1,5-DİAMİNOPENTAN MOLEKÜLÜNÜN TİTREŞİM SPEKTRUMLARININ TEORİK YÖNTEMLERLE İNCELENMESİ

Erol ALBAYRAK

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ŞUBAT 2007
ANKARA

Erol ALBAYRAK tarafından hazırlanan 1,5-DİAMİNOPENTAN MOLEKÜLÜNÜN TİTREŞİM SPEKTRUMUNUN TEORİK YÖNTEMLERLE İNCELENMESİ adlı tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Tez Yöneticisi
Yrd.Doç.Dr.Akif ÖZBAY

Bu çalışma, jürimiz tarafından oy birliği ile Fizik Anabilim Dalı' nda Yüksek Lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan : Prof. Dr. Abdullah GÜNEN

Üye : Prof. Dr. Süleyman ÖZÇELİK

Üye : Prof. Dr. Bora ALKAN

Üye : Yrd. Doç. Dr. Gökay UĞUR

Üye : Yrd. Doç. Dr.Akif ÖZBAY (Danışman)

Tarih : 01/02/2007

Bu tez Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez yazım kurallarına uygundur.

TEZ BİLDİRİMİ

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu,ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada orijinal olmayan her türlü kaynağa eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

Erol ALBAYRAK

1.5-DİAMİNOPENTAN MOLEKÜLÜNÜN TİTREŞİM SPEKTRUMLARININ TEORİK YÖNTEMLERLE İNCELENMESİ

(Yüksek Lisans Tezi)

Erol ALBAYRAK

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
Şubat 2007

ÖZET

Bu çalışmada, 1.5-Diaminopentan molekülünün en kararlı olduğu durumdaki geometrik parametreleri ve titreşim frekansları Gaussian 98 W programıyla teorik olarak hesaplanmıştır. Bu titreşim frekanslarının işaretlemeleri yapılarak frekanslara ait infrared şiddetleri belirlendi. Teorik olarak hesaplanan frekanslarla deneysel frekanslar birbiriyle karşılaştırılarak korelasyon grafikleri çizildi. Bu grafikler yardımı ile hesaplama metodları arasında karşılaşmalar yapıldı. B3LYP metodu ile yapılan hesaplamaların daha iyi sonuç verdiği gözlendi.

Bilim Kodu : **202.1.008**
Anahtar Kelimeler : **1,5-Diaminopentan,İnfrared,BLYP,B3LYP,HF**
Sayfa : **48**
Tez yöneticisi : **Yrd.Doç.Dr.Akif ÖBAY**

THE STUDY OF VIBRATIONS 1,5-DİAMİNO PENTANE MOLECULE THROUGH THEORICAL METHODS

(M.Sc.Thesis)

Erol ALBAYRAK

GAZİ UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY
February 2007

ABSTRACT

In this study, the geometrical parameters and vibrational frequences of 1.5-diamino pentane molecule are theoretically calculated in the most stable condition with the Gaussian 98 W programme. Through the assignment of these frequencies, the infrared intensities is determinated. The correlation graphs are iluistrated by comparing the theoretically calculated frequencies with the experimental ones. Some comparisions among the calculation methods are given by means of these graphs. It is observed that the frequency calculations by the B3LYP method give beter results.

Science Code : **202.1.008**
Key Words : **1,5-diaminopentane, infrared,BLYP,B3LYP,HF**
Page Numbers : **48**
Advisers : **Assit.Prof.Dr.Akif ÖZBAY**

TEŞEKKÜR

Bu tezi hazırlarken yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren Sayın Hocam Yrd.Doç.Dr. Akif ÖZBAY'a çok teşekkür ederim.Bu çalışmayı yapmamız için gereken Gaussian 98 Wiev programını kullanmamızı sağlayan sayın Hocam Prof.Dr. Şenay YURDAKUL'a bu imkanı sağladığı için teşekkür ederim. Ayrıca bu tezi hazırlarken yol gösteren sayın Hocam Doç.Dr.Mustafa KURT'a, Araştırma Görevlisi sayın Yusuf ERDOĞDU'ya, yardımları ve verdiği moral ile hep destekçim olan sayın Ali ALLI'ya teşekkürü borç bilirim.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET iv

ABSTRACT v

TEŞEKKÜR vi

ÇİZELGELERİN LİSTESİ ix

ŞEKİLLERİN LİSTESİ x

SİMGELER VE KISALTMALAR xi

1. GİRİŞ 1

2. MOLEKÜLER SPEKTROSKOPİ 2

3. TEORİK HESAPLAMA 4

3.1. Moleküler Mekanik 4

3.2. Kuantum Mekanik Yöntemlerle Elektronik Yapı İncelenmesi Yöntemleri 5

3.3. Bağımsız Elektron Yaklaşımı (Moleküler Orbital (MO)) 7

3.4. Hartree-Fock SCF (Self Consistent field) Yaklaşımı 9

3.5. Tam Dolu Hartree-Fock Hesaplamaları 10

3.6. Yarı Dolu Hartree-Fock Hesaplamalar 10

3.7. Molekül Titreşimleri ve Mod Analizi 11

3.7.1.- 1,5-Diaminopentan molekülünün temel titreşimleri 12

4. BİLGİSAYAR HESAPLAMALI MOLEKÜLER SPEKTROSKOPİ 13

4.1. Kuantum Mekaniksel Enerji İfadeleri Ve DFT 15

4.2. B3LYP Karma Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi 17

4. 3. Temel Setler ve 6-31 G(d) Temel Seti 18

4. 4. Geometrik Optimizasyon 22

Sayfa

4. 5. Hesaplama Yöntemi.....24

4.5.1. Yoğunluk fonksiyonu teorisinde öz uyumlu alan metodu (DFT-SCF).....24

4.5.2. SQM metodu…….....26

5. HESAPLAMA SONUÇLARI.....39

KAYNAKLAR.....40

EKLER.....42
EK-1 1,5 Diaminopentan molekülünün titreşim frekansları ve infrared şiddetleri…….....43

ÖZGEÇMİŞ.....48

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge **Sayfa**

Çizelge 3.1. C_{2v} nokta grubunun karakter çizelgesi…...…….....…… 12

Çizelge 4.1. Enerji türevlerinin fiziksel büyüklüklere göre dağılımı...…..… ……15

Çizelge 4.2. Hidrojen, karbon ve azot atomları için 6-31g* temel fonksiyonu sabitleri…….……..21

Çizelge 4.3. 1,5-Diaminopentan molekülünün deneysel ve teorik geometrik parametreleri……...……28

Çizelge 4.4**.** 1,5-Diaminopentan molekülünün BLYP 6-31G(d) modelinde hesaplanan titreşimsel modlarının işaretlenmesi…….33

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil **Sayfa**

Şekil 3.1. H_2 molekülünün molekül orbital yaklaşımı……...…….8

Şekil 3.2. Born Oppenheimer yaklaşımı……...8

Şekil 3.3. Tam dolu Hartree-Fock modeli……..10

Şekil 3.4. Yarı dolu Hartree-Fock modeli……...……....11

Şekil 3.5. 1,5-Diaminopentan molekülünün geometrik yapısı……...……12

Şekil 4.1. İki atomlu bir molekülde elektronik enerjinin atomlar arasındaki mesafeyle bağlantısı……...…….22

Şekil 4.2. İki boyutta potansiyel enerji yüzeyi……...……...….23

Şekil 4.3. Enerjinin yakınsaması ile işlem sayısı arasındaki ilişki……...….26

Şekil 4.4. 1,5-diaminopentan molekülünün bağ uzunlukları korelasyon grafikleri……. 30

Şekil 4.5. 1,5-diaminopentan molekülünün bağ açıları korelasyon grafikleri……...…….....31

Şekil 4.6. 1,5-diaminopentan molekülünün titreşim modlarının korelasyon grafikleri…….....…….……..……32

Şekil 4.7. -1,5-diamino pentan molekülünün infrared spektrumu……..……38

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmadaki bazı simgeler ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda verilmiştir.

Simgeler	**Açıklama**
ε_i	Tek elektron orbital enerjisi
$\mathbf{E}$	Molekülün toplam enerjisi
E^e	Korelasyon enerjisi
E_{B3LYP}	B3LYP enerjisi
$\mathbf{E}_{FF}$	Korelasyon enerjisi
$\mathbf{E}_g$	Gerilme enerjisi
$\mathbf{E}^b$	Burulma enerjisi
$\mathbf{E}^t$	Torsiyon enerjisi
$\mathbf{E}^{vdw}$	Vanderwals bağ enerjisi
$\mathbf{E}_{el}$	Elektronik etkileşim enerjisi
$\mathbf{E}^{etk}$	Çapraz etkileşim enerjisi
$\mathbf{H}$	Hamilton operatörü
$\mathbf{E}$	Enerji operatörü
$\mathbf{\Psi}$	Dalga fonksyonu
$\mathbf{P}$	Olasılık yoğunluğu
$\mathbf{\Phi}_i$	Bir elektron dalga fonksyonu
(α)	Spin yukarı fonksyonu
(β)	Spin aşağı fonksyonu
$\mathbf{E}^T$	Elektronların hareketinden kaynaklanan kinetik enerji

Simgeler	Açıklama
E°	Sıfır nokta enerjisi
$\mathbf{E}_F$	Fermi kinetik enerjisi
G	Kuvvet sabiti,hessian
G	Gaussian fonksyonlar,gradyent vektörü
ρ	Elektron yoğunluğu
$S_{\mu V}$	Çakışma matrisi
J	Coulomb integrali
X	Kartezyen koordinat matrisi
F_{KS}	Kohn sham vektörü

Kısaltmalar	Açıklama
B3LYP	LYP korelasyon enerjili 3 parametreli Becke karma metodu
DFT	Yoğunluk fonksiyon teorisi
HF	Hartree fock metodu
H28	Hartree kinetik enerjisi tomas
F30	Fock değiştokuş enerjisi
D30	Dirac değiştokuş enerjisi
PED	Potansiyel enerji dağılım
SQM	Ölçekleme metodu

1.GİRİŞ

1,5-Diaminopentan molekülü temel karbon zinciri yapısına sahip bir moleküldür.Bu yapısından ötürü sentez molekülü olarak kullanılır. Hoffmann tipi konak-konuk bileşiklerinin oluşturulması bu tür ligand moleküler için en güzel örnektir. Hoffmann tipi konak-konuk bileşikleri kafesli kristal bir örgüden oluşan iki bileşenli moleküler bir yapıdadır. Böyle bileşiklerde bileşenlerdenbiri konuk molekül,diğeri ise ana örgüyü oluşturan ve konuk molekülü çevreleyen konak moleküldür [1].

Bu tür bileşikler ilaçların mikrokapsülasyonu, izomerlerin ayrılması,kanser kemoterapisi, kötü kokuların tutulması, deniz suyunun arıtılması gibi teknolojinin birçok alanında kullanılır.

2. MOLEKÜLER SPEKTROSKOPİ

Molekül, iki veya daha fazla atomdan oluşan ve bir kimyasal bileşiğin tüm özelliklerini taşıyan atomlar topluluğudur. Moleküllerin özellikleri kendi yapıları ile direkt ilişkili olduğundan,molekülün özelliklerini belirlemek için,molekül yapısı incelenmelidir. Molekül yapısının aydınlatılmasında en çok yararlanılan yöntem spektroskopi yöntemidir. Molekül aynı zamanda kuantumsal bir sistem olduğu için detaylı yapısı kuantum mekaniksel yöntemlerlede incelenebilir.

X-ışını kırınımı yöntemiyle,molekül ve kristal yapı analizi en iyi yöntemlerden biridir.Ancak tek kristali elde edilemeyen örnekler için başka yapı analizi yöntemlerine gerek duyulmaktadır.

Molekül spektroskopi, madde ile elektromanyetik ışınım etkileşmesini (soğurulması, yayılması ve saçılması) incelenir. Moleküler yapıyla ilgili (moleküler simetri, bağ uzunlukları, bağ açıları, kuvvet alanı, dipol momentleri, molekül içi ve dışı etkileşmeler gibi) detaylı bir bilgi moleküler spektrumlardan elde edilebilir.

Madde ile elektromanyetik ışınım etkileşmesi,atomların veya moleküllerin enerji seviyeleri arasında geçişe neden olur.Bir moleküldeki enerji seviyeleri arasındaki değişim

$$\Delta E = E = h\upsilon(1/\lambda) \qquad (2.1)$$

ile ifade edilir. Burada; h Planck sabiti ($6.62x10^{-34}$ j.s) c; ışığın boşluktaki hızı ($2.99x10^{8}$m/s);v, frekans ve $1/\lambda$ ise dalga sayısıdır. (colthup et al, 1990). Elektromanyetik ışıma , dalga boylarına veya frekanslarına göre değişik spektrum bölgelerine ayrılır. Farklı spektrum bölgelerine karşılık gelen ışınım enerjisinin madde ile etkileşimine uygun spektroskopi (mikrodalga, infrared UV, NMR, ESR gibi) yöntemleriyle, molekül hakkında bilgi sahibi olunabilir.

Serbest bir molekülün toplam enerjisi ;

Dönme, nükleer dönme, öteleme, titreşim, elektronik enerjilerinin toplamı olarak yazılır.

Burada öteleme enerjisi sürekli,nükleer dönme enerjiside çok küçük olduğundan,diğer enerjiler ile karşılaştırıldığında ihmal edilir.Born-Oppenheimer yaklaşımına göre,serbest molekülün enerjisi,dönme,titreşim ve elektronik enerjiler toplamı;

Enerji = elektronik enerji + titreşim enerjisi + dönme enerjisi (2.2)

Olarak yazılabilir.(Braniden and Joachim, 1983) Burada elektronik enerji; molekül atomlarının elektronik düzeyler arasındaki geçişler ile ilgili enerji, titreşim enerjisi; moleküldeki atomların titreşiminden kaynaklanan titreşim enerjisi, dönme enerjisi; molekülün dönmesinden kaynaklanan dönü enerjisidir.gerçekte elektronik enerji düzeyleri arasındaki fark çok daha büyük,dönü enerji düzeyleri arasındaki fark ise çok daha küçüktür. Elektronik,titreşim ve dönü enerji değişimlerinin birbirlerine göre oranları;

$$\text{Elektronik enerji} \approx 10^{3} \text{ x Titreşim enerjisi} \approx 10^{6} \text{ x Dönü enerjisi} \quad (2.3)$$

olarak verilebilir [3-5].

3.TEORİK HESAPLAMA

Teorik hesaplama yöntemleri,deneysel verilerin analizi ve deney öncesi moleküler bir model oluşturmak amacıyla kullanılır.Bunun yanında,deneysel verilerin yetersiz oluşu ve veri alınamadığı durumlarda molekül yapı analizi,moleküler enerjiler, konformasyon durumları, dipol momentleri, titreşim frekansları ve termodinamik özellikler hakkında teorik hesaplama yöntemleriyle bilgi sahibi olunabilir. Bir enerji minimumu olarak adlandırılabilecek ancak tam olarak bir minimum olmayan konumlar ise genelde konformasyon (şekillenim) olarak adlandırılır [3].

Moleküler modelleme moleküllerin en düşük enerji konformasyonlarını, enerjilerini ve moleküler sistemlerin davranışlarını analiz eder ayrıca yapısal parametreleri de hesaplar. MOPAK, AMPAC, HYPERCHEM ve GAUSSİAN gibi isimlerle isimlendirilen bilgisayar programları moleküler modelleme programları olarak adlandırılır. Moleküler modellemede kuantum mekanik (elektronik yapı yöntemi) ve moleküler mekanik hesaplama yöntemleri kullanılır. Elektronik yapı yöntemleri; yarı deneysel, ab initio ve yoğunluk fonksiyonu teorisi (DFT) olarak üçe ayrılır. Moleküler mekanik yöntemleri ise kuvvet alanları ve parametrelere göre sınıflandırılabilir [3].

