ C
154	258	251	315	319	13 P83+11 P84+ 12 P85+ 19 P86	γ C

Tablo 4.6. (Devamı) AHD Bileşiminin Titreşim Frekans, PED ve Yorumları

No	IR	SPSIM	[^] DFT	[^] HF	PED (Ks>%10) - SPSIM	YORUM
155	238	230	299	306	12 H49	δ OCC
156	238	228	298	305	18 H33+ 16 H35+ 12 H45	δ OCC
157	222	226	287	289	14 H55+ 10 H59+ 12 T107	δ CCN+ δ CCO
158	220	221	269	270	10 H35+ 14 H58+ 24 H71	δ CCC
159	198	197	259	260	11 H33+ 20 H35	δ COC+ δ CCO
160	178	169	232	241	12 H35+ 15 H43+ 11 H52	δ CCO+ δ CCC
161	156	154	229	234	22 H52+ 10 P88	δ CCC +γ C
162	148	133	224	232	11 H57+ 14 P89	δ NCC+ γ N
163	148	131	218	221	15 T107	τ CN
164	114	118	206	207	15 T105+ 60 T106	τ CC
165	114	118	178	180	14 T105+ 59 T106	τ CC
166	114	113	160	161	11 T102	τ CC
167	94	111	146	148	25 T101+ 29 T102+ 20 T103	τ CC
168	94	110	141	139	19 T101+ 22 T102+ 15 T103	τ CC
169	82	87	129	127	24 H47+ 12 H52	δ CCC
170	72	80	126	123	16 H43+ 28 H46	δ CCC
171	68	58	108	110	15 T105	τ CC
172	56	55	103	105	24 T105+ 16 T106	τ CC
173	56	53	90	91	26 T100+ 13 T101+ 12 T103	τ OC
174	56	50	86	82	45 T100+ 11 T101+ 15 T103	τ OC
175	40	42	76	72	14 P90+ 11 T102	τ CC +γ C
176	38	37	72	68	53 T100+ 24 T105	τ O-C

Tablo 4.6. (Devamı) AHD Bileşiminin Titreşim Frekans, PED ve Yorumları

No	IR	SPSIM	[^] DFT	[^] HF	PED (K _s >%10) - SPSIM	YORUM
177	38	34	69	65	31 T100+ 14 T101+ 21+ T105	τ O-C
178	38	31	57	55	77 T108	τ N-C
179	27	27	40	39	12 T100+ 12 T102+ 49 T103	τ C-C
180	21	21	38	34	74 T104	τ C-C
181	17	17	35	29	31 T104+ 11 T106+ 18 T107	τ C-C
182	13	13	32	25	29 T105+ 24 T106+ 13 T109	τ C-C
183	11	11	19	21	17 T103+ 40 T105+ 13 T106	τ C-C
184	8	8	16	17	11 T109 -29 T111 -18 T108	τ C-C
185	6	6	13	13	-29 T111 +32 T112 +18 T108	τ C-N + τ C-C
186	0	0	9	9	-32 T109 +34 T114	τ N-N + τ C-C

* v, Gerilme titreşimini; δ, düzlem içi bükülme titreşimini; P, düzlem dışı bükülme titreşimini; T, torsiyon titreşimini göstermektedir.

* “Den” kısaltması “Deneysel” i, “Hes” kısaltması “Hesaplanan” ı, “PED” kısaltması “Potansiyel enerji dağılımı” nı ifade etmektedir.

* C_m, Alifatik karbonu göstermektedir.

[^]DFT ve HF düzeltme faktörü ile çarpılmıştır.

