

**3-FENİLTİYOFEN MOLEKÜLÜ VE FLORLU TÜREVLERİNİN
YAPISAL PARAMETRELERİ, ELEKTRONİK VE LİNEER OLMAYAN
OPTİK ÖZELLİKLERİNİN TEORİK OLARAK İNCELENMESİ**

Güventürk UĞURLU

**DOKTORA TEZİ
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**NİSAN 2006
ANKARA**

Güventürk UĞURLU tarafından hazırlanan 3-FENİLTİYOFEN MOLEKÜLÜ VE FLORLU TÜREVLERİNİN YAPISAL PARAMETRELERİ, ELEKTRONİK VE LİNEER OLMAYAN OPTİK ÖZELLİKLERİNİN TEORİK OLARAK İNCELENMESİ adlı bu tezin Doktora tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Prof. Dr. Ergün KASAP
Tez Yöneticisi

Bu çalışma, jürimiz tarafından Fizik Anabilim Dalında Doktora tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan: Prof. Dr. Ziya Burhanettin GÜVENÇ

Üye: Prof. Dr. Ziya KANTARCI

Üye: Prof. Dr. Süleyman ÖZÇELİK

Üye: Doç. Dr. Hatice KÖKTEN

Üye: Prof. Dr. Ergün KASAP

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

**3-FENİLTİYOFEN MOLEKÜLÜ VE FLORLU TÜREVLERİNİN YAPISAL
PARAMETRELERİ, ELEKTRONİK VE LİNEER OLMAYAN OPTİK
ÖZELLİKLERİNİN TEORİK OLARAK İNCELENMESİ
(Doktora Tezi)**

Güventürk UĞURLU

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
Nisan 2006**

ÖZET

Bu çalışmada, 3-feniltiyofen ve fenil halkası üzerinde flor atomlarının sayısı ve konumları değiştirilerek oluşturulan 3-(florofenil)tiyofenlerin yapısal parametreleri, elektronik enerjileri, dipol momentleri, en yüksek dolu moleküler orbital (HOMO), en düşük boş moleküler orbital (LUMO) enerjileri, polarizebiliteleri, anizotropik polarizebiliteleri ve hiperpolarizebilite değerleri DFT B3LYP/6-31++G(d,p) ve HF/6-31++G(d,p) modelleri ile GAUSSIAN 98W paket programında hesaplandı. Elektronik enerji, dipol moment, HOMO-LUMO enerji farkı, polarizebilite, anizotropik polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri dihedral açının fonksiyonu olarak elde edildi, dihedral açı 10° lik aralıklarla 0 dan 180° ye kadar değiştirildi. Her iki hesaplama modelinde, flor atomunun sayısı ve konumu 3-(florofenil) tiyofenlerin üzerindeki etkileri detaylı olarak tartışıldı. Özellikle fenil halkası üzerinde orto flor atomları bulunduğu durumlarda, anti-form denge durumu dihedral açısı, syn-form denge durumu dihedral açısından düzlemselliğe 10° kadar daha yakındır. Moleküler orbital hesaplama sonuçları polarizebilite ile HOMO-LUMO enerji farklarının dihedral açıya bağlı olarak değişimleri arasında ters bir bağıntı olduğu görüldü. Öyleki, HOMO-LUMO enerji

farkı syn-forumda ($0^\circ < \phi < 90^\circ$ arası) artarken anti-formda ($90^\circ < \phi < 180^\circ$ arası) azalmaktadır. Polarizebilite değerleri ise syn-forumda azalırken anti-formda artmaktadır.

Bilim Kodu : 202.1. 008
Anahtar Kelimeler : 3-feniltiyofen, Dipol moment, HF, DFT, B3LYP
Sayfa Adedi : 117
Tez Yöneticisi : Prof. Dr. Ergün KASAP

**THEORETICAL INVESTIGATION OF STRUCTURAL PARAMETERS,
ELECTRONIC AND NONLINEAR OPTIC PROPERTIES OF
3-PHENYLTHIOPHENE AND ITS FLUORINE-SUBSTITUED DERIVATIVES**

(Ph.D. Thesis)

Güventürk UĞURLU

GAZİ UNIVERSITY

INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

April 2006

ABSTRACT

In this study, the structure parameters, the electronic energies, the dipole moments, the highest occupied molecular orbital (HOMO) energies, the lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) energies, the polarizabilities, the anisotropic polarizabilities and hyperpolarizabilities values of 3-phenylthiophene and 3-(fluorophenyl)thiophenes formed by changing the number and position of the fluorine atoms on the phenyl ring were calculated with DFT B3LYP/6-31++G(d,p) and HF/6-31++G(d,p) methods and the GAUSSIAN 98W program package. The electronic energy, the dipole moment, the HOMO-LUMO energy difference, the polarizability, the anisotropic polarizability and the hyperpolarizability values were obtained as a function of the dihedral angle which was varied from 0 to 180° intervals of 10°. In the both calculation methods, the effects of number and position of substituent fluorine atom over 3-(fluorophenyl)thiophenes have been discussed in details. Especially, the situation when the ortho-fluorine atoms are on the phenyl ring, the dihedral angle of the anti-form equilibrium state is closer to planarity about 10°, than the syn-form equilibrium state. The results of molecular orbital calculations clearly show that there is the inverse relationship between the variation of polarizability and HOMO-LUMO energy

differences by depending on dihedral angle. That is, HOMO-LUMO energy differences values increase in the region of syn-form (for $0^\circ < \phi < 90^\circ$) and decrease in the region of anti-form (for $90^\circ < \phi < 180^\circ$). The polarizability values decrease in the region of syn-form and increase in the region of anti-form.

Science Code : 202. 1. 008

Key Words : 3-Phenylthiophene, Dipole moment, HF, DFT, B3LYP

Page Number : 117

Adviser : Prof. Dr. Ergün KASAP

TEŞEKKÜR

Bu çalışmam boyunca her konuda benden desteklerini esirgemeyen danışmanım ve kıymetli hocam Sayın Prof. Dr. Ergün KASAP'a teşekkür ederim.

Tezin hazırlanması ve şekillenmesi aşamasında değerli katkılarından dolayı tez izleme komitesinden Gazi Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Öğretim Üyesi Sayın Prof. Dr. Süleyman ÖZÇELİK ve Çankaya Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Öğretim Üyesi Sayın Prof. Dr. Ziya B. GÜVENÇ'e teşekkür ederim. Tez çalışmam boyunca değerli birikimlerini benden esirgemeyen Prof. Dr. Ziya KANTARCI ve Yrd. Doç. Dr. Mehmet BAHAT'a teşekkür ederim.

Bu çalışmada kullanılan Gaussian 98W ve GaussView 2.1 paket programlarının kullanımı için izinlerinden dolayı Sayın Prof. Dr. Ziya KANTARCI'ya ayrıca teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET.....	iii
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR.....	vii
İÇİNDEKİLER.....	viii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	xi
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....	xii
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	xviii
1. GİRİŞ.....	1
2. TEMEL BİLGİLER	5
2.1. Hartree-Fock Metodu (HF).....	5
2.2. Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT).....	9
2.3. Molekül Geometrisi ve Optimizasyonu.....	13
2.4. Doğrusal ve Doğrusal Olmayan Optik Özellikler.....	16
2.5. Temel Setler.....	18
3. MATERYAL VE METOT.....	20
3.1. Metot.....	20
3.2. Materyal.....	22
4. HESAPLAMA SONUÇLARI.....	26
4.1. Yapısal Parametreler.....	26
4.2. Bağlı Enerji ve Torsiyon Potansiyeli.....	35
4.3. HOMO-LUMO Enerji Farkı.....	42

Sayfa

4.4. İndüklenmiş Dipol Moment.....	49
4.5. Polarizebilite ve Anizotropik Polarizebilite.....	54
4.6. Hiperpolarizebilite.....	62
5. SONUÇ VE ÖNERİLER.....	68
KAYNAKLAR.....	72
EKLER.....	80
EK-1 3-feniltiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri.....	81
EK-2 3-(2-florofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri	84
EK-3. 3-(3-florofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri	88
EK-4. 3-(4-florofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri	90
EK-5 Bazı moleküller için HF ve B3LYP metotlarında 6-31++G**, 6-311++G**, 6-31++G(3df,2pd) temel setlerinde hesaplanan denge dipol moment değerleri.....	93
EK-6. FT, 2-FFT, 3-FFT ve 4-FFT moleküllerinin Potansiyel enerji değerleri	94
EK-7 3-feniltiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri.....	97
EK-8 3-(2-florofenil) tiyofen molekülünün denge durumu yapı parametreleri	98
EK-9 3-(3-florofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri	99
EK-10 3-(4-florofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri	100
EK-11 3-(2,3-diflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri	101
EK-12 3-(2,4-diflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri	102
EK-13 3-(2,5-diflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri	103
EK-14 3-(2,6-diflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri	104
EK-15 3-(3,4-diflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu yapı parametreleri.....	105
EK-16 3-(3,5-diflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri	106

Sayfa

EK-17 3-(2,3,4-triflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri	107
EK-18 3-(2,3,5-triflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri	108
EK-19 3-(2,3,6-triflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri	109
EK-20 3-(2,4,5-triflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri	110
EK-21 3-(2,4,6-triflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri	111
EK-22 3-(3,4,5-triflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri	112
EK-23 3-(2,3,4,5-tetraflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri	113
EK-24 3-(2,3,4,6-tetraflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri	114
EK-25 3-(2,3,5,6-tetraflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri.....	115
EK-26 3-(2,3,4,5,6-pentaflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri	116
ÖZGEÇMİŞ	117

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 3.1. 3-feniltiyofen ve türevlerinin adlandırılması.....	23
Çizelge 4.1. Denge durumları dihedral açıları ve elektronik enerji değerleri.....	28
Çizelge 4.2. Denge dipol moment ve HOMO-LUMO enerji farkı değerleri.....	30
Çizelge 4.3. B3LYP modelinde denge durumu polarizibilite ve hiperpolarizibilite değerleri.....	31
Çizelge 4.4. HF modelinde denge durumu polarizibilite ve hiperpolarizibilite değerleri.....	32
Çizelge 4.5. HF modelinde FT, 3,4,5-TFFT ve 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerinden seçilmiş bağ uzunluklar.....	32
Çizelge 4.6. Moleküllerin HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan elektronik enerjilerinin fit edilmiş potansiyel parametreleri (potansiyel parametreleri (a.u)).....	33
Çizelge 4.7. Moleküllerin B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan elektronik enerjilerinin fit edilmiş potansiyel parametreleri (potansiyel parametreleri (a.u)).....	34
Çizelge 4.8. Moleküllerin hesaplanan torsiyon bariyer yükseklikleri.....	36

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Nümerik integrali kolaylaştırmak için geliştirilen atomik grid noktaları	15
Şekil 2.2. İki boyutta potansiyel enerji yüzeyi	15
Şekil 2.3. Potansiyel enerji eğrisindeki maksimum ve minimum noktaların karakteristiği (Burada g gradyant, k kuvvet sabitidir).....	16
Şekil 3.1. 3-feniltiyofen ve florlu türevlerinin adlandırılmasında kullanılan kimyasal ve geometrik yapı konfigürasyonu.....	22
Şekil 3.2. 3-feniltiyofen ve florlu türevlerinin konfigürasyonları.....	24
Şekil 4.1. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT, 4-FFT moleküllerin bağıl enerjilerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	38
Şekil 4.2. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3-DFFT, 2,4-DFFT, 2,5-DFFT, 2,6-DFFT, 3,4-DFFT, 3,5-DFFT moleküllerin bağıl enerjilerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi.....	39
Şekil 4.3. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4-TFFT, 2,3,5-TFFT, 3,3,6-TFFT, 2,4,5-TFFT, 2,4,6-TFFT, 3,4,5-TFFT moleküllerin bağıl enerjilerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi.....	39
Şekil 4.4. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4,5-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerin bağıl enerjilerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi.....	40
Şekil 4.5. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT, 4-FFT moleküllerin bağıl enerjilerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi.....	40
Şekil 4.6. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3-DFFT, 2,4-DFFT, 2,5-DFFT, 2,6-DFFT, 3,4-DFFT, 3,5-DFFT moleküllerin bağıl enerjilerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	41

Şekil	Sayfa
Şekil 4.7. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4-TFFT, 2,3,5-TFFT, 2,3,6-TFFT, 2,4,5-TFFT, 2,4,6-TFFT, 3,4,5-TFFT moleküllerin bağıl enerjilerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi.....	41
Şekil 4.8. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4,5-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerin bağıl enerjilerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi.....	42
Şekil 4.9. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT, 4-FFT moleküllerin HOMO-LUMO enerji farklarının dihedral açığa bağlı olarak değişimi.....	45
Şekil 4.10. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3-DFFT, 2,4-DFFT, 2,5-DFFT, 2,6-DFFT, 3,4-DFFT, 3,5-DFFT moleküllerin HOMO-LUMO enerji farklarının dihedral açığa bağlı olarak değişimi.....	45
Şekil 4.11. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4-TFFT, 2,3,5-TFFT, 2,3,6-TFFT, 2,4,5-TFFT, 2,4,6-TFFT, 3,4,5-TFFT moleküllerin HOMO-LUMO enerji farklarının dihedral açığa bağlı olarak değişimi.....	46
Şekil 4.12. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4,5-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerin HOMO-LUMO enerji farklarının dihedral açığa bağlı olarak değişimi.....	46
Şekil 4.13. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT, 4-FFT moleküllerin HOMO-LUMO enerji farklarının dihedral açığa bağlı olarak değişimi.....	47
Şekil 4.14. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3-DFFT, 2,4-DFFT, 2,5-DFFT, 2,6-DFFT, 3,4-DFFT, 3,5-DFFT moleküllerin HOMO-LUMO enerji farklarının dihedral açığa bağlı olarak Değişimi.....	47
Şekil 4.15. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4-TFFT, 2,3,5-TFFT, 2,3,6-TFFT, 2,4,5-TFFT, 2,4,6-TFFT, 3,4,5-TFFT moleküllerin HOMO-LUMO enerji farklarının dihedral açığa bağlı olarak değişimi.....	48

Şekil	Sayfa
Şekil 4.16. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4,5-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerin HOMO-LUMO enerji farklarının dihedral açıya bağlı olarak değişimi.....	48
Şekil 4.17. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT, 4-FFT moleküllerin dipol momentlerinin dihedral açıya bağlı olarak değişimi.....	50
Şekil 4.18. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3-DFFT, 2,4-DFFT, 2,5-DFFT, 2,6-DFFT, 3,4-DFFT, 3,5-DFFT moleküllerin dipol momentlerinin dihedral açıya bağlı olarak değişimi.....	51
Şekil 4.19. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 3,4,6-TFFT, 2,4,6-TFFT, 3,4,5-TFFT, 4,5,6-TFFT, 3,5,6-TFFT, 2,5,6-TFFT moleküllerin dipol momentlerinin dihedral açıya bağlı olarak değişimi.....	51
Şekil 4.20. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4,5-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerin dipol momentlerinin dihedral açıya bağlı olarak değişimi.....	52
Şekil 4.21. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT, 4-FFT moleküllerin dipol momentlerinin dihedral açıya bağlı olarak değişimi.....	52
Şekil 4.22. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3-DFFT, 2,4-DFFT, 2,5-DFFT, 2,6-DFFT, 3,4-DFFT, 3,5-DFFT moleküllerin dipol momentlerinin dihedral açıya bağlı olarak değişimi.....	53
Şekil 4.23. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4-TFFT, 2,3,5-TFFT, 2,3,6-TFFT, 2,4,5-TFFT, 2,4,6-TFFT, 3,4,5-TFFT moleküllerin dipol momentlerinin dihedral açıya bağlı olarak değişimi.....	53
Şekil 4.24. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4,5-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerin dipol momentlerinin dihedral açıya bağlı olarak değişimi.....	54
Şekil 4.25. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT, 4-FFT moleküllerin polarizebilite değerlerinin Dihedral açıya bağlı olarak değişimi.....	56

Şekil	Sayfa
Şekil 4.26. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 5,6-DFFT, 4,6-DFFT, 3,6-DFFT, 2,6-DFFT, 4,5-DFFT, 3,5-DFFT moleküllerin polarizebilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi.....	56
Şekil 4.27. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4-TFFT, 2,3,5-TFFT, 2,3,6-TFFT, 2,4,5-TFFT, 2,4,6-TFFT, 3,4,5-TFFT moleküllerin polarizebilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi.....	57
Şekil 4.28. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4,5-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerin polarizebilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi.....	57
Şekil 4.29. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT, 4-FFT moleküllerin polarizebilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi.....	58
Şekil 4.30. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3-DFFT, 2,4-DFFT, 2,5-DFFT, 2,6-DFFT, 3,4-DFFT, 3,5-DFFT moleküllerin polarizebilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi.....	58
Şekil 4.31. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4-TFFT, 2,3,5-TFFT, 2,3,6-TFFT, 2,4,5-TFFT, 2,4,6-TFFT, 3,4,5-TFFT moleküllerin polarizebilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi.....	59
Şekil 4.32. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4,5-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerin polarizebilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi.....	59
Şekil 4.33. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT, 4-FFT moleküllerin anizotropik polarizebilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi.....	60
Şekil 4.34. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3-DFFT, 2,4-DFFT, 2,5-DFFT, 2,6-DFFT, 3,4-DFFT, 3,5-DFFT moleküllerin anizotropik polarizebilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi.....	60

Şekil	Sayfa
Şekil 4.35. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4-TFFT, 2,3,5-TFFT, 2,3,6-TFFT, 2,4,5-TFFT, 2,4,6-TFFT, 3,4,5-TFFT moleküllerin anizotropik polarizebilite değerlerinin dihedral açıya bağlı olarak değişimi.....	61
Şekil 4.36. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4,5-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerin anizotropik polarizebilite değerlerinin dihedral açıya bağlı olarak değişimi.....	61
Şekil 4.37. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT, 4-FFT moleküllerin hiperpolarizebilite değerlerinin dihedral açıya bağlı olarak değişimi.....	63
Şekil 4.38. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3-DFFT, 2,4-DFFT, 2,5-DFFT, 2,6-DFFT, 3,4-DFFT, 3,5-DFFT moleküllerin hiperpolarizebilite değerlerinin dihedral açıya bağlı olarak değişimi.....	64
Şekil 4.39. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4-TFFT, 2,3,5-TFFT, 2,3,6-TFFT, 2,4,5-TFFT, 2,4,6-TFFT, 3,4,5-TFFT moleküllerin hiperpolarizebilite değerlerinin dihedral açıya bağlı olarak değişimi.....	64
Şekil 4.40. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4,5-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerin hiperpolarizebilite değerlerinin dihedral açıya bağlı olarak değişimi.....	65
Şekil 4.41. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT, 4-FFT moleküllerin hiperpolarizebilite değerlerinin dihedral açıya bağlı olarak değişimi.....	65
Şekil 4.42. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3-DFFT, 2,4-DFFT, 2,5-DFFT, 2,6-DFFT, 3,4-DFFT, 3,5-DFFT moleküllerin hiperpolarizebilite değerlerinin dihedral açıya bağlı olarak değişimi.....	66
Şekil 4.43. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4-TFFT, 2,3,5-TFFT, 2,3,6-TFFT, 2,4,5-TFFT, 2,4,6-TFFT, 3,4,5-TFFT moleküllerin hiperpolarizebilite değerlerinin dihedral açıya bağlı olarak değişimi.....	66

Şekil	Sayfa
Şekil 4.44. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4,5-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerin hiperpolarizabilite değerlerinin diheral açıya bağlı olarak değişimi.....	67

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılan bazı simgeler ve kısaltmalar , açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler	Açıklama
$\text{\AA}$	Angstron
E	Hamiltonyen işlemcisi özdeğeri
$E_{elek.}$	Toplam elektronik enerjisi
E_{HK}	Hohenberg-Kohn enerji fonksiyonu
E_{xc}	Değiş-tokuş ve korelasyon enerjisi
F_{ij}	Kuvvet sabiti
$\hat{H}$	Hamiltonyen işlemcisi
$\hat{H}_e$	Elektronik hamiltonyen işlemcisi
J	Kulomp terimi
k	Kuvvet sabiti
T	Kinetik enerji fonksiyonu
V^{et}	Etkin potansiyel
α	Kutuplanabilirlik katsayısı
μ	Dipol momenti
ρ	Elektron yoğunluğu
ϕ_{μ}	Atomik orbital
$\emptyset_2$	Anti-form denge açısı
$\emptyset_1$	Syn-form denge açısı
Φ	Slater determinantı dalga fonksiyonu
Ψ	Dalga fonksiyonu
ψ_e	Elektronik dalga fonksiyonu

Kısaltmalar	Açıklama
AO	Atomik orbital
anti-form	Molekülün 90-180 derece bölgesindeki şekli
a.u.	Atomik birim
B3LYP	LYP korelasyon enerjili 3 parametrelili Becke karma metodu
DFT	Yoğunluk fonksiyon teoremi
HF	Hartree-Fock
HOMO	En yüksek dolu moleküler orbital
LCAO	Atomik orbitallerin lineer kombinasyonu
LUMO	En düşük boş moleküler orbital
LDA	Yerek yoğunluk fonksiyonu yaklaşımı
MM	Moleküler Mekanik
MO	Moleküler orbital
FT	3-feniltiyofen
PES	Potansiyel enerji yüzeyi
syn-form	Molekülün 0-90 derece bölgesindeki şekli
2-FFT	3-(2-florofenil) tiyofen
3-FFT	3-(3-florofenil) tiyofen
4-FFT	3-(4-florofenil) tiyofen
2, 3-DFFT	3-(2, 3-diflorofenil) tiyofen
2, 4-DFFT	3-(2, 4-diflorofenil) tiyofen
2, 5-DFFT	3-(2, 5-diflorofenil) tiyofen
2, 6-DFFT	3-(2, 6-diflorofenil) tiyofen
3, 4-DFFT	3-(3, 4-diflorofenil) tiyofen
3, 5-DFFT	3-(3, 5-diflorofenil) tiyofen
2, 3, 4-TFFT	3-(2, 3, 4-triflorofenil) tiyofen
2, 3, 5-TFFT	3-(2, 3, 5-triflorofenil) tiyofen
2, 3, 6-TFFT	3-(2, 3, 6-triflorofenil) tiyofen
2, 4, 5-TFFT	3-(2, 4, 5-triflorofenil) tiyofen

Kısaltmalar	Açıklama
2, 4, 6-TFFT	3-(2, 4, 6-triflorofenil) tiyofen
3, 4, 5-TFFT	3-(3, 4, 5-triflorofenil) tiyofen
2, 3, 4, 5-TFFT	3-(2,3, 4, 5-tetraflorofenil) tiyofen
2, 3, 4, 6-TFFT	3-(2,3, 4, 6-tetraflorofenil) tiyofen
2, 3, 5, 6-TFFT	3-(2,3, 5, 6-tetraflorofenil) tiyofen
2, 3, 4, 5, 6-PFFT	3-(2,3, 4, 5, 6-pentaflorofenil) tiyofen

1. GİRİŞ

Evrendeki bütün maddeler, atomların aralarında kimyasal bağlar yaparak bir araya gelmeleri ile molekül adı verilen atom topluluklarından ve moleküllerin uç uca ekleme ve bazı durumlarda çapraz bağlamak sureti ile elde edilen polimerlerden oluştuğu bilinmektedir. Maddelerin özellikleri onları oluşturan moleküllerin özelliklerine bağlıdır. Moleküllerin fiziksel ve kimyasal özelliği, yapısında bulunan atomların ve atomları bir arada tutan kimyasal bağlarla ilgilidir. Bundan dolayı molekülün yapısını belirlemek, yapı ile özellik arasındaki ilişkileri bulmak büyük önem taşır. Bir molekülün yapı ve özelliklerinin belirlenmiş olması, onun kimyasal reaksiyon yeteneği ve oluşturduğu maddenin özellikleri hakkında fikir sahibi olmamıza yardımcı olur. Bu nedenle kimya ve fizik alanında çalışanlar maddelerin özelliklerini belirlemek üzere bir çok araştırmalar yapmışlardır. Özellikleri belirlenen maddelerin istenilen iyi özelliklerini tek malzemede toplamak istemişlerdir. Örneğin metallerin elektriksel iletkenlik ve mekaniksel özelliklerini, polimerlerin özellikleriyle birleştirerek bir tek malzemede toplayabilmek her zaman ilgi çeken bir araştırma konusu olmuştur. Bu amaçla yapılan çalışmalarda polimere metal tozları gibi parçacıkların katılması ve iletkenliğin polimer örgüsüne sokulan metal faz üzerinden sağlanması ilginç sonuçlar vermiştir. Fakat bu çalışmada polimerin kendisi yalıtkanlık özelliğini koruyarak istenilen sonuç alınamamıştır.

Bu çalışmalardan sonra 1974 yılında H. Shirakawa iletken olmayan ve siyah toz halinde bulunan poliasetileni Ziegler-Natta katalizörü kullanarak metalik görüntüde ancak yeterince iletken olmayan gümüş renginde poliasetilen filmler hazırlamıştır (1,2). 1977 yılında H. Shirakawa, A.J. Hegeer ve A.G. MacDiarmid bu filmleri iyot, flor veya klor buharlarına tutularak yükseltgendiğinde, iletkenliğin 10^9 kat artarak 10^5 S/m düzeyine çıktığını gözlemişlerdir. Bu değer, yalıtkan karakterli Teflonun iletkenliği olan 10^{-18} S/m den çok yüksektir ve gümüş, bakır gibi metallerin iletkenliği olan 10^6 S/m düzeyine yakındır. H. Shirakawa, A.J. Hegeer ve A.G. MacDiarmid bu

alışmadan dolayı 2000 yılı Kimya Nobel ödölünü almışlardır. Bu alışma literatürde polimerlerin iletkenliğinin keşfi olarak bilinir (3-5).

1970 yıllarından beri polipirol, polianilin, polifuran ve politiyofen gibi polimerler iletkenlik özelliklerinden dolayı teknolojide transistör, foto diyot, ışık yayan diyot, batarya ve kondansatör gibi elektronik aygıtlarda temel malzeme olarak yaygın bir şekilde kullanıldığı için son yıllarda büyük ilgi toplamışlardır (6-9). Tiyofen ve tiyofen türevlerine dayalı organik polimerler teknolojide kolay işlenmelerinden ve yüksek kararlılıklarından dolayı bu polimerlere artan bir ilgi vardır ve yeni malzeme biliminde alışmalara konu olmuştur (10-17). Araştırmacılar malzeme biliminde yeni malzeme üretimi için polimerleri oluşturan dimer ve moleküller üzerinde yaptıkları substitüent etkileri veya doplama işlemleri ile bu moleküllerin elektriksel ve optiksel özelliklerinin değışebileceğini göstermişlerdir (18-20). A. Rudge ve arkadaşları tiyofenin 3-konumuna fluorofenil grubunun bağlayarak oluşturdıkları tiyofen türevlerinin n-katkı yoğunluğunu artırdığını ve tiyofen halkasının 3-konumuna bağlanan fenil halkası ile oluşan 3-feniltiyofen, fenil halkasındaki π -bağlarından dolayı, politiyofene göre daha kararlı olduğu ve teknolojide iletken polimer olarak kullanılabileceği yapılan alışmalarla tespit edilmiştir (21). J.P. Ferraris ve arkadaşları 3-feniltiyofen molekülünün fenil halkası üzerinde (F, SO₂Me, CN) gibi çeşitli substitüentler kullanarak elde edilen 3-feniltiyofen türevlerinin elektrokimyasal özelliklerini incelemişlerdir (22). 3-feniltiyofen ve onun türevlerinin elektro kimyasal özellikleri ile ilgili bir ok deneysel alışmalar yapılmasına karşılık (23-32), bu moleküllerin yapısal özellikleri ile ilgili deneysel ve teorik olarak literatürde ok az sayıda alışma bulunmaktadır (33-37). 1971 yılında 2- ve 3-feniltiyofen moleküllerin denge durum konformasyon yapıları yarı deneysel Extended Hückel metodu ile; elektronik yapıları ve özellikleri CNDO/2 yaklaşımıyla V. Glasso ve arkadaşları tarafından alışılmış ve deneysel değerlerle uyumlu sonuçlar elde edilmiştir (34). R. Hilal ve arkadaşları 2- ve 3-feniltiyofen moleküllerinin dipol momentlerini, en yüksek dolu moleküler orbital (Highest Occupied Molecular orbital (HOMO)) ve en düşük boş moleküler

orbital (Lowest Unoccupied molecular Orbital (LUMO)) enerjilerini teorik olarak çalışmışlardır (35). C.A. Veracini ve arkadaşları yaptığı deneysel çalışmada 3-feniltiyofen molekülünün denge konformasyonunu açısını 24° , merkez karbon atomları arasındaki bağ uzunluğunu $1.49 \text{ \AA}$ bulmuştur (37).