3.1. Moleküler Mekanik

Moleküler mekanik,molekül içerisindeki atomları bütün serbestlik derecelerini göz önüne alarak potansiyel enerji yüzeylerini tanımlamak için geliştirilen bir hesaplama yöntemidir.

Moleküler mekanik yönteminin temelinde,atomlar arasındaki kuvvetler ele alınarak molekülün geometrisinde en iyi atomik konumlar belirlenir. Molekülün en olası geometrisini belirlemek için kuvvetlerden veya gerilmelerden doğan enerji ifadesinde bulunan fiziksel parametreler büyük döngülerle değiştirilerek toplam enerji minimum yapılmaya çalışılır.Minimum yapılan toplam enerji,molekül içindeki anlık gerilmelerin dikkate alınmasının bir sonucudur.Bu durum genelde hacimsel etki enerjisine karşılık gelir ve bu enerji molekülün potansiyel enerji

kararlılığıyla ilgilidir.Yani minimum enerjili durum en karalı yapıya ve şekillenime karşılık gelir. Bu yöntemle,potansiyel fonksyonları kullanarak yapılan enerji hesabı çok hızlı olduğundan,moleküler mekanikte, enerji minimizasyonu kullanılarak moleküler şekillenim elde edilmesi diğer yöntemlerle bu yapının baz alınması yaygın olarak kullanılmaktadır. Moleküler mekanik modellerde atomlar birer kütle, bağlar ise yay olarak düşünülür. Yani kütle-yay sistemi olarak kabul edilir. Moleküllerdeki etkileşmeler ise bağlı atomlar arasındaki etkileşmeler bağlı olmayan atomlar arasındaki etkileşmeler olmak üzere ikiye ayrılır. Moleküler mekanik kuvvet alanına katkısı olan fiziksel temel büyüklükler: burulma, bağ gerilmesi, açı bükülmesi ve bağsız açı etkileşimleri'dir. Bu büyüklüklerin oluşturduğu enerji konformasyon enerjisi adını alır. Konformasyon enerjisi,molekülün gerçek enerjisi değildir. Dolayısıyla mutlak değerinin çokfazla önemi yoktur, fakat molekülün farklı konformasyıonlarına karşılık gelen enerji farkları önemlidir. Özellikle biyolojik moleküllerde aktivite yapı ilişkisini incelemek açısından moleküle ait farklı konformasyonların olup olmadığı araştırılmalıdır. Bir molekülün konformasyon enerjisi (E_{FF});

$$E_{FF} = E_g + E_b + E_t + E_{vdw} + E_{el} + E_{etk} \tag{3.1}$$

İle verilir.Burada E_g; bağlar arasındaki gerilme enerjisi, E_b; bağlar arasındaki bükülme enerjisi, E_t ; burulma enerjisi, E_{vdw} ve E_{el}; bağ yapmayan atomlar arasındaki etkileşim enerjisi ve E_{etk} ; gerilme, bükülme, burulma enerjileri arasındaki etkileşmeyi ifade eder. Moleküler mekanik modelleri kullanan değişik MM1, MM2, MM+, CHARM, MMFF gibi paket programları vardır. Bunlar arasındaki temel fark,E_{FF} konformasyon enerjisinde ne kadar etkileşimi göz önüne aldıklarına bağlı olmasıdır [6,7].

3.2. Kuantum Mekanik Yöntemlerle Elektronik Yapı İncelenmesi Yöntemleri

Elektronik yapı yöntemleri,kuantum mekaniği kanunlarını kullanır.Schrödinger denkleminin çözümü bir elektronlu sistemler hariç zor olduğundan, elektronik yapı yöntemlerinde, çözümler çeşitli matematiksel yaklaşımlarla karakterize edilir.

Elektronik yapı yöntemleri,ab initio, DFT yoğunluk fonksiyoneli teorisi(density functional teory) ve yarı deneysel hesaplamalar içerir. Ab initio hesaplamaları, atomik orbitallerin seti ile (temel fonksiyonlar oluşturarak) ilgili parametreleri kullanır.Hesaplama süresi, moleküler mekanik yöntemlere göre çok daha fazladır. Deneysel parametreler kullanılmaz. Ab initio hesaplamalarında hidrojen gibi ufak moleküller için schrödinger denklemini çözmek kolaydır.Ancak, büyük sistemlerde çözüm zorlaştığından farklı matematiksel yaklaşımlar kullanılır (Hartree-Fock, Self Consistent Field (HF-SCF) ve density functional teory (DFT) gibi).

Yoğunluk fonksiyoneli teorisi (density functional teory-DFT) ab initio hesaplamalarına benzer, fakat yoğunluk fonksiyoneli ile ilgili parametreler bu hesaplamalara eklenmiştir. Yoğunluk fonksiyoneli molekülün,enerjisini tanımlama eğilimindedir. HF-SCF modelinde,elektron-elektron etkileşimleri için ortalama bir potansiyel temel alınır. Bu yaklaşım,molekül frekanslarının hesaplanması ve molekül geometrisinin tayini için uygun değildir. DFT modelinde, molekül dalga fonksiyonları yerine,elektron olasılık yoğunluğu (ρ) hesaplanır. DFT modeli, molekül özelliklerinin tayininde çok daha doğru sonuçlar verir. Yarı deneysel molekül orbital yöntemler, ab initio ve moleküler mekanik yöntemleri arasında yer alır. Bu yöntemlerde deneysel olarak elde edilen parametreler mevcuttur. Schrödinger eşitliğinin yaklaşık çözümünü elde etmek için o sisteme uygun parametrelerin kullanılması gerekir. Etkileşim integralleri için yaklaşık fonksiyonların kullanılmasıyla hesaplama süresi ab initio yöntemlerin hesaplama süresiyle karşılaştırılmayacak kadar azdır. Çok küçük sistemler için kullanılabilineceği gibi büyük kimyasal sistemler için de kullanılabilir. Yarı deneysel bazı yöntemler şunlardır:

CNDO (Complete neglect of differantial overlap),INDO (Intermediate neglect of differantial overlap), MINDO (Modified INDO), AM1(Austin model), PM3 (Parametric method). Bu yöntemleri yapısında bulunduran paket programlardan bazıları; MOPAC, AMPAC, GAUSSIAN ve HYPERCHEM'dir. Bu paket programlar yardımıyla moleküllere ait elektron dağılımları, dipol momentleri, molekül orbitalleri, geometrik parametreler (bağ uzunlukları,açı değerleri), enerjiler,

titreşim spektrumları gibi moleküle ait bilgilere ulaşılabilir. Kristal çalışması yapılmış bir molekül için hangi yöntemin daha iyi moleküler parametreler verdiği bulunabilir. Bu bilgiler yardımıyla yapısı bilinmeyen benzer moleküller çalışılabilir. Kuantum mekaniksel yöntemlere dayanan elektronik yapı yöntemlerini biraz daha detaylı inceleyelim. Moleküller hakkında bilgiyi kuantum mekaniği modeli ile incelemek için schrödinger denklemi çözülmelidir.

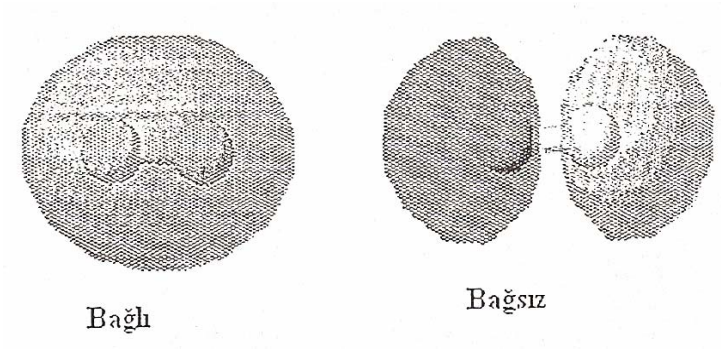
$$H\Psi = E\Psi \tag{3.2}$$

Hamiltonien operatörü H;molekül veya atomdaki elektronlar ve çekirdeğin kinetik ve potansiyel enerjisine bağlıdır. Dalga fonksiyonu Ψ;elektronların molekülde farklı yerlerde bulunma olasılığını verir. Enerji E; elektronik spektroskopiyi yorumlamada yardım etmekte kullanıp, tek tek elektronların enerjileriyle ilişkilidir.

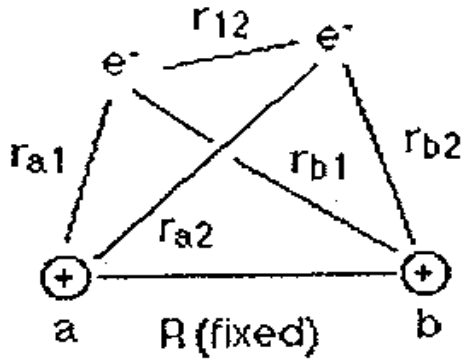
Schrödinger denklemi çok zor bir problem olduğundan yaklaşımlar yapılmadan çözülemez. Born-Oppenheimer ve bağımsız elektron yaklaşımlarıyla problem basite indirgenir.Çekirdeğin kütlesi elektronun kütlesi ile kıyaslandığında daha ağır olduğundan çekirdekler arası uzaklığı sabitleştirmek amacıyla,çekirdeğin konumu sabitleştirilir, molekül için geometri sağlanır ve schrödinger denklemi çözülür [8].

3.3. Bağımsız Elektron Yaklaşımı (Moleküler Orbital (MO))

MO teori çekirdekler arasında elektronların paylaşımı ile oluşan moleküler bağlarla ilgilenir. Dalga fonksiyonu Ψ,elektron dalga fonksiyonlarının çarpımıdır. Her bir moleküler orbital, molekülü oluşturan atom orbitallerinin kombinasyonu olarak yazılabilir. Örneğin su molekülü (H_2) için $c_1 1s_1 + c_2 1s_2$ ($1s_i$ 1 hidrojene ait 1s atomik orbital fonksiyonu, c_i parametre) yazılabilir. Bu metot atomik orbitallerin doğrusal toplam teoremi olarak adlandırılır. H_2 molekülünün en düşük enerjisi iki 1s orbitali toplamından oluşmuş bağlı MO ve bağsız MO'leri şekilde verilmiştir.



Şekil 3.1. H_2 molekülünün MO yaklaşımı [9].



Şekil 3.2. Born-oppenheimer yaklaşımı [9].

Birden fazla elektron olduğunda hamiltoniendeki terimlerden dolayı, Schrödinger denklemini çözmek imkansızdır. Born-Oppenheimer yaklaşımındaki hidrojen molekülü için hamiltonien,

$$H= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{a1}} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{a2}} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{b1}} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{b2}} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 R} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}} \qquad (3.3)$$

Olarak verilir. İlk iki terim elektronların kinetik enerjisidir. Son altı terim ise sistemin potansiyel enerjisidir. Çözüme ulaşmak için, elektronlar arası etkileşimin ortalama değeri alındığında (f_i) schrödinger denklemi çözülebilir hale gelir. Φ_i bir elektron dalga fonksyonu olmak üzere,bir elektronlu denklemler seti Hartree-Fock denklemi adını alır.

$$f_i\Phi_i = \varepsilon_i \varphi_i \qquad i= 1,2,\ldots\ldots,n \qquad (3.4)$$

Toplam dalga fonksiyonu schrödinger denkleminin bir çözümü olur.

$\Psi = \Phi_1 \; \Phi_2 \; \Phi_3 \ldots\ldots\ldots \Phi_n$

Bu çarpım pauli dışarlama ilkesi ve slater determinantı kullanılarak bulunur.[8-11]

3.4. Hartree-Fock SCF (Self Consistent field) Yaklaşımı

Hartree-Fock denklemlerindeki f_i fonksiyonları;

$$f_i = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 + \upsilon_i \qquad (3.5)$$

υ_i moleküldeki çekirdek ve diğer elektronların etkileşimi sırasındaki ortalama potansiyel enerji olmak üzere, tanımlanır.Potansiyel enerjinin diğer elektronların orbitallerine, Φ_i,bağlı olması Hartree-Fock denkleminin tekrarlanarak çözülmesini gerektirir.

Hartree-Fock denkleminin tekrarlanarak çözümü,

1.Uygun elektron orbitalleri (dalga fonksiyonları) $\mathbf{\Phi}_i$'nin ortaya konulması ve υ_i ortalama potansiyel enerjinin hesaplanması.

2. Hartree-fock denklemlerinde yeni elektron orbitalleri tanımlanarak, Φ_i;

$$[\,-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2 + \upsilon_i\,]\,\phi_i = \varepsilon_i\phi_i \qquad (3.6)$$

ortalama potansiyel enerjinin yeni değerleri bulunur.

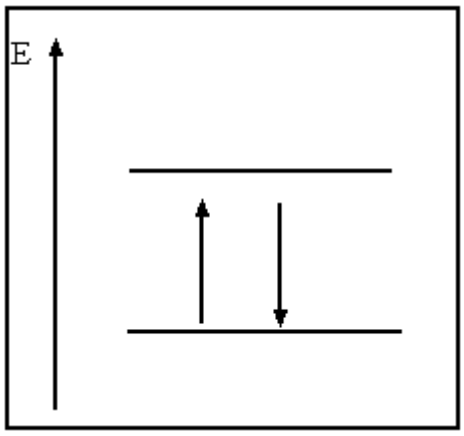
3. İkinci adım olarak da elektron orbitalleri ve potansiyel enerjide hiçbir değişiklik olmayana kadar tekrarlanmasıyla olur.(Self-Consistent)

3.5.Tam Dolu Hartree-Fock Hesaplamaları

Pauli ilkesi gereğince dalga fonksiyonları elektron spininide içermelidir. Orbitaller uzaysal dalga fonksiyonu ve spin fonksiyonunun çarpımı olan Hartree-Fock metoduyla hesaplanır.

$$\Phi_i = \Phi_{i\ uzaysal}\ (x,y,z) \quad \text{veya} \quad \Phi_i = \Phi_{i\ uzaysal}\ (x,y,z)\,\beta \tag{3.7}$$

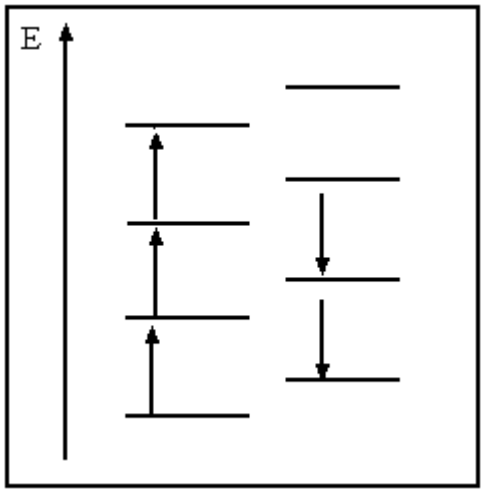
Bir spin orbitalinde ,$\Phi_i = \Phi_{i\ uzaysal}\ (x,y,z)$ α ve β spin dalga fonksiyonların uzayda elektron bulundurma olasılığını tanımlayan uzaysal dalga fonksiyonudur. Kapalıkabuk sistemlerde (tüm elektronlar ikili)SCF denklemlerinin çözümü esnasında, ikili elektronların uzaysal dalga fonksiyonlarının çözümü sınırlanabilir. Buna sınırlandırılmış Hartree-Fock (RHF) hesaplama denir. Spin fonksiyonlar kaldırılırsa her bir iki elektronlunun yerine uzaysal (boşluk) orbitaller seti kullanılır. H_2 molekülü için sınırlandırılmış Hartree-Fock çözümünde, elektron barındıran orbitaller occupied orbital,elektron barındırmayan orbitaller virtual(sanal) orbitaller adını alır.