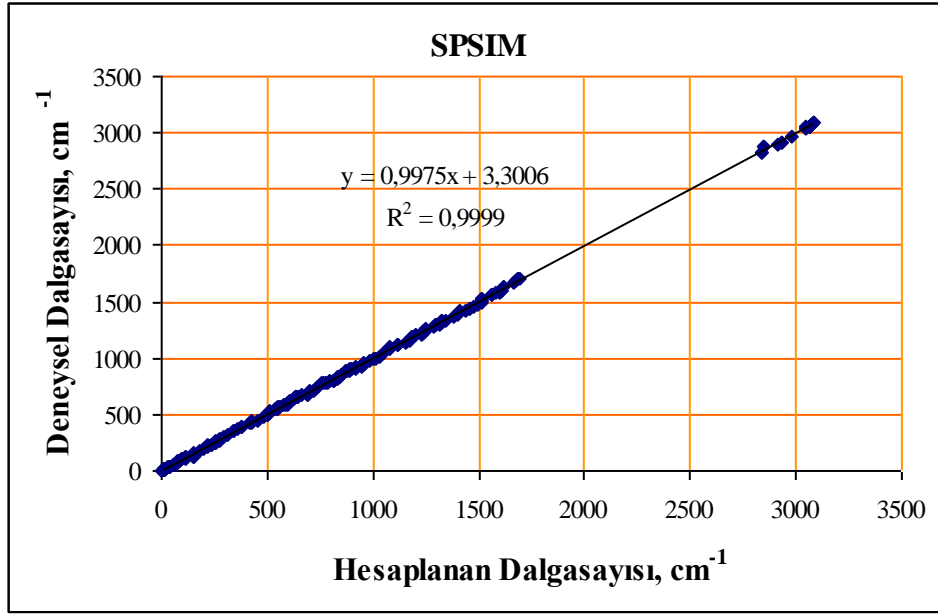
Bu çalışmada halkaya bağlı aromatik C-H gerilme titreşimleri teorik olarak SPSIM’ de 3085, 3084, 3066, 3065, 3064, 3063, 3061, 3060, 3059, 3047, 3045 cm⁻¹; DFT’ de 3106, 3102, 3101, 3100, 3094, 3092, 3088, 3084, 3083, 3081, 3074, 3073, 3069, 3063, 3059, 3054 cm⁻¹; HF’ de 3071, 3070, v3066, 3060, 3057, 3056, 3055, 3050, 3045, 3041, 3039, 3038, 3034, 3029, 3023, 3018, 3016 cm⁻¹ dalga sayılarında hesaplanmıştır. Deneysel spektrumda ise 3082, 3075, 3064, 3045 cm⁻¹ dalga sayısında gözlenmiştir. L. Aydın tezinde aynı tür titreşimleri 3056, 3054, 3049, 3048 cm⁻¹ dalga sayılarında hesaplamıştır [48].

Alifatik C-H gerilme titreşimi teorik olarak SPSIM' de 2972, 2912, 2898, 2870, 2828 cm^{-1} ; DFT' de 3032, 3031, 3005, 2986, 2967, 2966, 2905, 2904 cm^{-1} ; HF' de 2989, 2987, 2986, 2968, 2938, 2937, 2877, 2876 cm^{-1} dalga sayılarında hesaplanmıştır. Deneysel spektrumda ise 2976, 2935, 2912, 2849, 2842 cm^{-1} dalga sayısında gözlenmiştir. L. Aydın tezinde aynı tür titreşimleri 2989, 2981, 2909 cm^{-1} dalga sayılarında hesaplamıştır [48].