Literatürde 3-feniltiyofen molekülünü oluşturan fenil ve tiyofen molekülerinin dimerli (bifenil ve bitiyofen) molekülleriyle bizim çalışmamıza benzer çalışmalar yapılmıştır (38-40). Vladimer Lukes ve arkadaşları MP2 ve HF modelleri ile 3-21G (d) temel setini kullanarak 2,2' bitiyofen, 2,3' bitoyofen ve 3,3' bitiyofen moleküllerinin elektronik özellikleri, dipol momentleri ve enerjilerinin dihedral açının fonksiyonu olarak değişimleri incelenmiş ve bitiyofen izomerlerinin düzlemselliğe yakınlığını $2,2' \rightarrow 2,3' \rightarrow 3,3'$ bitiyofen şeklinde sıralanmıştır. Ayrıca 2,2' bitiyofen molekülünün Nükleer Magnetik Rezonans (NMR) spektroskopisi çalışmasında bu molekülün syn- ve anti-form durumları arasındaki enerji farkları 0.2 kcal/mol olarak belirtilmiştir (41). Nicolas Di Cesare ve arkadaşları bitiyofen ve Etil-sübstitüe bitiyofen molekülerinin HF modelinde değişik temel setler (6-31G* ve 3-21G*) kullanarak yapısal parametreler incelenmiş ve moleküllerin denge durumları dihedral açılarının temel setlere göre farklılık gösterdikleri gözlenmiştir (42,43).

Sundaram Arulmozhiraja ve arkadaşlarının bifenil molekülü ile yaptıkları çalışmalarında belirttikleri gibi bifenil halkaları üzerindeki meta ve para pozisyonlarındaki sübstitüent klor atomları ile oluşturulan klorlanmış bifenil türevleri zehirli olduğu fakat orto pozisyonlarındaki sübstitüent klor atomları ile oluşturulan klorlanmış bifenil türevleri daha az zehirli olduğu belirlenmiştir (44). Yani bu durumu dihedral açının dönmesi ile oluşturulan bariyer yükseklikleri ile ilişkilendirirsek bariyer yüksekliğinin düşük olması durumunda (bu durum kolay düzlemleştirmeye karşılık gelir) bu büyük bir zehirlilikle ilişkilendirilebilir. Buna karşılık bariyer yüksekliğinin yüksek olması durumunda zayıf bir zehirliliğe karşılık gelir. Yani klorlanmış bifenil molekülünün türevlerinin zehirliliği merkez C-C bağı etrafındaki dönme

sonucu oluşan potansiyel bariyerleri ile belirlenebildiği gibi klorlamanın derecesi de zehirlilik miktarını belirlemede önemli bir etkidir. Bifenil molekülü iletken polimer teknolojisinde yaygın olarak kullanılmaktadır. Teknolojik öneminden dolayı bifenil molekülü ile ilgili bir çok deneysel ve kuantum kimyasal çalışmalar mevcuttur (45-52).

Bu çalışmada, 3-feniltiyofen ve fenil halkasına bağlı flor atomlarının konumları ve sayıları sistematik olarak değiştirilerek oluşturulan florlu FT molekülünün mono-, di-, tri-, tetra- ve pentaflorofeniltiyofen izomerlerinden 3-(2-florofenil) tiyofen, 3-(3-florofenil) tiyofen, 3-(4-florofenil) tiyofen, 3-(2, 3-diflorofenil) tiyofen, 3-(2, 4-diflorofenil) tiyofen, 3-(2, 5-diflorofenil) tiyofen, 3-(2, 6-diflorofenil) tiyofen, 3-(3, 4-diflorofenil) tiyofen, 3-(3, 5-diflorofenil) tiyofen, 3-(2, 3, 4-triflorofenil) tiyofen, 3-(2, 3, 5-triflorofenil) tiyofen, 3-(2, 3, 6-triflorofenil) tiyofen, 3-(2, 4, 5-triflorofenil) tiyofen, 3-(2, 4, 6-triflorofenil) tiyofen, 3-(3, 4, 5-triflorofenil) tiyofen, 3-(2,3, 4, 5-tetraflorofenil) tiyofen, 3-(2, 3, 4, 6-tetraflorofenil) tiyofen, 3-(2,3, 5, 6-tetraflorofenil) tiyofen ve 3-(2,3, 4, 5, 6-pentaflorofenil) tiyofen moleküllerinin geometrik optimizasyonları, Hartree-Fock (HF) ve yoğunluk fonksiyonu teorisi (DFT) ile 6-31++g** temel seti kullanılarak yapısal parametreleri; denge durumu geometrisi, bağ uzunlukları, bağ ve dihedral açıları hesaplandı. Daha sonra bu moleküllerin dipol moment, elektronik enerji, en yüksek dolu moleküler orbital (HOMO) ve en düşük boş moleküler orbital (LUMO) enerjileri, polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri hem denge durumu geometrisinde hem de dihedral açının fonksiyonu olarak 10° 'lik adımlarla 0° den 180° ye kadar taranarak her iki modelde hesaplanmıştır. Hesaplamalar GAUSSIAN 98W (53) paket programında yapılmıştır. Hesaplanmış potansiyel eğrileri Fourier serisine uyarlanarak kosinüs terimleri cinsinden ifade edilerek potansiyel eğrilerin Fourier katsayıları bulunmuştur. 3-feniltiyofen molekülünün fenil halkasındaki hidrojenlerden birinin veya bir kaçının flor atomu ile yer değiştirmiş olan bileşikler, bu molekülün süstitüe türevleri olarak adlandırılır. Bu çalışmada flor-süstitüe türevleri yerine florlu türevleri isimlendirmesi kullanıldı.

2. TEMEL BİLGİLER

Kuantum teorisinin geliştirilmesinden sonra, kuantum mekanik kanunları kuantum sistemler olan atom ve moleküllere uygulanmaya başlanmıştır. Kuantum mekaniği bir molekülün enerjisini ve diğer büyüklüklerini hesaplamayı Schrödinger denkleminin çözümü ile mümkün kılmaktadır. Schrödinger denklemi yalnızca hidrojen atomu için tam olarak çözülebilmektedir. Birden fazla elektrona sahip sistemler için Schrödinger denkleminin tam çözümü mümkün değildir. Bu nedenle çok elektronlu sistemler için matematiksel yaklaşımlar yapılarak, yaklaşık çözüm metotları geliştirilmiştir (moleküler mekanik (MM), yarı-deneysel ve ab initio metotları vb.). Yaklaşık çözüm metotları kuantum mekaniği uygulamalarında büyük önem taşırlar. Teorik olarak geliştirilen metotlar arasındaki farklılıklar hesaplamalarda kullandıkları yaklaşımlardan kaynaklanmaktadır. Bu metotlardan literatürde geniş kabul görenlerden biri ab initio metotlarıdır (54).

Ab initio terimi hesaplamaların kuantum mekaniği, istatistik termodinamik kanunlar ve fiziksel sabitlere bağlı olduğunu ifade eder. Bu hesaplamalarında Schrödinger denklemi başlangıç noktasıdır.

2.1. Hartree-Fock (HF)

Moleküler bir sistem için Schrödinger denklemi $H\Psi = E\Psi$ olarak verilir. Bu sistem için hamiltoniyen operatörü aşağıdaki şekilde yazılır.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \nabla_i^2 - \sum_{\alpha=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2 + e^2 \left[\sum_{\alpha < \beta}^N \sum_{\alpha < \beta}^N \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta}}{R_{\alpha\beta}} + \sum_{i < j}^n \sum_{i < j}^n \frac{1}{r_{ij}} - \sum_i^n \sum_{\alpha}^N \frac{Z_{\alpha}}{r_{i\alpha}} \right] \quad [2.1]$$

Born-Oppenheimer yaklaşımı elektrondan çok ağır olan çekirdeklerin, bağıl olarak daha yavaş hareket ettiği için sabit kabul edilebileceğini ve elektronların çekirdek etrafında hareket ettiğini varsayar. Böylece, çok

elektronlu sistemin toplam dalga fonksiyonu Ψ , çekirdek ve elektron dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak yazıla bilinir.

$$\Psi = \Psi_{\zeta} \Psi_e \quad [2.2]$$

Born-Oppenheimer yaklaşımından gidilen metotlarda amaç elektronik Schrödinger denklemini çözmektir (çekirdeğin kinetik enerjisi ihmal edilir). Schrödinger denklemi,

$$\hat{H}_e \Psi_e = E_e \Psi_e \quad [2.3]$$

Şeklinde yazılır.

Eş. 2.1 ile verilen hamiltoniyen ifadesi Born-Oppenheimer yaklaşımı yapıldığında ayrı ayrı $\hat{H}_0$, $\hat{H}_1$ ve $\hat{H}_2$ operatörleri olarak yazılır (54).

$$\hat{H}_0 = e^2 \sum_{\alpha < \beta} \sum \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta}}{R_{\alpha\beta}} \quad [2.4]$$

$$\hat{H}_1 = \sum_{i=1}^n \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_{\alpha} \frac{e^2 Z_{\alpha}}{r_{\alpha i}} \right) = \sum_{i=1}^n \hat{h}_1(i) \quad [2.5]$$

$$\hat{H}_2 = \sum_{i < j} \sum \frac{e^2}{r_{ij}} \quad [2.6]$$

Buradaki problem $\hat{H}_2$ teriminin değişkenlerine ayıramamasıdır. Bunun giderilmesi için Hartree bağımsız parçacık modelini öne sürmüştür. Bu modele göre her elektron, çekirdeğin potansiyel alanı ve diğer elektronlardan kaynaklanan ortalama bir potansiyel etkisinde hareket eder.

$$\sum_{i<j} \sum \frac{e^2}{r_{ij}} \longrightarrow \sum_i^n V_1^{et}(i) \quad [2.7]$$

Böylece, çok elektronlu sistemdeki her elektron kendi dalga fonksiyonu ile tanımlanır ve çok elektronlu bir sistemin dalga fonksiyonunu tek elektron dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak verilir.

$$\Psi(1, 2, 3, \dots, n) \rightarrow \phi_1(1)\phi_2(2)\dots\phi_n(n) \quad [2.8]$$

Buna Hartree çarpımı denilir.

Hartree toplam dalga fonksiyonu elektron koordinatlarına göre anti simetrik değildir. Bu Pauli dışarlama ilkesi ile çelişir. Bunun düzeltilmesi Fock ve Slater tarafından sistemin dalga fonksiyonu bir determinant (Eş. 2.9) şeklinde yazılarak yapılmıştır (55).

$$\Phi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(r_1)\phi_2(r_2)\dots\phi_N(r_N) \\ \phi_1(r_2)\phi_2(r_2)\dots\phi_N(r_2) \\ \vdots \\ \phi_1(r_N)\phi_2(r_N)\dots\phi_N(r_N) \end{vmatrix} \quad [2.9]$$

Anti simetrik dalga fonksiyonlarına göre etkin potansiyel Eş. 2.10 ile verilmiştir.

$$V_1^{et}(i) = \sum_{j=1}^n \int \phi_j(j) \frac{e^2}{r_{ij}} (1 - \hat{P}_{ij}) \phi_j(j) d\tau_j = \sum_{j=1}^n \langle \phi_j(j) | (1 - \hat{P}_{ij}) \phi_j(j) \rangle \quad [2.10]$$

Burada $\hat{P}_{ij}$ elektronların koordinatlarını değiştiren operatör;

$$\hat{P}_{ij} [\phi_i(1)\phi_j(2)] = \phi_i(2)\phi_j(1) \quad [2.11]$$

Çok elektronlu sistemlerde enerjinin beklenen değeri Eş. 2.12 ile verilmiştir.

$$E = \langle \Phi | \hat{H} \Phi \rangle = \langle \Phi | \hat{H}_0 \Phi \rangle + \left\langle \Phi \left| \sum_{i=1}^n \hat{h}_1(i) \Phi \right. \right\rangle + \left\langle \Phi \left| \sum_{i<j}^n \sum_{j=1}^n \hat{h}_2(ij) \Phi \right. \right\rangle \quad [2.12]$$

Φ Sistemin Slater determinantı dalga fonksiyonudur. Determinant tek elektron dalga fonksiyonlarının çarpımının lineer kombinasyonudur. Buna göre enerjinin beklenen değeri Eş. 2.13 ile verilir.

$$\begin{aligned} E &= E_0 + \sum_{i=1}^n \langle \phi_i(i) \hat{h}_1(i) \phi_i(i) \rangle + \sum_{i<j}^n \sum_{j=1}^n \langle \phi_i(i) \phi_j(j) \hat{h}_2(ij) \phi_i(i) \phi_j(j) \rangle \\ &\quad - \langle \phi_i(i) \phi_j(j) \hat{h}_2(ij) \phi_i(j) \phi_j(i) \rangle \\ &= E_0 + \sum_{i=1}^n \langle \phi_i(i) \hat{h}_1(i) \phi_i(i) \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \langle \phi_i(i) \phi_j(j) | \hat{h}_2(ij) (1 - \hat{P}_{ij}) \phi_i(i) \phi_j(j) \rangle \end{aligned} \quad [2.13]$$

Eş. 2.13 de çift katlı toplam ifadesindeki ilk terim Coulomb etkileşimini ve ikinci terim değiş tokuş etkileşimini gösterir. Sistemin taban durum enerjisine karşılık gelen dalga fonksiyonu varyasyon prensibinden, dalga fonksiyonunun ortanormal olması Lagrange çarpımı yardımı ile yapılır. Bu işlemlerden sonra Hartree-Fock (HF) eşitliği;

$$\hat{F}(i) \phi_i = \sum_j \varepsilon_{ij} \phi_j \quad i = 1, 2, \dots, n \quad [2.14]$$

şeklinde yazılır. Burada n elektronların ve Fock operatörlerinin (F) sayısıdır. Bu ifadenin matris gösterimi aşağıdaki gibidir (55).

$$\hat{F}\phi = \varepsilon\phi = (\phi_1\phi_2\ldots\phi_n) \begin{bmatrix} \varepsilon_{11}\varepsilon_{22}\ldots\varepsilon_{1n} \\ \varepsilon_{21}\ldots\varepsilon_{2n} \\ \ldots \\ \varepsilon_{n1}\ldots\varepsilon_{nn} \end{bmatrix} \quad [2.15]$$

2.2. Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT)

Hohenberg ve Kohn teoremi, bir molekülün taban durum elektronik enerjisini sistemin dalga fonksiyonu yerine elektron yoğunluğunun (ρ) fonksiyonu cinsinden ifade eder. Bu da yoğunluk fonksiyonu teorisinin (DFT) temelini oluşturur. Burada bir molekül, çevresini elektron bulutu saran sabitleştirilmiş çekirdek kümesi olarak düşünülür. Elektron bulutu bu modelin esasıdır. Yani çekirdekler sanki elektron gazına gömülmüş gibi dikkate alınır. Çekirdeğin elektron bulutu üzerine etkisi bir dış potansiyel olarak bilinir. Enerjinin beklenen değeri, elektron yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak Eş. 2.16 ile verilir.

$$\begin{aligned} E &= \langle \Psi[\rho] | \hat{H} | \Psi[\rho] \rangle \\ &= \langle \Psi[\rho] | \hat{T} | \Psi[\rho] \rangle + \langle \Psi[\rho] | V_{ee} | \Psi[\rho] \rangle + \langle \Psi[\rho] | V_{ne} | \Psi[\rho] \rangle \\ &= T[\rho] + V_{ee}[\rho] + V_{ne}[\rho] \end{aligned} \quad [2.16]$$

Eş. 2.16 de dış potansiyelin enerji katkısı V_{ne} elektron yoğunluğu kullanılarak ifade edilebilir (Eş. 2.17-Eş. 2.18).

$$V_{ne} = - \sum_{i=1}^n \sum_{\alpha=1}^N \frac{Ze^2}{r_{i\alpha}} = \sum_{i=1}^n v(r_i) \quad [2.17]$$

$$V_{ne}[\rho] = \int \Psi^*(1, \dots, n) \Psi(1, \dots, n) \sum_i v(r_i) dr_1 \dots dr_n = \int \rho(r) v(r) dr \quad [2.18]$$

Burada bütün elektronlar aynı dış potansiyel $V(r)$ etkisindedir. Toplam elektronik enerji fonksiyonu Eş. 2.19 ile verilir.

$$E[\rho] = F[\rho] + \int \rho(r)v(r)dr \quad [2.19]$$

Burada $F[\rho] = T[\rho] + V_{ee}[\rho]$ eşitliği Hohenberg-Kohn fonksiyoneli olarak bilinir. Elektron yoğunluğu minimizasyon (ikinci Hohenberg-Kohn teoremi) prensibi kullanılarak belirlenebilir. Bu elektron yoğunluğu için varyasyon prensibinin temelidir. Herhangi bir $\rho \neq \rho_0$ deneme yoğunluğu için enerji fonksiyoneli $E_{HK}[\rho] > E_0$ olur. Burada $\rho_0(r)$ yoğunluk ve E_0 temel durumdaki enerjidir. Bu $E[\rho_0] = E_0$ için de doğrudur.

Enerji fonksiyonu minimize etmek için

$$\delta[E_{HK}[\rho] - \mu(\int \rho(r) - n)] = 0 \quad [2.20]$$

denklemini kullanılır. Burada $\mu = \frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho(r)} + v(r)$ belirsiz Lagrange çarpanıdır.

Eğer $E_{HK}[\rho]$ içindeki $F[\rho]$ bilinmiş olsaydı bu tam olarak çözüle bilinirdi. $F[\rho]$ için bir formül bulunursa bu tam olarak çözülür. $T[\rho]$ tam olarak hesaplanmasına rağmen sorun $V[\rho]$ için yaklaşık çözümlerin olmasıdır.

DFT nin pratik uygulamaları, Kohn ve Sham tarafından sunulan bir prosedürle mümkün hale getirildi. Elektronları birbiri ile etkileşmeyen bir sistem düşünüldü. Bu sistemin Schrödinger denklemi bir elektron denklemine ayrılabilir olsun. Tek-elektron denklemleri elektron yoğunluğunu ifade edebilmek için kullanıldı.

$$\rho = \sum_{i=1}^n |\phi_i|^2 \quad [2.21]$$

Bu sistemde, kinetik enerji fonksiyonu aşağıdaki forma sahiptir.

$$T_s[\rho] = \sum_{i=1}^n \langle \phi_i | -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi_i \rangle \quad [2.22]$$

Bu etkileşmeyen sistemin enerji fonksiyonudur, gerçek sistem için

$$E_c = T_s[\rho] - T[\rho] \quad [2.23]$$

Bu fark, elektronların korelasyon enerjisini içerir, değiş tokuş enerjisi ile birleştirilerek

$$F[\rho] = T_s[\rho] + J[\rho] + E_{xc}[\rho] \quad [2.24]$$

$J[\rho]$ Coulomb terimi ve E_{xc} değiş-tokuş ve korelasyon terimidir. Eş. 2.24,

$$\frac{\delta T_s[\rho]}{\delta \rho(r)} + V^{et}(r) = \mu \quad [2.25]$$

formunu alır. Burada

$$V^{et}(r) = v(r) + \frac{\delta J[\rho]}{\delta \rho(r)} + \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho(r)} \quad [2.26]$$

Burada $T_s[\rho]$ $J[\rho]$ nun klasik elektrodinamikteki değeri için hesaplanabilir.

Problem artık E_{xc} nin belirlenmesine indirgenmiştir.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V^{et}(r) \right] \phi_i = \sum_{j=1}^n \varepsilon_{ij} \phi_j \quad [2.27]$$

Enerjinin beklenen değerin minimum olabilmesi için varyasyon prensibinde kullanılan V^{et} tek-elektron fonksiyonu değiştirilerek en uygun olanı seçilir. Buradan kanonik Kohn-Sham denklemi aşağıdaki şekilde yazılır.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V^{et}(r) \right] \phi_i = \varepsilon_i \phi_i \quad [2.28]$$

Sonuç olarak, burada SCF prosedürü kullanılarak Kohn-Sham orbitalleri elde edilebilir.

Problemde bilinmeyen E_{XC} değerini hesaplamak için E_x ve E_C kısımlarına ayırabiliriz. Yerel yoğunluk yaklaşımı metotlarında (LDA) bu fonksiyonlar sadece elektron yoğunluğuna bağlıdır. Gradyan-düzeltilmeli fonksiyonlarda ise hem elektron yoğunluğuna hem de yoğunluğun gradyantına bağlıdır. Bir LDA fonksiyoneli tekdüze gaz modelinden aşağıdaki gibi elde edilebilir.

$$E_x^{LDA} = -\frac{3}{2} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \int \rho^{4/3} dr \quad [2.29]$$

Bu ifade tekdüze elektron gazı için değiş-tokuş enerjisidir. Bu ifade Becke tarafından geliştirilerek aşağıdaki şekilde formüle edilmiştir.

$$E_x^{B88} = E_x^{LDA} - b \int \frac{\rho^{4/3} x^2}{(1 + 6b \sinh^{-1} x)} dr \quad [2.30]$$

Burada b deneysel olarak 0,0042 a.u. olarak bulunmuştur. En iyi bilinen gradyant düzeltilmeli fonksiyonlar Lee-Yang-Parr (LYP), Perdew (P86) ve Perdew-Wang (PW91) tarafından geliştirilmiştir. Bunlar hem yoğunluk hem

de yoğunluk granyantını içerir. Daha ileri DFT fonksiyonları değiş-tokuş ve korelasyon terimlerinin beraber kullanılması ile elde edilmiştir. Bunlardan literatürde en çok kullanılanı Beck'nin değiş-tokuş terimini (Eş. 2.30) ve LYP korelasyon fonksiyonunu kullanan BLYP (Beck-Lee-Yang-Parr) fonksiyoneliidir. Son zamanlarda HF değiş-tokuş ve DFT korelasyon ve değiş-tokuş fonksiyonellerinin bir karışımını içeren karma metotlar geliştirilmiştir (Eş. 2.31).

$$E_{xc}^{hyb} = c_{HF} E_x^{HF} + c_{DFT} E_{xc}^{DFT} \quad [2.31]$$

Bunlardan en önemlisi 1993 yılında geliştirilen Beck'nin 3 parametrelili fonksiyonudur (Eş. 2.32).

$$E_{xc}^{B3PW} = E_x^{LSDA} + c_0 (E_x^{HF} - E_{xc}^{LSDA}) + c_x E_x^{B88} + E_c^{VWN} + c_c \Delta E_c^{PW} \quad [2.32]$$

Burada c_0 , c_x ve c_c atomizasyon enerjisi, iyonlaşma enerjisi ve proton ilgisine fit edilerek bulunan sabitlerdir. Bu ifadenin içerdiği korelasyon enerji terimine bağlı olarak farklı versiyonları olabilir. Eş. 2.32'de PW91 yerine Lee-Yang-Parr fonksiyoneli kullanıldığında B3LYP metodu elde edilir (55).

2.3. Molekül Geometrisi ve Optimizasyonu

Molekülün geometrisinden; moleküldeki atomların uzay yerleşimleri ve molekülün uzay yapısı anlaşılmaktadır.

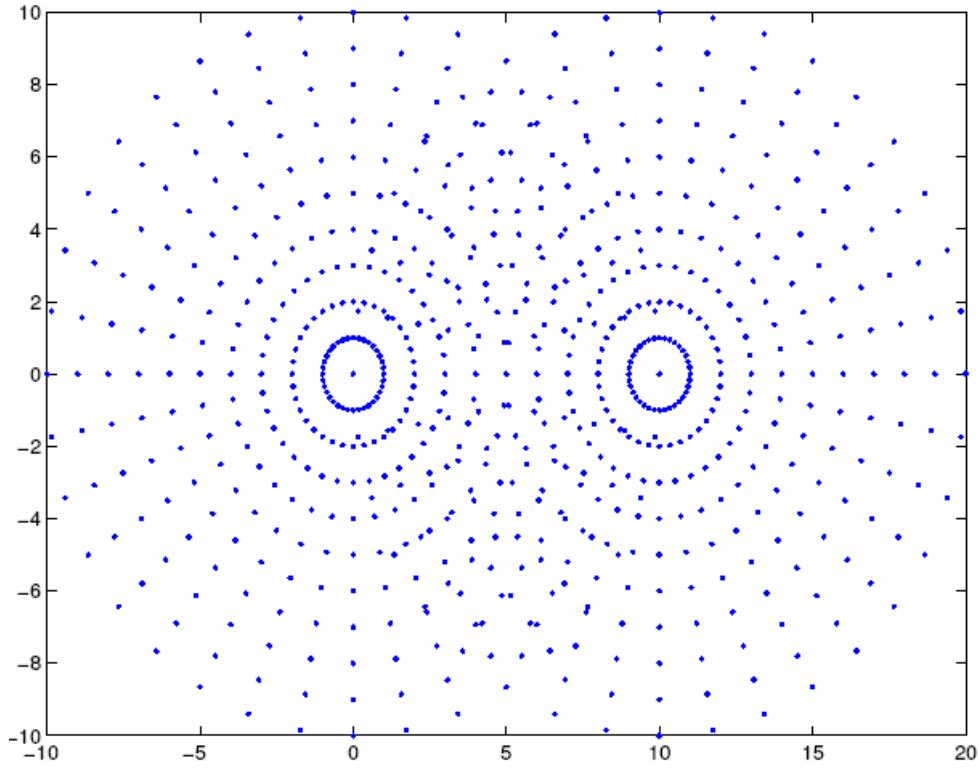
Molekülün minimum enerjisine karşılık gelen, moleküldeki atomların uzay yerleşimlerini bulmaya geometrik optimizasyon denir. Bunun genel için program algoritması (56);

- i) Moleküldeki atomların başlangıç koordinatları verilir.

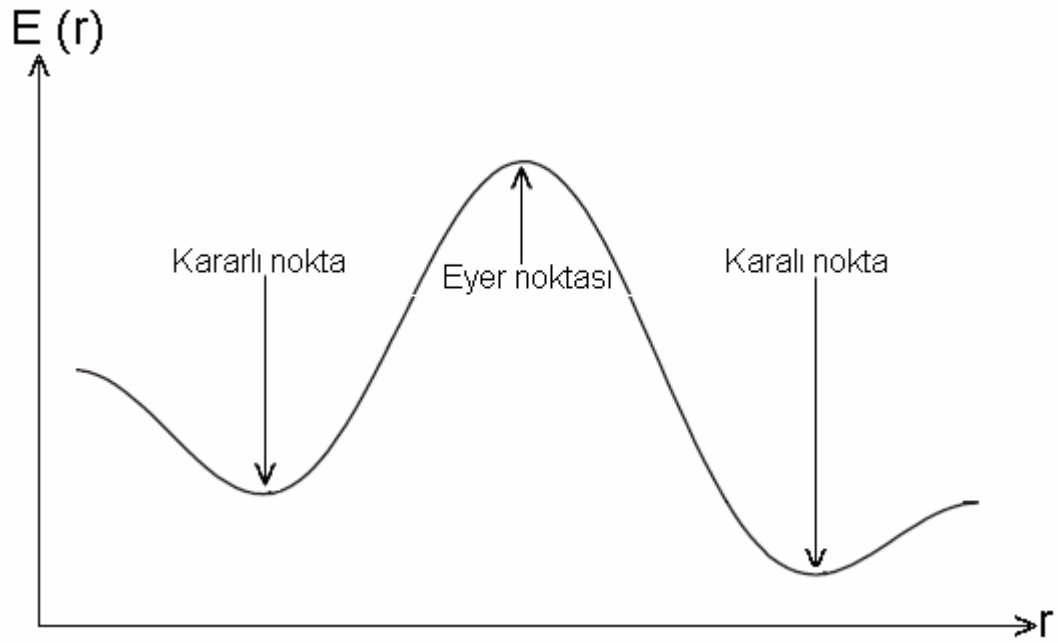
- ii) Molekölün enerjisi ve,
- iii) Moleköldeki her bir atom üzerine etki eden net kuvvet hesaplanır.
- iv) Eğer moleköldeki her bir atom üzerine etki eden net kuvvet sıfır ($\sim 10^{-6}$) ise geometrik optimizasyon tamamlanır.
- v) Moleköldeki atomların uzay yerleşkesi, üzerlerine etki eden kuvveti azaltacak şekilde değiştirilir. Basamak 2'ye dönülür.

Gaussian 98 (53) paket programında geçerli algoritma Berny Hard Schlegel tarafından geliştirilen Berny Algoritması kullanılır (57). Bu algoritmada molekülün sistemin toplam enerjisinin birinci türevi (gradyan) ve ikinci türevi (Hessian Matrisi) göz önüne alınarak enerji sistemin minimum enerjili yapısı tespit edilir (58). Bu algoritmada geçerli grid olarak (75,302) kullanılır (59). Grid ifadesindeki birinci sayı atomdan itibaren radyal kabuk sayısını, ikincisi ise her bir kabuktaki grid nokta sayısını belirtir (Şekil 2.1).