Şekil 3.3. Tam dolu Hartree-Fock modeli [4].

3.6. Yarı Dolu Hartree-Fock Hesaplamaları

Açık kabuk sistemlerde çiftlenmemiş elektronlar bulunur. Bu metoda iki uzaysal orbital seti, spin yukarı (α) ve spin aşağı (β) kullanılır.



Şekil 3.4. Yarı dolu Hartree-Fock modeli [4].

3.7. Molekül Titreşimleri ve Mod Analizi

Çok atomlu (kompleks) yapıların aydınlatılması Schrödinger denklemi ile mümkün değildir. Bu nedenle çok atomlu yapıların çözümleri için çeşitli yaklaşım metotları uygulanır. Bu yaklaşım metotlarından birisi 'Grup Teorisi'dir. Grup teorisinde, simetri fonksiyonlarından, spektroskopik verilerden ve özel matematiksel terimlerden faydalanılarak kimyasal sistemin yapısı için tahminlerde bulunulur. Karakter tablolarına bakılarak bir molekülün temel titreşim modlarının simetri türlerine dağılımı bulunabilir. Bunun için indirgeme formülünden yararlanılır. Molekül atomlarının uzaydaki dizilişi molekülün simetrisi olarak tanımlanır. Simetri işlemleri (terslenme, dönü, yansıma gibi..) moleküle uygulandığında molekülün simetrisi değişmez. Molekülün bu simetri işlemleri bir grup oluşturur. Bu gruba nokta grubu denir. Herhangi bir simetri türündeki titreşim modu sayısı;

$$n_i = \frac{1}{h} \sum_s n_s \ \chi_i (R)\, \chi (R) \tag{3.8}$$

eşitliği ile bulunur [10].

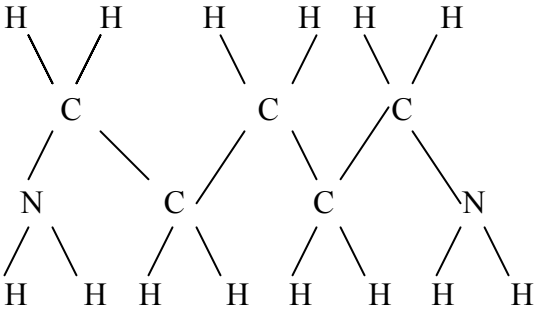
n_i = i. Simetri türündeki titreşim mod sayısı, h = grubun derecesi (simetri eleman sayısı), n_s = bir sınıftaki simetri eleman sayısı, $\chi_i (R)$ = i. Simetri türündeki R simetri

elemanına ait indirgenemez temsilin karakteri, $\chi(R)$= R simetri elemanına ait indirgenebilen temsilin karakteri, Γ = molekülün indirgenebilen gösterim sayısı.

3.7.1. 1,5 -Diaminopentan molekülünün temel titreşimleri

1,5-Diaminopentan ($C_5 H_{14} N_2$) molekülü Şekil 3.5'de gösterildiği gibi 21 atomlu olup, C ve N atomları düzlemsel, H atomları da düzlem dışıdır. Lineer olmayan bir molekül olduğundan 3N-6 tane yani 57 tane normal titreşim modu vardır. 1,5-diaminopentan molekülünün simetri elemanları $E, C_2(z), \sigma_v(xz), \sigma_v(yz)$ şeklindedir.

Bu simetri elemanları C_{2V} ,nokta grubuna girer . Bu nokta grubunun karakter tablosu Çizelge 3.1'de verilmiştir [27]. 1,5-Diaminopentan molekülünün simetri türlerine göre dağılımı indirgeme formülü kullanılarak $17A_1+12A_2+15B_1+13B_2$ şeklinde bulunur.



Şekil 3.5. 1,5-Diaminopentan molekülünün geometrik yapısı [13].

Çizelge 3.1. C_{2v} nokta grubunun karakter çizelgesi [27].

C_{2V}	E	$C_2(z)$	$\sigma_V(xz)$	$\sigma_V(yz)$	IR	Raman
A_1	1	1	1	1	T_Z	X^2, y^2, Z^2
A_2	1	1	-1	-1	R_Z	xy
B_1	1	-1	1	-1	T_X, R_Y	zx
B_2	1	-1	-1	1	T_Y, R_X	yz

4.BİLGİSAYAR HESAPLAMALI MOLEKÜLER SPEKTROSKOPİ

Bilgisayar hesaplamalı moleküler spektroskopi, fizik yasalarını esas alarak moleküler yapıyı, kimyasal reaksiyonları, spektroskopik büyüklükleri hesaplar. Teorik hesaplamalar diye adlandırdığımız bu metot moleküler mekanik ve elektronik yapı teorisi olarak ikiye ayrılır. Her iki metot da benzer hesaplamalar yapar. Bu hesaplamalar kısaca;

Geometrik optimizasyon*;* en düşük enerjili yani en kararlı duruma karşılık gelen moleküler yapının geometrisini bulmaktır. Geometrik optimizasyon enerjinin atomik koordinatlara göre birinci türevinden yani gradyentinden hesaplanır. Frekans hesabı*;* atomların hareketinden kaynaklanır ve enerjinin atomik koordinatlara göre ikinci türevinden hesaplanır. Bilgisayarlı hesaplama metotlarında molekülün özelliklerini inceleyen iki alan vardır. Bunlar moleküler mekanik ve elektronik yapı kuramlarıdır. Elektronik yapı kuramı içerisinde yarı-deneysel (semiemprical) moleküler orbital yöntemleri ve ab-initio yöntemleri yer alır. Her iki metot da aynı temel hesaplamaları gerçekleştirir. Her ikisinin de kolaylıkları yanında dezavantajları da vardır.

Moleküler mekanik hesaplamaları moleküler yapının basit klasik-mekanik modelinin oluşturulmasına dayanır. Moleküler mekanik hesaplamaları yapan programlar bir kimyasal sistemdeki atomlar arasındaki etkileşmeleri klasik mekanik kuralları ile tanımlar. Bu programlar oldukça hızlıdırlar ve temel haldeki bir sistemin enerjisini kolaylıkla hesaplayabilirler. Ancak moleküler mekanik metotların verdiği kolaylıkların yanı sıra dezavantajları da vardır. En önemli dezavantajlarından birisi moleküler sistemin elektronik yapıya bağlı olan özellikleri ya da diğer bir ifadeyle elektronik yapı hakkında bilgi verememesidir [12].

Elektronik yapı metotlarda kuantum mekaniksel yasalar kullanılır. Kuantum mekaniğine göre bir molekülün enerjisi Schrödinger denkleminin çözümü ile verilir. Çok küçük sistemler hariç Schrödinger denkleminin tam çözümü mümkün değildir. Bu nedenle simülasyonla yaklaşık çözümler yapılır.

Ab-Initio moleküler orbital yöntemleri kuantum mekaniksel yöntemlere dayanır ve bu yöntemler ile elektronik yapı ve buna bağlı özellikler hesaplanabilir. Hesaplama süresi oldukça uzundur. Hesaplama süresini azaltmada bazı kolay yöntemler uygulanabilir fakat böyle bir yol moleküler yapıyla ilgili bilgilerde çok az da olsa sapmaya neden olabilir.

Yan deneysel (Semiemprical) metodlar: Yarı deneysel metodların moleküler mekanik ve Ab-initio metotlarına göre avantajları ve dezavantajları söz konusudur. Örneğin hesaplama süresi Ab-Initio hesaplamalarıyla karşılaştırılamayacak kadar kısadır. Çok küçük sistemler için kullanılabileceği gibi büyük moleküler sistemler için de kullanılabilir. Hesaplamalarda kuantum mekanik yöntemler kullanılır. Bu metotlarda moleküler parametrelerin deneysel değerlerine yakın sonuçlar, verecek parametreler mevcuttur. Hesaplamaları kolaylaştırmak için deneysel verilerden elde edilen parametreler yarı deneysel (semiemprical) yöntemlerde kullanılmaktadır. Moleküler mekanikte olduğu gibi incelenen sistem için tüm parametrelerin uygun olması gerekmektedir.

Yan deneysel metodlar ve ab-initio metotları ile elde edilen sonuçların doğruluğu ve hesaplama maliyeti açısından birbirlerinden farklılık gösterirler. Yarı deneysel yöntemler ile hesaplamalar zaman açısından oldukça ucuz ve iyi parametre setlerinin olduğu sistemlerde hem kalitatif hem de kantitatif açıdan molekül yapıları hakkında oldukça doğru tahmin verir.

Ab initio metotlarda, moleküler mekanik ve yarı deneysel metotların aksine, hesaplanan molekül için ışık hızı, Planck sabiti, elektronların hızı ve kütlesi gibi temel fiziksel büyüklükler hariç deneysel değerler kullanılmaz [8,15]. Moleküllerin titreşim spektrumlarının ve kuvvet alanlarının kuantum mekaniksel ab initio yöntemler ile hesaplanması P. Pulay'ın 1969 da ki klasik çalışmasına dayanır [16].

Bu çalışmada Pulay kuvvet ve gradyent metotlarını kullanmıştır. Bu metot çok atomlu moleküllerin kuvvet alanlarının hesaplanmasında yaklaşık sonuç verir. Pulay'ın bu çalışmasında atomlara etki eden kuvvetlerin ab initio metotlarda analitik

olarak elde edilebileceği gösterilmiş ve Hartree-Fock elde edilmiştir. İkinci ve daha üst mertebeden analitik türevlerin elde edilmesi kuantum mekaniksel hesaplama yöntemleri için çok büyük bir gelişme olmuştur. Ab initio metotlardan Hartree- Fock (HF), yoğunluk fonksiyonu teorisi (DFT), Möller Plesset teorisi (MP2) için 1970-1980'li yıllarda enerji ifadesinin 1. ve 2. analitik türevleri alınarak spektroskopik büyüklüklerin hesabı için kullanılmıştır [11,16]. Birinci türevlerin hesaplanması sonucunda geometrik optimizasyon yapılır. İkinci türevler bize kuvvet sabitini dolayısıyla titreşim frekanslarını verir. infrared şiddetleri dipol momentlerin türevinden bulunur. Günümüzde kullanılan kuantum mekaniksel yöntemler ile hesaplama yapan paket programların tamamında değişik mertebelerden analitik türevler kullanılır. Çizelge 4.1'de enerjinin türevlerinden hangi büyüklüklerin hesaplanabileceği verilmektedir. Burada E_e toplam elektronik enerjiye, R atomik koordinatlara, e elektrik alan bileşenine karşılık gelir [11].

Çizelge 4.1. Enerji türevlerinin fiziksel büyüklüklere göre dağılımı [8,11].

Enerji Türevi	Hesaplanan büyüklükler
$\frac{\partial E_e}{\partial R}$	Atomlara etki eden kuvvetler, moleküllerin geometrisi, karalı noktalar
$\frac{\partial E_e}{\partial R \partial R}$	Kuvvet sabitleri temel titreşim frekansları infrared ve raman spektrumları, titreşim genlikleri
$\frac{\partial^2}{\partial R}\frac{E_e}{\partial R}$	Dipol moment türevleri, harmonik yaklaşımda infrared şiddetleri
$\frac{\partial^3 E_e}{\partial R_i \partial \varepsilon_\alpha \partial \varepsilon_\beta}$	Kutuplanabilirlik türevleri, harmonik yaklaşıma raman şideti

4.1. Kuantum Mekaniksel Enerji İfadeleri ve DFT

Bir molekülün enerjisi ve diğer fiziksel büyüklüklerin kuantum mekaniksel olarak çözümünü Schrödinger dalga denklemi ile bulabilir. Schrödinger denklemi;

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \tag{4.1}$$

ile verilir. Burada H moleküler etkileşmeleri tanımlayan bir operatör, Ψ moleküler dalga fonksiyonu, E ise moleküler sistemin farklı kararlı durumlarına karşılık gelen enerjilerdir.

Moleküller kuantum mekaniksel olarak incelenirken moleküler hareket çekirdeğin hareketi ve elektronların hareketi olmak üzere iki kısma ayrılır. Çekirdeğin kütlesi elektronun kütlesine göre çok büyük olduğu için bu iki hareket ayrı ayrı incelenebilir. Bu yaklaşıma Born-Oppenheimer yaklaşımı adı verilir.

Bir molekülün elektronik enerjisi kuantum mekaniksel olarak:

$$E_E = E^T + E^V + E^{XC} \tag{4.2}$$

yazılabilir. Burada E^T elektronların hareketinden kaynaklanan kinetik enerji, E^v çekirdek elektron çekim ve çekirdek çiftleri arasındaki itme potansiyel enerjisidir. E^J elektron elektron itme terimi, $E^{xc} = E^x + E^c$ ise değiş tokuş (E^x) ve korelasyon (E^c) terimi olup elektron elektron etkileşmelerinin geri kalan kısmını kapsar. Değiş tokuş enerjisi zıt spirili elektronlar arasındaki etkileşme enerjisi olup kuantum mekaniksel dalga fonksiyonunun antisimetrikliğinden kaynaklanır.

Korelasyon enerjisi ise aynı spinli elektronlar arasındaki etkileşme enerjisidir.Buna Neon atomunun enerjisini örnek olarak verebiliriz. Atomik birimler cinsinden Neon atomunun hesaplanmış enerjileri ;

E = -129,4

E^T= 129

E^v=-312

E^J = 66

E^x= -12

E°= -0,4 atomik birim (hartree) dir. (1 Hartree (H) = 27,192 eV tur) [15,16].

Eğer enerjinin açık ifadesi moleküler dalga fonksiyonu Ψ'ye bağımlı ise bu Hartree-Fock (HF) modeli olarak bilinir. HF modeli korelasyon yani elektron - elektron etkileşim enerjilerini dikkate almaz. Eğer enerji ifadesi elektron yoğunluğu ρ ya bağımlı ise,.buna da yoğunluk fonksiyonu modeli denir ve DFT ile gösterilir. Yoğunluk fonksiyonu teorisinde sık kullanılan iki kavram vardır. Bunlar;

1. Elektron yoğunluğu, $\rho = \rho$ (r): Herhangi bir noktadaki elektron yoğunluğu,
2. İdeal Elektron Gazı Modeli: Bir bölgedeki yük dağılımının, sisteme düzgün dağılmış n tane elektron ve sistemi nötralize edecek kadar pozitif yükten oluştuğu varsayımına dayalı idealize edilmiş bir modeldir. Klasik modellerinde enerji ifadeleri elde edilirken elektron dağılımının V hacimli bir küp içinde olduğu ve elektron yoğunluğunun ρ = n / V (n ; mol sayısı, V ; hacim) olmak üzere ρ sabit kabul edilmiştir. Ayrıca fonksiyonel kavramı da DFT'de çok sık kullanılan bir kavram olup bir F fonksiyonunun f(x)' e bağımlılığım ifade eder ve F[f] ile gösterilir [8,10].