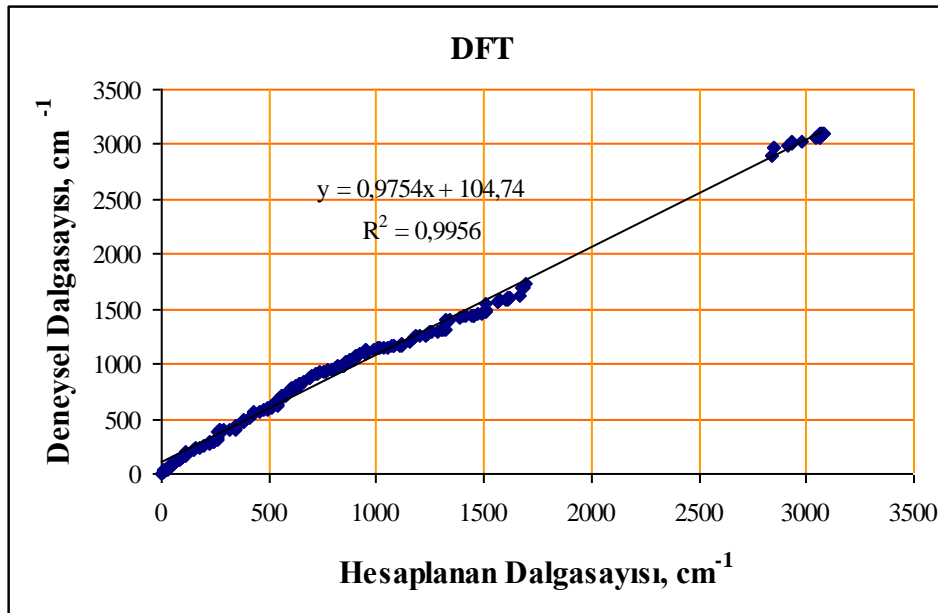
Bu çalışmada aromatik C=C gerilme titreşimleri teorik olarak SPSIM' de 1606, 1602, 1579, 1576, 1560, 1558, 1535 cm^{-1} ; DFT' de 1596, 1592, 1589, 1581, 1568, 1560, 1558 cm^{-1} ; HF' de 1633, 1631, 1630, 1616, 1607, 1597, 1595 cm^{-1} dalga sayılarında hesaplanmıştır. Deneysel spektrumda 1612, 1599, 1575, 1562, 1511 cm^{-1} dalga sayısında gözlenmiştir.

AHD bileşiğinde C=O gerilme titreşimleri teorik olarak SPSIM' de 1714, 1702, 1682 cm^{-1} ; DFT' de 1729, 1702, 1682 cm^{-1} ; HF' de 1804, 1787, 1780 cm^{-1} dalga sayısında hesaplanmıştır. Deneysel spektrumda ise 1691, 1682, 1675 cm^{-1} dalga sayısında gözlenmiştir. L. Aydın tezinde aynı tür titreşimleri 1654, 1644 cm^{-1} dalga sayılarında hesaplamıştır [48].

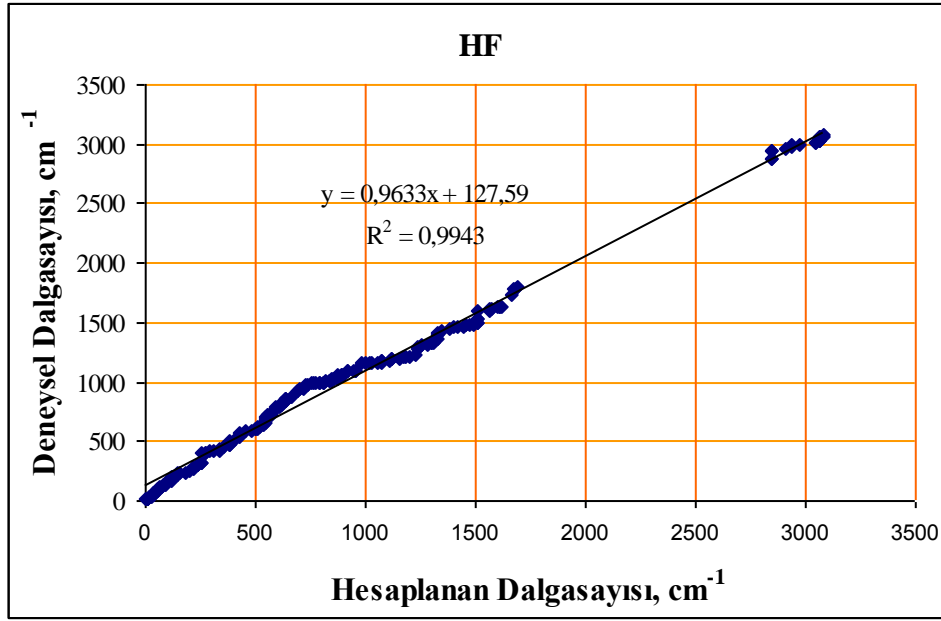
Bu bileşikteki HCH bükülme titreşimleri teorik olarak SPSIM' de 1437, 1419, 1386, 1361 cm^{-1} ; DFT' de 1446, 1437, 1432, 1430 cm^{-1} ; HF' de 1475, 1462, 1459, 1454 cm^{-1} dalga sayılarında hesaplanmıştır. Deneysel spektrumda ise 1453, 1441, 1403, 1383 cm^{-1} dalga sayısında gözlenmiştir. AHD bileşiğinin hesapladığımız frekanslarının uyum içinde olduğu görülmüştür.