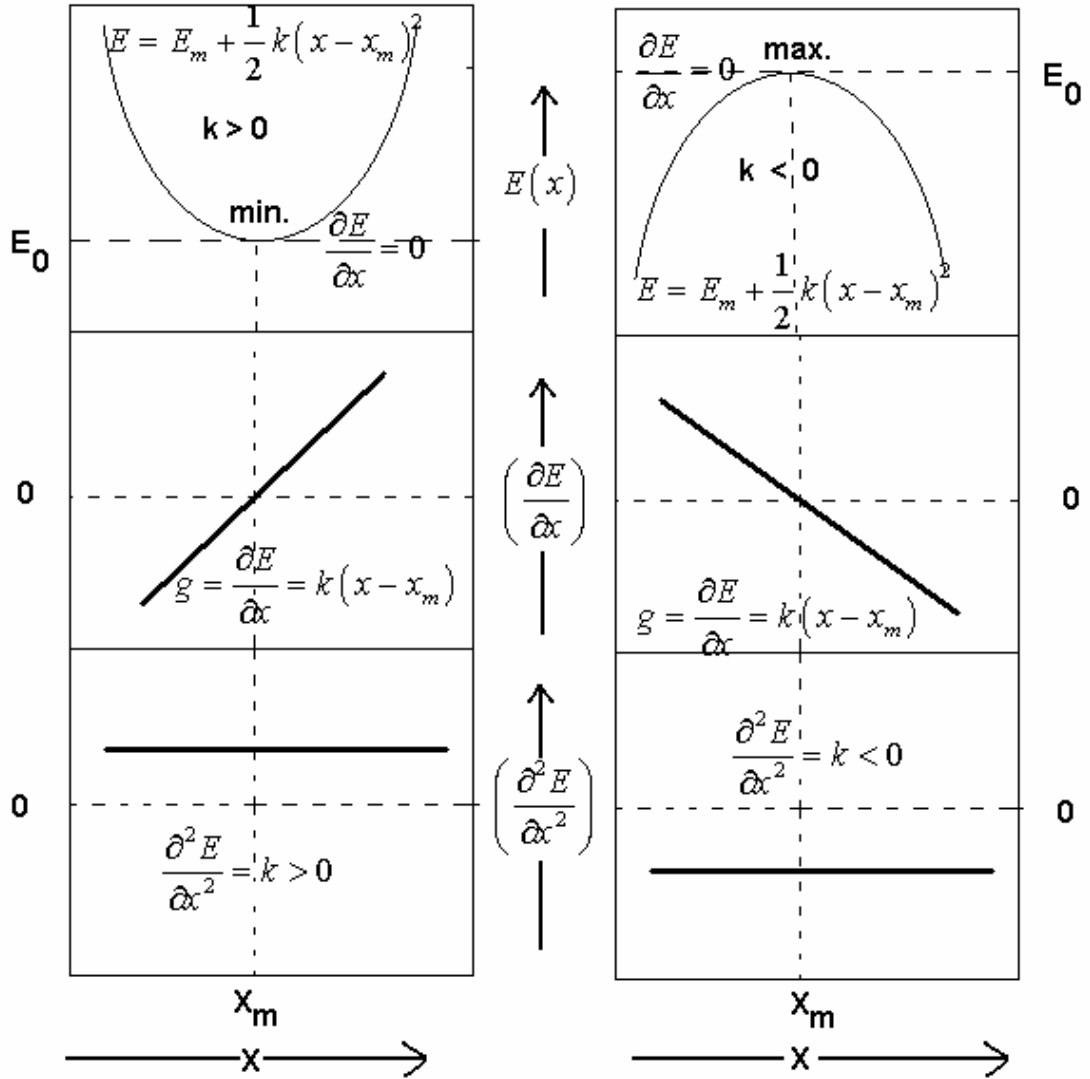
Bir molekülün yapısındaki değişikliklere karşı sistemin enerjisinin değişim grafiği potansiyel enerji yüzeyi (PES) olarak bilinir. PES de Şekil 2.2'de görüldüğü gibi birden fazla maksimum, minimum veya eyer noktaları olabilir. Bu noktalara karşılık gelen yapılar kararlı yapılar olarak bilinir. Bu kararlı noktalar enerjinin birinci ve ikinci türevi ile belirlenir. Bu noktalarda enerjinin birinci türevi sıfırdır. Eğer ikinci türevlerin tamamı pozitif ise o nokta yerel minimum, tamamı negatif ise yerel maksimum sadece bir tanesi negatif ise eyer noktası denir (Şekil 2.3).



Şekil 2.1. Nümerik integrali kolaylaştırmak için geliştirilen atomik grid noktaları (60)



Şekil 2.2. İki boyutta potansiyel enerji yüzeyi



Şekil 2.3. Potansiyel enerji eğrisindeki maksimum ve minimum noktaların karakteristiği (Burada g gradyant, k kuvvet sabitidir.)

2.4. Doğrusal ve Doğrusal Olmayan Optik Özellikler

Atomik ve molekül sistemlerin dipol momentleri, nötr bir atom için atomu oluşturan pozitif ve negatif yüklerin çekim merkezleri üst üste gelerek atomik dipol moment sıfır olur, molekül sistemlerde ise elektronların ve çekirdeklerin molekül içinde dağılımına göre iki sınıfa ayrılabilir. Bunlardan apolar moleküllerde negatif ve pozitif yük dağılımları tam simetrik olursa her

iki cins yükün çekim merkezleri üst üste gelir ve dipol moment sıfır olur ve polar moleküllerde negatif ve pozitif yüklerin çekim merkezleri birbirine nazaran kaymış olurlar, böylece molekül sürekli dipol momente sahip olur. Yani moleküler dipol moment moleküllerin asimetrikliğinin bir ölçüsüdür. Moleküler sistemlere bir dış elektrik alan uygulandığı zaman moleküldeki yük dağılımı bozulduğu gibi, sürekli dipol moment belirli doğrultuda yönelebilir. Eğer molekül sürekli bir dipol momente sahip ise, dipol momentindeki değişim Eş. 2.33 ile verilir.

$$\mu^* = \mu_0 + \alpha E + \frac{1}{2} \beta E^2 + \dots \quad [2.33]$$

Eş. 2.33'de μ^* indüklenmiş dipol moment, μ_0 ise sürekli dipol moment, sağındaki ikinci terim lineer polarizasyonu, sonraki terimler ise lineer olmayan polarizasyonları gösterir. Bu eşitlik lineer olmayan optik etkinin temelini oluşturur.

Moleküler sistemin elektrik alan ile etkileşim enerjisinin elektrik alana bağımlılığı Taylor Seri açılımı (Eş. 2.34) verilir (61).

$$U(E) = U(0) + \sum_i \left(\frac{\partial U}{\partial E_i} \right)_0 E_i + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \left(\frac{\partial^2 U}{\partial E_i \partial E_j} \right)_0 E_i E_j + \frac{1}{6} \sum_i \sum_j \sum_k \left(\frac{\partial^3 U}{\partial E_i \partial E_j \partial E_k} \right)_0 E_i E_j E_k + \dots \quad [2.34]$$

Eş. 2.34'de enerjinin birinci türevi sürekli dipol moment (Eş. 2.35) , ikinci türevi polarizebilite (Eş. 2.36) üçüncü türevi ise hiperpolarizebilite (Eş. 2.37) olarak tanımlanır.

$$\mu_i = - \left(\frac{\partial U}{\partial E_i} \right)_0 \quad [2.35]$$

$$\alpha_{ij} = - \left(\frac{\partial^2 U}{\partial E_i \partial E_j} \right)_0 \quad [2.36]$$

$$\beta_{ijk} = - \left(\frac{\partial^3 U}{\partial E_i \partial E_j \partial E_k} \right)_0 \quad [2.37]$$

2.5. Temel Setler

Çoğu elektronik yapı metotları bilinmeyen molekül orbitallerini (MO) ifade etmek için bilinen temel fonksiyonların bir setini kullanır. Her bir MO, temel set olarak bilinen atomik orbital (AO) terimlerinin doğrusal toplamıdır (Linear combination of atomic orbitals-LCAO). Yani LCAO veya MO metodunda molekülün dalga fonksiyonu molekülü oluşturan atomların dalga fonksiyonlarının toplamı olarak yazılır (Eş. 2.38.) (62).

$$\psi_i = \sum_{\mu=1}^n c_{\mu i} \phi_{\mu} \quad [2.38]$$

Burada ψ_i moleküler orbitali ϕ_{μ} atomik orbitalleri gösterir. $c_{\mu i}$ ise moleküler orbital açılım katsayısı olarak adlandırılır. Temel setler atomik orbitaller için tanımlanmıştır. Fakat molekülleri oluşturan atomların atomik orbitallerinde büyüklük, şekil veya yük bakımından önemli değişiklikler olur. Bu da özel tanımlamalar gerektirir. Bunun için temel sete polarize ve difüz fonksiyonlar eklenerek genişletilmiş temel set tanımlanmıştır. Genişletilmiş temel setler molekülün yüksek dereceden orbitallerini hesaba katarak, moleküler yük dağılımındaki, komşu atomların etkileşmesinden kaynaklanan şekil ve boyut değişikliklerini tanımlar.

Atomlar birbirine yaklaştırıldığında diğer çekirdeklerin etkisiyle elektronik yoğunluk bozulur. Yük dağılımının yeniden yapılanması kutuplanma etkisine

sebebi olur. Bunu gidermek için eklenen temel fonksiyonlara polarize fonksiyonlar denir.

Uyarılmış ve iyonik moleküllerde elektron yoğunluğu molekülün temel durumuna göre daha dağınıktır. Bu durumu matematiksel olarak modellemek için dağınık fonksiyonlar (difüze) kullanılır. Temel setlere eklenen bu fonksiyonlara difüze fonksiyonlar denir. Literatürde değişik şekillerde gösterilen veya program verilerinde bulundurulmuş çok sayıda temel set vardır.

k-nlmG temel set split-valans tipi temel set olarak bilinir. Bu gösterimde k kor orbital veya iç kabuktaki elektronların kaç tane ilkel gaussian tipi fonksiyon ile temsil edildiğini gösterir. nlm ise hem valans orbitallerinin kaç tane yarıldığını hem de bunların kaç tane ilkel gaussian fonksiyonu ile temsil edildiğini gösterir. Eğer gösterimde sadece (nl) var ise ikili yarıma, (nlm) var ise üçlü yarıma dikkate alınır. Temel set gösteriminde G den önce difüze fonksiyonlar için + veya ++ gösterimi kullanılır. + ağır atomlar için p-fonksiyonunu, ++ ise Hidrojen atomu için s- fonksiyonunu tanımlar. Polarize fonksiyonları belirtmek için G den sonra parantez içinde ağır atomlar için d, df ve Hidrojen atomu için p, pd harfleri kullanılır.

Genelde atomik orbitali tam ifade edebilmek için çok sayıda temel fonksiyona ihtiyaç duyulur. Kullanılan temel fonksiyon sayısı arttıkça orbital daha iyi tanımlanır. Bunun için molekül sisteminin elektriksel özellikleri (dipol moment, polarizebilite, vb.) hesaplanırken temel setlere difüze ve polarize fonksiyonlar eklenerek doğruluğu artırılır. Örneğin 6-31+G(d), 6-31++G(d), 6-31++G(d, p) ve 6-311++G(d, p) vb.

Temel fonksiyon sayısı fazlalaştıkça daha fazla hesaplama süresi ve daha fazla bilgisayar hafızası gerekir. Bu nedenle yapılacak bir hesaplamada amaçlanan sonuca uygun temel set seçilmelidir.

3. MATERYAL VE METOT

3.1. Metot

Bu çalışmada, FT molekülü ve flor atomunun sayısı ve konumu sistematik olarak değiştirilerek oluşturulan florlanmış FT moleküllerinin giriş dosyaları Gauss View'de hazırlandı. Hesaplamalar Gaussian 98W paket programında yapıldı (53). Hesaplamalarda HF ve DFT metotları kullanıldı. Hesaplamalara getireceği katkı ve farklılıkları gözlemek amacıyla seçilmiş bazı moleküller için (FT, 2-FFT, 3-FFT ve 4-FFT) 6-31++g(d,p), 6-311++g(d,p) ve 6-311++g(3df,2pd) temel setlerinde de (63-69) hesaplamalar yapıldı. Temel set değişimine ek olarak DFT metodunda farklı grid değerleri kullanılarak hesaplamalar yapılmış, yapılan bu işlemler sonucunda elde edilen sonuçların karşılaştırılması ile; sonuçta elde edilen parametrelerin farklı temel setlerde birbirine yakın olduğu bulunmuştur. (6-31++G(d,p) temel setinde hesaplanan denge dihedral açısının farklı grid ve temel setlere değişimi en az değeri $0,1^\circ$ ve en büyük değeri ise $\pm 1,6^\circ$ dir). Bu temel setlerden hesaplama zamanı en az olan 6-31++G(d,p) split-valans temel seti, diğer temel setlere göre hesaplama zamanı dikkate alınarak, bu çalışmada temel set olarak seçildi. Grid olarak ise programın standart gridi olan (75,302) seçildi. Yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen yapısal parametre değerleri EK-1-EK-4'de, dipol moment değerleri EK-5'de ve potansiyel enerji yüzeyleri EK-6'da verilmiştir.

Moleküllerin geometrik optimizasyonları, her iki hesaplama modelinde de hiçbir sınırlama yapılmadan hesaplanmıştır. Yapılan optimizasyonlar sonucu moleküllerin denge durumu yapısal parametreleri, bağ uzunlukları (Å), bağ açıları ($^\circ$), dihedral açıları ($^\circ$), elektronik enerjileri (a.u.)¹ ve dipol momentleri (Debye) elde edildi.

¹ a.u.=627,51530 kcal/mol

Her iki hesaplama modelinde de; moleküllerin elektronik enerjileri, en yüksek dolu molekül orbital enerjileri (HOMO), en düşük boş molekül orbital enerjileri (LUMO), polarizebilite, anizotropik polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri, hem denge durumunda, hem de dihedral açının fonksiyonu olarak incelendi. Dihedral açı 0° den 180° ye kadar 10° aralıklarla artırıldı. Moleküler özelliklerin dihedral açının fonksiyonu olarak hesaplanmasında moleküllerin denge durumu optimizasyonları kullanıldı. Hesaplama sonucunda elde edilen moleküler özelliklerin, molekül üzerindeki flor atomlarının sayısına ve konumuna göre değişimleri yorumlandı.

Hesaplamalar sonucunda; HOMO-LUMO enerji farkı (a.u.)¹, polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerlerinin kartezyen bileşenleri (a.u) elde edildi. Bu kartezyen bileşen değerlerinden polarizebilite;

$$\alpha = \left(\frac{1}{3}\right)(\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz}) \quad [3.1]$$

Hiperpolarizebilite;

$$\beta_t = \left[(\beta_{xxx} + \beta_{xyy} + \beta_{xzz})^2 + (\beta_{yyx} + \beta_{yzz} + \beta_{yxx})^2 + (\beta_{zzx} + \beta_{zxx} + \beta_{zyy})^2 \right]^{1/2} \quad [3.2]$$

anizotropik polarizebilite;

$$\Delta\alpha = \left(\frac{1}{2}\right) \left[(\alpha_{xx} - \alpha_{yy})^2 + (\alpha_{xx} - \alpha_{zz})^2 + (\alpha_{yy} - \alpha_{zz})^2 \right]^{1/2} \quad [3.3]$$

eşitlikleri ile hesaplandı. Elde edilen verilerden HOMO-LUMO enerji farkı (ΔE);

$$\Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}} \quad [3.4]$$

Torsion bariyer yükseklikleri;

¹ a.u.=27,2116 eV

$$0^\circ \text{ için } \Delta E_0 ; \Delta E_0 = E(\varnothing=0^\circ) - E(\varnothing_{\min}) \quad [3.5]$$

$$90^\circ \text{ için } \Delta E_{90} ; \Delta E_{90} = E(\varnothing = 90^\circ) - E(\varnothing_{\min}) \quad [3.6]$$

$$180^\circ \text{ için } \Delta E_{180}; \Delta E_{180} = E(\varnothing = 180^\circ) - E(\varnothing_{\min}) \quad [3.7]$$

eşitlikleri ile hesaplandı.

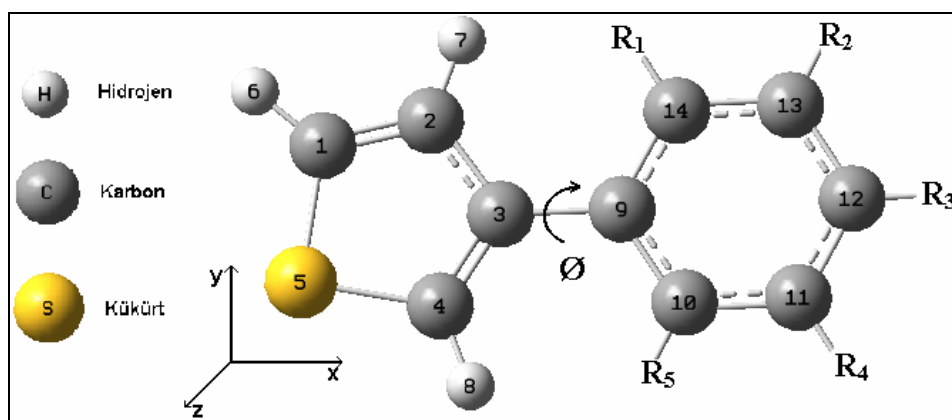
Elektronik enerji değerleri Fourier serisine fit edilerek Fourier katsayıları bulundu (70).

$$V(\theta) = V_0 + \sum V_n \cos(n\phi) \quad [3.8]$$

Burada, V torsiyon potansiyel engeli yüksekliği, n molekülün simetrisini gösteren katsayı, $\emptyset$ denge dihedral açısıdır.

3.2. Materyal

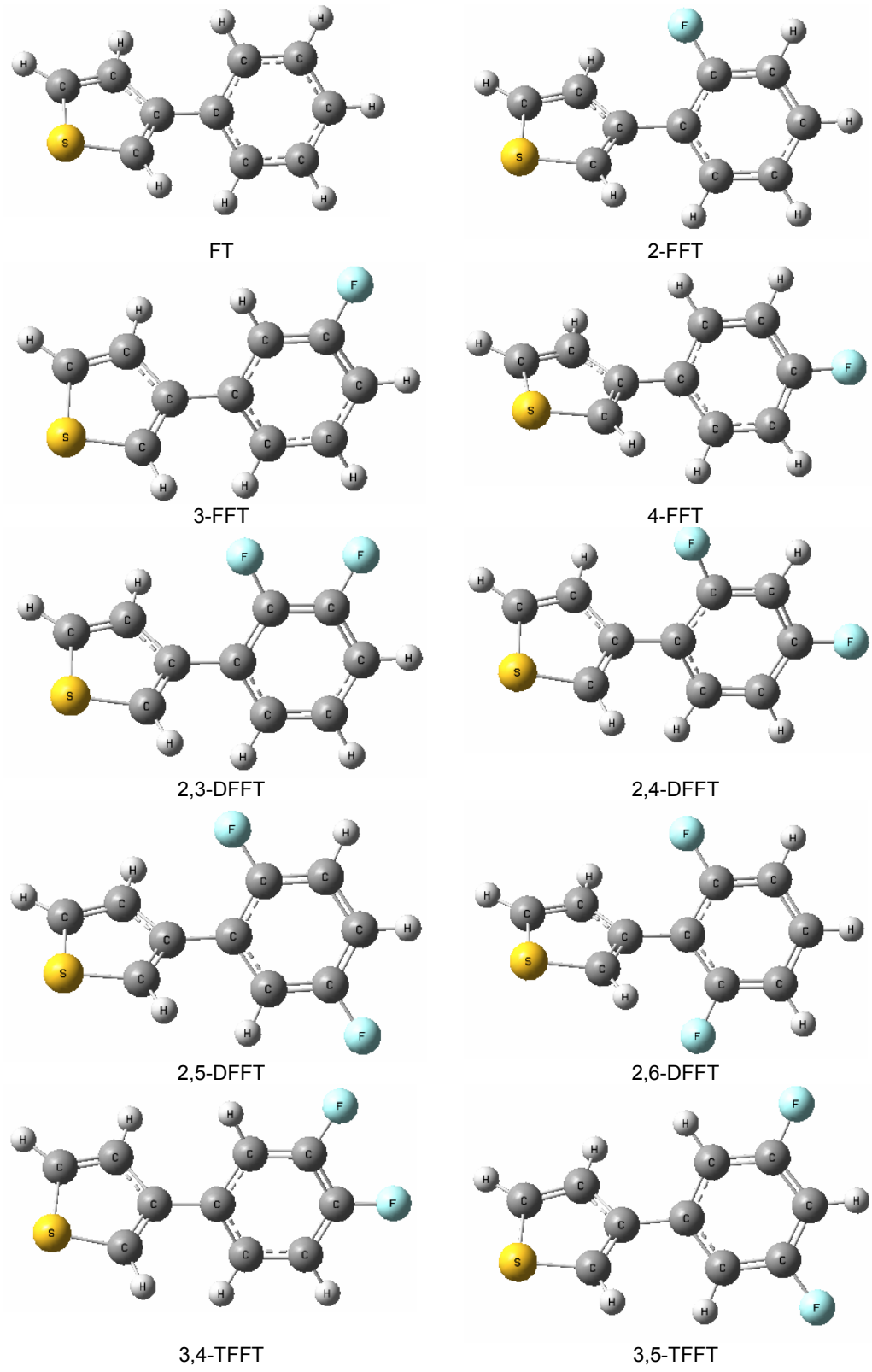
Bu çalışmada incelenen moleküllerin adlandırılmasında kullanılan sistematik Şekil 3.1’de, kimyasal ve geometrik yapı konfigürasyonları Şekil 3.2’de ve adlandırılmaları Çizelge 3.1’de verildi.



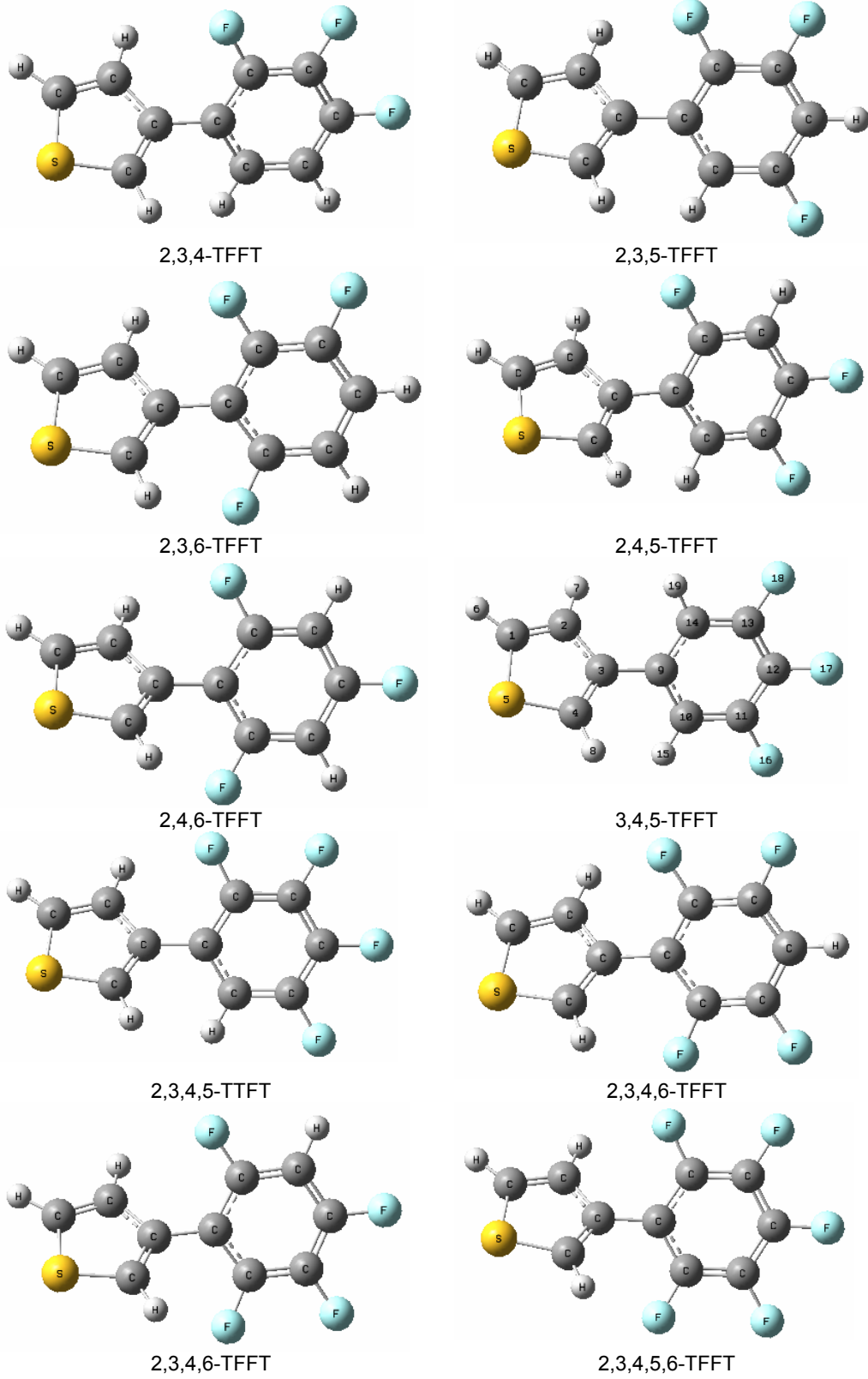
Şekil 3.1. 3-feniltiyofen ve florlu türevlerinin adlandırılmasında kullanılan kimyasal ve geometrik yapı konfigürasyonu

Çizelge 3.1. 3-feniltiyofen ve florlu türevlerinin adlandırılması ve kısaltmalar

Molekül	Kısaltma	R				
		R ₁	R ₂	R ₃	R ₄	R ₅
3-feniltiyofen	FT	H	H	H	H	H
3-(2-florofenil) tiyofen	2-FFT	F	H	H	H	H
3-(3-florofenil) tiyofen	3-FFT	H	F	H	H	H
3-(4-florofenil)tiyofen	4-FFT	H	H	F	H	H
3-(2,3-diflorofenil)tiyofen	2,3-DFFT	F	F	H	H	H
3-(2,4-diflorofenil)tiyofen	2,4-DFFT	F	H	F	H	H
3-(2,5-diflorofenil)tiyofen	2,5-DFFT	F	H	H	F	H
3-(2,6-diflorofenil)tiyofen	2,6-DFFT	F	H	H	H	F
3-(3,4-diflorofenil)tiyofen	3,4-DFFT	H	F	F	H	H
3-(3,5-diflorofenil)tiyofen	3,5-DFFT	H	F	H	F	H
3-(2,3,4-triflorofenil)tiyofen	2,3,4-TFFT	F	F	F	H	H
3-(2,3,5-triflorofenil)tiyofen	2,3,5-TFFT	F	F	H	F	H
3-(2,3,6-triflorofenil)tiyofen	2,3,6-TFFT	F	F	H	H	F
3-(2,4,5-triflorofenil)tiyofen	2,4,5-TFFT	F	H	F	F	H
3-(2,4,6-triflorofenil)tiyofen	2,4,6-TFFT	F	H	F	H	F
3-(3,4,5-triflorofenil)tiyofen	3,4,5-TFFT	H	F	F	F	H
3-(2,3,4,5-tetraflorofenil)tiyofen	2,3,4,5-TFFT	F	F	F	F	H
3-(2,3,4,6-tetraflorofenil)tiyofen	2,3,4,6-TFFT	F	H	F	F	F
3-(2,3,5,6-tetraflorofenil)tiyofen	2,3,5,6-TFFT	F	F	H	F	F
3-(2,3,4,5,6-pentaflorofenil)tiyofen	2,3,4,5,6-PFFT	F	F	F	F	F



Şekil 3.2. 3-feniltiyofen ve florlu türevlerinin konfigürasyonları



Şekil 3.2. (Devam) 3-feniltiyofen ve florlu türevlerinin konfigürasyonları

4. HESAPLAMA SONUÇLARI

Bu bölümde, Bölüm 3.1’de verilen metot ve Bölüm 3.2’de verilen materyal kullanılarak çalışılan moleküllerin yapısal parametreleri (denge durum geometrisi, bağ uzunlukları, bağ ve dihedral açıları), dipol moment, elektronik enerji, HOMO-LUMO enerji farkı, polarizebilite, anizotropik polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri hesaplandı.

4.1. Yapısal Parametreler

Denge dihedral açısı moleküllerin geometrisinde önemli bir faktördür. Çünkü denge dihedral açısı moleküldeki etkileşen iki kuvvetin denge durumunda oluşmaktadır. Bu etkileşimlerden biri fenil ve tiyofen halkaları üzerinde bulunan π -elektronları etkileşimi (Bu etkileşim halkaları düzlemsel tutma eğilimindedir) diğeri ise halkalar üzerinde bulunan orto-atomlarının sterik etkileşimidir (Bu etkileşim halkaları düzlemsellikten ayırma eğilimindedir) . Bu çalışmada denge durumu dihedral açıları; fenil halkası düzlemi ile tiyofen halkası düzlemi arasındaki (C2-C3-C9-C14) açısıdır.