4.2. B3LYP Karma Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi

Dalga mekaniğine dayanan HF teorisi kinetik enerji için uygun bir ifade verir fakat değiş tokuş enerjisi için iyi sonuç vermez ve bu metotla korelasyon enerjileri hesaplanamaz. DFT modelleri ise değiş tokuş ve korelasyon enerjilerini daha iyi hesaplar ve böylece tam enerji ifadesi için saf HF veya saf DFT modelleri yerine, bu modellerin her ikisinin enerji ifadelerinin, toplam elektronik enerji ifadesinde kullanılmaları sonucu, karma modeller üretilmiştir. Bu modeller toplam enerji, bağ uzunlukları, iyonizasyon enerjileri gibi birçok büyüklükleri saf modellerden daha iyi hesaplamaktadır.

Bir karma model de bu enerji ifadeleri birleştirilerek yeni bir enerji ifadesi elde edilebilir. Becke, değiş tokuş ve korelasyon enerjisi XC için aşağıdaki karma modeli ortaya çıkarmıştır.

$$E_{BLYP}^{XC} = C_{HF} E_{HF}^{X} + C_{DFT} E_{DFT}^{XC} \qquad (4.3)$$

Burada Cler sabitlerdir. Becke'nin önerdiği karma modeller BLYP ve B3LYP'dir. Bu karma modellerin en iyi sonuç verenlerinden biri; Lee,Young,Parr korelasyon

enerjili üç parametreli Becke karma metodudur, bu metoda B3LYP denir . Bu modelde değiş tokuş ve korelasyon enerjisi; Split valans temci setleri ise bir valans orbitali için farklı büyüklükte (a) iki veya daha çok temel fonksiyon içerirler. Örneğin:

$$E_{BLYP}^{XC} = E_{LDA}^{X} + C_0(E_{HF}^{X} - E_{LDA}^{X}) + C_1 \Delta E_{H88}^{X} + E_{VWN3}^{C} + C_2(E_{LYP}^{C} E_{VWN3}^{C}) \qquad (4.4)$$

ifadesi ile verilmektedir. Burada C_0,C_1 ve C_2 katsayıları deneysel değerlerden türetilmiş sabitler olup değerleri sırası ile 0,2, 0,7 ve 0,8'dir. Dolayısı ile B3LYP modelinde bir molekülün toplam elektronik enerji ifadesi;

$$E_{BLYP} = E_V + E_J + E_{BLYP}^{XC} \qquad (4.5)$$

Olarak elde edilir [8,18].

4. 3. Temel Setler ve 6-31 G(d) Temel Seti

Atomik orbitallerin matematiksel ifadesine temel set denir. Moleküllerin atomlardan oluşması ve aynı cins atomların farklı moleküllerde benzer özellikler göstermelerinden dolayı moleküler orbital atomik orbitallerin lineer toplamları olarak yazılabilir. ψ_i moleküler orbitali, ϕ_μ de atomik orbitali göstermek üzere aralarında

$$\Psi, = \sum^{N} c_{\mu i} \phi_\mu \qquad (4.6)$$

bağıntısı vardır. Burada $c_{\mu i}$ molekuler orbital açılım katsayıları; ϕ_μ atomik orbitalleri ise temel fonksiyonları olarak adlandırılır.Gaussian tipi atomik fonksiyonlar aşağıdaki ifadeyle verilir.

$$g(\alpha, r) = c x^n y^m z^I e^{-\alpha r^2}$$

Burada a fonksiyonun genişliğini ifade eden bir sabit, c ise α , l,m ve n ye bağlı sabittir. s, p_y ve d_{xy} tipi gaussian fonksiyonlar aşağıda

$$g_s(\alpha,\vec{r}) = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{3/4} e^{-ar^2} \tag{4.7}$$

$$g_y(\alpha,\vec{r}) = \left(\frac{128a^5}{\pi^3}\right)^{1/4} ye^{-ar^2} \tag{4.8}$$

$$g_{XY}(\alpha,\vec{r}) = \left(\frac{2048a^7}{\pi^3}\right)^{1/4} xye^{-ar^2} \tag{4.9}$$

Bunlara ilkel gaussianlar denir. Sınırlandırılmış gaussianlar ise;

$$\phi_m = \sum_p d_{\mu p} g_p \tag{4.10}$$

İfadesi ile verilmekte olup $d_{\mu p}$' ler herhangi bir temel set için sınırlı sayuıdaki sabitlerdir.

Sonuçta bir moleküler orbital,

$$\Psi, = \sum^N c_\omega \phi_\mu = \sum_\mu \left(\sum_p d_{\mu p} g_p \right) \tag{4.11}$$

İle verilmektedir. Burada $c_{\mu i}$ lineer açılım katsayısının her bir orbital için tekrar hesaplanması bizim için önemli bir sorun yaratır.

Atomik orbitaller için birçok temel set önerilmiştir. Bunlardan minimal temel setler; herhangi bir atom için gerektiği sayıda temel fonksiyon içerir. Örneğin;

H:Is

C: 1s, 2s, 2px, 2py, 2pz

Split valans temel setleri ise bir valans orbitali için farklı büyüklükte (a) iki veya daha çok temel fonksiyon içerirler. Örneğin;

H:1s, 1s

C :1s, 2s, 2s, 2px, 2py, 2px, 2py, 2pz

Burada işaretli ve işaretsiz orbitallerin büyüklükleri farklıdır. 3-21G, 4-21G, 6-31G setleri temel minimal setlerdir. Split valans temel setler orbitallerin büyüklüğünü değiştirir fakat şeklini değiştirmez. Polarize temel setler ise bir atomun taban durumunu tanımlamak için gerekenden daha fazla açısal momentumu orbitallere ekleyerek orbitallerin şeklini değiştirir. Örneğin temel polarize setler karbon atomları için d:fonksiyonlarını da göz önüne alır. 4-21G* (4-21G(d)), 6-31G*(6-31G(d)) şeklinde ifade edilir [8,20].

Hesaplamalarımızda kullanılan 6-31G(d) temel seti için ifadeler aşağıda ve ilgili sabitlerde çizelgede verilmiştir. Hidrojen atomu için S atomik orbitalleri aşağıdaki gibi verilir.

$$\phi_{Is}\left(\vec{r}\right)=\sum_{k=l}^{3} d_k\, g_s\left(a_k \vec{r}\right) ve\, \phi_{ıs}\left(\vec{r}\right)=\sum_{k=l}^{3} d_k\, g_s\left(a_k, \vec{r}\right) \tag{4.12}$$

Karbon ve azot atomları için s ve p atomik orbitaller,

$$\phi_{Is}\left(\bar{r}\right)=\sum_{k=ı}^{3} d_{2p,k}\, g_s\left(a_{1k}, \bar{r}\right), \phi_{2s}\left(\bar{r}\right)=\sum_{k=ı}^{3} d_{2s,k}\, g_s\left(a''_{k,r}\, \bar{r}\right) \tag{4.13}$$

$$\phi''_{2px}\left(\bar{r}\right)=\sum_{k=ı}^{3} d_{2p,k}\, g_{px}\left(a'_{2k}, \bar{r}\right) \tag{4.14}$$

$$\bar{\phi}_{2s}\left(\bar{r}\right)=\sum_{k=1} d''_{2s,k}\, g_s\left(a''_{2k,}\, \bar{r}\right), \phi''_{2pxs}\left(\bar{r}\right)=\sum_{k=ı} d''_{2p,k}\, g_{px}\left(a''_{2k,}\, \bar{r}\right), \tag{4.15}$$

Şeklinde yazılabilir.

Karbon ve azot atomları için d orbitali sanal bir orbital olup kısıtlanmamıştır. Yani $\phi_d = g_d(a_d)$ ifadesi ile verilmektedir. $\phi' ve \phi''$ fonksiyonları valans kabuğunun iç ve dış kısımlarına karşılık gelir [10,22,23].

Çizelge 4.2. Hidrojen, karbon ve azot atomları 6-31G* temel fonksiyon sabitleri [14,20,.21].

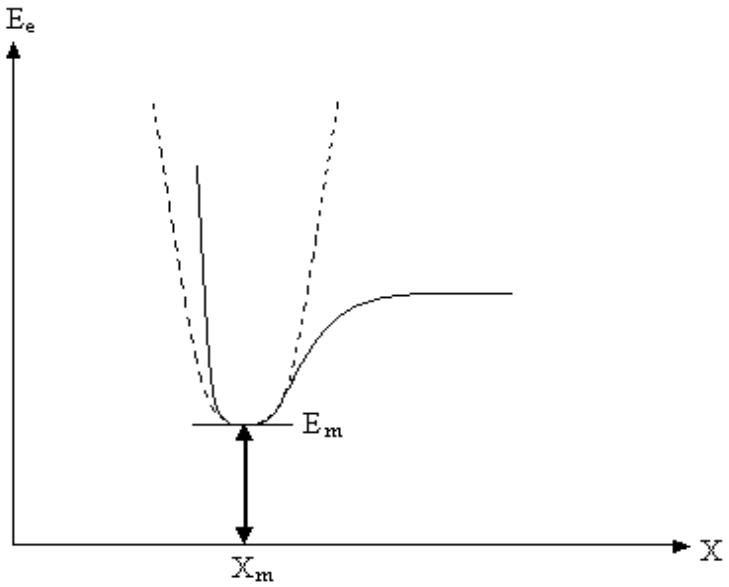
Hidrojen atomu						
α		d		α		
1,300773		3,349460		1,219492		
1,962079		2,347270				
4,445290		8,137573				
Karbon atomu için						
α_{I}	d_{Is}	α_2	d_{2_s}	d_{2_p}	α	α_d
3.047525	1.834737	7.868272	-1,193324	6,899907	1,559860	0,8
4,573695	1,403732	1,881289	-1,608542	3,164240		
1,039487	6,884262	5.442493	1.143456	7.443083		
1,039487	6,884262					
2,921016	2,321844					
9,28663	4,679413					
3,163927	3,623120					
Azot atomu için						
α_{I}	d_{Is}	α_2	d_{2_s}	d_{2_p}	α	α_d
4,173511	1,834772	1,186242	-1,149612	6,757974	2,207742	0,8
6,274579	1,399463	2,771432	-1,691175	3,239073		
1,429021	6,858655	7,878976	1,145852	7,408951		
4,023433	2322409					
1,282021	4,690699					
4,390437						

4. 4. Geometrik Optimizasyon

Kararlı hal (denge durum) geometrisinin nasıl hesaplandığını bu kısımda inceleyeceğiz.

Kullanılan yöntem gradiyent optimizasyonu veya kuvvet metodu olarak bilinir. Bilgisayarlı hesaplama tekniğinde hesaplamalar moleküler sistem belirli bir geometride iken gerçekleştirilir. Moleküllerdeki yapısal değişiklikler molekülün enerjisinde ve diğer birçok özelliklerinde kayda değer değişiklikler gösterir. Molekülün yapısındaki küçük değişiklikler sonucunda oluşan enerjinin koordinata bağımlılığı potansiyel enerji yüzeyi olarak adlandırılır. Potansiyel enerji yüzeyi moleküler yapı ile sonuç enerjisi arasındaki ilişkidir.

Bir molekül için potansiyel enerji eğrileri veya yüzeyi bilinirse denge durumundaki geometriye karşılık gelen minimum enerjili nokta bulunabilir.iki atomlu bir molekülde bağ gerilmesine karşılık gelen elektronik enerji grafiği Şekil 4.1'de verilmiştir Burada minimum enerjili nokta E_m ve X_m ile gösterilmektedir.



Şekil 4.1.iki atomlu bir molekülde elektronik enerjinin atomlar arasındaki mesafeyle bağlantısı [5].

gradyent vektörü

$$\langle g| \equiv g = \left(\frac{ae}{ax_1}, \frac{ae}{ax^2}, \ldots \right) \tag{4.16}$$

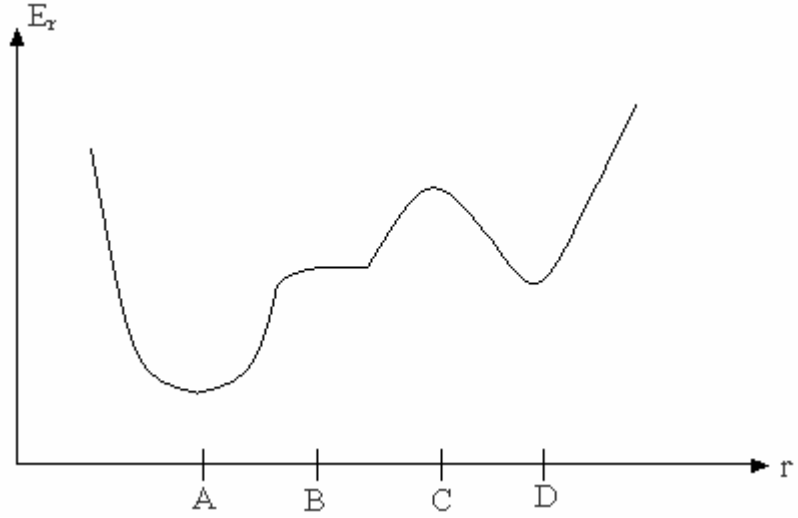
İle verilir. Burada ;E = Enerji, $\chi_1, \chi_2 =$ Konumuna ifade etmektedir.

Moleküler geometri optimizasyonu bu konumlara karşılık gelen minimum enerjili noktalan bulmak demektir. Bu da ilk aşamada yukarda verilen gradyent vektörünü bulmak, daha sonrada bu vektörü sıfır vektör yapan noktalan bulmaya karşılık gelir.

$$\langle g| = (00, \ldots.) \tag{4.17}$$

Gradyent vektörünün sıfır olduğu noktalar minimum enerjili duruma karşılık gelir ve molekülün bu durumdaki geometrisine de denge durumu geometrisi adı verilir.

Şekil 4.2'de görüldüğü gibi bir molekül için potansiyel enerji yüzeyinde birçok maksimum ve minimumlar görülür.



Şekil 4.2.İki boyutta potansiyel enerji yüzeyi [5].

Potansiyel enerji yüzeyindeki minimumlar sistemin dengede olduğu yerdir. Tek bir molekül için farklı minimumlar farklı konformasyonlara veya yapısal izomerlere karşılık gelir. Sırtlardaki düşük nokta bir yönde yerel minimum, diğer yönden bir

maksimumdur. Bu tür noktalara eyer noktaları denir. Bunlar iki denge yapısı arasındaki geçiş yapısına karşılık gelir.

Geometri optimizasyonları genellikle potansiyel enerji yüzeyindeki minimumları araştırır, bunun neticesinde de moleküler sistemlerin denge yapılarını tahmin eder. Optimizasyon aynı zamanda da geçiş yapılarını araştırır.

Minimumlarda ve eyer noktalarında enerjinin birinci türevi yani gradiyent sıfırdır. Kuvvet de gradiyentin negatifidir, bu nedenle bu noktalarda kuvvet de sıfırdır. Potansiyel enerji yüzeyinde gradiyent vektörü g' nin sıfır olduğu noktaya kararlı noktalar adı verilir. Geometri optimizasyonları bu kararlı noktalan bulmayı hedefler.

Geometri optimizasyonu giriş(başlangıç) geometrisinden moleküler yapıdan başlayarak potansiyel enerji yüzeyini dolaşır. Bu noktada enerji ve gradiyenti hesaplar ve hangi yöne doğru ne kadar gidileceğine karar verir. Gradiyent eğimin dikliğini verdiği kadar yüzey boyunca mevcut noktadan enerjinin çok hızlı düştüğü noktayı da verir.