Şekil 4.7. AHD Bileşiği için deneysel ve SPSIM ile hesaplanan frekanslar arasındaki korelasyon grafiği.



Şekil 4.8. AHD Bileşiği için deneysel ve DFT ile hesaplanan frekanslar arasındaki korelasyon grafiği.



Şekil 4.9. AHD Bileşiği için deneysel ve HF ile hesaplanan frekanslar arasındaki korelasyon grafiği.

Hesaplanan (SPSIM, DFT ve HF) ve deneysel frekanslar arasındaki korelasyon lineer olup sırasıyla $y = 0,9975x + 3,3006$ ($R^2 = 0,9999$), $y = 0,9754x + 104,74$ ($R^2 = 0,9956$) ve $y = 0,9633x + 127,59$ ($R^2 = 0,9943$) eşitlikleri elde edilmiştir. SPSIM ile elde edilen frekans değerleri DFT ve HF metodlarına göre deneysel verilere daha yakın sonuçlardır. AHD' nin bu çalışmada hesaplanan % Bağıl Hata SPSIM, DFT ve HF için sırasıyla 1,8; 22,00; 22,4 cm^{-1} ' dir.

İncelenen her üç bileşik için deneysel bulunan titreşim frekansları görülebileceği gibi yarı deneysel verilerin kullanıldığı SPSIM programı ile elde edilmiştir. % bağıl hata bu hesaplama ile 1,8 ile 3,91 arasında değişirken diğer yöntemlerde % bağıl hata % 22'lere kadar çıkabilmektedir.

KAYNAKLAR

1. <http://www.turkcebilgi.com/hidrazin/ansiklopedi>, Mayıs 2011.
2. G.P.Keefe, "Streptococcus Agalactiae Mastitis" Canadian Veterinary Journal, 38: 429 (1997).
3. Ma TS and Tein TM, Antibodies and Chemotherapy, J.Chem.Soc., 3: 491 (1953).
4. Bau-Hri NP, Xuong MD, Binon f ve Roger f, J.Chem.Soc. Vol 1: 1358 (1953).
5. M.Sayaji Rao and K.Hussain Reddy, Indian Journal of Chemistry, 38A, 262-266 (1999).
6. M.Sayaji Rao and K.Hussain Reddy, Indian Journal of Chemistry, 38A, 262-266 (1999).
7. R.B. Singh, P. Jain and R. P. Singh, Talanta, 1982, 29, 77.
8. A. Çukurovalı, İ. Yılmaz, H. Özmen and M. Ahmedzade, Heter. Chem., 2001, 12, 42.
9. <http://www.nedirbilelim.com/dizin3/hidrazin.html>, Mayıs 2011.
10. Mustafa SAÇMACI, Bazı Visinal Diketo-Furan Sistemlerinin Hidrazon'lar, İzosiyanatlar, Üretan'lar ile Reaksiyonlarının Deneysel Ve Semiempirik Verileri, Doktora Tezi, Kasım 2002.
11. Gaussian 09, Revision B.01, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel et al, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010.
12. Seda S., Fatma K., Nilgün K., Anatholy D., 5-Nitro-1*h*-Đndol-2,3-Dion-3-NFeniltiyosemikarbazon molekülünün infrared spektroskopisi ve teorik incelenmesi, BAÜ FBE Dergisi, Cilt:9, Sayı:2, 3-16, Aralık 2007.
13. Fischer, P., Bougeard, D., Schrader, B., SPSIM Spektren Simulation, Universitat-Gesamthochschule-Essen, Essen, 1989.
14. Mehmet Apal, Bazı Sülfonil Hidrazin Türevi Metal Komplekslerin Titreşim SPpektroskopik İncelenmesi ve Spektrum Yapı İlişkisinin İrdelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Aralık 2004.