Bu çalışmada; Çizelge 3.1 deki moleküllerin geometrik optimizasyonları HF/6-31++G** ve B3LYP/6-31++G** modelleri ile hiçbir sınırlama yapılmadan hesaplandı. Hesaplama sonuçları elde edilen yapısal parametreler (bağ uzunlukları, bağ açıları ve dihedral açıları) EK-7-EK-26’da verilmiştir. Hesaplama sonuçlarında bütün moleküllerin düzlemsel olmayan iki denge durumu olduğu belirlendi. Bu denge durumları arasındaki en büyük enerji farkı 0,3 kcal/mol olarak hesaplandı. Bunlardan birincisi 0-90° arasında (syn-form) ikincisi ise 90-180° arasında (anti-form) oldukları, syn- formundaki denge dihedral açısını $\varnothing_1$ ile anti-form durumundaki denge dihedral açı $\varnothing_2$ ile gösterildi. Genellikle simetrik moleküllerde $\varnothing_1$ ve $\varnothing_2$ denge durum açılarının toplamı 180° ye eşit olmaktadır ($\varnothing_1 + \varnothing_2 = 180$) (37,71). Fakat bu çalışmada 2-FFT, 2,3-FFT, 2,4-DFFT, 2,5-DFFT, 2,3,5-TFFT, 2,4,5-TFFT ve 2,3,4,5-TFFT molekülerinde iki denge durumu açısının toplamı 180° den yaklaşık 10°

büyüktür ($\varnothing_1 + \varnothing_2 > 180$). Bu durum bahsi geçen moleküller için her iki modelde de görüldü (Çizelge 4.1.). Bu moleküller için elde edilen $\varnothing_2$ denge durum açıları $\varnothing_1$ 'e göre düzlemselliğe daha yakındır. Denge durum açıları $\varnothing_1 + \varnothing_2 > 180$ şartını sağlayan moleküllerin syn-formu denge durumunda fenil halkası üzerinde orto-flor atomu bulunmaktadır. Dihedral açının değişmesi ile anti form denge durumuna geçen orto-flor fenil halkası üzerinde bulunan kükürt atomu ile aynı tarafta bulunmaktadır. İki denge durumu açısının toplamının 180° den büyük çıkmasının nedeni, flor atomunun hidrojen atomundan ve kükürt atomunun da karbon atomundan daha elektronegatif olmasından dolayı, anti-formdaki sterik etkinin syn-formdaki sterik etkiden küçük olması, olarak yorumlanabilir.

Hesaplamalar sonucunda B3LYP modeli ile hesaplanan bağ uzunlukları HF modelindekinden $0,01 \text{ \AA}$ kadar daha büyük olduğu görüldü (merkez karbon atomları (C3-C9) arası bağ uzunluğu hariç). C3-C9 bağ uzunlukları B3LYP'de $0,006 \text{ \AA}$ kadar daha küçüktür. Bu durum karbozel ve floren atomlarının geometrik optimizasyonlarında da görülmüştür (72,74). Bilindiği gibi HF modeli elektron korelasyonunu içermediğinden bağ uzunluklarını daha kısa hesaplar. B3LYP modeli elektron korelasyonunu göz önüne aldığından halkalar üzerinde bulunan π -elektronları etkileşimi nedeni ile C3-C9 merkez karbon atomları arasındaki bağ uzunluğunu daha kısa hesaplar (74). Dihedral açıları, B3LYP modelinde HF modeline göre $1-2^\circ$ kadar daha büyüktür (C3-C9 merkezli dihedral açıları hariç). Denge durumu dihedral açılarını HF modeli, B3LYP modeline göre daha büyük hesapladı ($8-10^\circ$ kadar).

İki modelde de hesaplanmış moleküllerin denge durumu dihedral açıları ve elektronik enerjileri Çizelge 4.1 de, denge durumu dipol moment değerleri ve HOMO-LUMO enerji farkları Çizelge 4.2 de, B3LYP modeli ile hesaplanan denge durumu polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri Çizelge 4.3 ve HF modeli ile hesaplanan denge durumu polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri Çizelge 4.4'de verildi.

Çizelge 4.1. Denge durumları dihedral açıları ve elektronik enerji değerleri

Molekülün adı	Dihedral açı (derece)		Elektronik enerji (a.u)	
	$\varnothing_1$	$\varnothing_2$	$\varnothing_1$	$\varnothing_2$
HF/6-31++G**				
FT	41,5	138,7	-780,868567577	-780,868567981
2-FFT	46,1	143,9	-879,720543277	-879,720172115
3-FFT	40,5	139,9	-879,722343923	-879,722335719
4-FFT	42,8	137,4	-879,721841746	-879,721841920
2,3-DFFT	45,4	144,2	-978,566760295	-978,566489909
2,4-DFFT	47,8	141,8	-978,572967928	-978,572528448
2,5-DFFT	44,7	145,5	-978,571927542	-978,571684736
2,6-DFFT	45,2	134,5	-978,570918317	-978,570974807
3,4-DFFT	41,9	138,9	-978,568037481	-978,568017997
3,5-DFFT	39,3	140,9	-978,575199616	-978,575175304
2,3,4-TFFT	47,1	142,2	-1077,41173996	-1077,41146490
2,3,5-TFFT	42,3	144,8	-1077,41739405	-1077,41724348
2,3,6-TFFT	44,1	135,4	-1077,41509252	-1077,41513039
2,4,5-TFFT	46,2	143,4	-1077,41690914	-1077,41659758
2,4,6-TFFT	47,9	131,8	-1077,42242363	-1077,42242077
3,4,5-TFFT	40,6	139,6	-1077,41349659	-1077,41349612
2,3,4,5-TFFT	45,6	143,7	-1176,25507277	-1176,25492015
2,3,4,6-TFFT	46,8	133,1	-1176,25926213	-1176,25922436
2,3,5,6-TFFT	43,3	136,5	-1176,25850482	-1176,25850452
2,3,4,5,6-FFFT	45,7	134,0	-1275,09542003	-1275,09541771
B3LYP/6-31++G**				
FT	33,5	146,5	-784,089549761	-784,089546068
2-FFT	37,3	153,8	-883,328407634	-883,328591889
3-FFT	32,2	147,5	-883,330241062	-883,330214237
4-FFT	34,5	145,7	-883,329790563	-883,329766294
2,3-DFFT	36,7	153,4	-982,561556829	-982,561753523
2,4-DFFT	38,8	152,0	-982,567458465	-982,567570291
2,5-DFFT	36,4	155,0	-982,567018240	-982,567329105
2,6-DFFT	34,6	145,2	-982,565683118	-982,565775858
3,4-DFFT	33,3	146,4	-982,562955976	-982,562925505
3,5-DFFT	31,6	148,4	-982,569603842	-982,569582899
2,3,4-TFFT	38,4	151,3	-1081,793375710	-1081,793497570
2,3,5-TFFT	34,1	153,7	-1081,799118880	-1081,799416950
2,3,6-TFFT	34,4	144,5	-1081,797245190	-1081,797255340
2,4,5-TFFT	37,4	153,6	-1081,798772170	-1081,799000250
2,4,6-TFFT	36,4	143,4	-1081,803433160	-1081,803437760
3,4,5-TFFT	32,8	147,3	-1081,795060030	-1081,795057040
2,3,4,5-TFFT	37,1	153,0	-1181,023860630	-1181,024072810
2,3,4,6-TFFT	36,6	143,6	-1181,027789620	-1181,027769990
2,3,5,6-TFFT	34,4	145,2	-1181,027711290	-1181,027719400
2,3,4,5,6-FFFT	36,1	143,8	-1280,251262120	-1280,251267680

Florlu FT moleküllerinin yapısal parametreleri üzerinde flor atom sayısı ve konumlarının etkili olduğu hesaplama sonuçlarından görülmektedir. Özellikle fenil halkası üzerindeki flor atomu, orto konumunda bulunduğu zaman

(2-FFT) molekülün syn-form denge durumu açısı FT molekülüne göre daha büyük, anti-form denge durumu açısı FT molekülüne göre daha küçüktür. Fenil halkası üzerindeki flor atomu, meta konumunda bulunduğu zaman (3-FFT) molekülün syn-form denge durumu ve anti-form denge durumu açısı FT molekülüne göre daha küçüktür.

Çizelge 4.5 de verilen FT, 3,4,5-TFFT ve 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerinin HF modeli ile hesaplanmış yapısal parametrelerden seçilmiş bağ uzunluklarından fenil halkası üzerinde bulunan karbon atomları arasındaki (R10, R11, R12, R14, R16, R18) bağ uzunlukları incelendiğinde, FT molekülünün bu bağ uzunluklarının 2,3,4,5,6-PFFT molekülünün bağ uzunluklarından 0,0047-0,015 Å kadar daha kısa olduğu hesaplandı. 2,3,4,5,6-PFFT molekülünün fenil halkası üzerindeki karbon atomları arasındaki bağların FT molekülüne göre daha kısa olması, flor atomunun hidrojen atomundan daha elektronegatif olmasından dolayı bağlı oldukları karbon atomları üzerinde indüktif etki göstermelerinden kaynaklandığı şeklinde yorumlandı.

Aynı şekilde 3,4,5-TFFT molekülünün fenil halkasındaki meta ve para flor atomları ile bağlı oldukları karbon atomları arasında oluşan indüktif etki sonucu, fenil halkasındaki karbon bağlarının bağ uzunluklarının FT' ye göre kısaldığı görülmektedir.

Literatürde bu moleküllerden yalnız FT molekülünün denge durumu deneysel yapı parametreleri bulunmakta olup, deneysel olarak halkalar arası bağ uzunluğu 1.49 Å (37), teorik olarak denge dihedral açısı (CNDO/2 yarı deneysel metot ile) 37° (34), (B3LYP/6-31G* modeli ile) 32° verilmiştir (33). FT molekülüne benzer yapıya sahip Tiyofen-fenil-tiyofen molekülü HF/3-21G* modeli hesaplamalarında denge dihedral açısı 41,5° verilmiştir (75). Bizim çalışmalarımızda da HF/6-31++G** modeliyle 41,5°, B3LYP/6-31++G** modeliyle 33,5° bulunmuştur. Her iki hesaplama sonucunda elde edilen

denge durumu dihedral açılarının yapılan teorik çalışmalarla uyum içinde olduğu görülmektedir.

Çizelge 4.2. Denge dipol moment ve HOMO-LUMO enerji farkı değerleri

Molekülün adı	Dihedral açı(derece)		Dipol moment(D)		HOMO-LUMO (eV)	
<i>HF/6-31++G**</i>	$\varnothing_1$	$\varnothing_2$	$\varnothing_1$	$\varnothing_2$	$\varnothing_1$	$\varnothing_2$
FT	41,5	138,7	0,89	0,89	9,42	9,43
2-FFT	46,1	143,9	1,81	2,18	9,62	9,47
3-FFT	40,5	139,9	1,33	1,98	9,64	9,62
4-FFT	42,8	137,4	1,24	1,24	9,52	9,52
2,3-DFFT	45,4	144,2	2,61	3,20	9,81	9,66
2,4-DFFT	47,8	141,8	1,20	1,78	9,75	10,40
2,5-DFFT	44,7	145,5	0,68	0,32	9,86	9,73
2,6-DFFT	45,2	134,5	2,09	2,09	9,45	9,72
3,4-DFFT	41,9	138,9	2,54	2,93	9,72	9,68
3,5-DFFT	39,3	140,9	1,61	1,61	9,92	9,92
2,3,4-TFFT	47,1	142,2	2,99	3,54	9,90	9,73
2,3,5-TFFT	42,3	144,8	1,35	1,87	10,11	9,95
2,3,6-TFFT	44,1	135,4	1,56	2,01	9,93	9,93
2,4,5-TFFT	46,2	143,4	1,63	1,61	9,96	9,81
2,4,6-TFFT	47,9	131,8	0,45	0,45	9,91	9,91
3,4,5-TFFT	40,6	139,6	3,33	3,33	9,94	9,94
2,3,4,5-TFFT	45,6	143,7	2,80	3,13	10,15	9,98
2,3,4,6-TFFT	46,8	133,1	1,98	1,55	10,06	10,08
2,3,5,6-TFFT	43,3	136,5	0,43	0,44	10,19	10,19
2,3,4,5,6-FFFT	45,7	134,0	2,00	2,01	10,26	10,26
<i>B3LYP/ 6-31++G**</i>						
FT	33,5	146,5	0,50	0,50	5,10	5,11
2-FFT	37,3	153,8	1,42	1,77	5,09	5,04
3-FFT	32,2	147,5	1,46	1,92	5,08	5,07
4-FFT	34,5	145,7	1,46	1,46	5,11	5,13
2,3-DFFT	36,7	153,4	2,44	2,91	5,10	5,05
2,4-DFFT	38,8	152,0	1,35	1,75	5,13	5,08
2,5-DFFT	36,4	155,0	0,53	0,27	5,00	4,96
2,6-DFFT	34,6	145,2	1,49	1,49	5,08	5,08
3,4-DFFT	33,3	146,4	2,70	2,95	5,10	5,07
3,5-DFFT	31,6	148,4	1,88	1,88	5,08	5,08
2,3,4-TFFT	38,4	151,3	3,01	3,40	5,15	5,09
2,3,5-TFFT	34,1	153,7	1,58	1,92	5,04	5,00
2,3,6-TFFT	34,4	144,5	1,25	1,64	5,03	5,04
2,4,5-TFFT	37,4	153,6	1,88	1,89	5,03	4,99
2,4,6-TFFT	36,4	143,4	0,41	0,41	5,15	5,15
3,4,5-TFFT	32,8	147,3	3,43	3,43	5,08	5,08
2,3,4,5-TFFT	37,1	153,0	2,98	3,20	5,08	5,03
2,3,4,6-TFFT	36,6	143,6	2,01	1,73	5,10	5,11
2,3,5,6-TFFT	34,4	145,2	0,75	0,75	5,02	5,02
2,3,4,5,6-FFFT	36,1	143,8	2,28	2,29	5,09	5,09

Çizelge 4.3. B3LYP modelinde denge durumu polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri

Molekülün adı	θ_1 (°)	α (a.u)	β (a.u)
FT	33,5	136,5	254,9
2-FFT	37,3	136,1	468,2
3-FFT	32,2	136,4	309,2
4-FFT	34,5	135,9	291,0
2,3-DFFT	36,7	136,5	532,7
2,4-DFFT	38,8	135,7	558,9
2,5-DFFT	36,4	136,2	346,7
2,6-DFFT	34,6	136,4	619,1
3,4-DFFT	33,3	136,3	414,7
3,5-DFFT	31,6	136,5	142,0
2,3,4-TFFT	38,4	136,4	443,6
2,3,5-TFFT	34,1	136,7	349,1
2,3,6-TFFT	34,4	136,8	588,2
2,4,5-TFFT	37,4	136,3	177,7
2,4,6-TFFT	36,4	136,1	84,7
3,4,5-TFFT	32,8	136,9	389,3
2,3,4,5-TFFT	37,1	137,2	301,9
2,3,4,6-TFFT	36,6	136,8	144,8
2,3,5,6-TFFT	34,4	137,3	480,4

Çizelge 4.4. HF modelinde denge durumu polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri

Molekülün adı	Dihedral açı(derece)		α (a.u)		β (a.u)	
	$\emptyset_1$	$\emptyset_2$	$\emptyset_1$	$\emptyset_2$	$\emptyset_1$	$\emptyset_2$
FT	41,5	138,7	125,33	125,39	89,55	80,55
2-FFT	46,1	143,9	124,09	124,63	224,77	223,43
3-FFT	40,5	139,9	124,13	124,33	170,59	136,04
4-FFT	42,8	137,4	123,75	123,75	276,66	276,69
2,3-DFFT	45,4	144,2	123,38	123,93	317,01	288,41
2,4-DFFT	47,8	141,8	122,65	123,09	244,84	216,04
2,5-DFFT	44,7	145,5	123,19	123,78	81,43	126,9
2,6-DFFT	45,2	134,5	123,18	123,18	229,09	229,23
3,4-DFFT	41,9	138,9	123,03	123,15	366,15	356,06
3,5-DFFT	39,3	140,9	123,42	123,41	62,80	63,10
2,3,4-TFFT	47,1	142,2	122,35	122,88	385,00	344,44
2,3,5-TFFT	42,3	144,8	122,72	123,29	153,85	127,46
2,3,6-TFFT	44,1	135,4	122,69	122,66	225,26	199,07
2,4,5-TFFT	46,2	143,4	122,26	122,74	244,53	232,54
2,4,6-TFFT	47,9	131,8	121,89	121,89	109,07	109,08
3,4,5-TFFT	40,6	139,6	122,71	122,72	384,60	384,35
2,3,4,5-TFFT	45,6	143,7	122,16	122,64	334,93	295,77
2,3,4,6-TFFT	46,8	133,1	121,82	121,86	202,39	233,99
2,3,5,6-TFFT	43,3	136,5	122,37	122,37	109,33	109,31
2,3,4,5,6-FFT	45,7	134,0	121,31	121,85	233,43	222,11

Çizelge 4.5. HF modelinde FT, 3,4,5-TFFT ve 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerinden seçilmiş bağ uzunlukları

Bağ uzunluğu		FT	3,4,5-TFFT	2,3,4,5,6-PFFT
R1	R(1.2)	1,3466	1,3467	1,3454
R2	R(1.5)	1,7229	1,7222	1,7234
R3	R(1.6)	1,0713	1,0712	1,0711
R4	R(2.3)	1,4436	1,4424	1,4425
R5	R(2.7)	1,0737	1,0736	1,0725
R6	R(3.4)	1,3527	1,3529	1,3521
R7	R(3.9)	1,485	1,4836	1,4845
R8	R(4.5)	1,7231	1,7205	1,7172
R9	R(4.8)	1,0714	1,0715	1,0707
R10	R(9.10)	1,3935	1,3924	1,3888
R11	R(9.14)	1,3939	1,3929	1,3889
R12	R(10.11)	1,3865	1,3775	1,3783
R14	R(11.12)	1,3868	1,3781	1,3773
R16	R(12.13)	1,3871	1,3784	1,3778
R18	R(13.14)	1,3862	1,3771	1,3774

Çizelge 4.6. Moleküllerin HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan elektronik enerjilerinin fit edilmiş potansiyel parametreleri (potansiyel parametreleri (a.u))

Molekülün adı	V_0	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	R^2
FT	-780,867	-0,0002	0,0001	0	0,0012	0,0001	0,0002	0,9954
2-FFT	-879,719	0	0,0009	0,0006	0,0015	0,0001	0,0004	0,9959
3-FFT	-879,721	0,0002	0	0	0,0012	-0,0001	0,0002	0,9968
4-FFT	-879,72	0,0002	0,0004	-0,0001	0,0012	-0,0001	0,0002	0,9978
2,3-DFFT	-978,565	0	0,0008	0,0006	0,0015	0,0001	0,0004	0,9966
2,4-DFFT	-978,571	0,0001	0,0012	0,0004	0,0014	0,0001	0,0004	0,9973
2,5-DFFT	-978,57	0,0002	0,0006	0,0004	0,0014	0,0001	0,0004	0,9974
2,6-DFFT	-978,569	0	0,0016	0	0,0018	0	0,0006	0,9963
3,4-DFFT	-978,567	-0,0002	0,0002	0,0001	0,0012	0,0001	0,0002	0,997
3,5-DFFT	-978,574	0,0002	-0,0002	-0,0001	0,0012	-0,0001	0,0002	0,9969
2,3,4-TFFT	-1077,41	0,0002	0,0011	0,0004	0,0015	0,0001	0,0004	0,9976
2,3,5-TFFT	-1077,42	0,0002	0,0005	0,0003	0,0014	0,0001	0,0004	0,9973
2,3,6-TFFT	-1077,41	0	0,0014	0	0,0018	0	0,0006	0,9956
2,4,5-TFFT	-1077,41	0,0002	0,0009	0,0004	0,0014	0,0001	0,0004	0,9978
2,4,6-TFFT	-1077,42	0	0,002	0,0001	0,0018	0	0,0006	0,9966
3,4,5-TFFT	-1077,41	0,0002	0	-0,0001	0,0012	-0,0001	0,0002	0,997
2,3,4,5-TFFT	-1176,25	0,0002	0,0008	0,0003	0,0014	0,0001	0,0004	0,9976
2,3,4,6-TFFT	-1176,26	0	0,0018	0,0001	0,0017	0	0,0006	0,9966
2,3,5,6-TFFT	-1176,26	0	0,0013	0	0,0018	0	0,0006	0,9949
2,3,4,5,6-PFFT	-1275,09	0	0,0019	0,0001	0,0018	0	0,0006	0,9962

Çizelge 4.7. Moleküllerin B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan elektronik enerjilerinin fit edilmiş potansiyel parametreleri (potansiyel parametreleri (a.u))

Molekölün adı	V_0	V_1	V_2	V_3	V_4	V_5	V_6	R^2
FT	-784,0879	-0,0002	-0,0012	0,0001	0,0010	0,0001	0,0002	0,9983
2-FPT	-883,3266	-0,0001	-0,0009	0,0004	0,0012	0,0001	0,0003	0,9948
3-FPT	-883,3285	0,0002	-0,0013	-0,0001	0,0010	-0,0001	0,0002	0,9980
4-FPT	-883,3282	0,0002	-0,0010	-0,0001	0,0011	-0,0001	0,0002	0,9975
2,3-DFFT	-982,5597	-0,0002	-0,0009	0,0004	0,0012	0,0001	0,0003	0,9959
2,4-DFFT	-982,5656	0,0002	-0,0006	0,0002	0,0011	0,0000	0,0003	0,9962
2,5-DFFT	-982,5650	0,0002	-0,0011	0,0002	0,0011	0,0000	0,0003	0,9979
2,6-DFFT	-982,5642	0,0000	-0,0005	0,0000	0,0012	0,0000	0,0004	0,9926
3,4-DFFT	-982,5613	-0,0003	-0,0012	0,0001	0,0010	0,0001	0,0002	0,9979
3,5-DFFT	-982,5678	-0,0002	-0,0015	0,0001	0,0010	0,0001	0,0002	0,9980
2,3,4-TFFT	-1081,7916	-0,0002	-0,0006	0,0004	0,0012	0,0001	0,0003	0,9951
2,3,5-TFFT	-1081,7973	-0,0001	-0,0011	0,0004	0,0012	0,0001	0,0003	0,9966
2,3,6-TFFT	-1081,7956	-0,0001	-0,0006	0,0000	0,0012	0,0000	0,0004	0,9916
2,4,5-TFFT	-1081,7970	-0,0001	-0,0009	0,0004	0,0011	0,0001	0,0003	0,9954
2,4,6-TFFT	-1081,8021	0,0000	-0,0001	0,0000	0,0013	0,0000	0,0005	0,9888
3,4,5-TFFT	-1081,7933	-0,0003	-0,0014	0,0001	0,0010	0,0001	0,0002	0,9979
2,3,4,5-TFFT	-1181,0220	0,0002	-0,0008	0,0001	0,0011	0,0000	0,0003	0,9958
2,3,4,6-TFFT	-1181,0263	0,0001	-0,0002	0,0000	0,0013	0,0000	0,0004	0,9912
2,3,5,6-TFFT	-1181,0260	-0,0001	-0,0006	0,0000	0,0013	0,0000	0,0005	0,9920
2,3,4,5,6-PFFT	-1280,2497	-0,0001	-0,0002	0,0000	0,0013	0,0000	0,0005	0,9914

4.2. Bağlı Enerji ve Torsiyon Potansiyeli

Moleküllerin uzaysal yapılarını ve bunların değişme ihtimallerini belirlemek için bunların iç enerjilerini belirlemek gereklidir. Bu enerji, moleküllerin yapısını karakterize eden parametrenin karışık fonksiyonu olabilir. Fiziksel sistemin denge durumu, enerjinin minimumuna karşılık geldiğinden, bu fonksiyonun parametrelerle ilgili olarak minimum değerleri belirtilmelidir. Moleküler sistemlerde ortaya çıkabilecek molekül içi ve moleküller arası etkileşimler, denge durumu üzerinde oldukça etkinlik göstermektedir. Günümüzde bu durumlar belirli yaklaşımlar kullanılarak bilgisayar sistemlerinde çözülebilmektedir. Moleküler sistemlerde, σ -bağı etrafında grupların dönmesinden meydana gelen geçici molekül şekline, molekülün konformasyonları, grupların σ -bağı etrafında dönmeleri sonucu molekülün uğradığı enerji değişiminin analizine de konformasyon analizi denir.

Bu çalışmada, Çizelge 3.1 de verilen bütün moleküllerin elektronik enerjileri dihedral açının fonksiyonu olarak HF/6-31++G** ve B3LYP/6-31++G** modelleri ile hesaplandı. Dihedral açısı (C2-C3-C9-C14) 0° den 180° ye kadar 10° lik aralıklarla değiştirildi. Her bir molekül için elde edilen en küçük enerjiye sahip durumunun (denge durumu) enerjisi sıfır kabul edilerek moleküllerin bağlı enerjilerinin dihedral açısıya göre değişimleri, HF modeli için Şekil 4.1-Şekil 4.4'de, B3LYP modeli için Şekil 4.5-Şekil 4.8'de verildi. Bu moleküllerin syn-form (0°) daki bariyer yüksekliği (ΔE_0), ortogonal durumdaki (90°) bariyer yüksekliği (ΔE_{90}) ve anti-form durumundaki (180°) bariyer yüksekliği (ΔE_{180}) Çizelge 4.6'da verildi. Hesaplanmış potansiyel eğrileri eşitlik (3.8) de verilen Fourier serisine uyarlanarak cosinüs terimleri cinsinden ifade edilerek Fourier katsayıları Çizelge 4.7'de verildi. Fourier katsayılarından V_0 değerinin baskın olduğu görüldü.

Moleküllerin potansiyel enerji yüzeylerinin iki minimuma ve üç geçiş durumuna sahip oldukları görüldü. Bu durum moleküller için benzer bir

davranıştır. Fakat potansiyel enerji yüzeyleri için yapılan hesaplamalarda, moleküllerin ortogonal durumdaki (90°) bariyer yüksekliği (ΔE_{90}) için bulunan değer B3LYP'de HF ye göre daha yüksek çıkmıştır, bunun tersine syn-formdaki (0°) bariyer yüksekliği (ΔE_0) ve anti-formdaki (180°) bariyer yüksekliği (ΔE_{180}) ise daha düşük çıkmıştır. B3LYP modeli, ortogonal durumunda π -elektron konjuge bağlar kırıldığından relatif enerjiyi daha yüksek hesaplar, düzlemsel durumlarda ise bağ kırılması oluşmadığından enerjileri daha düşük hesaplar (76).