Enerjinin atomik koordinatlara göre ikinci türevi kuvvet sabitini verir. Optimizasyon algoritmalarının çoğu kuvvet sabitleri matrisini de hesaplar. Kuvvet sabitleri bu noktadaki yüzeyin eğriliğini tanımlayarak bir sonraki aşamanın belirlenmesinde ek bilgi verir. Optimizasyon yakınsadığında tamamlanmış olur. Yani hesaplanan geometride g vektörü sıfir ve bir sonraki aşamada hesaplanan geometrik parametrelerin değerleri ile hesaplanan değerler arasındaki fark ihmal edilebilir bir değerde ise optimizasyon tamamlanmış olur [8,23].

4. 5. Hesaplama Yöntemi

4.5.1. Yoğunluk fonksiyonu teorisinde öz uyumlu alan metodu (DFT-SCF)

Bir molekülün enerjisi ve geometrik parametreleri DFT modelinde SCF yöntemi ile aşağıda belirtilen yol izlenerek hesaplanır.

I.. Yaklaşık bir moleküler orbital ifadesi giriş değeri olarak tahmin edilir. Bu tahmin atomik orbitallerinin çizgisel kombinasyonlarını esas alır. Atomik orbital olarak 6-31 G (d) ve 6-311 G (d) temel seti kullanılır.

II..Elektron yoğunluğu bu tahmini moleküler orbitalden hesaplanır ve giriş değeri olarak kabul edilir.

III ..Tahmini enerji ifadeleri hesaplanır.

IV . Önce $S_{\mu V} = \int \phi_V(\vec{r})\,\phi_V(\vec{r})\vec{dr}$ ifadesi hesaplanır, daha sonra da aşağıda verilen;

$H_{\mu\nu}^{core}, j_{\mu\nu,}\, F_{\mu\nu}^{xc}$ hesaplanır. Bir sonraki aşamada $F_{\mu\nu}$ değeri hesaplanır.

$$H_{\mu\nu} = \int \phi_\mu(\vec{r}) \left(\frac{-1}{2\nabla^2} - \sum_A \frac{Z_A}{\left|\vec{r} - \vec{R_a}\right|} \right) \phi_V \, d\vec{r} \tag{4.18}$$

$$j_{\mu\nu} = \sum_{\lambda a}^{N} p_{\lambda a} (\mu a I \lambda q) = \int\int \phi\mu\left(\bar{r}\right) \phi_{bv}\left(\bar{r}\right) \frac{1}{\bar{r} - r^1} \phi_\lambda\left(\bar{r}\right) \phi_\sigma\left(\bar{r}\right) \bar{d}\, r\, \bar{dr} \tag{4.19}$$

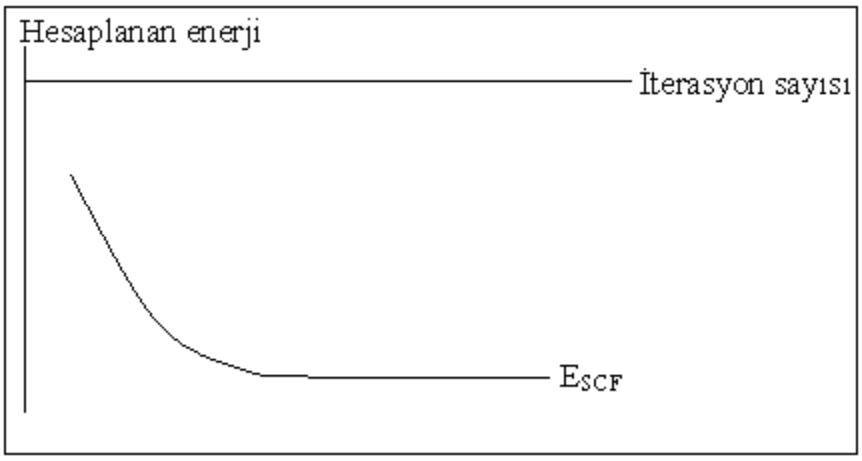
$$F_{\mu\lambda} = H_{\mu\nu}^{core} + j_{\mu\nu} + F_{\mu\nu}^{xc} \tag{4.20}$$

Yukarıda ifade edilen aşamalardan başlangıç değeri hesaplanır, bu başlangıç değer hesaplamalarından sonra SCF çevirimi tekrar başlar. Yani elektron yoğunluğu p ve $S_{\mu V}$, $H_{\mu V}^{core}$, $J_{\mu V}$, $F_{\mu V}^{xc}$, ε, C_{vi}, E_e, $\frac{\partial e}{\partial r}$. Bu işlem hesaplanan bu büyüklüklerin bir önceki değeri ile hesaplanan değeri arasındaki fark kabul edilebilir bir seviyeye inene kadar devam edilir. Örnek olarak enerjinin yakınsamasını göz önüne alalım ; hesaplanan enerji değerleri arasındaki fark kabul edilebilir- bir toleransta bir birine yakın ise hesaplama işlemi yani SCF iterasyonu durdurulur. Enerjinin yakınsaması ile işlem sayısı arasındaki ilişki Şekil 3.7'de verilmiştir [6,21].

4.5.2. SQM metodu

Pulayın kuvvet veya gradyent metodu; çok atomlu moleküllerin kuvvet alanlarının ab initio modeller ile hesabında en önemli gelişmedir. Bu metot da enerjinin koordinata göre birinci türevinin sıfır olduğu durumda molekülün denge durum geometrisi bulunur. Hartree-Fock modeli için birinci analitik türev Pulay tarafından formüle edilmiştir[16]. Enerjinin koordinata göre ikinci türevi ise kuvvet sabitini verir. Kuvvet sabitinden ise molekülün titreşim frekansları hesaplanabilir. Çok atomlu moleküllerin kuvvet sabitlerinin ilk sistematik hesaplamaları 1970'li yıllarda yapılmıştır. Özellikle HF modeli ile yapılan hesaplamalar hesap edilen kuvvet sabitleri ve frekanslarla ilgili olarak sistematik ama %10-15 hatalı sonuçlar vermiştir [22].

Hesaplanan kuvvet sabitlerindeki bu hata miktarı sonuçta titreşim frekanslarını da etkilemektedir. Ölçülen frekans değerleri ile hesaplanan frekans değerleri arasındaki farkı gidermek amacı ile ölçekleme metodu geliştirilmiştir. Bu alandaki ilk ciddi çalışmalar; etilen ve asetilenin kuvvet alanı çalışmalarında Pulay ve Meyer tarafından 1974 te kullanılan basit ölçeklemelerdir[24]. Bu kuvvet sabitlerinin gerçeğinden büyük hesaplanması sistematik olduğu için hesaplanan değerler sabit ölçekleme faktörleri ile çarpılarak gerilmelerde %10 bükülmelerde %20 azaltılmış hale getirilmiştir. Benzer çalışmalarda aynı dönemlerde farklı gruplarca yapılmıştır [8,18,25].



Şekil 4.3. Enerjinin yakınsaması ile işlem sayısı arasındaki ilişki [5].

Sistematik bir şekilde model olarak ölçekleme, Puiay ve arkadaşları [26] tarafından geliştirilmiş ve kullanılmıştır. Pulay ve arkadaşları HF/4-21 G ve HF/4-21 G* için ölçeklemeyi sistematik hale getirmişler ve bu model HF/4-21 G ve HF/4-21 G* tabanlı SQM modeli olarak adlandırılmıştır.

B3LYP / 6-31 G (d) modeli için SQM metodu P.Pulay ve G. Rauhut tarafından 1995 yılında geliştirilmiştir. 20 tane basit organik molekül için (C,H,N,O...içeren) geometrik optimizasyon B3LYP / 6-31 G (d) metodu kullanılarak optimize edilmiş ve hesaplanan geometride bu moleküllere ait 347 tane temel titreşim frekansı yine B3LYP / 6-31 G (d) kullanılarak hesaplanmış ve deneysel değerlerle karşılaştırılarak ölçekleme faktörleri belirlenmiştir [26].

Genellikle B3LYP / 6-31G (d) düzeyindeki bir teori ile yapılan hesaplamada frekanslar deneysel değerlerden ortalama %5 daha büyük hesaplamaktadır. Parmak izi bölgesinde modelin verdiği frekans değerlerinin deneysel değerlerden farkının RMS değeri $74\ cm^{-1}$, SQM uygulandıktan sonra ise $13\ cm^{-1}$ kadardır. Bunun temel nedeni ise; anharmoniklik, modelin eksikliği, molekül geometrisindeki hata miktarı gibi sıralanabilmektedir [26].

Bu hesaplamalarda takip edilen yol işlem sırasına göre aşağıda verilmiştir.

1. İncelenecek molekülün yaklaşık geometrisinin veri olarak girilmesi

2. Geometri optimizasyonunun yapılması; Önce hesaplama metodu ve kullanılacak temel set seçilir. Geometri optimizasyonu, seçilen model çerçevesinde enerjinin birinci analitik türevinden hesaplanır. Enerjinin birinci analitik türevi gradiyent vektörü $\langle g|$ yi verir, $\langle g|$'nin sıfır olması moleküler sistemin dengede olması demektir. Bu durumda molekülün yapısı hesaplanır.

3. Molekülün titreşim frekansının hesaplanması; Geometri optimizasyonu ile elde edilen geometri veri olarak girilir ve hesaplama modeli seçilir. Seçilen modelde enerjinin ikinci analitik türevi hesaplanır. İkinci türev bize kuvvet sabitlerini verir. Kuvvet sabitlerinden titreşim frekansları harmonik yaklaşımda hesaplanır.

4. Titreşim frekansları uygun ölçekleme faktörleri kullanılarak ölçeklenir [27].

Çizelge 4.3. 1,5-diaminopentan molekülünün deneysel ve teorik geometrik Parametreleri [29].

Parametreler	**Deneysel***	**B3LYP 6-31G(g)**	**BLYP 6-31 G(g)**	**HF 6-31 G (g)**	**B3LYP 6-311 G (g)**
Bağ uzunlukları (A)					
N -H	0.9	1,02	1,03	1,00	1,02
C -H	0,97	1,09	1,1	1,08	1,09
N - C	1,48	1,46	1,47	1,45	1,46
C - C	1,52	1,53	1,55	1,53	1,53
Bağ açıları					
H-C-H	107,59	106,8	106,21	106,27	105,84
H-N-H	107,69	105,6	104,81	106,85	106,31
N-C-C	114,71	116,26	116,52	115,66	116,33
C-C-C	112,01	113,46	113,61	113,15	113,57

*X.G. Meng and Z.D.Lin tarafından elde edilen değerler

B3LYP / 6-311 G(d) hesaplama metodunda N-C-C (116.33°) bağ açısı, C-C-C (113.57°) , H-N-H (106.31°) ve H-C-H (105.84°) bağ açılarından daha büyüktür. Aynı durum BLYP / 6-31 G(d), B3LYP / 6-31 G(d) ve HF / 6-31 G(d) hesaplama metotları içinde geçerlidir. Genel olarak N-C-C bağ açıları C-C-C, H-C-H ya da H-N-H bağ açılarından büyüktür. Bu durum deneysel sonuçla uyumludur.

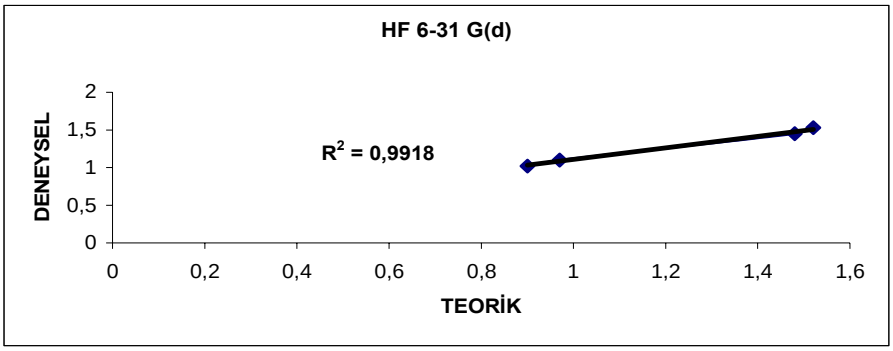
B3LYP / 6-311 G(d) hesaplama metodunda C-C (1,53 Â) bağ uzunluğu, N-C (1,46 Â) C-H (1,09 Â) ve N-H (1,02 Â) bağ uzunluğundan daha büyüktür. Aynı durum BLYP / 6-31 G(d), B3LYP / 6-31 G(d) ve HF / 6-31 G(d) hesaplama metotları içinde geçerlidir. Genel olarak; C-C bağ uzunluğu N-C, C-H ve N-H bağ uzunluğundan daha büyüktür. Bu durum deneysel sonuçla uyumludur.

HF metodu ile yapılan hesaplamalarda bazı bağ uzunlukları deneysel değerlerden daha kısa hesaplanmıştır. N-C bağ uzunluğu, deneysel olarak 1.48Â iken HF metodunda 1.45Â olarak hesaplanmıştır. Deneysel değerler ile hesaplanan değerler arasında en büyük fark BLYP / 6-31 G(d) metodunda ortaya çıkmıştır. Bu fark yaklaşık olarak 0,13Â civarındadır.

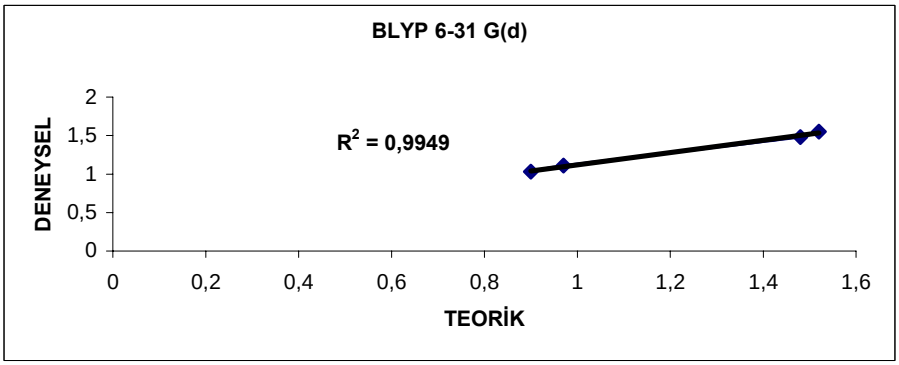
Aynı zamanda bağ açılan için teorik değerlerle deneysel değerler karşılaştırılarak korelasyon grafikleri şekillerde verilmiştir.

Çizelgedeki deneysel değerler ile hesaplanan geometrik parametre değerleri karşılaştırıldı. 1,5-diaminopentan molekülünün bağ uzunlukları, teorik değerlerle deneysel değerlerin karşılaştırılması için korelasyon grafiği Şekilde verilmiştir.

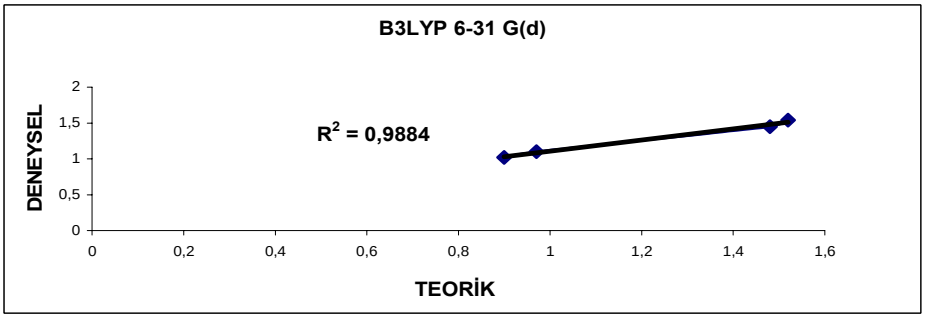
Frekanslar sırasıyla HF, BLYP, B3LYP / 6-31 G(d) ve B3LYP / 6-311 G(d) metotları ile hesaplanmıştır. Deneysel frekans değerleri ile hesaplanan teorik frekans değerlerini karşılaştırmak için korelasyon grafikleri çizildi. Bu grafiklerden görüldüğü gibi genelde bütün metotlar deneyle uyumlu sonuç vermiştir.