15. Yıldız, A., Genç, Ö., Bektaş, S., Enstrümental Analiz Yöntemleri, Hacettepe Üniversitesi Yayınları, A-64, 1997.
16. Özpozan T., Titreşim Spektroskopisi (IR- RAMAN) Teori Ve Uygulamaları, Erciyes Üniversitesi Yayını, Yayın No 25, Kayseri, Nisan 1996.
17. Küçükusta, D., Piperazin Glioksim ligandı ve Co(II) kompleksinin normal koordinat analizi yöntemiyle titreşim spektroskopik incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Erciyes Üniversitesi., Kayseri, 2001.
18. Hummel, D.O., Polymer Spectroscopy, Verlag Chemie, Weinheim (Ed.), 1973.
19. Cothup, N.B., Dally, L.H., Wiberley, S.E., In Introduction to Infrared and Raman Spectroscopy, Academic Press, New York, 1974.
20. Schrader, B. and Schrader, C., Theoretische Chemie I, Universität Essen, 1990.
21. Whittaker, E.T., Analytical Dynamics of Particles and Rigid Bodies, 3rd ed., Chapter 7, Cambridge Univ. Press, London and New York , 1927.
22. Steele, D., Theory of Vibrational Spectroscopy, Sounders, Philadelphia, Pennsylvania, 1971.
23. E.B.Wilson, Jr. J.C. Decius, P.C.Cross, Molecular Vibrations1 Dover Publication Inc., New York , 1980McGraw-Hill Book Company, New York,Toronto, London 1985.
24. Snyder, R.G., Schachtschneider, J.H., A valence force field for saturated hydrocarbons, Spectrochim. Acta., 21, 169, 1965.
25. Shimanouchi, T., Vibrational Spectroscopy and its Chemical Applications, Collection of Scientific Papers of Takehiko Schimanouchi, The University of Tokyo, 1977.
26. Spiekermann, M., Bougeard, D., Oelichmann, H.J. and Schrader, B., Coupled calculation of vibrational frequencies and intensities I.C alculatıon of Intensities by a CNDO/2 metod with extended basis set, Theor. Chim. Acta, 54, 301, 1980.
27. Fischer, P., Diplomarbeit, Universität, Essen, 1985.

28. Shimanouchi, T., Computer Programs for Normal Coordinate Treatment of Polyatomic Molecules, Tokyo, 1968.
29. Schrader, B., Spiekermann, M., Hecht, L., Bougeard, D., Coupled calculation of vibrational frequencies and intensities VIII Raman and IR activity measure of normal vibrational of non-chiral molecules and molecular crystals, J. Mol. Struct., 113, 49, 1984.
30. Schneider, R., Messung und Berechnung der infrarot-und Raman-activen Molekül-und Gitterschwingungen des kristallinen Melamines, Dissertation Dortmund, 1974.
31. Fischer, P., Grunenberg, A., Bougeard, D., Schrader, B., Coupled calculation of vibrational frequencies and intensities 9. Intensities of methane, ethane, propane and methionine calculated with the MNDO method, J. Mol. Struct. 146, 51, 1986.
32. İbrahim Aydın, Aseton-n-Pentan Kompleksinin Farklı Kuantum Kimyasal Metotla İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Kayseri 2008.
33. Young, D.C., Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems, Wiley, 99, New York, 2001.
34. Murat ÖZDEMİR, Benzenesülfonik asit hidrazit'in Konformasyon Analizi, Titreşim ve Kimyasal Kayma Değerlerinin DFT Metodu ile Hesaplanması, Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi, Ankara 2007.
35. Stewart, J.J.P., Optimization of Parameters Semiempirical Methods I. Method J. Comp. Chem. 209, 1989.
36. Stewart, J.J.P., Optimization of Parameters Semiempirical Methods V: Modification of NDDO Approximations and Application to 70 Elements, Journal of Molecular Modeling, Vol. 13, No. 12, 2007.
37. Hinchliffe, A., Modelling Molecular Structures, 2nd Edition, Wiley, Chichester, 2000.
38. Leach, A. R., Molecular Modelling, Longman, England, 1999.
39. Scheiner, S., "Fundamental Features of Hydrogen Bonds" in Pauling's Legacy – Modern Modelling of the Chemical Bond, Theoretical and Computational Chemistry, Vol. 6, Eds. Z.B. Maksic, W.J. Orville-Thomas, 571-591, Elsevier, Amsterdam, 1999.