Çizelge 4.8. Moleküllerin hesaplanan torsiyon bariyer yükseklikleri

Molekül	B3LYP/6-31++G**			HF/6-31++G**		
	ΔE_0	ΔE_{90}	ΔE_{180}	ΔE_0	ΔE_{90}	ΔE_{180}
FT	0,97	2,33	0,99	1,88	1,48	1,88
2-FFT	1,71	2,18	1,28	3,42	1,37	2,59
3-FFT	0,85	2,37	0,90	1,79	1,61	1,80
4-FFT	1,06	2,18	1,08	2,01	1,32	2,00
2,3-DFFT	1,71	2,21	1,34	3,31	1,42	2,53
2,4-DFFT	1,52	1,68	1,08	3,31	0,99	2,46
2,5-DFFT	1,42	2,17	0,88	2,86	1,25	2,01
2,6-DFFT	1,65	1,72	1,64	3,60	0,77	3,49
3,4-DFFT	1,05	2,32	1,06	1,96	1,48	1,93
3,5-DFFT	0,92	2,57	0,86	1,70	1,76	1,70
2,3,4-TFFT	1,91	2,05	1,50	3,24	1,01	2,44
2,3,5-TFFT	1,61	2,33	1,19	2,79	1,32	2,00
2,3,6-TFFT	1,66	1,85	1,71	3,49	0,91	3,43
2,4,5-TFFT	1,75	2,15	1,21	2,99	1,05	2,14
2,4,6-TFFT	1,94	1,49	1,94	3,95	0,61	3,80
3,4,5-TFFT	0,97	2,48	1,00	1,80	1,59	1,81
2,3,4,5-TFFT	1,49	1,95	1,12	2,94	1,10	2,12
2,3,4,6-TFFT	1,77	1,87	1,75	3,52	1,05	3,42
2,3,5,6-TFFT	1,96	1,62	1,88	3,77	0,67	3,64
2,3,4,5,6-FFFT	1,95	1,65	1,92	3,94	0,75	3,82

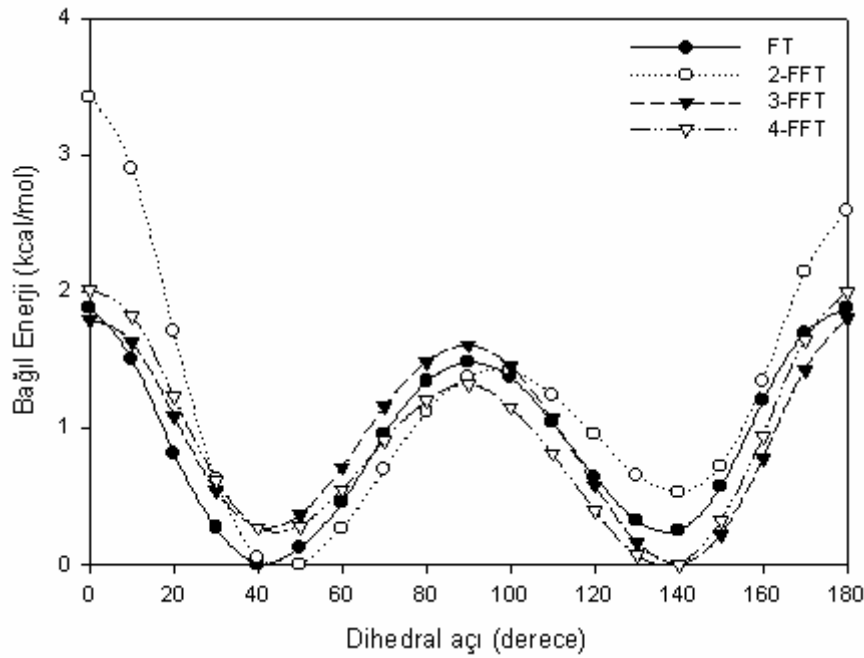
Flor atomlarının, moleküllerin her iki model ile hesaplanmış potansiyel enerji yüzeyleri üzerinde etkileri görüldü. Bu etkilerin flor atomlarının konumlarına ve sayılarına göre değiştiği Şekil 4.1-Şekil 4.8' den de anlaşılmaktadır. Örneğin fenil halkası üzerinde orto flor atomu bulunduran 2-FFT molekülünün

FT molekülüne göre her iki modelde de düzlemsel durumdaki bariyer yükseklikleri daha yüksek, ortogonal durumdaki bariyer yükseklikleri ise daha düşük olup, 2-FFT molekülünün düzlemsel durumdaki bariyer yükseklikleri birbirinden farklıdır (B3LYP de 0,43 kcal/mol HF da 0,83 kcal/mol). Fenil halkası üzerinde meta flor atomu bulunduran 3-FFT molekülünün FT molekülüne göre, her iki modelde de düzlemsel durumdaki bariyer yükseklikleri daha düşük, ortogonal durumdaki bariyer yükseklikleri ise daha yüksektir. Fakat 3-FFT molekülünün düzlemsel durumdaki bariyer yükseklikleri arasındaki fark 2-FFT' ye göre oldukça küçüktür (B3LYP de 0,05 kcal/mol HF da 0,01 kcal/mol). Fenil halkası üzerinde para flor atomu bulunduran 4-FFT molekülünün FT molekülüne göre her iki modelde de düzlemsel durumdaki bariyer yükseklikleri daha yüksek, ortogonal durumdaki bariyer yükseklikleri ise daha düşük olup 4-FFT molekülünün düzlemsel durumdaki bariyer yükseklikleri birbirinden farklıdır (B3LYP de 0,02 kcal/mol HF da 0,01 kcal/mol). Flor atomlarının, moleküllerin her iki model ile hesaplanmış potansiyel enerji yüzeyleri üzerindeki etkilerini bir genelleme yapacak olursak fenil halkası üzerinde orto flor atomu bulunduran moleküllerin düzlemsel durumdaki bariyer yükseklikleri daha yüksek, ortogonal durumdaki bariyer yükseklikleri ise daha düşüktür. (2,6-DFFT, 2,4-DFFT, 2,5-DFFT, 2,6-DFFT, 2,3,4-TFFT, 2,3,5-TFFT, 2,3,6-TFFT, 2,4,5-TFFT, 2,4,6-TFFT, 2,3,4,5-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT) ve fenil halkası üzerinde meta flor atomu bulunduran moleküllerin düzlemsel durumdaki bariyer yükseklikleri daha düşük, ortogonal durumdaki bariyer yükseklikleri ise daha yüksektir (3,5-DFFT, 3,4,5-TFFT).

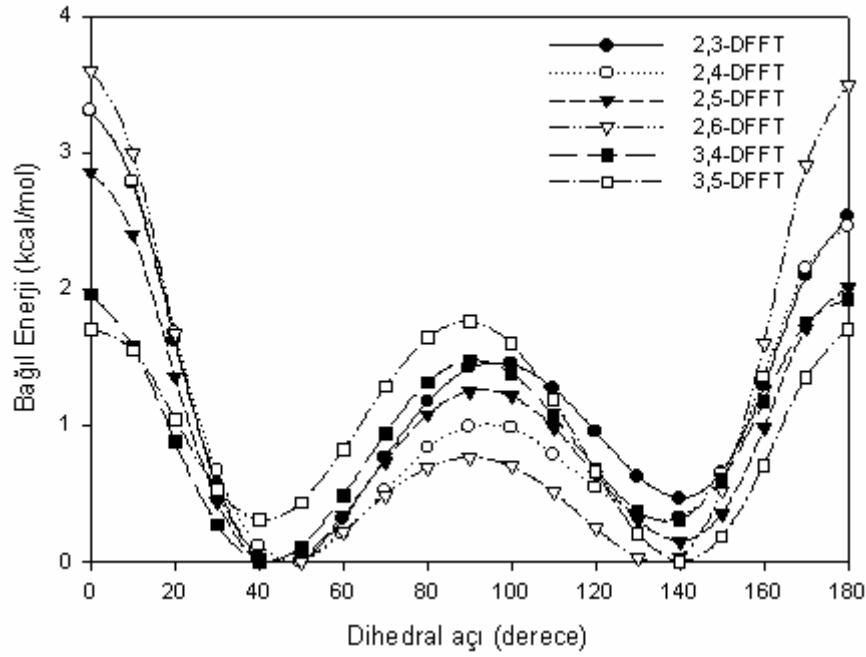
Fenil halkası üzerinde bir orto flor atomu bulunduran moleküllerin her iki modelde de düzlemsel durumdaki bariyer yükseklikleri bir birinden farklı olup syn-form durumlarının bariyer yükseklikleri anti-form durumlarının bariyer yüksekliklerinden daha büyüktür. Bunun nedeni ise syn-form durumundaki moleküllerin anti-form durumuna geçtiklerinde, flor atomu ile tiyofen halkası üzerinde bulunan kükürt atomu aynı tarafta bulunmaları olarak yorumlandı. Bu moleküllerin syn-form durumundaki sterik etkisi anti-form durumundaki

sterik etkiden daha kuvvetlidir. Yani flor atomu ve kükürt atomu aynı tarafta olduğu zaman bu moleküllerin denge durumu açıları da diğer denge durumu açısından daha küçüktür, bu da sterik etkinin bir sonucudur.

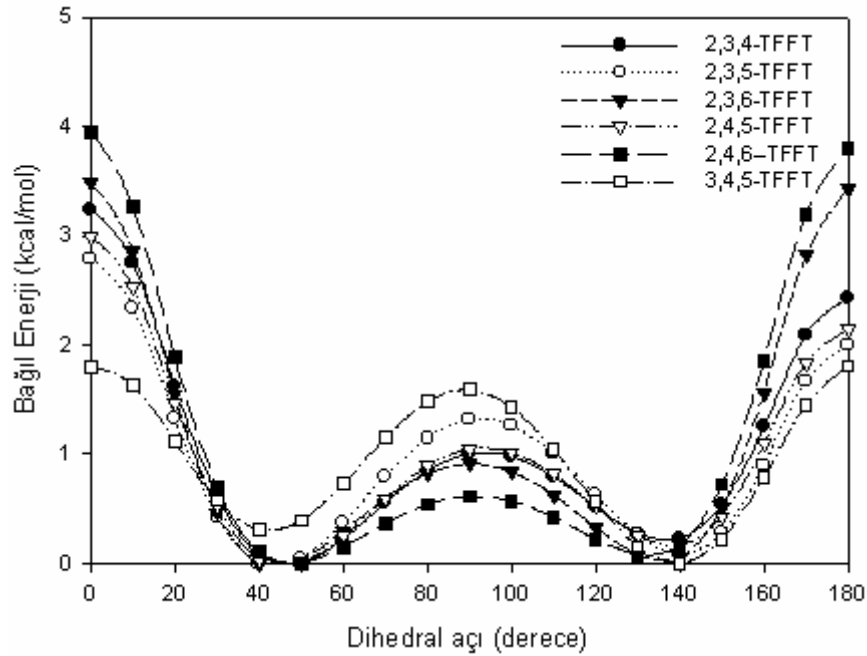
Ayrıca, B3LYP modelinde 2,3,4,5-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,6-TFFT ve 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerin düzlemsel durumdaki bariyer yüksekliklerinin ortogonal durumdaki bariyer yüksekliklerine oranı sırasıyla büyümektedir. Bunun nedeni ise flor atomlarının bağlı oldukları karbon atomları üzerindeki indüktif etkileri sonucu, fenil halkasındaki π -elektron konjugasyonunun zayıflaması olarak yorumlandı.



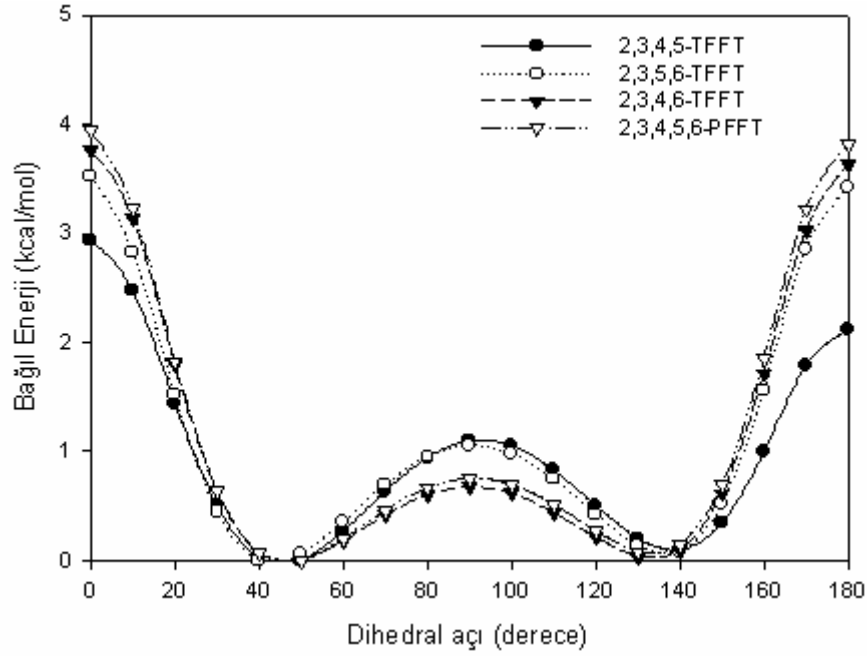
Şekil 4.1. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT, 4-FFT moleküllerin bağıl enerjilerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



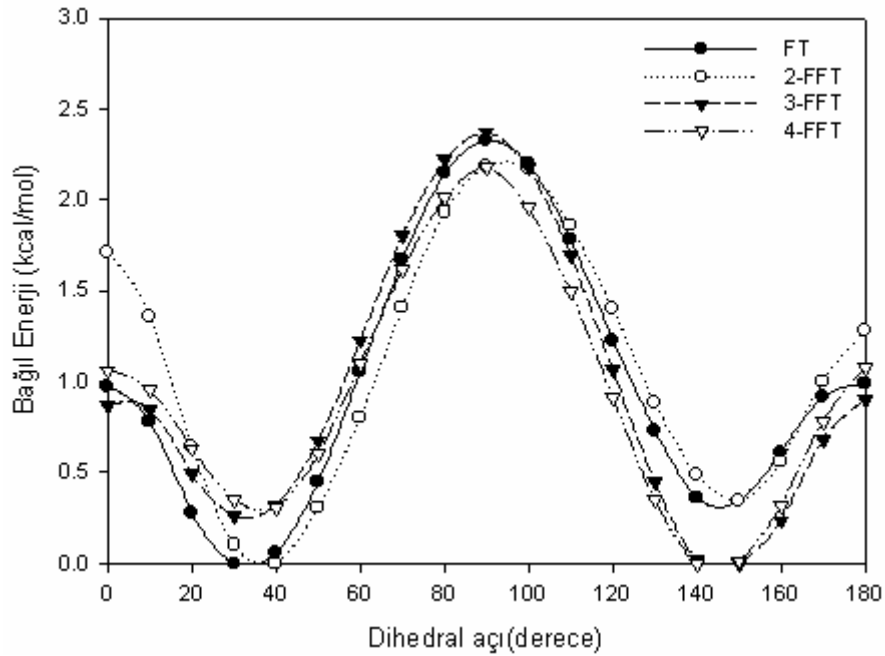
Şekil 4.2. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3-DFFT, 2,4-DFFT, 2,5-DFFT, 2,6-DFFT, 3,4-DFFT, 3,5-DFFT moleküllerinin bağıl enerjilerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



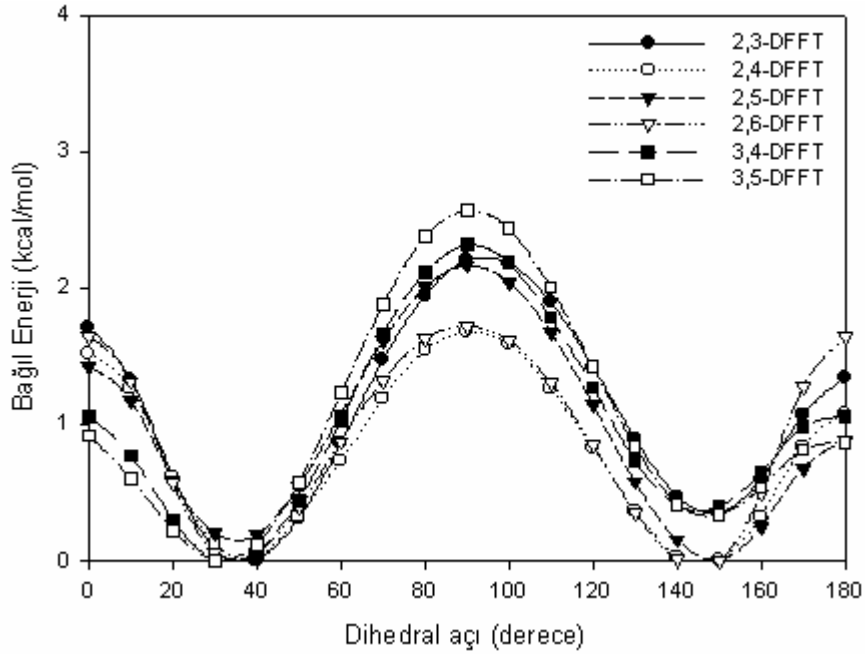
Şekil 4.3. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4-TFFT, 2,3,5-TFFT, 2,3,6-TFFT, 2,4,5-TFFT, 2,4,6-TFFT, 3,4,5-TFFT moleküllerinin bağıl enerjilerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



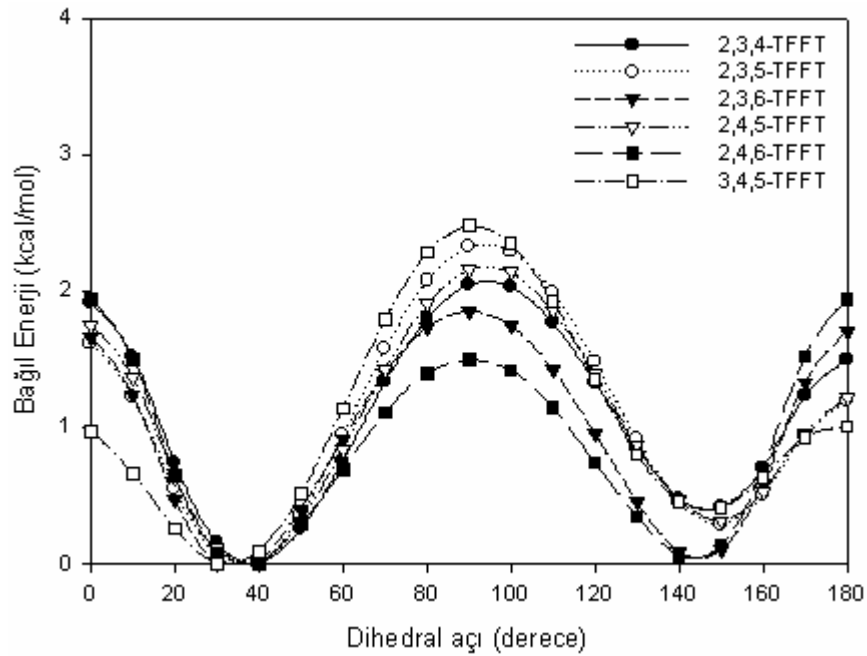
Şekil 4.4. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4,5-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerinin bağıl enerjilerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



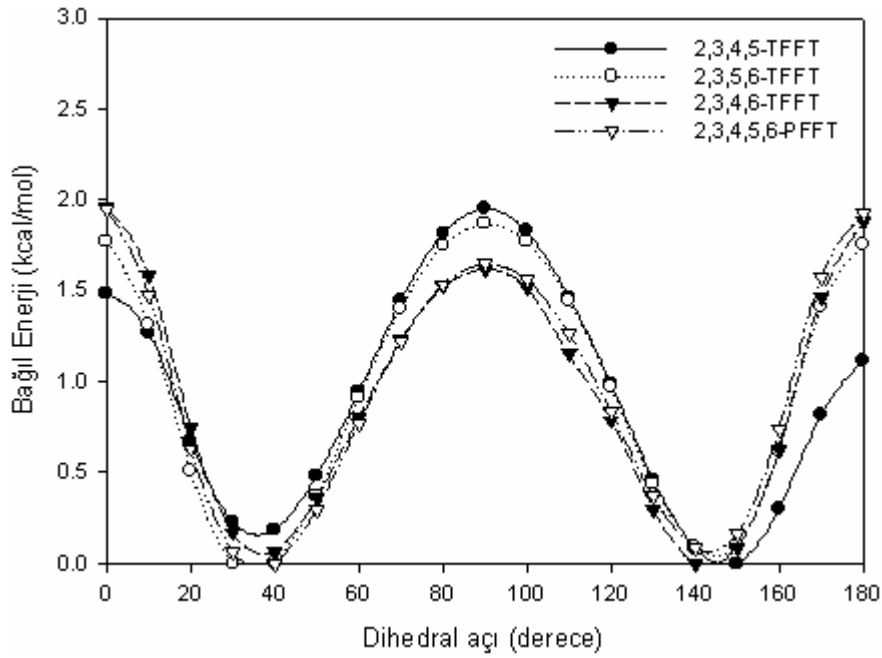
Şekil 4.5. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT, 4-FFT moleküllerinin bağıl enerjilerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.6. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3-DFFT, 2,4-DFFT, 2,5-DFFT, 2,6-DFFT, 3,4-DFFT, 3,5-DFFT moleküllerinin bağıl enerjilerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.7. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4-TFFT, 2,3,5-TFFT, 2,3,6-TFFT, 2,4,5-TFFT, 2,4,6-TFFT, 3,4,5-TFFT moleküllerinin bağıl enerjilerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.8. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4,5-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerin bağıl enerjilerinin dihedral açısıya bağlı olarak değişimi

4.3. HOMO-LUMO Enerji Farkları

HOMO; dolu olan en yüksek enerjili orbitali, LUMO; boş olan en düşük enerjili orbitali gösteren sembollerdir (bunlar orbitallerin İngilizce karşılığının baş harflerinden türetilmiştir). Moleküler orbital (MO); birden fazla atom veya molekülün etrafını saran orbitallerdir. Atomik orbitaller moleküler orbitalleri meydana getirirken, oluşan molekül orbitallerinin sayısı birleşen atomik orbitallerin sayısına eşittir. Moleküllerin polarizebilite değerleri ile HOMO-LUMO enerji farkları arasında karşılıklı bir ilişki vardır (77). Eğer bir molekülün HOMO-LUMO enerji farkları küçükse elektron dağılımı kolayca yönlendirilebilir ve polarlanma büyük olur, enerji farkları büyük olduğu durumlarda ise elektron dağılımı daha az değişir ve polarlanma düşük olur.

Çalışmanın bu kısmında, HF/6-31++G** modeli ve B3LYP/6-31++G** modelleri ile moleküllerin en yüksek dolu moleküler orbital ve en düşük boş

moleküler orbital enerjileri dihedral açının fonksiyonu olarak hesaplandıktan sonra (Eş. 3.4) ile LUMO-HOMO enerji farkı (ΔE) hesaplandı.

HF/6-31++G** modeli sonuçlarından hesaplanan HOMO-LUMO enerji farkları Şekil 4.9-Şekil 4.12 de ve B3LYP/6-31++G** modeli sonuçlarından hesaplanan HOMO-LUMO enerji farkları Şekil 4.13-Şekil 4.16'da verilmiştir. B3LYP modeli hesaplamalarında 2-FFT, 2,4-DFFT ve 2,3,4,5-TFFT molekülleri hariç her iki modelde de moleküllerin dihedral açığa bağlı davranışları aynı eğilimde olup 0°den 90° ye kadar enerji farkları artmakta 90° den 180° ye kadar ise azalmaktadır. Yani moleküllerin HOMO-LUMO enerji farklarının dihedral açığa bağlı olarak değişimleri, moleküllerin ortogonal durumlarında (90°) benzerdir. Bunun anlamı, molekülün düzlemsel durumdan (dihedral açı 0° ve 180° ye eşit) ortogonal duruma (dihedral açı 90° eşit) değiştiği zaman HOMO-LUMO enerji farklarının arttığı görülmektedir (Şekil 4.9-Şekil 4.16). B3LYP modeli hesaplamalarında 2-FFT, 2,4-DFFT ve 2,3,4,5-TFFT moleküllerinin HOMO-LUMO enerji farkları 80° lik durumda en büyük değere ulaşır.

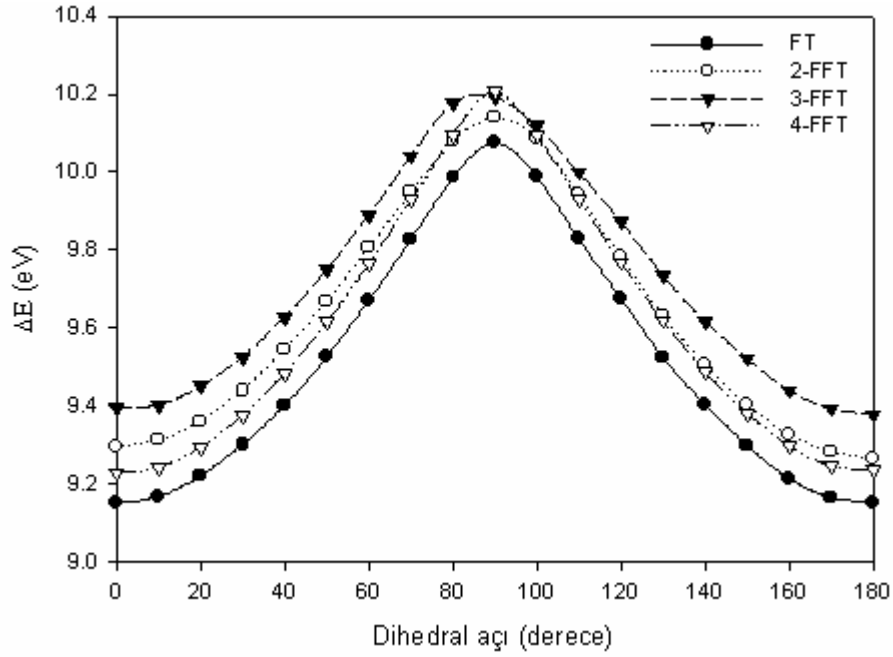
Fenil halkası üzerinde bir orto flor atomu bulunduran molekülleri her iki modelde de düzlemsel durumdaki HOMO-LUMO enerji farkları bir birinden farklı olup syn-form durumundaki bariyer yükseklikleri anti-form durumundaki bariyer yüksekliklerinden daha küçüktür. HF modeli hesaplamalarında flor atomlarının sayısı B3LYP modelinde ise konumu, HOMO-LUMO enerji farkı üzerinde küçük bir etkiye sahiptir.

Çalışılan moleküllerden literatürde yalnız FT molekülünün CNDO/2 yarı deneysel model ile HOMO LUMO enerjileri hesaplanmış olup sırası ile -0.402 ve 0.0684 a.u ($\Delta E=12.75$ eV) olarak verilmiştir (35). Diğer bir teorik çalışmada ise bu değerler sırasıyla -8.935 ve 1.146 eV olup ($\Delta E=10.08$ eV) olarak verilmiştir (34). RHF/3-21G(d) modelinde Tiyofen-fenil-tiyofen molekülünün HOMO-LUMO enerji farkı 10.2 eV olarak verilmiştir (75). Bizim çalışmamızda FT molekülü için HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan denge

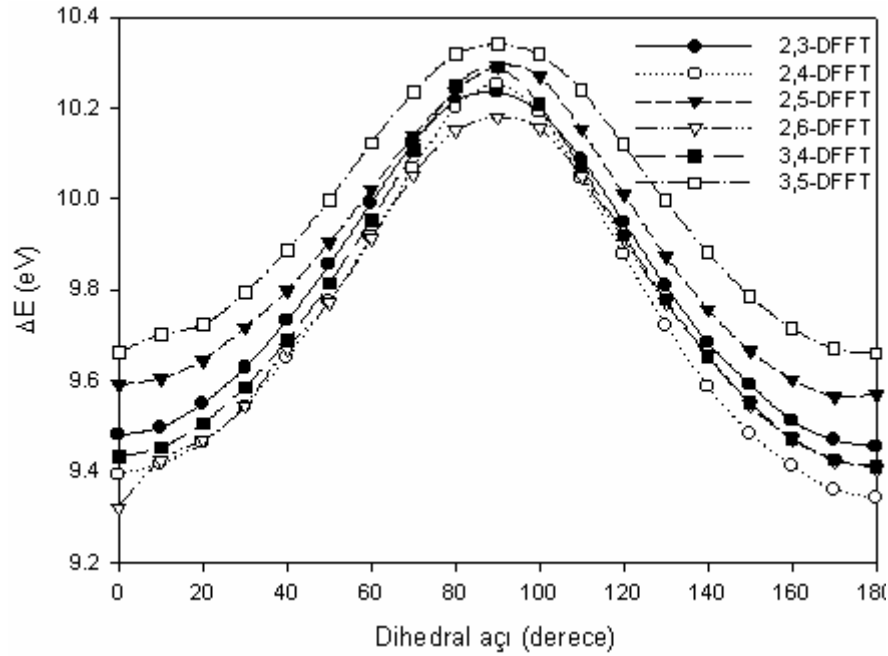
durumu HOMO-LUMO enerji farkı $\Delta E=9.43$ eV olarak bulunmuştur (Çizelge 4.2). Bu çalışmada elde edilen sonuç genel beklentiye uygun olup daha önce yapılan çalışmalardan daha küçüktür.

Para-feniltiyofen dimer ile yapılan B3LYP/6-31G* modellenli teorik çalışmada enerji farkı $\Delta E=4,84$ eV olarak verilmiştir (71). Bizim çalışmamızda FT molekülü için B3LYP/6-31++G** modellenli ile $\Delta E=5,11$ eV hesaplanmıştır. Para-feniltiyofen dimerinde bu değerin daha düşük çıkması beklenen bir sonuçtur, çünkü bir molekülde konjuge bağları arttıkça moleküler enerji farkı azalır (78). Alguno ve arkadaşlarının bitiyofen monomer ve dimerleri ile ilgili yaptıkları teorik çalışmada HOMO–LUMO enerji farklarını monomer için RHF/6-31+G modellenli ile $\Delta E=11,43$ eV, B3LYP/CEP-31+G modellenli ile $\Delta E=5,83$ eV, dimerde ise RHF/6-31+G modellenli ile $\Delta E=9,52$ eV, B3LYP/CEP-31+G modellenli ile $\Delta E=4,41$ eV, RHF/6-31G** modellenli ile $\Delta E=12,67$ eV, B3LYP/6-31G** modellenli ile $\Delta E=6,12$ eV, dimerde ise RHF/6-31G** modellenli ile $\Delta E=10,15$ eV ve B3LYP/6-31G** modellenli ile $\Delta E=4,27$ eV hesaplamışlardır (79). Aynı çalışmada bu moleküller için HOMO-LUMO enerji farkları deneysel olarak sırasıyla $\Delta E=5,23$ ve $\Delta E=4,05$ eV olarak verilmiştir (79). Bu çalışmadan da görüldüğü gibi HOMO-LUMO enerji farklarını teorik çalışmalarda B3LYP modellenli deneysel değerlere daha yakın vermektedir. HF modellenli korelasyon katkısını içermediğinden HOMO-LUMO enerji farklarını daha yüksek hesaplamaktadır.