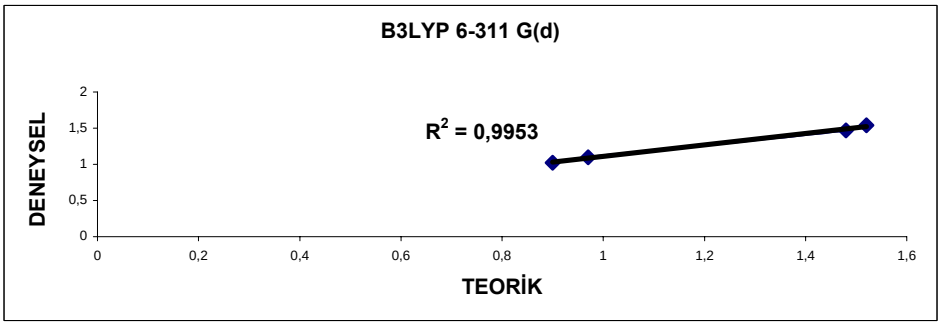
(a)



(b)

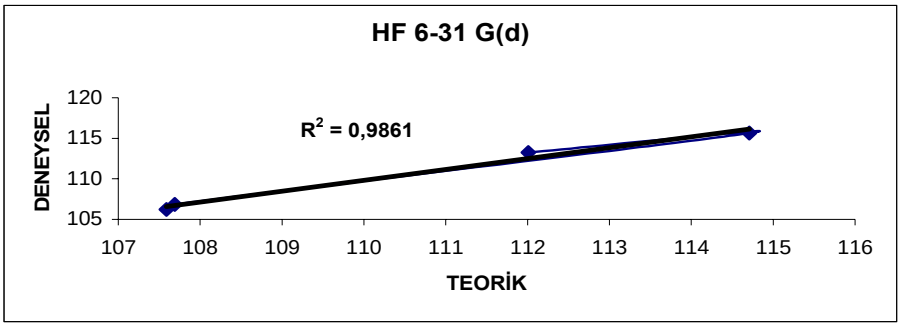


(c)

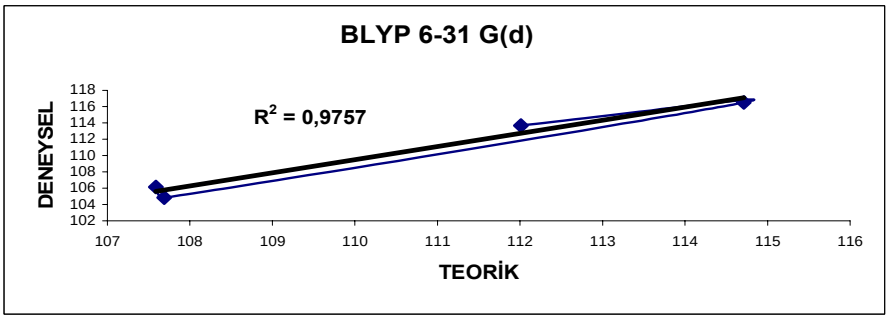


(d)

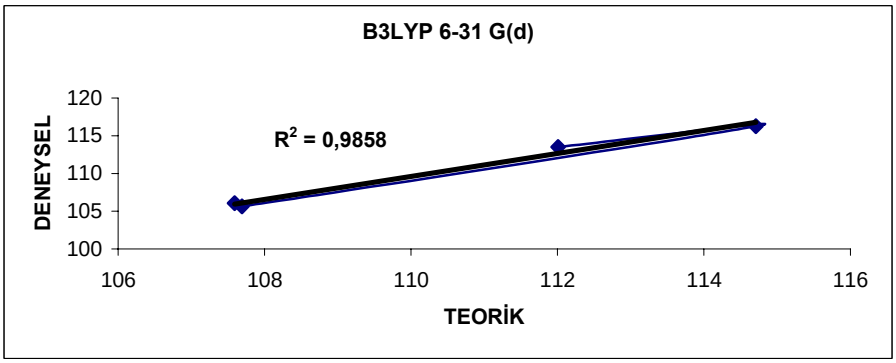
Şekil 4.4. 1,5-diaminopentan molekülünün bağ uzunlukları korelasyon grafikleri a) HF 6-31G(d) b) BLYP 6-31G(d) c) B3LYP 6-31G(d) d) B3LYP 6-311G(d) [9]



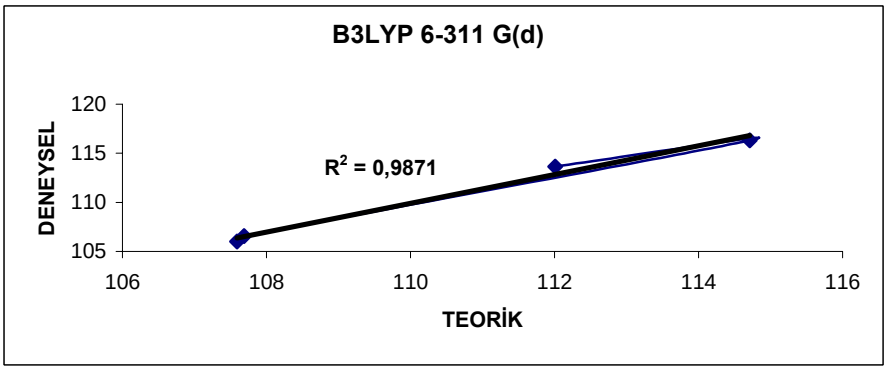
(a)



(b)

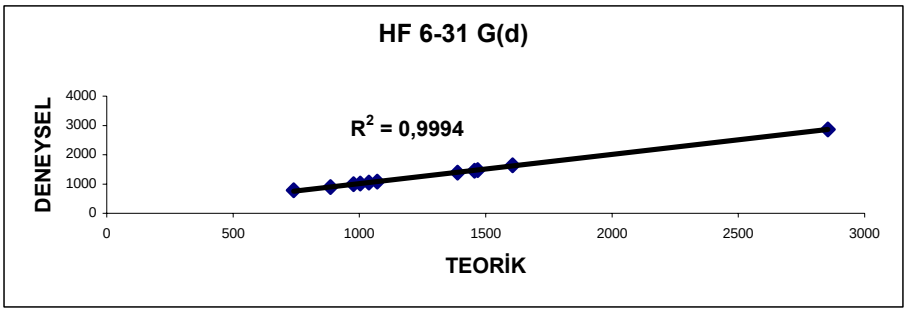


(c)

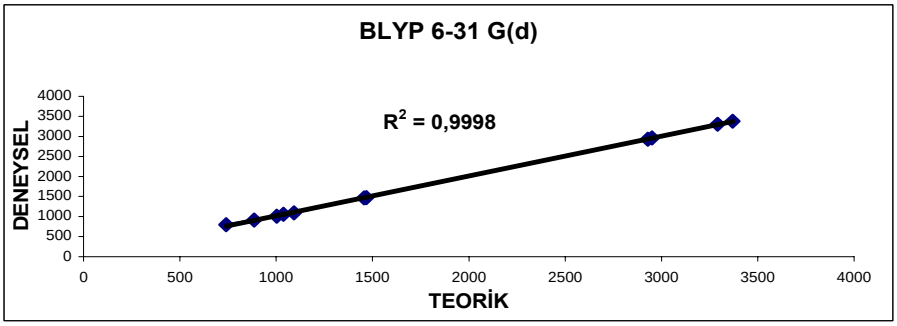


(d)

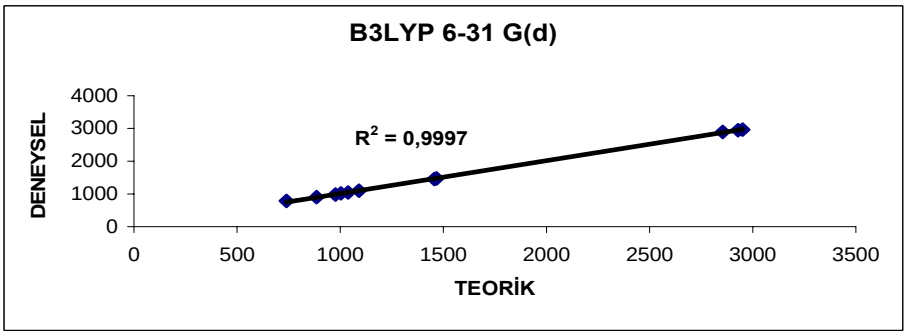
Şekil 4.5. 1,5-diaminopentan molekülünün bağ açıları korelasyon grafikleri a) HF 6-31G(d) b) BLYP 6-31G(d) c) B3LYP 6-31G(d) d) B3LYP 6-311G(d) [9]



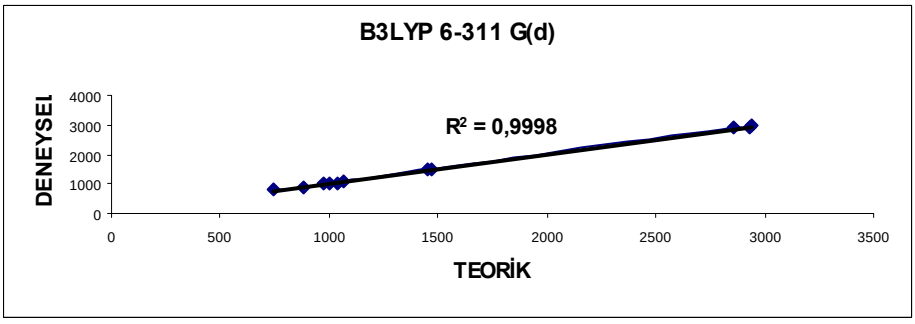
(a)



(b)



(c)



(d)

Şekil 4.6. 1,5-diaminopentan molekülünün titreşim modlarının korelasyon grafikleri a) HF 6-31G(d) b) BLYP 6-31G(d) c) B3LYP 6-31G(d) d) B3LYP 6-311G(d) [9]

Çizelge 4.4. 1.5-Diaminopentan molekülünün BLYP 6-31G(d) modelinde hesaplanan titreşimsel modlarının işaretlenmesi [9].

Normal Mod	FREQ.(cm^{-1})	IR	% Katkı
ν_1	67.50	2	30%RİNG TORSİYON
ν_2	89.54	0	%34 RİNG TORSİYON+%6 BEND (H13-C3-C2)+%BEND(H14-C1-C2)+%BEND(H17-C5-C4)+%6BEND(H18-C3-C4)
ν_3	95.82	1	%27BEND(C5-C3-C4)+%5BEND:(N6-C2-C1)+%16(C3-C1-C2)+%5BEND(H14-C1-C2+N9-C4-C5)
ν_4	145.73	0	%26 RİNG TORSİYON
ν_5	159.52	2	%16 RİNG TORSİYON
ν_6	245.79	6	%11 BEND(C3-C1-C2)+%11(C5-C3-C4)+%10BEND(N6-C2-C1)+%10 BEND(H18-H17-C4)+%10STR(C4-C5)+ %10STR(C1-C2)+%8STR(C1-N6)+%8STR(C5-N9
ν_7	289.94	0	%18STR(C2-C3)+ %18STR(C3-C4) +%10 STR(C1-C2)+%10 STR(C4-C5)+%7 BEND(C5-C3-C4) +%7 BEND(C3-C1-C2)
ν_8	301.74	0	% 26 RİNG TORSİYON+%5 STR (C2-H14)+%5 STR(C2-H13)+%5 STR(C4-H18)+%5STR(C5-H19)
ν_9	302.78	98	%36 RİNG TORSİYON
ν_{10}	428.56	4	%17 STR(C1-N6)+%17STR(C4-N9)+%11 BEND(C4-C2-C3)+%9BEND(N6-C2-C1)+%9BEND(N9-C4-C5)+ %6STR(C2-C3)+%6STR(C3-C4)+%6STR(C4-C5) +%6STR(C1-C2)
ν_{11}	483.52	2	%14BEND(C5-C3-C4)+%14BEND(C3-C1-C2)+11BEND(N9-C4-C5)+%11BEND(N6-C2-C1)+%7STR(C4-C5)+ %7STR(C1-C2)+%7STR(C5-N9)+%7STR(C1-N6)
ν_{12}	727.16	3	%54 RİNG TORSİYON

Çizelge 4.4. (Devam) 1.5-Diaminopentan molekülünün BLYP 6-31G(d) modelinde hesaplanan titreşimsel modlarının işaretlenmesi [9].

ν_{13}	742.84	0	%12 RİNG TORSİYON+%6STR(C2-H14)+%6STR(C2-H13)+%6STR(C4-C18)+%6STR(C4-C17)
ν_{14}	801.62	0	%12 RİNG TORSİYON+ %4STR(C3-H15)+%4STR(C3-H16)+%3BEND(H20-C4-C5)+%3BEND(H19-C4-C5)+ %3BEND(H11-C2-C1)+%3BEND(H12-C2-C1)+%3BEND(H13-C1-C2)+%3BEND(H14-C1-C2)+ %2BEND(H16-C2-C3)+%%2BEND(H15-C2-C3)+%2BEND(H15-C4-C3)+%%2BEND(H16-C4-C3)+ %2STR(N9-H10)+%%2STR(N9-H21)+%2STR(N6-H8)+%%2STR(N6-H7)+%2BEND(H10-C5-N9)+%%2BEND(H21-C5-N9)
ν_{15}	856.68	309	% 52 RİNG TORSİYON
ν_{16}	874.58	0	% 54 RİNG TORSİYON
ν_{17}	914.02	0	% 5BEND(H11-C2-C1)+%5BEND(H12-C2-C1)+%5BEND(H20-C4-C5)+%5BEND(H19-C4-C5)
ν_{18}	973.15	1	%15STR(C4-C5)+%15STR(C1-C2)+%9STR(C2-C3)+%9STR(C3-C4)
ν_{19}	973.15	141	%10STR(C5-N9)+10STR(C1-N6)%6STR(C3-C4)+%6STR(C2-C3)%5STR(C4-C5)%5STR(C1-C2)
ν_{20}	1014.27	1	%10 RİNG TORSİYON
ν_{21}	1017.72	3	%28STR(C2-C3)+%28STR(C3-C4)+%14STR(C1-C2,)+%14STR(C4-C5)
ν_{22}	1029.01	0	%12BEND(C4-C2-C3)+%10STR(C5-N9)+%10STR(C1-C6)+%8STR(C4-C5)+%8STR(C1-C2)+%7BEND(N6-C2-C1)+ %7BEND(N9-C4-C5)
ν_{23}	1062.39	0	%36 RİNG TORSİYON
ν_{24}	1064.27	5	%10STR(C5-C9)+%10STR(C1-N6)+%5STR(C3-C4)+%5STR(C2-C3)

Çizelge 4.4. (Devam) 1.5-Diaminopentan molekülünün BLYP 6-31G(d) modelinde hesaplanan titreşimsel modlarının işaretlenmesi [9].