40. Sum, A.K., Sandler, S.I., Ab Initio Calculations of Cooperativity Effects on Clusters of Methanol, Ethanol, 1-Propanol, and Methanethiol J. Phys. Chem. A., 104(6), 1121-1129, 2000.
41. Desiraju, G.R., Steiner, T., The Weak Hydrogen Bond in Structural Chemistry and Biology. IUCr Monographs on Crystallography, No.9.Oxford University Press, 1999.
42. Jeffrey, G. A., An Introduction to Hydrogen Bonding Oxford University Press, New York,1997.
43. Joesten, M.D., J. Chem. Educ., 59, 362 p, 1982.
44. Gauss View 3.09, Gaussian Inc., Carnegie Office Park, Pittsburg, USA.
45. Nobuhiko Kuze, Takeshi Sakaizumi, Osamu Ohashi, Yutaka Yokouchi, Kinuya Iijima,Journal of Molecular Structure, 978 (2010) 195–200.
46. S.R. Sheeja, Neema Ani Mangalam, M.R. Prathapachandra Kurup, Y. Sheena Mary, K. Raju, Hema Tresa Varghese, C. Yohannan Panicker,Journal of Molecular Structure 973 (2010) 36–46.
47. E. Akalın, S.Akyüz,Journal of Molecular Structure, 482-483 (1999), 175-181.
48. Lütfiye Aydın, Bazı Diketo Bileşiklerin Hidrazon Türevlerinin Kuramsal ve Titreşim Spektroskopik İncelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Temmuz 2010.
49. Tuncer Hökelek, Emin Sarıpınar, İsmail Yıldırım, Mehmet Akkurt and Yunus Akçamur, 4-(4-Methoxybenzoyl)-5-(4-methoxyphenyl)-2,3-dihydro-2,3-furandione, Acta Cryst. (2002). E58, o30-o32.
50. A. Manimekalai et al. / Spectrochimica Acta Part A 77 (2010) 687–695.
51. S.R. Sheeja, Neema Ani Mangalam, M.R. Prathapachandra Kurup, Y. Sheena Mary, K. Raju, Hema Tresa Varghese, C. Yohannan Panicker,Journal of Molecular Structure 973 (2010) 36–46.
52. N.Neto, M. Scrocco and S. Califano Laboratorio di Spettroscopia Molecolare Del C.N.R. Università di Napoli G.Capponi n, 9, Italy,28 February 1966.

53. P. Venkata Ramana Rao, G. Ramana Rao / *Spectrochimica Acta Part A* 58 (2002) 3039_ 3065.
54. Sabri ÇAVUŞ, N,N-Dietil N'-Benzoil Tiyoüre ve Platin Kompleksinin Titreşim Spektrumlarının Normal Koordinat Analizi İle Aydınlatılması Ve Simulasyonu, Doktora Tezi, Ocak 1998.
55. S. Gunasekaran et al. / *Spectrochimica Acta Part A* 65 (2006) 1041–1052.
56. C. Ravikumar et al. / *Chemical Physics Letters* 460 (2008) 552–558.

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Tuğba ÖZEN

Baba Adı : Ömer

Anne Adı : Yıldız

1986 yılında Yozgat'da doğdu. İlk, orta ve lise öğrenimini Yozgat'da tamamladı. 2004 yılında Selçuk Üniversitesi Fen - Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümünü kazandı. 2008 yılında bu bölümden mezun oldu. 2009 yılında Bozok Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Tezli Yüksek Lisans Programını kazandı. Halen öğrenimini sürdürmektedir.

Adres : Aşağı Noh. Mah. 1.Cad. Ender Apt. Kat: 5 No:15 Yozgat/Merkez

E-mail : tugba__ozen@hotmail.com