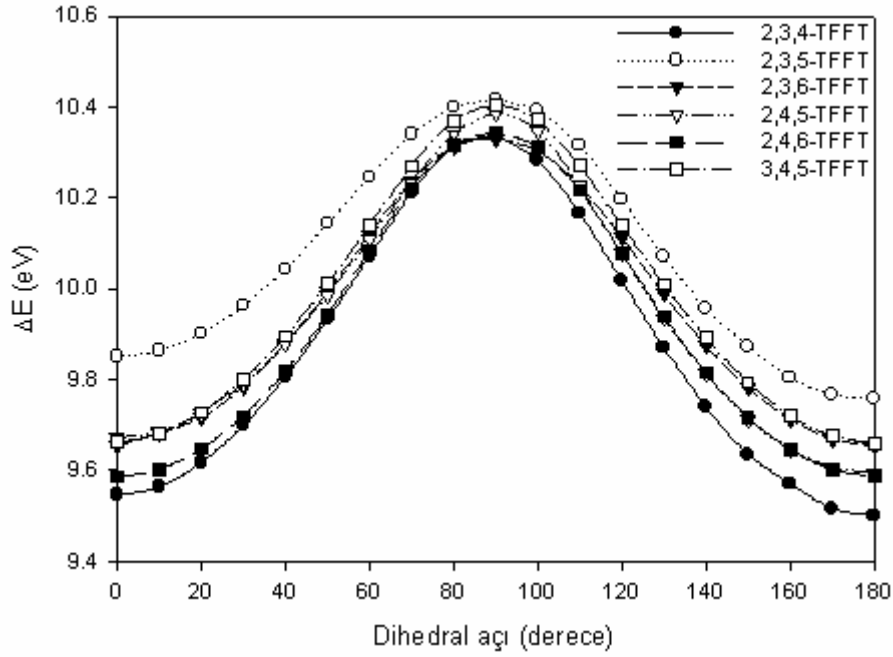
Literatürde daha önce yapılan çalışmalardan HOMO-LUMO enerji farkı için B3LYP metodunun daha iyi sonuçlar verdiği bilinmektedir. HF ve MP2 metotları her zaman için bu enerji farkını beklenenden daha büyük olarak hesaplamaktadır (71).



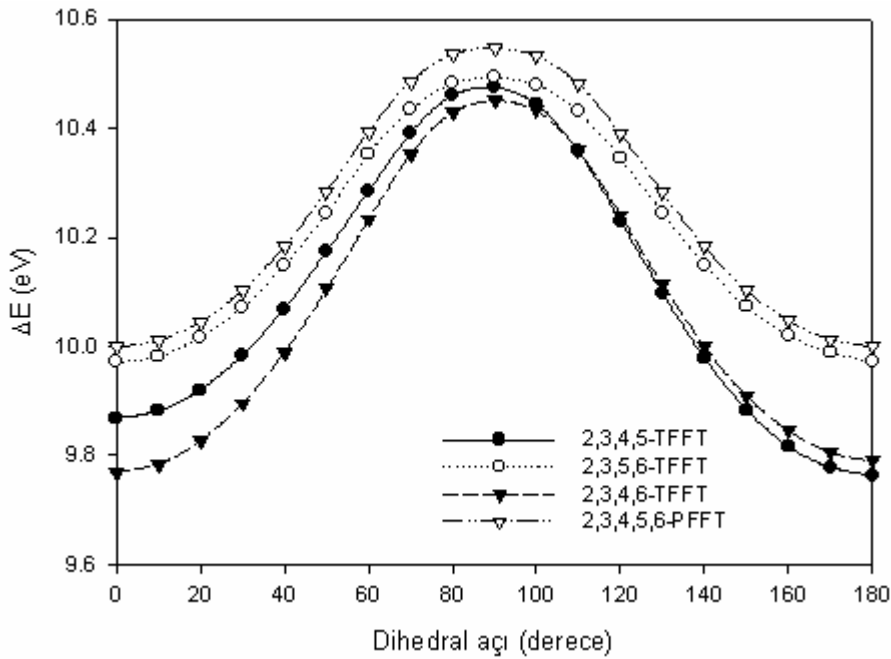
Şekil 4.9. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT, 4-FFT moleküllerin HOMO-LUMO enerji farklarının dihedral açığa bağlı olarak değişimi



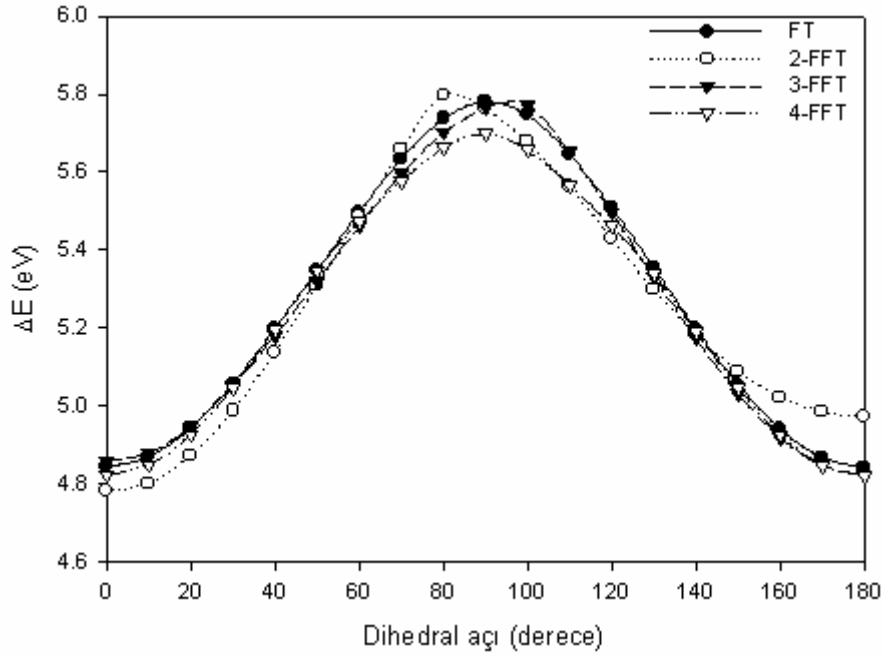
Şekil 4.10. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3-DFFT, 2,4-DFFT, 2,5-DFFT, 2,6-DFFT, 3,4-DFFT, 3,5-DFFT moleküllerin HOMO-LUMO enerji farklarının dihedral açığa bağlı olarak değişimi



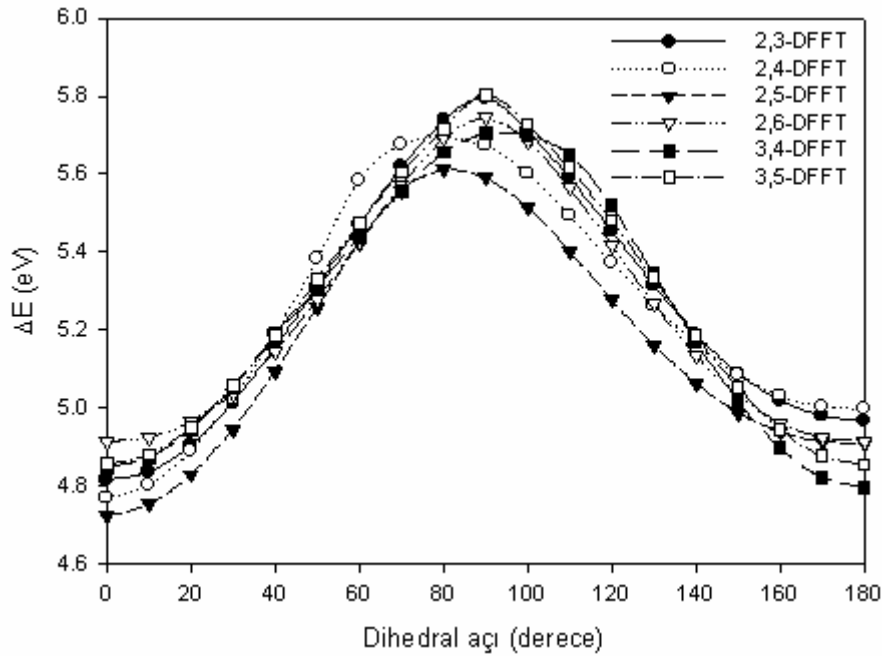
Şekil 4.11. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4-TFFT, 2,3,5-TFFT, 2,3,6-TFFT, 2,4,5-TFFT, 2,4,6-TFFT, 3,4,5-TFFT moleküllerin HOMO-LUMO enerji farklarının dihedral açığa bağlı olarak değişimi



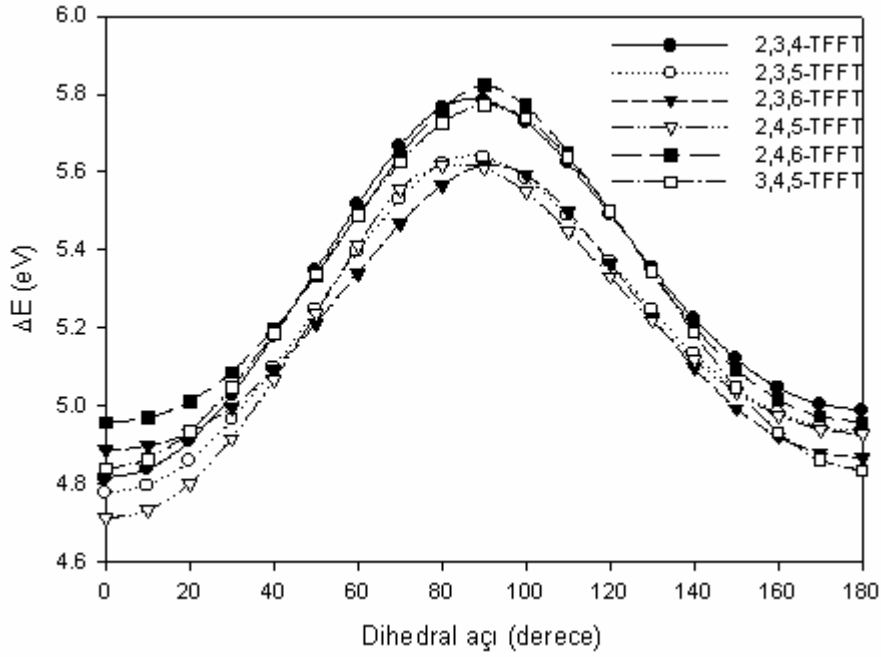
Şekil 4.12. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4,5-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerin HOMO-LUMO enerji farklarının dihedral açığa bağlı olarak değişimi



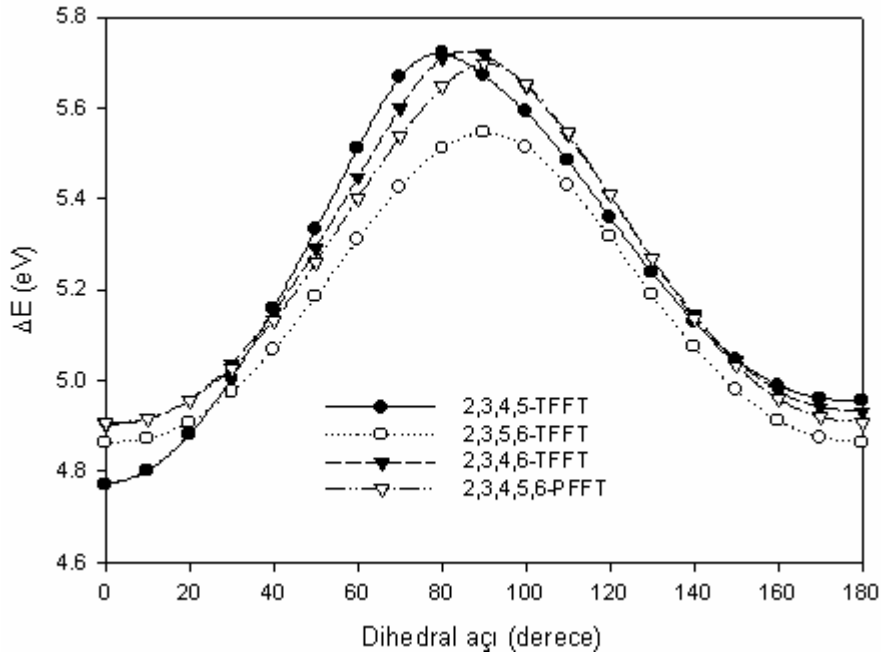
Şekil 4.13. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT, 4-FFT moleküllerin HOMO-LUMO enerji farklarının dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.14. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3-DFFT, 2,4-DFFT, 2,5-DFFT, 2,6-DFFT, 3,4-DFFT, 3,5-DFFT moleküllerin HOMO-LUMO enerji farklarının dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.15. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4-TFFT, 2,3,5-TFFT, 2,3,6-TFFT, 2,4,5-TFFT, 2,4,6-TFFT, 3,4,5-TFFT moleküllerin HOMO-LUMO enerji farklarının dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.16. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4,5-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerin HOMO-LUMO enerji farklarının dihedral açığa bağlı olarak değişimi

4.4. İndüklenmiş Dipol Moment

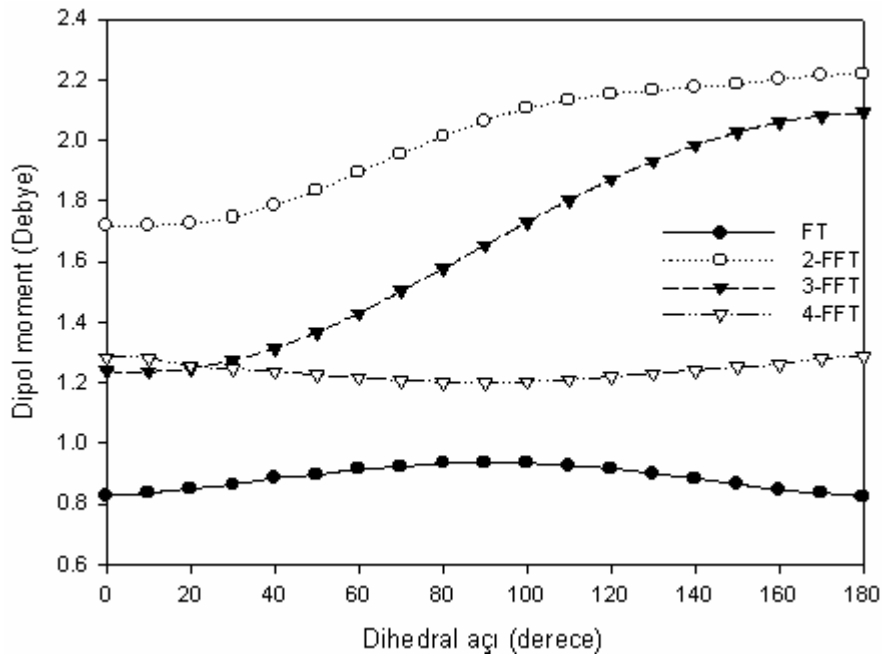
Çalıştığımız bütün moleküllerin indüklenmiş dipol momentlerinin dihedral açıya bağlılığı HF/6-31++G** ve B3LYP/6-31++G** modelleri ile hesaplandı (Şekil 4.17-Şekil 4.24). Florlu FT moleküllerinin indüklenmiş dipol momentleri üzerinde flor atomlarının sayısı ve konumlarına göre etkileri incelendi. Flor atomlarının sayısına karşılık konumlarının daha etkili olduğu şekillerden de görülmektedir. Çünkü dipol moment moleküler sistemlerde bireysel dipol momentlerin vektörel toplamıdır. Moleküllerde farklı elektronegatifliğe sahip atomlar kovalent bir bağ oluşturduğundan, elektronlar bu atomlar arasında eşit olarak paylaşılmaz. Elektronegatifliği büyük olan flor atomu elektron çiftini kendine doğru çeker ve bir polar kovalent bağ oluşturur. Böyle bir bağın oluşumu sonucu elektronegatifliği büyük olan flor atomu kısmî negatif yüke (δ^-) ve elektronegatifliği küçük olan karbon atomları kısmî pozitif (δ^+) yüke sahip olacaklardır. Buna karşılık hidrojen ve karbon atomlarının yaptıkları kovalent bağlar daha az polar olurlar ve bundan dolayı moleküllerin dipol momentleri üzerinde flor atomunun etkisi daha baskındır. Bu etki Liu ve arkadaşlarının Florlu phenylbisiklohexzan molekülü ile yaptıkları çalışmada verilmiştir (80).

Çalışmamızda moleküllerin her iki model ile hesaplanan indüklenmiş dipol momentlerinin dihedral açının fonksiyonu olarak davranışları aynı eğilimdedir. FT, 4-FFT, 3,5-DFFT, 2,4,6-TFFT ve 2,3,4,5,6-PFFT molekülleri her iki hesaplama modelinde de indüklenmiş dipol momentlerinin dihedral açıya karşılık değişimleri kararlı bir davranış gösterdiler. Yani 4-FFT molekülünün syn-form, ortogonal ve anti-form durumlarındaki HF modeli hesaplamalarında indüklenmiş dipol momentlerinin sırasıyla 1,28, 1,20 ve 1,29 D, B3LYP de ise bu değerler sırasıyla 1,52, 1,34 ve 1,50 D'dir. Her iki modelde en büyük indüklenmiş dipol moment değerine (B3LYP/6-31++G(d,p) modelinde 3,43 D, HF/6-31++G(d,p) modelinde 3,33 D) 3,4,5-TFFT molekülü, en küçük indüklenmiş dipol moment değerine (B3LYP/6-31++G(d,p) modelinde 0,41 D,

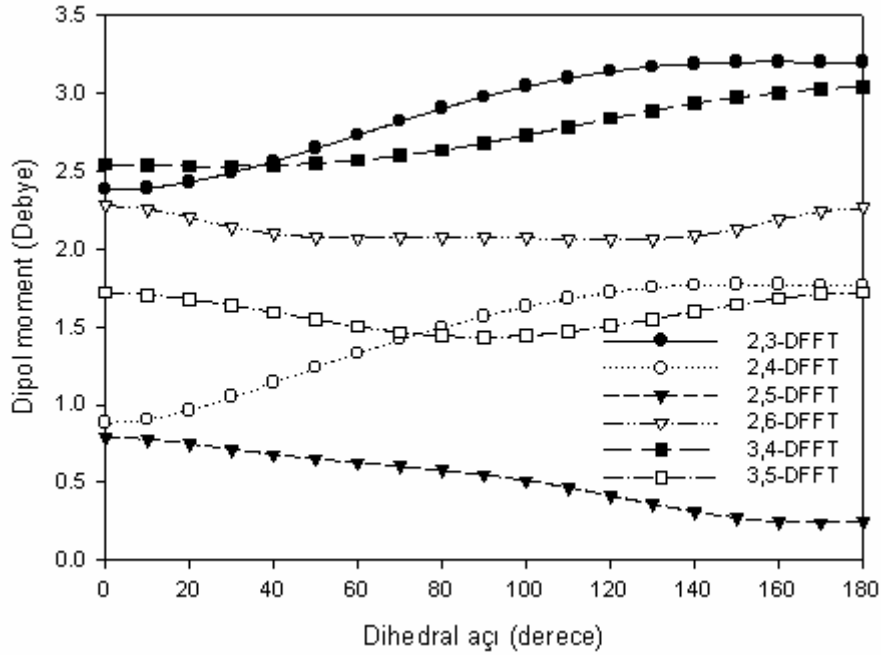
HF/6-31++G(d,p) modelinde 0,45 D) ise 2,4,6-TFFT molekülünün sahip olduğu görülmektedir (Şekil 4.19, Şekil 4.23). Flor atom sayısının aynı olduğu moleküller arasında indüklenmiş dipol momentler arasındaki bu fark flor atomlarının fenil halkası üzerinde farklı konumda olmasından kaynaklanmaktadır.

2,5-DFFT ve 2,3,4,6-TFFT moleküllerinin indüklenmiş dipol moment hesaplarında dihedral açı arttığı zaman (0 dan 180° kadar) indüklenmiş dipol moment değerlerinin küçüldüğü görüldü.

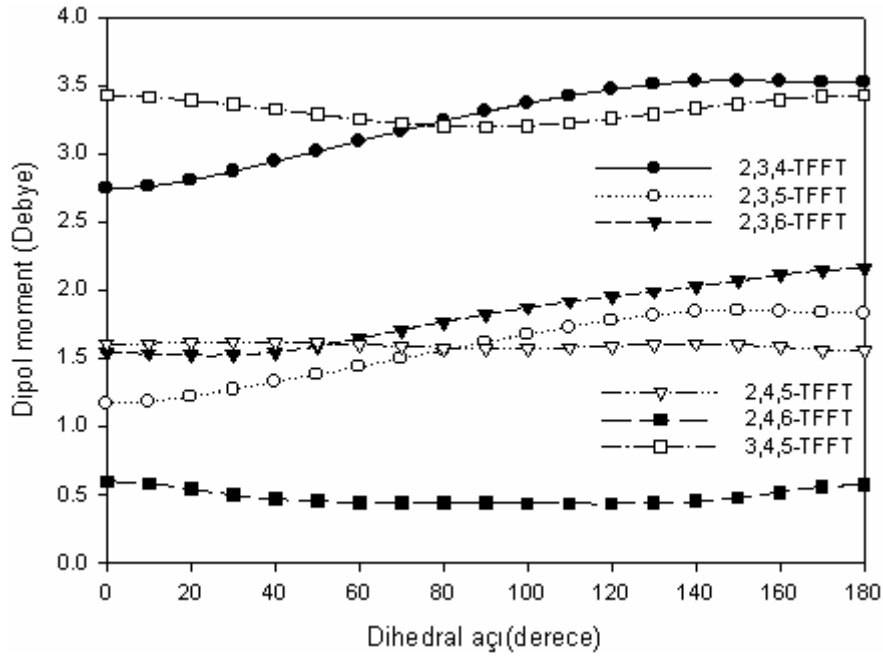
Çalıştığımız moleküllerden literatürde yalnız FT molekülünün teorik olarak dipol moment değeri 0,89 D, deneysel olarak da 0,49 ve 0,80 D olduğunu verilmiştir (34). Bu molekül için HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan dipol moment değerleri 0.89 D (Çizelge 4.4) literatür ile uyum içersindedir.



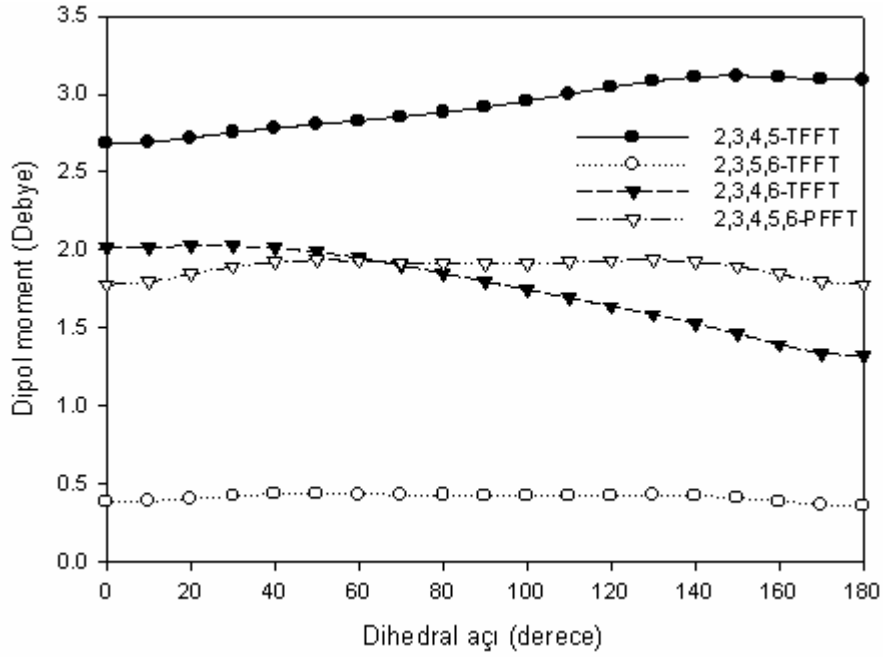
Şekil 4.17. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT, 4-FFT moleküllerin dipol momentlerinin dihedral açıya bağlı olarak değişimi



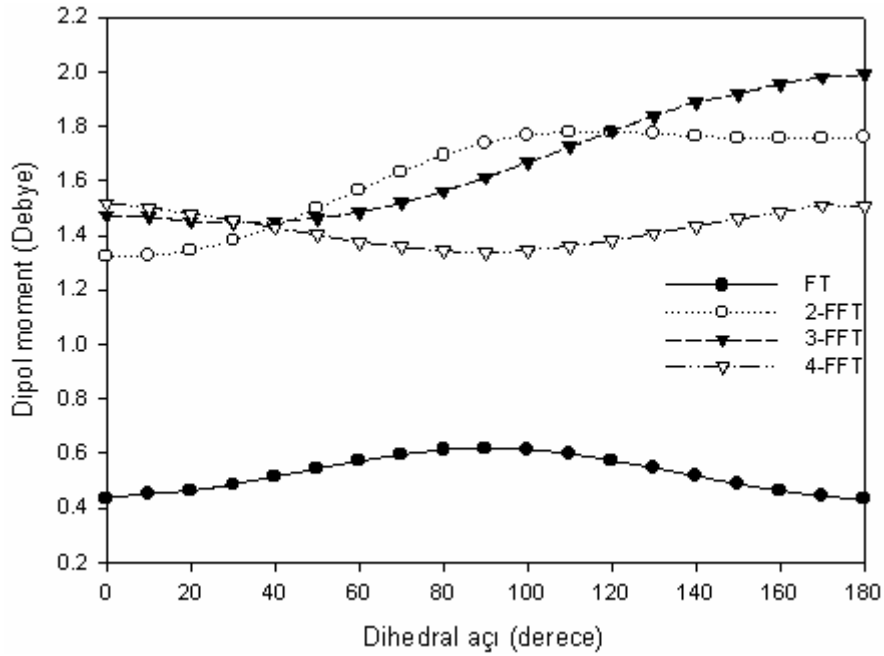
Şekil 4.18. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3-DFFT, 2,4-DFFT, 2,5-DFFT, 2,6-DFFT, 3,4-DFFT, 3,5-DFFT moleküllerin dipol momentlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



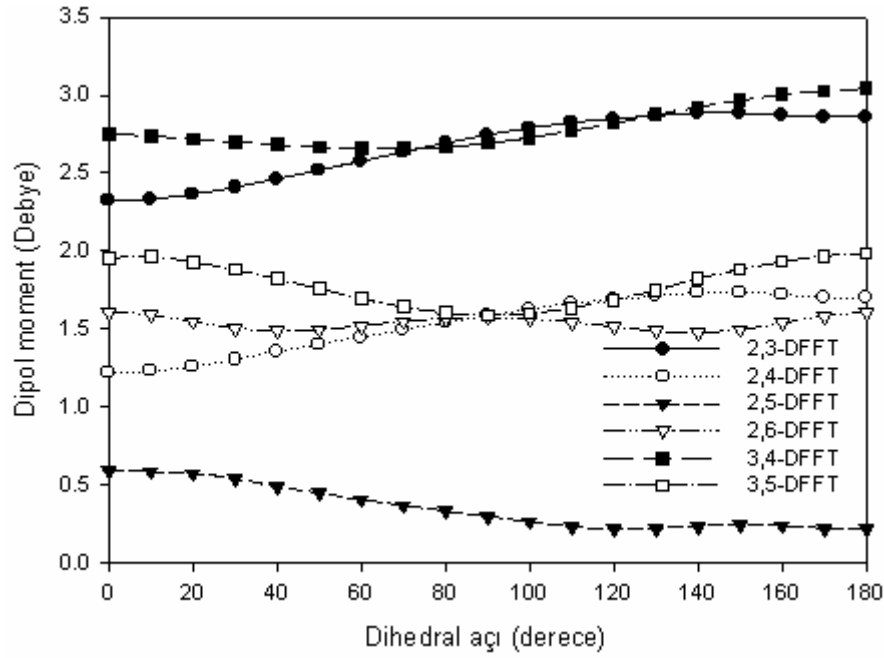
Şekil 4.19. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 3,4,6-TFFT, 2,4,6-TFFT, 3,4,5-TFFT, 4,5,6-TFFT, 3,5,6-TFFT, 2,5,6-TFFT moleküllerin dipol momentlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