ν_{25}	1101.99	8	%9BEND(C4-C2-C3)+%6BEND(C3-C1-C2)+%6BEND(C5-C3-C4)
ν_{26}	1223.74	0	%24RİNG TORSİYON+%4STR(C5-H19)+%4STR(C5-H20)+%4STR(C1-H11)+%4STR(C1-H12)+ %3BEND(H20-C4-C5)+%3BEND(H19-C4-C5)+%3BEND(H11-C2-C1)+%3BEND(H12-C2-C1)+%2BEND(H13-C3-C2)+ %2STR(N6-H8)+%2STR(N6-H7)+%2BEND(:H13-C1-C2)+%2BEND(H14-C1-C2)+%2BEND(H18-C5-C4)+ %1BEND(H15-C4-C3)+%1BEND(H16-C4-C3)+%1BEND(H15-C2-C3)
ν_{27}	1233.49	19	%8BEND(H16-C2-C3)+%8BEND(H15-C2-C3)+%8BEND(H16-C4-C3)+%8BEND(H15-C4-C3)
ν_{28}	1282.27	0	%22RİNG TORSİYON
ν_{29}	1303.05	0	%7BEND(H14-C3-C2)+%7BEND(H13-C3-C2)+%7BEND(H17-C3-C4)+%7BEND(H18-C3-C4)+ %7BEND(H17-C5-C4)+%7BEND:(H18-C5-C4)+%7BEND(H14-C1-C2)+%7BEND(H13-C1-C2)+%5BEND(H12-N6-C1)
ν_{30}	1310.98	0	%12 RİNG TORSİYON+%5BEND(H15-C4-C3)+%5BEND(H16-C4-C3)+%5BEND(H15-C2-C3)+ %5BEND(H16-C2-C3)+%3STR(C1-H11)+%3STR(C1-H12)+%3STR(C5-C20)+%3STR(C5-H19)+%3BEND(H18-C3-C4)+ %2(N9-H21)+%2(H18-C3-C4)+%2BEND(H19-N9-C5)+%2BEND(H11-N6-C1)+%2BEND(H12-N6-C1)+ %2STR(C2-H14)+%2STR(C2-H13)+%2STR(C4-H17)+%2STR(C4-H18)+%1BEND(H11-C2-C1)
ν_{31}	1312.48	0	%7STR(C3-H16)+%7STR(C3-H15)
ν_{32}	1360.52	20	%8BEND(H16-C2-C3)+%8BEND(H15-C2-C3)+%8BEND(H16-C4-C3)+%8BEND(H15-C4-C3)+ %6BEND(H12-N6-C1)+%8BEND(H11-N6-C1)+%8BEND(H19-N9-C5)+%8BEND(H20-N9-C5)+%6BEND(C5-N9)
ν_{33}	1370.62	6	%7BEND(H15-C2-C3)+%7BEND(H16-C2-C2)+%7BEND(H15-C4-C3)+%7BEND(H16-C4-C3)+ %5BEND(H17-C5-C4)+%5BEND(H18-C5-C4)+%5BEND(H13-C1-C2)+%5BEND(H14-C1-C2)+%5BEND(H13-C3-C2)
ν_{34}	1373.35	2	%6BEND(H10-C5-N9)+%6BEND(H21-C5-N9)+%6BEND(H8-C1-N6)+%6BEND(H7-C1-N6)+%5STR(C3-H16)+%5STR(C3-H15)
ν_{35}	1375.80	0	%5BEND(H10-C5-N9)+%5BEND(H21-C5-N9)+%5BEND(H8-C1-N6)+%5BEND(H7-C1-N6)
ν_{36}	1375.85	1	%7BEND(H19-N9-C5)+%7BEND(H20-N9-C5)+%7BEND(H12-N6-C1)+%7BEND(H11-N6-C1)+ %7BEND(H19-C4-C5)+%7BEND(H20-C4-C5)+%7BEND(H12-C2-C1)+%7BEND(H11-C2-C1)+%5BEND(H17-C5-C4)

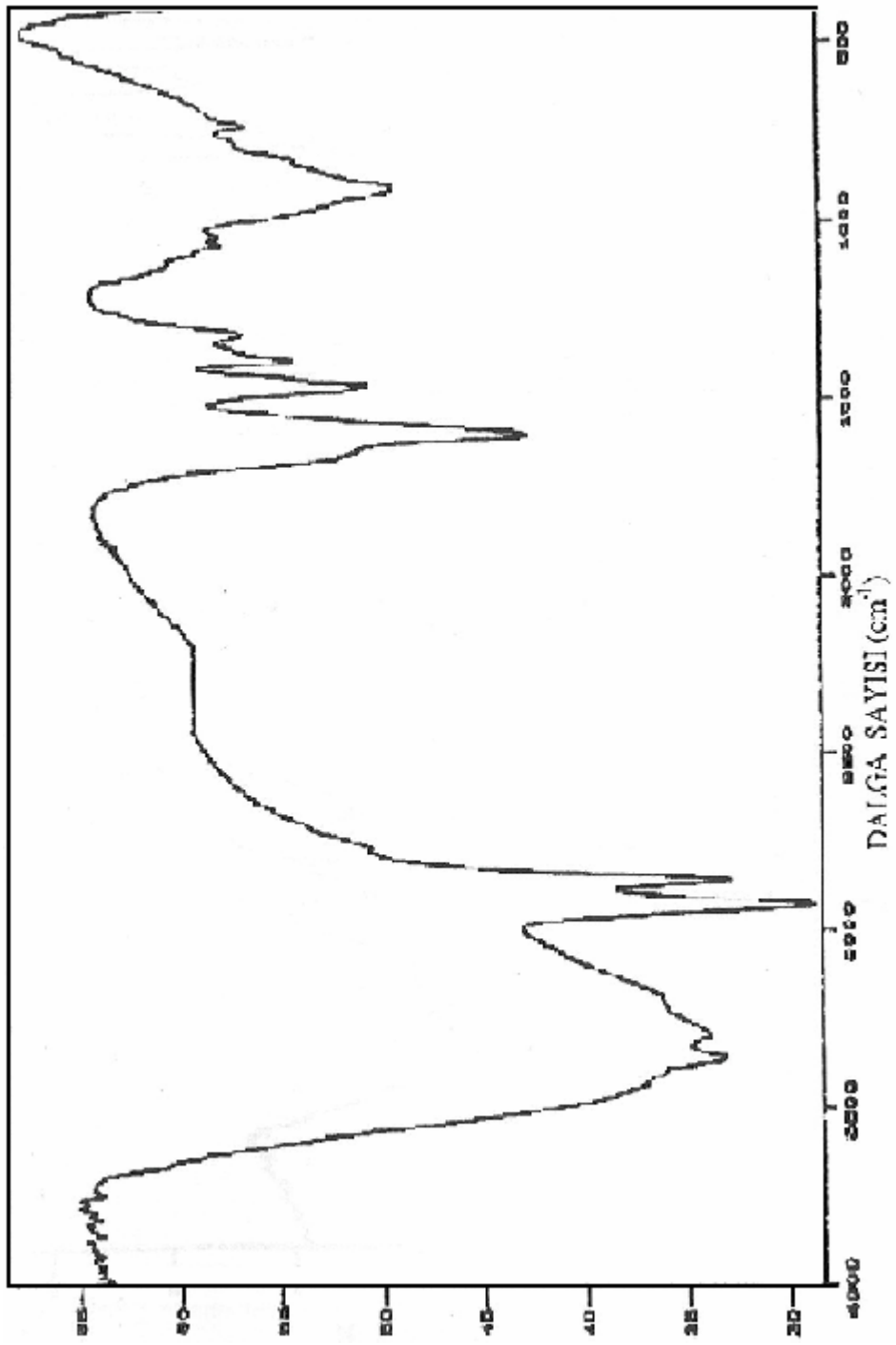
Çizelge 4.4. (Devam) 1.5-Diaminopentan molekülünün BLYP 6-31G(d) modelinde hesaplanan titreşimsel modlarının işaretlenmesi [9].

ν_{37}	1471.68	2	%28BEND(H12-H11-C1)+%28BEND(H20-H19-C5)+%11BEND(H14-H13-C2)+%11BEND(H18-H17-C4)
ν_{38}	1474.27	0	%20BEND(H20-H19-C5)+%%20BEND(H12-H11-C1)+%13BEND(H16-H15-C3)+%13BEND(H18-H17-C4)+ %13BEND(H14-H13-C2)
ν_{39}	1479.91	0	%36BEND(H16-H15-C3)+%15BEND(H20-H19-C5)+%15BEND(H12-H11-C1)+%6BEND(H18-H17-C4)+%6BEND(H14-H13-C2)
ν_{40}	1492.28	0	%28BEND(H14-H13-C2)+%28BEND(H18-H17-C4)+%10BEND(H12-H11-C1)+%10BEND(H20-H19-C5)
ν_{41}	1504.60	0	%29BEND(H16-H15-C3)+%21BEND(H18-H17-C4)+%21BEND(H14-H13-C2)
ν_{42}	1658.65	0	%47BEND(H8-H7-N6)+%30BEND(H21-H10-N9)+%6BEND(H8-C1-N6)+%6BEND(H7-C1-N6
ν_{43}	1658.77	31	%47BEND(H21-H10-N9)+%30BEND(H8-H7-N6)+%6BEND(H10-C5-N9)+%6BEND(H21-C5-N9)
ν_{44}	2923.31	1	%12STR(C2-H14)+%12STR(C2-H13)+%12STR(C4-H17)+%12STR(C4-H18)+%6STR(N6-H7)+%6STR(N6-H8)+ %6STR(N9-H21)+%6STR(N9-H10)+%5STR(C1-H11)+%5STR(C1-H12)+%5STR(C5-H20)+%5STR(C5-H19)
ν_{45}	2926.59	16	%12STR(C3-H16)+%12STR(C3-H15)+%7STR(C4-H17)+%7STR(C4-H18)+%7STR(C2-H14)+%7STR(C2-H13)+ %7STR(C5-H20)+%7STR(C5-H19)+%7STR(C1-H12)+%7STR(C1-H11)
ν_{46}	2936.54	34	%19STR(C3-H16)+%19STR(C3-H15)+%7STR(C4-H17)+%7STR(C4-H18)+%7STR(C2-H13)+%7STR(C2-H14)+ %6STR:(N9-H21)+%6STR(N9-H10)+%6STR(N6-H7)+%6STR(N6-H8)
ν_{47}	2945.54	3	%7STR(C3-H16)+%7STR(C3-H15)
ν_{48}	2951.27	0	%8STR(C2-H14)+%8STR(C2-H13)+%8STR(C4-H18)+%8STR(C4-H17)

Çizelge 4.4. (Devam) 1.5-Diaminopentan molekülünün BLYP 6-31G(d) modelinde hesaplanan titreşimsel modlarının işaretlenmesi [9].

ν_{49}	2953.95	0	%10STR(C1-H11)+%10STR(C1-H12)+%10STR(C5-H20)+%%10STR(C5-H19)+%8STR(N6-H7)+%8STR(N6-H8)+ %8STR(N9-H21)+%8STR(N9-H10)+%5STR(C2-H14)
ν_{50}	2956.31	114	%8STR(C5-H20)+%8STR(C5-H19)+%8STR(C1-H12)+%8STR(C1-H11)+%8STR(C3-H16)+%8STR(C3-H15)+ %7STR(N9-H21)+%7STR(N9-H10)+%7STR(N6-H7)+%7STR(N6-H8)
ν_{51}	2972.74	14	%10STR(C3-H16)+%10STR(C3-H15)+%5STR(C5-H20)+%5STR(C5-H19)+%6STR(N6-H7)+%6STR(N6-H8)+ %6STR(N9-H21)+%6STR(N9-H10)+%5STR(C1-H12)+%5STR(C1-H11)
ν_{52}	2993.58	0	%9STR(C1-H12)+%9STR(C1-H11)+%9STR(C5-H20)+%9STR(C5-H19)+%8STR(N6-H8)+%%8STR(N6-H7)+ %8STR(N9-H10)+%8STR(N9-H21)
ν_{53}	2998.47	176	%9STR(C3-H16)+%9STR(C3-H15)+%8STR(C4-H18)+%8STR(C4-H17)+%8STR(C2-H13)+%8STR(C2-H14)+ %6STR(C5-H19)+%6STR(C5-H20)+%6STR(C1-H11)+%6STR(C1-H12)
ν_{54}	3315.73	2	%10STR(N6-H7)+%10STR(N6-H8)+%10STR(N9-H21)+%10STR(N9-H10)+%8STR(C1-H12)+%8STR(C1-H11)+ %8STR(C5-H20)+%8STR(C5-H19)+%6STR(C7-H14)
ν_{55}	3315.76	0	%9STR(C3-H16)+%9STR(C3-H15)+%8STR(N9-H21)+%8STR(N9-H10)+%8STR(N6-H7)+%8STR(N6-H8)+ %7STR(C5-H20)+%7STR(C5-H19)+%7STR(C1-H12)+%7STR(C1-H11)
ν_{56}	3398.28	2	%8STR(N6-H8)+%8STR(N6-H7)+%8STR(N9-H10)+%%8STR(N9-H21)+%7STR(C1-H11)+%7STR(C1-H12)+ %7STR(C5-H20)+%7STR(C5-H19)
ν_{57}	339830	8	%7STR(C3-H16)+%7STR(C3-H15)+%6STR(N9-H21)+%6STR(N9-H10)+%6STR(N6-H7)+%6STR(N6-H8)+ %5STR(C5-H20)+%5STR(C5-H19)+%5STR(C1-H12)+%5STR(C1-H11)

Bend: Açı bükülmesi, STR: Gerilme, RingTorsiyon: Burulma



(a) Geçirgenlik %

Şekil 4.7. 1,5-diamino pentan molekülünün infrared spektrumu [5].

5. HESAPLAMA SONUÇLARI

Bu çalışmada 1,5-diaminopentan molekülünün geometrik parametreleri ve titreşim frekanslarını hesaplamak için Gaussian 98W paket programı kullanılmıştır.

Hesaplamalarda HF,BLYP ve B3LYP metodları için 6-31 G(d) baz seti,ayrıca buna ek olarak B3LYP metodu için 6-311 G(d) baz seti kullanılmıştır.

1,5-diaminopentan molekülünde HF6-31 G(d) , BLYP6-31 G(d) , B3LYP 6-31 G(d)

B3LYP 6-311 G(d) modellerinde optimize edilmiş geometrik yapıya ait bağ uzunlukları için deneysel değerler ile hesaplanan değerlerin genel olarak uyumlu sonuçlar verdiği görülmüştür.

Bağ uzunluklarında en uyumlu sonucu B3LYP 6-31 G(d) metodu vermiştir.

Bağ uzunluklarını bulmak için çizdiğimiz korelasyon grafiklerinde ‘’1’’ e en yakın değeri yani en uyumlu sonucu B3LYP 6-31 G(d) metodu vermiştir (Şekil 3.4.).

Bağ açılarında da elde edilen sonuçlar genel olarak uyumlu sonuçlardır,en uyumlu sonucu ise B3LYP 6-311G(d) metodu vermiştir (Şekil 3.5.).

1,5-diaminopentan molekülünün titreşim frekansları teorik olarak hesaplanmış ve deneysel frekanslarıyla karşılaştırılarak korelasyon grafikleri çizilmiştir.

Bu grafiklere bakılarak hesaplama metotları birbiriyle kıyaslanmıştır.

Kıyaslamalar sonucunda B3LYP 6-311G(d) ve BLYP6-31 G(d) metotları ile yapılan frekans hesaplamalarının çok uyumlu sonuç verdiği gözlenmiştir (Şekil 3.6.).

Hesaplamada kullanılan yöntemler genel olarak çok iyi sonuçlar verdi,hesaplama sonuçlarında çok büyük farklılıklar olmadığından herhangi birisi hesaplama yapmak için tercih edilebilir.

KAYNAKLAR

1. Hagan, S.M., "Clatrate Inclusion Compounds", ***Reinhold Pub.Carp.,*** New York,112 -143 (1962).

2. Atwood J.L., Davies, J.E.D.and Mac Nicol, D.D., ''Inclusion compounds, structural Aspect of Inclusion compounds Formed by Organic Host Lattices'', ***Academic pres.*** New York, 2:22-85 (1984).

3. Nakamoto ,K.''İnfrared and Raman Spectra Of Inorganic and Coordinaionation Compounds'', 4^{nd} ***Ed.Wiley***, New York, 1-82 (1982).

4. Akyüz ,S., ''An Infrared and raman Spectroskopic Investigation of copper Tetracyanonickelate Complexes of α-β-and γ-Picoline'', ***J. Incl. Phenom***., 4:219 – 223 (1986).

5. Chang,R., "Basic Principles of Sspectroscopy'' 1^{th} Edition ''***Mc Gray Hill,*** London , 32-103 (1971).

6. Barrow, G M., "Molecular Spektroscopy", ***Mc Gray Hill,*** London, 153-190 (1962).

7. Woodward, L.A., "İntroduction to the Theory and Molecular Vibration Spectroscopy", ***Oxford***., 252-270 (1972).

8. Bahat.M.,"Kinazolin Molekülünün Kuvvet Alanının DFT-B3LYP 6-31G^{*} Tabanlı SQM Metodu ile Hesabı ve Bazı Hoffman Tipi Komplekslerin Titreşimsel Spektroskopi ile İncelenmesi" Doktora tezi, ***Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü***, Ankara, 3-55(2000).

9. Albayrak E. Arşivinden, (2007).

10. Gill P. M.W.,"DFT,HF and self consident field,Enc,of comp.Chemistry'', ***John-Wiley and Sons Inc.***New York, 214-260 (2003).

11. Pulay P., "Analytical Derivative methods in quantum chemistry, Ab initio methods in Quantum Chemistry-11'',Ed.By K.P.Lawley,***John Wiley and Sons Inc.*** New York, 1-125 (1987).

12. Davidson, George, " Introductory Group Theory for Chemists'',***Mc Gray Hill***, London, 14:63,63 (1971).

13. Gans, P., 1971, "Vibrating Molecules'',, ***Chapman and Hall***, London, 33:57-84 (1992).

14. Cook.D.B. "Ab-initio Valence Calculations in Chemistry'',***John Wiley and Sons Inc.*** New York, 56-211 (1974).

15. Jensen F., "İntroduction to Computational Chemistry''. ***John Wiley and Sons Inc***. New York, 88-92 (1999).

16. Pulay P., " Ab-initio calculation of force constants and equilibrium geometries in polyatomic molecules'', ***Mol.Phy***., 17:197 (1969).

17. Pulay P., "An efficient ab initio gradient program", ***Theoret.Chim***. ***Acta,*** 50:299 (1979).

18. Blom C.E., Altona C., " Geometry of the substitued cyclohexane ring: X- ray structire determinations and emprical valence-force calculations'', ***Mol.Phy.,*** 31:1377 (1976).

19. Becke A.D., "Density functional thermochemistry III. The role of exact exchange''**, *J.Chem.Phys***., 98:5648 (1993).

20. Levine I.N., "Quantum Chemistry", ***Prentice-Hall***, USA, 201-217 (1991).

21. Ditcfield R.Hehre W.J.Pople J.A. "Self-consistent molecular orbital methods. IX. An extended Gaussian-type basis for molecular orbital studies of organicmolecules'', ***J.Chem.Phy.,*** 54(2):724 (1971).

22. Hariharan P.C.,Pople J.A., "The influence of polarization functions on molecular orbital hydrogenations energies'', ***Theoret.Chim. Acta***, 28:213 (1973).

23. Csizmadia G.L., "Computational Adv.in Inorganic Chem.Molecular Str. nd Reactivity'', Ed.by öğretir C.,Csizmadia G.L., NATO ASI series, ***Kluwer Academic Publishers,*** USA, 33-64 (2000).

24. Pulay P.,Meyer W., "Comparison of the ab initio force constant of exhane, ethylene and acethylene", ***Mol.Phys.,*** 27:473 (1974).

25. Botschvina P., Bleicher W., "Quantum chemical calculations of formyl radicals II Ground state of the fluoroformyl radical'', ***Mol.Phys.,*** 30:1029 (1975).

26. Rauhut G. And Pulay P., "Transferable scaling factors for desity functional derived vibrational force fields''**, *J.Phys.Chem***, 99 (10) : 3094 (1995).

27. Kurt M., "Bazı metal (II) Benzimidazol bileşiklerinin yapılarının Kırmızı Altı Spektrokopisi yöntemiyle araştırması ve 1,2-Bis(4-Pyridyl) ethan molekülünün titreşim spektrumunun teorik olarak incelenmesi'', Doktora Tezi ***Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü***, Ankara, 51-65 (2005).

28. Meng, X.G. and Z.D., "catena-poly [[tetraaquacadmium(II)-μ-hexane-1,6-diamine κ^2 N:N'] terephthalate dihydrate]''; ***Acta Cryst.*****A.;**E61:263-264 (2005).

EKLER

EK-1 1,5 Diaminopentan molekülünün titreşim frekansları ve infrared şiddetleri

	FREQ	INTENS	CONTRIBUTIONSCOORD(%;>5%)
1.	67.50	**2.71**	60(9.) 59(9.) 57(6.) 61(6.)
2.	89.54	**0.00**	59(13.) 60(13.) 57(6.) 61(6.) 30(6.) 28(6.) 41(6.) 43(6.)
3.	95.82	**1.57**	33(27.) 27(16.) 39(16.) 21(5.) 45(5.)
4.	145.73	**0.00**	58(7.) 62(7.) 57(6.) 61(6.)
5.	159.52	**2.59**	61(8.) 57(8.)
6.	245.79	**6.63**	27(11.) 39(11.) 21(10.) 45(10.) 11(10.) 1(10.) 14(8.) 2(8.)
7.	289.94	**0.08**	5(18.) 8(18.) 1(10.) 11(10.) 39(7.) 27(7.)
8.	301.74	**0.00**	58(8.) 62(8.) 7(5.) 6(5.) 13(5.) 12(5.) 57(5.) 61(5.)
9.	302.78	**98.52**	62(11.) 58(11.) 60(7.) 59(7.)
10.	428.56	**4.06**	2(17.) 14(17.) 33(11.) 21(9.) 45(9.) 5(6.) 8(6.) 11(6.) 1(6.)
11.	483.52	**2.14**	39(14.) 27(14.) 45(11.) 21(11.) 11(7.) 1(7.) 14(7.) 2(7.)
12.	727.16	**3.85**	60(13.) 59(13.) 61(9.) 57(9.) 62(5.) 58(5.)
13.	742.84	**0.00**	62(6.) 58(6.) 7(6.) 6(6.) 13(6.) 12(6.)

EK-1 (Devam) 1,5 Diaminopentan molekülünün titreşim frekansları ve infrared şiddetleri

14. 801.62 **0.10** 10(4.) 9(4.) 48(3.) 46(3.) 22(3.) 24(3.)58(3.) 62(3.) 28(3.) 30(3.) 43(3.) 41(3.)23(3.) 25(3.) 49(3.) 47(3.) 29(2.) 31(2.) 42(2.) 40(2.) 34(2.) 36(2.) 35(2.) 37(2.)60(2.) 59(2.) 19(2.) 20(2.) 18(2.) 17(2.)54(2.) 55(2.) 52(2.) 51(2.) 57(2.)

15. 856.68 **309.59** 55(11.) 54(11.) 51(10.) 52(10.) 56(5.) 53(5.)

16. 874.58 **0.08** 51(11.) 52(11.) 55(11.) 54(11.) 53(5.) 56(5.)

17. 914.02 **0.00** 22(5.) 24(5.) 48(5.) 46(5.)

18. 973.15 **1.19** 11(15.) 1(15.) 5(9.) 8(9.)

19. 973.15 **141.36** 14(10.) 2(10.) 8(6.) 5(6.) 11(5.) 1(5.)

20. 1014.27 **0.97** 54(5.) 55(5.)

21. 1017.72 **3.64** 5(28.) 8(28.) 1(14.) 11(14.)

22. 1029.01 **0.02** 33(12.) 14(10.) 2(10.) 11(8.) 1(8.) 21(7.)45(7.)

23. 1062.39 **0.00** 59(6.) 60(6.) 52(6.) 51(6.) 54(6.) 55(6.)

24. 1064.27 **5.06** 14(10.) 2(10.) 8(5.) 5(5.)

25. 1101.99 **8.34** 33(9.) 27(6.) 39(6.)

EK-1 (Devam) 1,5 Diaminopentan molekülünün titreşim frekansları ve infrared şiddetleri

26. 1223.74 **0.01** 54(5.) 55(5.) 52(5.) 51(5.) 15(4.) 16(4.) 3(4.) 4(4.) 48(3.) 46(3.) 22(3.) 24(3.)29(2.) 31(2.) 42(2.) 40(2.) 12(2.) 13(2.)7(2.) 6(2.) 61(2.) 57(2.) 10(2.) 9(2.)19(2.) 20(2.) 18(2.) 17(2.) 28(2.) 30(2.)43(2.) 41(2.) 35(1.) 37(1.) 34(1.)

27. 1233.49 **19.23** 36(8.) 34(8.) 37(8.) 35(8.) 41(7.) 43(7.)30(7.) 28(7.) 40(6.) 42(6.) 31(6.) 29(6.)

28. 1282.27 **0.00** 52(6.) 51(6.) 54(5.) 55(5.)

29. 1303.05 **0.04** 31(7.) 29(7.) 40(7.) 42(7.) 41(7.) 43(7.) 30(7.) 28(7.) 25(5.) 23(5.) 49(5.) 47(5.)

30. 1310.98 **0.00** 35(5.) 37(5.) 34(5.) 36(5.) 3(3.) 4(3.)16(3.) 15(3.) 42(3.) 40(3.) 29(3.) 31(3.) 52(3.) 51(3.) 54(3.) 55(3.) 43(3.) 41(3.) 28(3.) 30(3.) 18(2.) 17(2.) 19(2.) 20(2.) 49(2.) 47(2.) 23(2.) 25(2.) 7(2.) 6(2.) 12(2.) 13(2.) 22(1.) 24(1.) 48(1.)

31. 1312.48 **0.07** 10(7.) 9(7.)

32. 1360.52 **20.53** 36(8.) 34(8.) 37(8.) 35(8.) 25(8.) 23(8.) 47(8.) 49(8.) 24(6.) 22(6.) 46(6.) 48(6.)

33. 1370.62 **5.80** 34(7.) 36(7.) 35(7.) 37(7.) 41(5.) 43(5.) 28(5.) 30(5.) 29(5.) 31(5.) 40(5.) 42(5.)

34. 1373.35 **1.84** 54(6.) 55(6.) 52(6.) 51(6.) 10(5.) 9(5.)

35. 1375.80 **0.00** 52(5.) 51(5.) 54(5.) 55(5.)

EK-1 (Devam) 1,5 Diaminopentan molekülünün titreşim frekansları ve infrared şiddetleri

36. 1375.85 **1.05** 47(7.) 49(7.) 25(7.) 23(7.) 46(7.) 48(7.) 24(7.) 22(7.) 41(5.) 43(5.) 28(5.) 30(5.)

37. 1471.68 **1.56** 26(28.) 50(28.) 32(11.) 44(11.)

38. 1474.27 **0.07** 50(20.) 26(20.) 38(13.) 44(13.) 32(13.)

39. 1479.91 **0.00** 38(36.) 50(15.) 26(15.) 44(6.) 32(6.)

40. 1492.28 **0.08** 32(28.) 44(28.) 26(10.) 50(10.)

41. 1504.60 **0.49** 38(29.) 44(21.) 32(21.)

42. 1658.65 **0.24** 53(47.) 56(30.) 52(6.) 51(6.)

43. 1658.77 **31.27** 56(47.) 53(30.) 54(6.) 55(6.)

44. 2923.31 **1.73** 7(12.) 6(12.) 12(12.) 13(12.) 17(6.) 18(6.) 20(6.) 19(6.) 3(5.) 4(5.) 16(5.) 15(5.)

45. 2926.59 **16.77** 10(12.) 9(12.) 12(7.) 13(7.) 7(7.) 6(7.) 16(7.) 15(7.) 4(7.) 3(7.)

46. 2936.54 **34.56** 10(19.) 9(19.) 12(7.) 13(7.) 6(7.) 7(7.) 20(6.) 19(6.) 17(6.) 18(6.)

47. 2945.54 **3.73** 10(7.) 9(7.)

48. 2951.27 **0.00** 7(8.) 6(8.) 13(8.) 12(8.)

EK-1 (Devam) 1,5 Diaminopentan molekülünün titreşim frekansları ve infrared şiddetleri

49. 2953.95 **0.00** 3(10.) 4(10.) 16(10.) 15(10.) 17(8.) 18(8.) 20(8.) 19(8.) 7(5.) 6(5.) 13(5.) 12(5.)

50. 2956.31 **144.29** 16(8.) 15(8.) 4(8.) 3(8.) 10(8.) 9(8.) 20(7.) 19(7.) 17(7.) 18(7.)

51. 2972.74 **13.64** 10(10.) 9(10.) 20(6.) 19(6.) 18(6.) 17(6.) 15(5.) 16(5.) 4(5.) 3(5.)

52. 2993.58 **0.00** 4(9.) 3(9.) 16(9.) 15(9.) 18(8.) 17(8.) 19(8.) 20(8.)

53. 2998.47 **175.60** 9(9.) 10(9.) 13(8.) 12(8.) 6(8.) 7(8.) 15(6.) 16(6.) 3(6.) 4(6.)

54. 3315.73 **1.91** 17(10.) 18(10.) 20(10.) 19(10.) 3(8.) 4(8.) 16(8.) 15(8.) 7(6.) 6(6.) 13(6.) 12(6.)

55. 3315.76 **11.42** 10(9.) 9(9.) 20(8.) 19(8.) 17(8.) 18(8.) 16(7.) 15(7.) 4(7.) 3(7.)

56. 3398.28 **1.82** 18(8.) 17(8.) 19(8.) 20(8.) 3(7.) 4(7.) 16(7.) 15(7.)

57. 3398.30 **7.81** 9(7.) 10(7.) 19(6.) 20(6.) 18(6.) 17(6.) 15(5.) 16(5.) 3(5.) 4(5.)

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel bilgiler

Soyadı, adı	: ALBAYRAK, Erol
Uyruğu	: T.C.
Doğum tarihi ve yeri	: 23.05.1978, Kırşehir/Mucur
Medeni Hali	: Bekar
e-mail adresi	: erol_albayrak@hotmail.com

Eğitim

Derece	**Eğitim Birimi**	**Mezuniyet tarihi**
Yüksek lisans	Gazi Üniversitesi/Fizik Bölümü	2007
Lisans	Gazi Üniversitesi/Fizik Bölümü	2003
Lise	Kırşehir Lisesi	1996

İş Deneyimi	**Yer**	**Görev**
2004-2006	Çorum Ahi Dershanesi	Fizik öğretmeni

Yabancı Dil

İngilizce