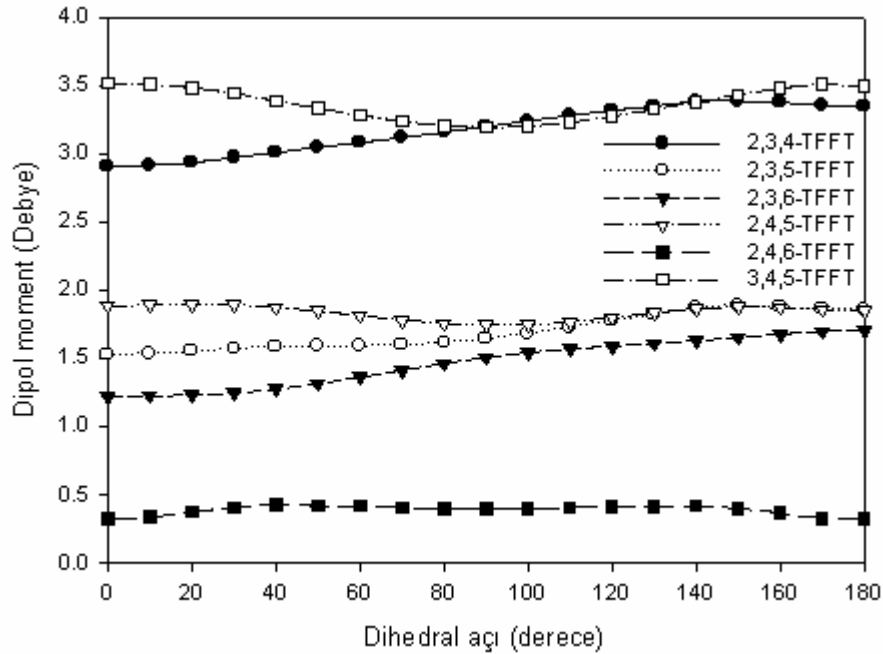
Şekil 4.20. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4,5-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerin dipol momentlerinin dihedral aç (derece) olarak değışimi



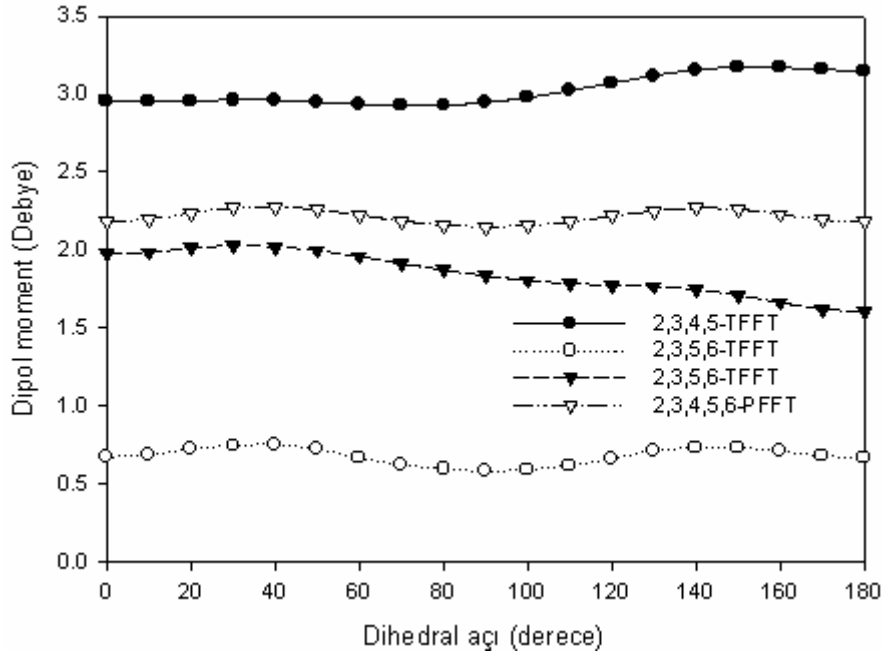
Şekil 4.21. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT, 4-FFT moleküllerin dipol momentlerinin dihedral aç (derece) olarak değışimi



Şekil 4.22. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3-DFFT, 2,4-DFFT, 2,5-DFFT, 2,6-DFFT, 3,4-DFFT, 3,5-DFFT moleküllerin dipol momentlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.23. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4-TFFT, 2,3,5-TFFT, 2,3,6-TFFT, 2,4,5-TFFT, 2,4,6-TFFT, 3,4,5-TFFT moleküllerin dipol momentlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.24. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4,5-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerin dipol momentlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi

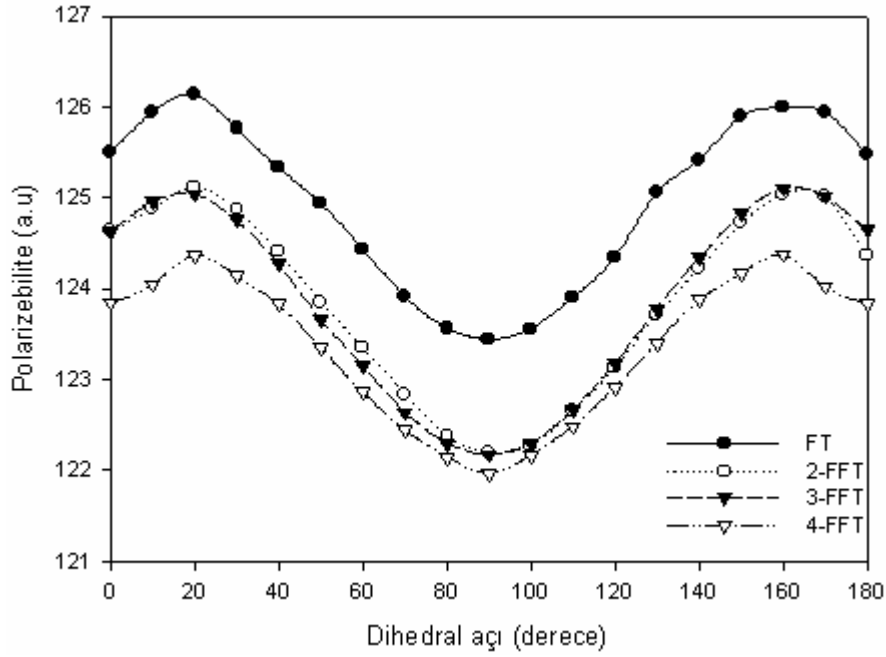
4.5. Polarizebilite ve Anizotropik Polarizebilite

Bir molekülün polarizebilitesi, molekülün dipol momentinin uygulanan elektrik alana gösterdiği doğrusal tepki olarak tanımlanır. Polarizebilite molekül sisteminin yük yoğunluğu ve elektronik dağılımı gibi özelliklerinin bir ölçüsü olduğundan, moleküler optik ve spektroskopide kullanılan önemli bir niceliktir. Elektrik alana maruz bırakılan bir molekülün şeklindeki değişim polarizebilite ile belirlenir. Molekülün biçimsel bakımdan bozulması uygulanan alanın yönünden bağımsızsa bu polarizebilite izotropik, değilse anizotropik olarak bilinir.

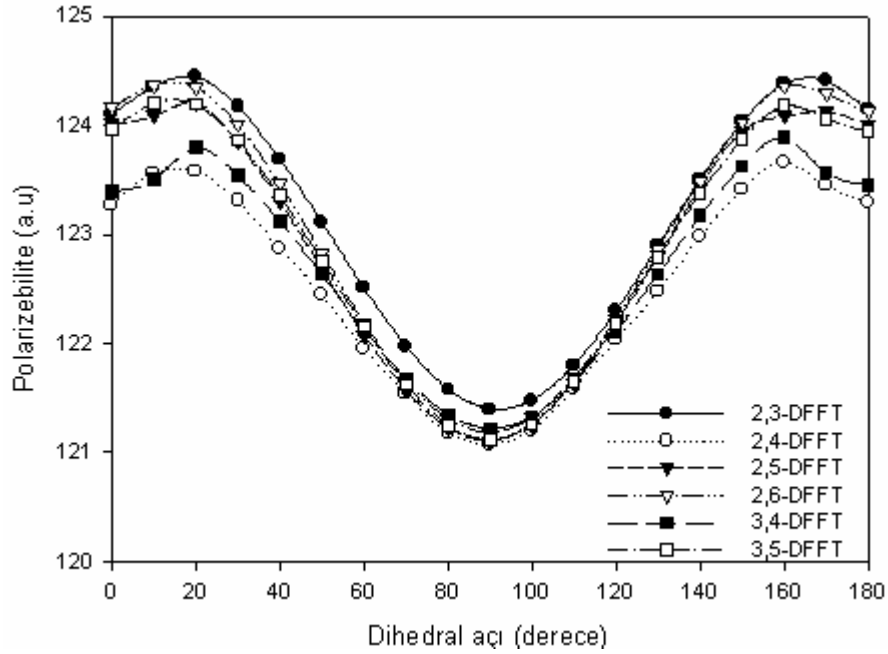
Bu moleküllerin polarizebilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimleri HF/6-31++G** ve B3LYP/6-31++G** modelleri ile hesaplandı (Şekil 4.25-Şekil 4.32). Moleküllerin anizotropik polarizabilite değerleri HF modeli için Eş. 3.3 kullanılarak hesaplandı (Şekil 4.33-Şekil 4.36).

Hesaplamalarda bütün moleküllerin polarizabilite ve anizotropik polarizabilite değerlerinin dihedral açığa göre değişimi aynı eğilimde olup, moleküllerin bu değerleri ortogonal durumlarında (90°) benzerdir. HF modelinde FT, 2-FFT, 3-FFT ve 4-FFT moleküllerinin polarizabilite değerleri yaklaşık 20° ve 160° civarlarında maksimum değere, 90° civarlarında ise minimum değere sahip oldukları, diğer moleküllerin maksimum değerlerinin yaklaşık 10° ve 170° civarlarında görülmektedir. Anizotropik polarizabilite ise moleküllerin syn-form ve anti-form durumlarında en büyük değere, 90° durumlarında en düşük değere sahiptir.

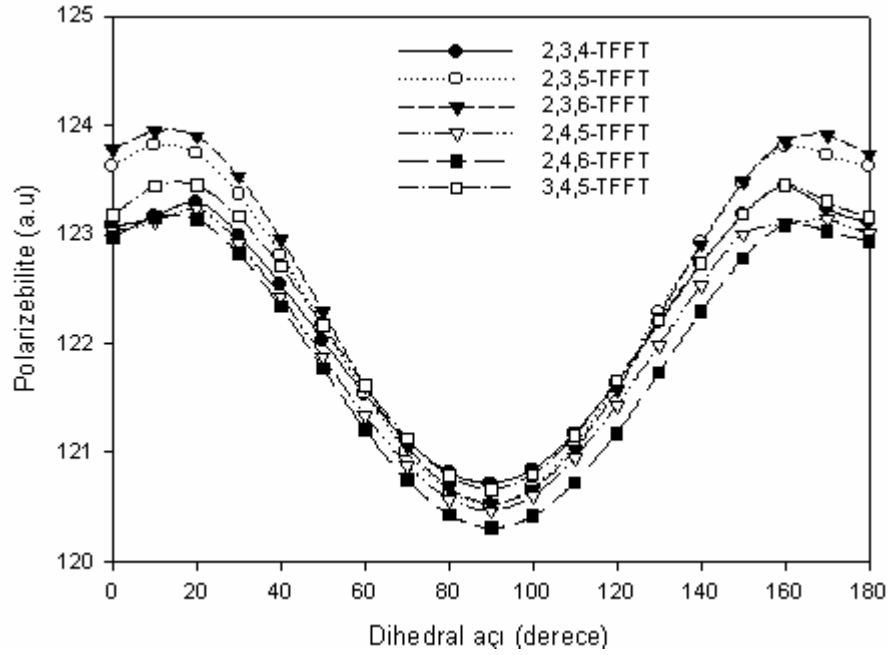
Çalışmamızda polarizebilite değerlerinin dihedral açığa göre değişimi ile HOMO-LUMO enerji farklarının dihedral açığa göre değişimi arasında ters bir orantı olduğu görüldü. Bu ters orantı literatürdeki çalışmalarla uyum içindedir (77). Fenil ve tiyofen halkalarında düzlemsel durumda oluşan π -bağlarının etkileştiği, 90° durumunda etkileşmediği bilinmektedir. Statik hiperpolarizebilite hesaplama sonuçlarında moleküllerin açığa bağlı olarak değişimleri, moleküller arasında farklılık göstermekle birlikte fenil halkasına bağlanan flor atomlarının konumları etkili olmaktadır. Fenil halkasındaki para ve meta flor atomlarının bulunduğu moleküllerde (4-FFT, 4,5-DFFT, 3,4,5,6-TFFT gibi) genellikle 0° den 90° ye kadar statik hiperpolarizebilite artmakta, 90° den 180° ye kadar azalmaktadır ve 3-feniltiyofen ile birlikte flor atomlarının orto konumunda bulunduğu moleküllerde (6-FFT, 2,6-DFFT) ise, bunun tersi olup 0° den 90° ye kadar statik hiperpolarizebilite azalmakta, 90° den 180° ye kadar artmaktadır. Yalnız meta konumunda flor atomları bulunduran 3,6-DFFT ve meta ve orta konumunda flor atomları bulunduran 2,3,5,6-TFFT molekülleri 0° den 60° ve 90° den 120° kadar azalmakta 60° den 90° ye ve 120° den 180° ye kadar statik hiperpolarizebilite değerleri artmaktadır.



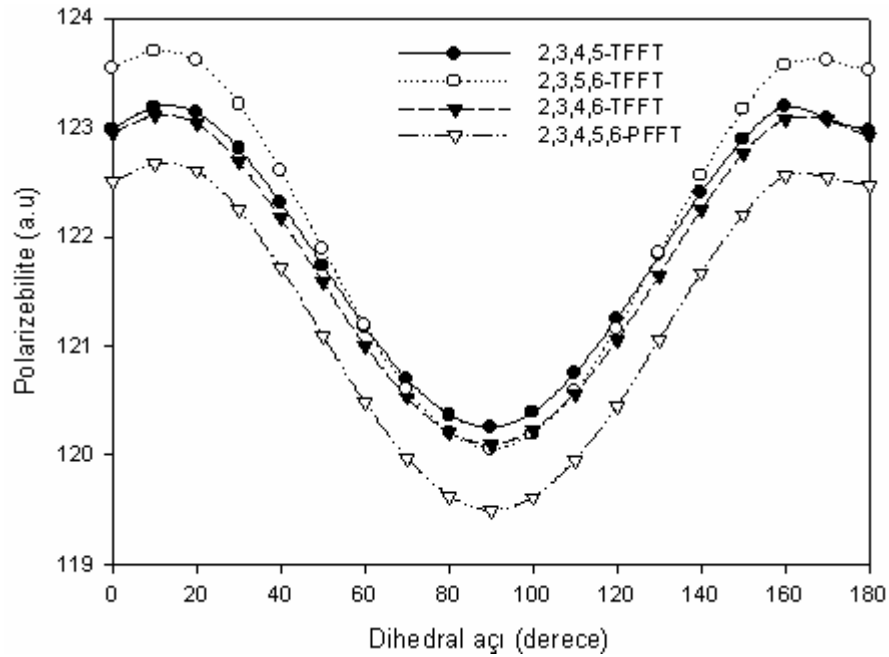
Şekil 4.25. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT, 4-FFT moleküllerin polarizabilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



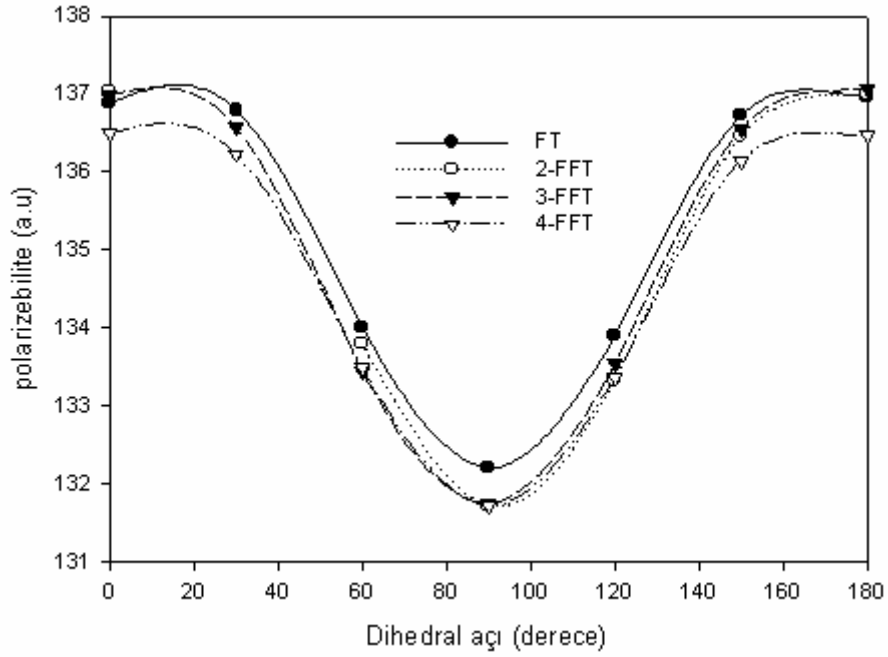
Şekil 4.26. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3-DFFT, 2,4-DFFT, 2,5-DFFT, 2,6-DFFT, 3,4-DFFT, 3,5-DFFT moleküllerin polarizabilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



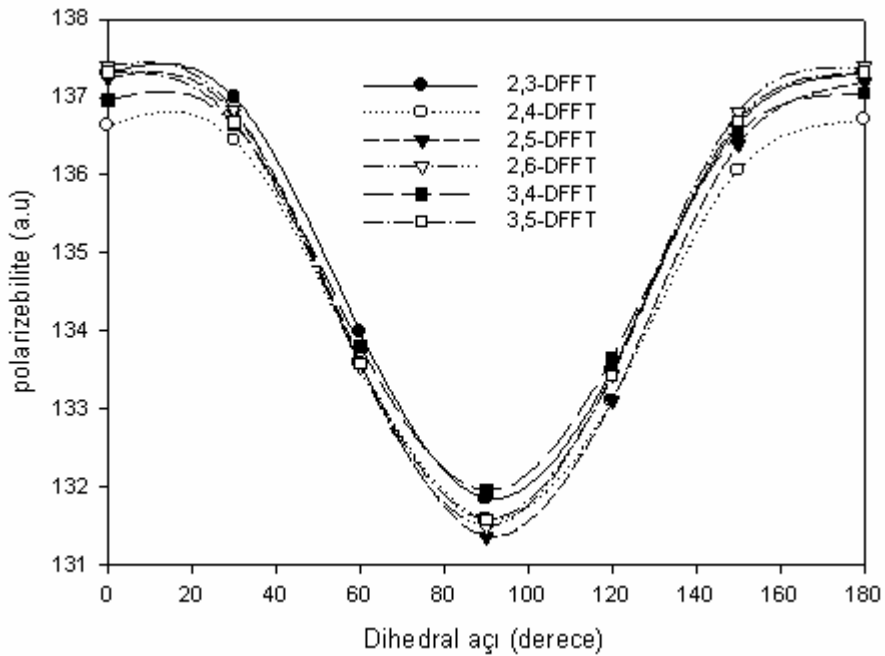
Şekil 4.27. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4-TFFT, 2,3,5-TFFT, 2,3,6-TFFT, 2,4,5-TFFT, 2,4,6-TFFT, 3,4,5-TFFT moleküllerin polarizebilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



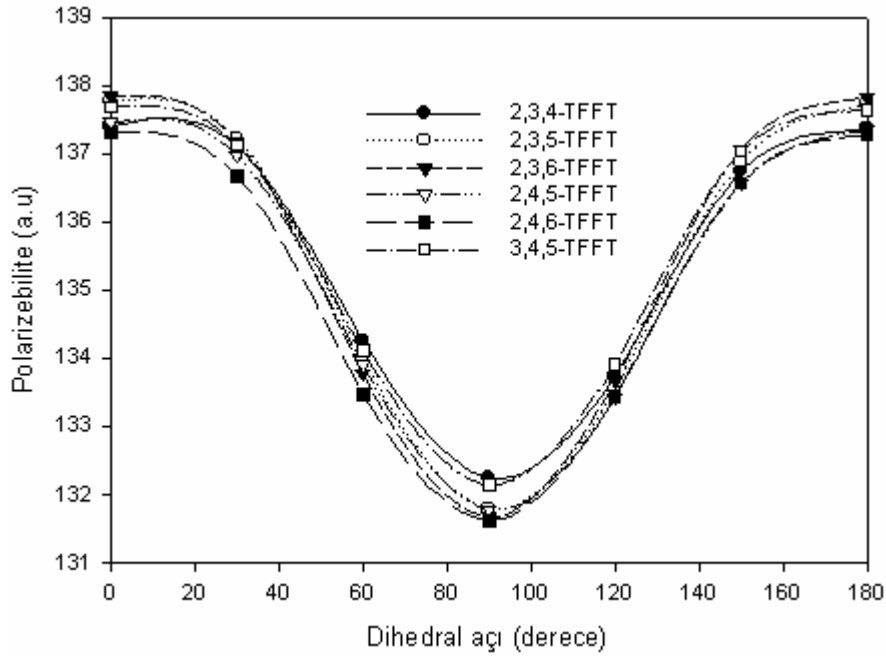
Şekil 4.28. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4,5-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerin polarizebilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



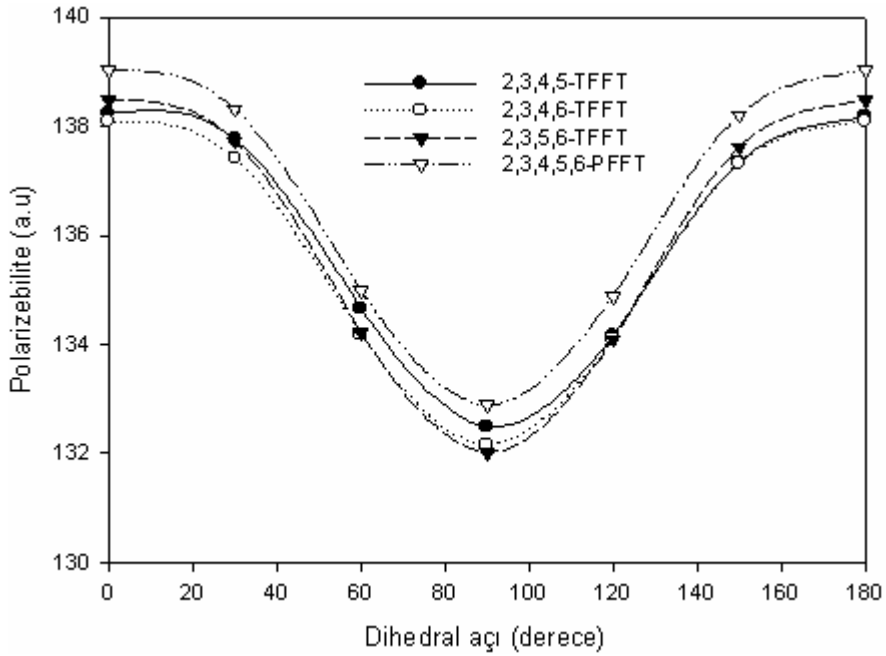
Şekil 4.29. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT, 4-FFT moleküllerin polarizabilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



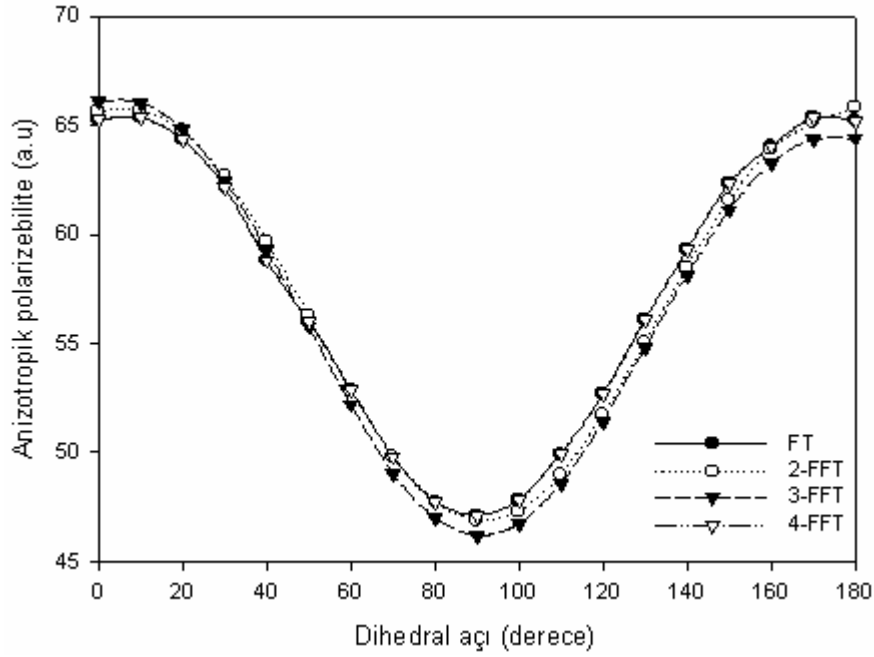
Şekil 4.30. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3-DFFT, 2,4-DFFT, 2,5-DFFT, 2,6-DFFT, 3,4-DFFT, 3,5-DFFT moleküllerin polarizabilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



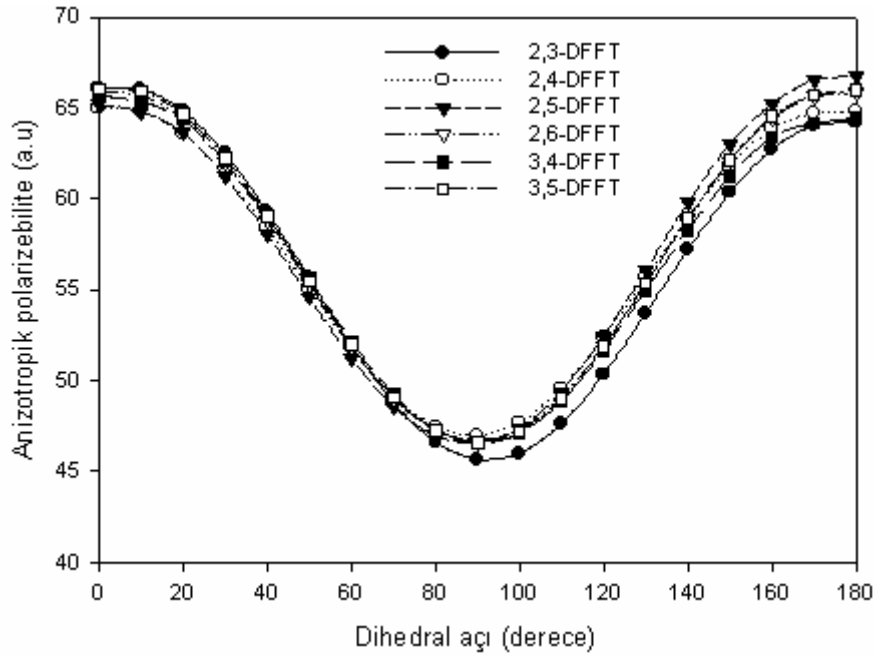
Şekil 4.31. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4-TFFT, 2,3,5-TFFT, 2,3,6-TFFT, 2,4,5-TFFT, 2,4,6-TFFT, 3,4,5-TFFT moleküllerinin polarizebilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



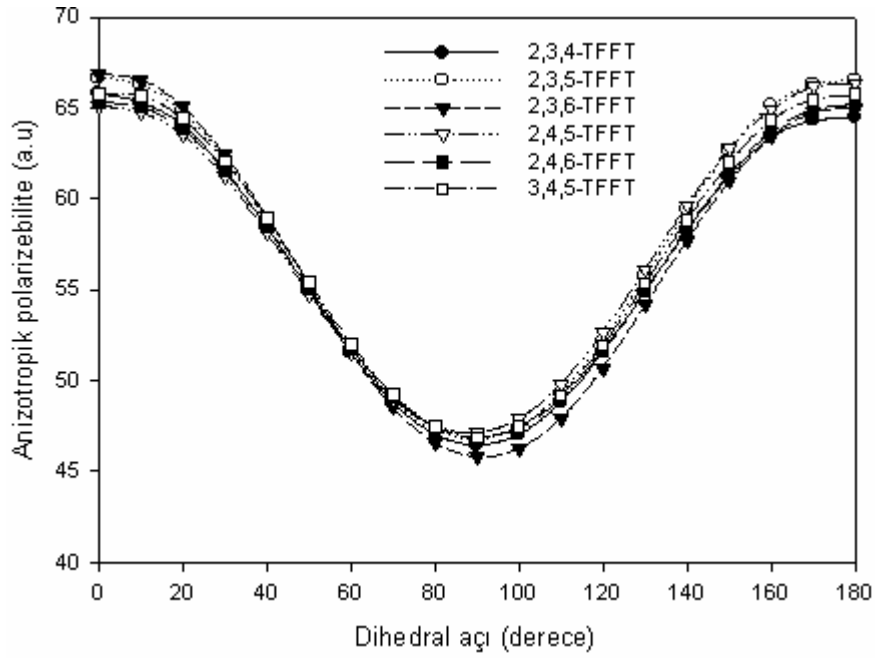
Şekil 4.32. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4,5-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerinin polarizebilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



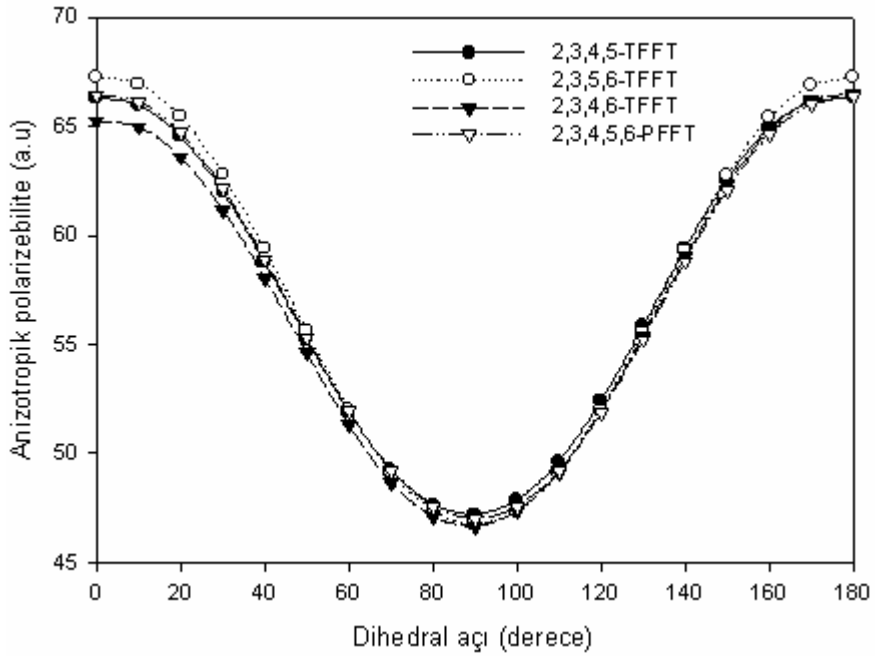
Şekil 4.33. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT, 4-FFT moleküllerin anizotropik polarizabilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.34. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3-DFFT, 2,4-DFFT, 2,5-DFFT, 2,6-DFFT, 3,4-DFFT, 3,5-DFFT moleküllerin anizotropik polarizabilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.35. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4-TFFT, 2,3,5-TFFT, 2,3,6-TFFT, 2,4,5-TFFT, 2,4,6-TFFT, 3,4,5-TFFT moleküllerinin anizotropik polarizabilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.36. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4,5-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerinin anizotropik polarizabilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi

4.6. Hiperpolarizebilite

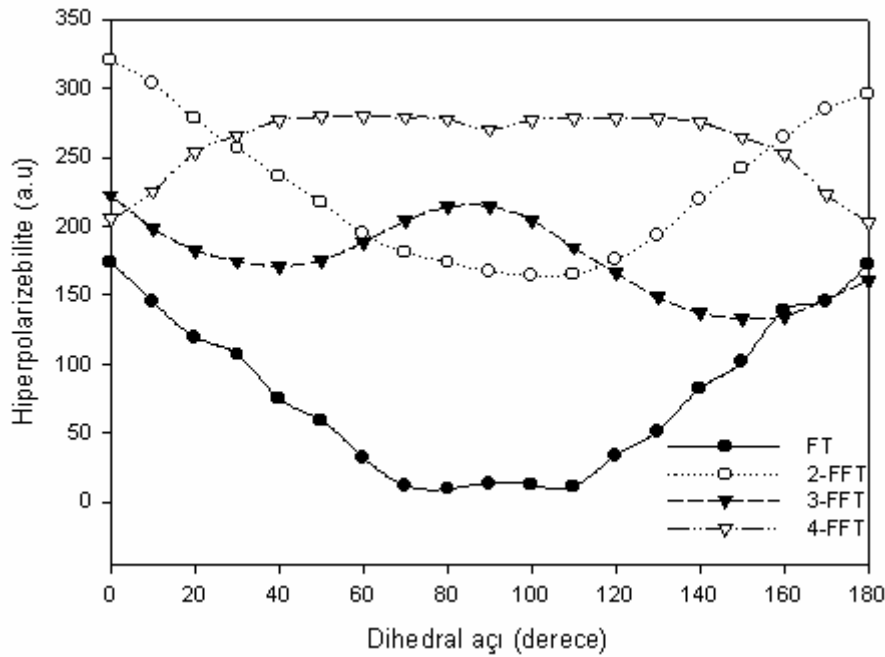
Bir molekülün hiperpolarizebilitesi, molekülün dipol momentinin uygulanan elektrik alanına karşı gösterdiği doğrusal olmayan tepkinin bir ölçüsüdür.

Hiperpolarizebilite genellikle çekirdeklerden uzak uygun değiş tokuş-korelasyon potansiyeli ve uzak mesafedeki elektron yoğunluğu ile belirlenir. Bundan dolayı hiperpolarizebilite hesaplamalarında geniş ve difüz temel setler kullanmak gerekir. Bu duyarlılık, bu özelliklerin moleküller arası kuvvetlerle etkileştiğini ifade eder.

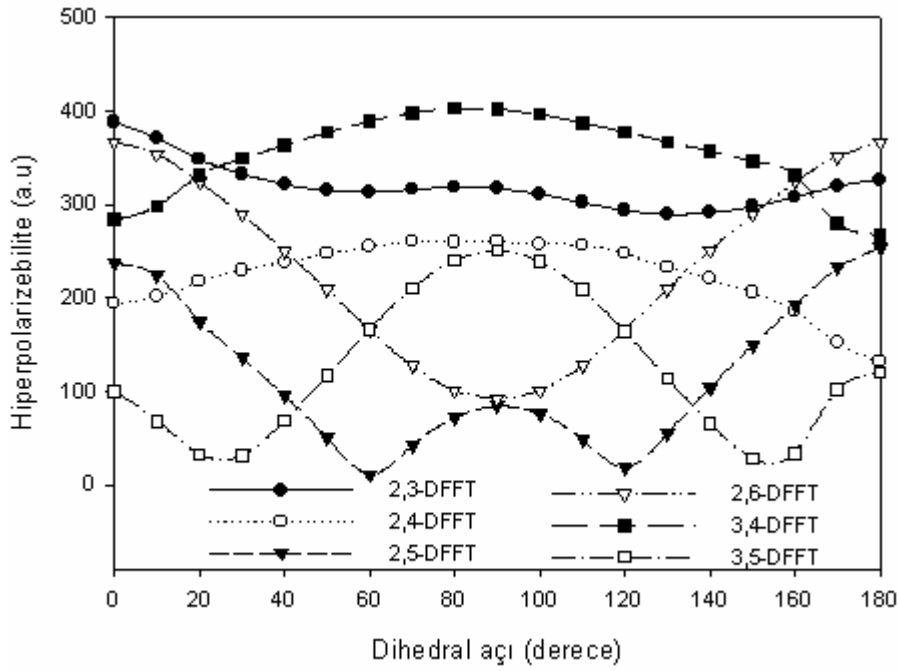
Çalışmamızın bu kısmında, Çizelge 3.1 de verilen moleküllerin hiperpolarizebilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimleri HF/6-31++G** ve B3LYP/6-31++G** modelleri ile hesaplandı ve HF modelinde hesaplanan değerler Şekil 4.37-Şekil 4.40, B3LYP modeli ile hesaplanan değerler ise Şekil 4.41-Şekil 4.44 de verildi. Bu moleküllerin polarizabilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimleri her iki hesaplama modelinde de aynı eğilimde olmaları ile birlikte polarizabilite değerleri birbirine yakın olduğu Şekil 4.28-Şekil 4.32 den de görülmektedir. Fakat moleküllerin hiperpolarizebilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimleri her bir molekül için hesaplama modellerindeki davranışları aynı yönde değişirken, hiperpolarizebilite değerleri arasında farklılıklar gözlemlendi.

Hesaplamalarda FT, 4-FFT, 2,6-DFFT, 3,5-DFFT, 2,4,6-TFFT ve 3,4,5-TFFT moleküllerinin hiperpolarizebilite değerlerinin dihedral açığa göre değişimlerinin moleküllerin ortogonal durumuna (90°) göre simetrik oldukları görüldü. Bu moleküllerden FT, 2,6-DFFT, molekülleri ortogonal durumda (90°) minimum, düzlemsel durumda ise maksimum hiperpolarizebilite değerlerine, 4-FFT, 3,5-DFFT, 2,4,6- ve 3,4,5-TFFT molekülleri ortogonal durumda (90°) maksimum, düzlemsel durumda ise minimum hiperpolarizebilite değerlerine sahiptirler. 2-FFT, 2,3,6-TFFT ve 2,3,4,5-TFFT

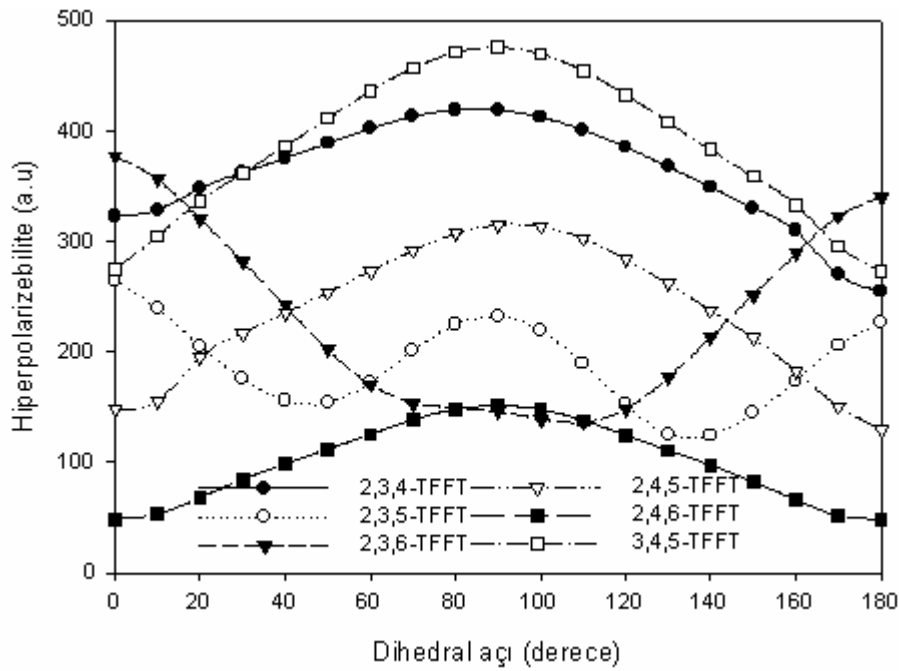
molekülleri ortogonal durumda (90°) maksimum hiperpolarizebilite değerlerine, aynı durumlarda 2,4-DFFT, 3,4-DFFT ve 2,3,4-TFFT molekülleri minimum hiperpolarizebilite değerlerine sahip oldukları, bu moleküllerin düzlemsel durumdaki hiperpolarizebilite değerlerinin ise birbirinden farklı olduğu görüldü. Moleküllerin hiperpolarizebilite değerlerinin flor atom sayısı ve konumlarına göre değişimine bakıldığında, flor atomu para konumunda bulunduğu zaman bu moleküller ortogonal durumda maksimum hiperpolarizebilite değerlerine sahiptirler (4-FFT, 2,4-DFFT, 3,4-DFFT, 2,4,6-TFFT ve 3,4,5-TFFT). Flor atomları orto konumunda bulunduğu zaman bu moleküller ortogonal durumda minimum hiperpolarizebilite değerlerine sahiptirler (2-FFT, 2,3-DFFT, 2,6-DFFT molekülleri gibi). Çalışılan moleküllerden en büyük hiperpolarizebilite değeri düzlemsel durumda HF ve B3LYP modellerinde 2,6-DFFT molekülünde sırasıyla 366 ve 769 a.u, ortogonal durumda ise 3,4,5-TFFT molekülünde sırasıyla 476 ve 652 a.u olarak hesaplandı.



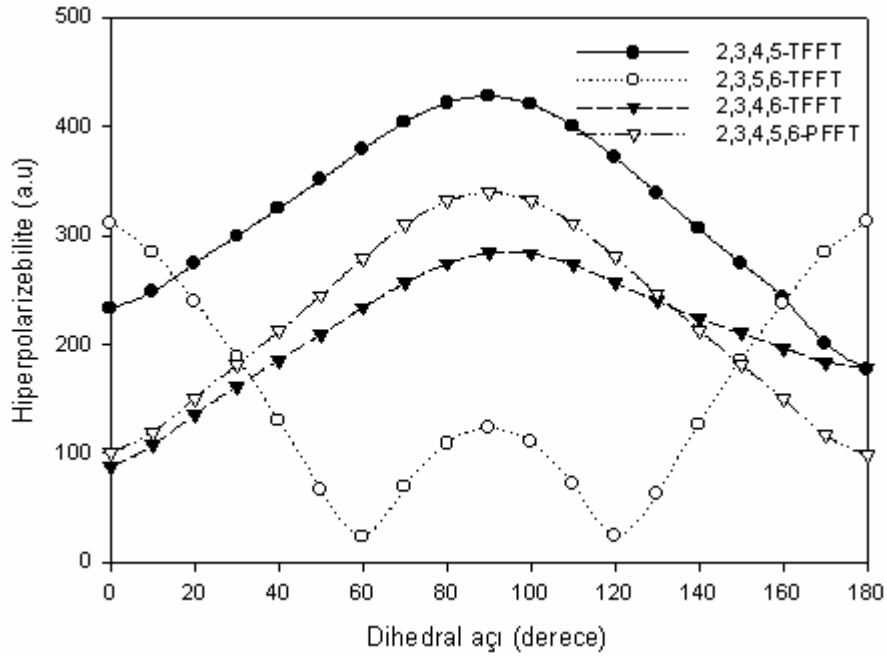
Şekil 4.37. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT, 4-FFT moleküllerin hiperpolarizebilite değerlerinin Dihedral açığa bağlı olarak değişimi



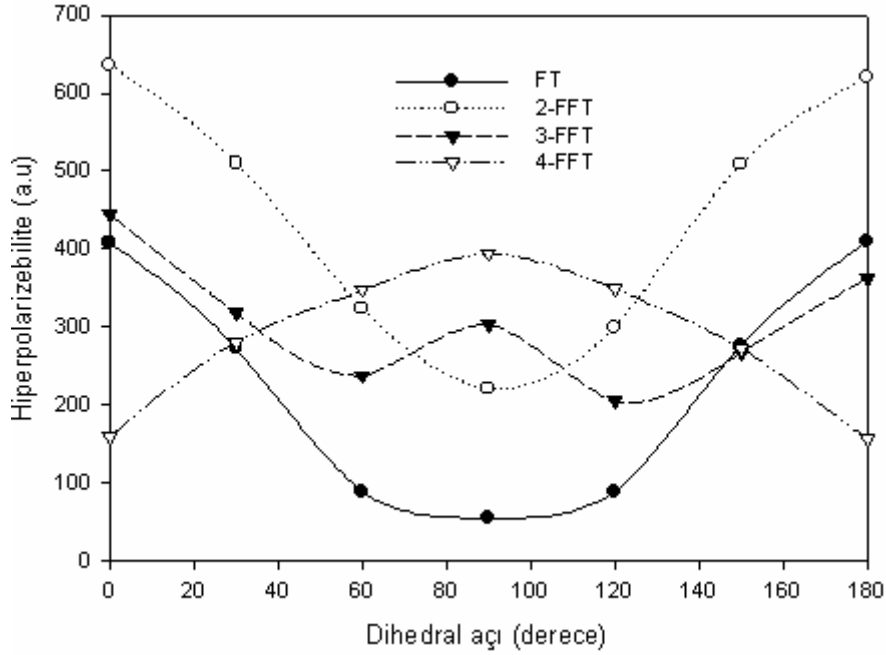
Şekil 4.38. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 5,6-DFFT, 4,6-DFFT, 3,6-DFFT, 2,6-DFFT, 4,5-DFFT, 3,5-DFFT moleküllerinin hiperpolarizebilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



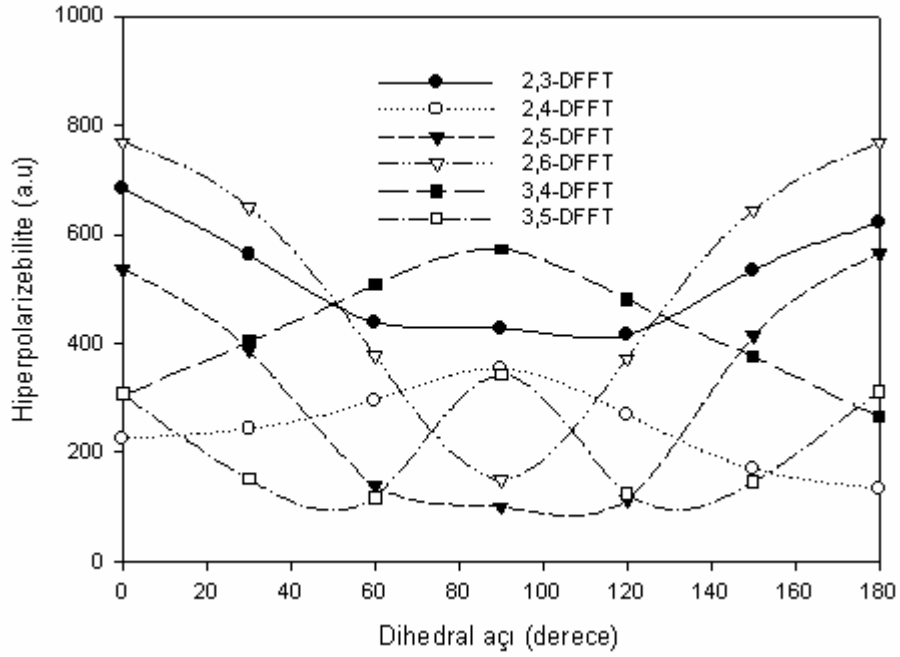
Şekil 4.39. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4-TFFT, 2,3,5-TFFT, 2,3,6-TFFT, 2,4,5-TFFT, 2,4,6-TFFT, 3,4,5-TFFT moleküllerinin hiperpolarizebilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



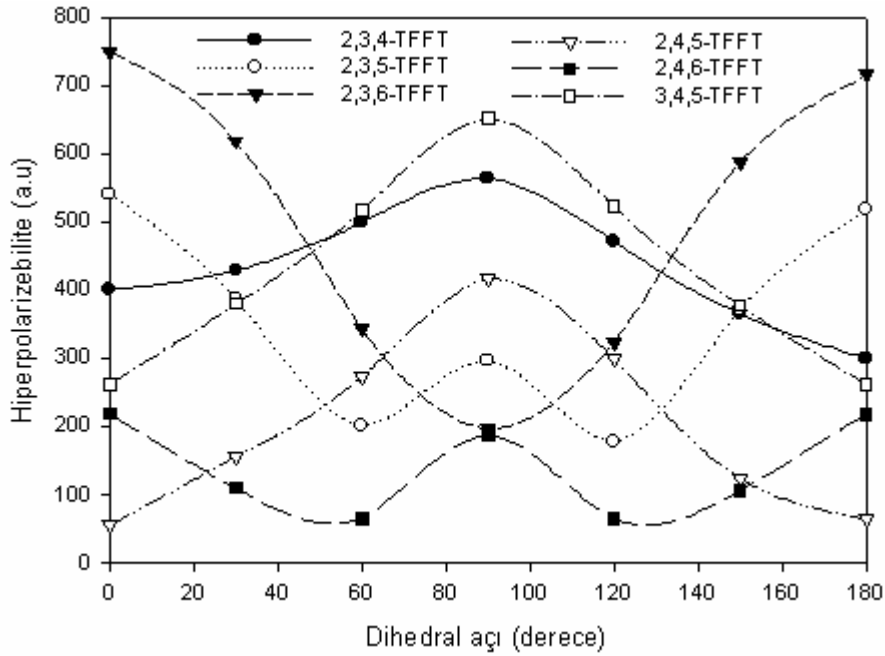
Şekil 4.40. HF/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4,5-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerin hiperpolarizebilite değerlerinin dihedral açığına bağlı olarak değişimi



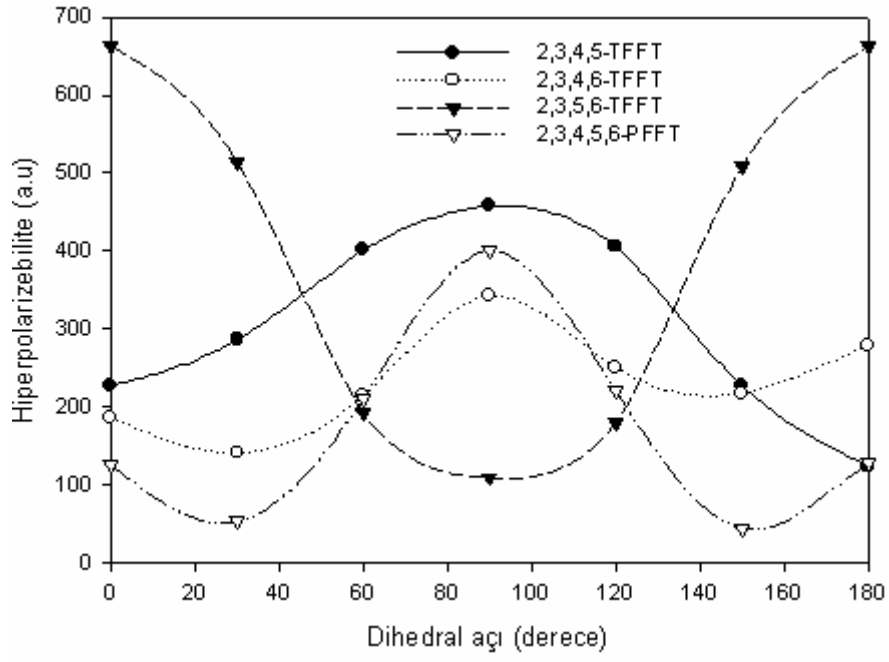
Şekil 4.41. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT, 4-FFT moleküllerin hiperpolarizebilite değerlerinin dihedral açığına bağlı olarak değişimi



Şekil 4.42. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3-DFFT, 2,4-DFFT, 2,5-DFFT, 2,6-DFFT, 3,4-DFFT, 3,5-DFFT moleküllerin hiperpolarizebilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.43. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4-TFFT, 2,3,5-TFFT, 2,3,6-TFFT, 2,4,5-TFFT, 2,4,6-TFFT, 3,4,5-TFFT moleküllerin hiperpolarizebilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.44. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2,3,4,5-TFFT, 2,3,4,6-TFFT, 2,3,5,6-TFFT, 2,3,4,5,6-PFFT moleküllerin hiperpolarizebilite değerlerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada FT molekülünün 19 adet florlu türevi için hesaplamalar yapılmıştır. Literatürde FT molekülünde, hidrojen atomunun yerine flor dışında başka bir grup veya atom bağlanması ile oluşturulan yeni molekül süstitüe türevlerinin sınırlı sayıda elektrokimyasal çalışmaları mevcuttur. Bu açıdan bakıldığında bu çalışma, moleküler türevlerin molekül özellikleri üzerine etkilerinin anlaşılmasında önemlidir.

Bu çalışmada, 3-feniltiyofen ve flor atomunun fenil halkası üzerinde konum ve sayıları sistematik olarak değiştirilerek oluşturulan 3-(florofenil)tiyofen türevlerinin yapısal ve elektronik özellikleri HF/6-31++G(d,p) ve B3LYP/6-31++G(d,p) modelleri ile hesaplandı. Bu moleküllerin denge durumları yapısal parametreleri hesaplandıktan sonra moleküllerin elektronik enerjileri, indüklenmiş dipol momentleri, HOMO-LUMO enerji farkları, polarizebilite, anizotropik polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri dihedral açının fonksiyonu olarak incelendi. Dihedral açının değişimi fenil halkası üzerindeki atomların, tiyofen halkası üzerindeki atomlara göre relatif konumlarını belirler. Çalışmanın amacı, flor atomunun fenil halkası üzerinde konum ve sayıları değiştirilerek oluşturulan yeni moleküllerin özelliklerini ve flor atomunun bu oluştumdaki etkisini incelemektir.

Flor atomlarının moleküllerin denge durumu dihedral açılarını etkiledikleri ve sayılarından ziyade konumlarının daha etkili olduğu görüldü. Özellikle moleküller üzerinde syn-formundaki orto-flor atomunun anti-form durumuna geçtiği zaman bu durumlardaki denge dihedral açılarının düzlemselliğe olan eğilimlerinin aynı olmadığı görüldü. Bu durum orto-flor atomunun syn-formundaki ve anti-formundaki sterik etkileşmelerinin farklı olduğu şeklinde yorumlandı. Üzerinde meta-flor atomları bulunan moleküllerin denge durumu dihedral açılarının 3-feniltiyofen molekülüne göre daha küçük olduğu hesaplandı. Bu ise flor atomunun hidrojen atomuna göre daha elektronegatif olmasından kaynaklanmaktadır. Bundan dolayı fenil halkası üzerindeki meta-

flor atomları ile orto-hidrojen atomlarının etkileşmeleri sonucu bu hidrojen atomlarının kısmi pozitif yüklerinin azalması ile halkalar arasındaki orto-hidrojen atomları etkileşmelerinin daha zayıf olması şeklinde yorumlandı. Bu etkileşme sonuçları H. Sarker ve arkadaşlarının flor-süstitüe polifeniltiyofen molekülü ile yaptıkları çalışmalarda gözledikleri sonuçlarla uyum içerisindedir (81). Moleküller üzerinde para-flor atomu bulunduğunda denge durumu dihedral açılarının 3-feniltiyofen molekülüne göre çok az artırdığı görüldü.

Moleküllerin her birinin her iki hesaplama modelinde de torsiyon potansiyellerinin iki minimumu olduğu görüldü. Moleküller üzerinde iki orto-flor atomu veya bunlarla birlikte meta- ve para-flor atomu bulunduğu durumlarda, torsiyon potansiyel eğrileri moleküllerin ortogonal durumuna göre simetrik olur. Tek orto-flor atomu veya bununla birlikte meta- ve para-flor atomu bulunduğu durumlarda ise syn-formundaki (0°) bağıl enerjiler anti-formdaki (180°) bağıl enerjilerinden daha büyük olmaktadır. Bunun nedeni, yukarıda tartıştığımız gibi sterik etki olarak yorumlandı. Torsiyon potansiyel hesaplamalarında B3LYP modeli HF modeline göre, moleküllerin ortogonal durumundaki (90°) bariyer yüksekliği (ΔE_{90}) daha yüksek, syn-form durumundaki (0°) bariyer yüksekliği (ΔE_0) ve anti-form durumundaki (180°) bariyer yüksekliği (ΔE_{180}) ise bunun tersi değer vermektedir. B3LYP modeli, moleküllerin ortogonal durumunda π -elektron konjuge bağları kırıldığından dolayı relatif enerjiyi daha yüksek hesaplar ve düzlemsel durumlarda ise bu durum oluşmadığından enerjileri daha kararlı hesaplar (76).

Flor atomlarının sayılarından ziyade konumları, moleküllerin torsiyon potansiyelleri üzerinde etkili olmaktadır. Özellikle moleküller üzerinde syn-formdaki orto-flor atomu, dihedral açının değişimi ile anti-form bölgesine geçtiği zaman, yani tiyofen halkası üzerinde bulunan kükürt atomu ile fenil halkası üzerinde bulunan orto-flor atomu aynı tarafta olduğu durumda, moleküllerin orto H-H ve H-F sterik etkileşmelerinin zayıfladığı görüldü. Bu

durum, kükürt atomunun karbon atomundan daha elektronegatif etkide bulunması olarak yorumlandı.

HF/6-31++G** modeli ve B3LYP/6-31++G** modelleri ile moleküllerin en yüksek dolu moleküler orbital (HOMO) ve en düşük boş moleküler orbital (LUMO) enerjileri dihedral açının fonksiyonu olarak hesaplandıktan sonra, enerji farkları (ΔE) hesaplandı. Hesaplamalar sonucunda, moleküllerin HOMO-LUMO enerji farklarının dihedral açının fonksiyonu olarak değişimleri, her iki hesaplama modelinde de moleküllerin ortogonal durumda maksimum değere sahip olduklarını gösterdi. Moleküller ortogonal durumda bulundukları zaman, düzlemsel konformasyonlarına göre π -elektronlarının delokalizasyonları azaldığı için HOMO-LUMO enerji farkı daha büyük değere sahip olur. Bu durum Jing-Fang ve arkadaşlarının tiyofen-fenil-tiyofen molekülü ile ilgili yapmış oldukları teorik çalışma ile de uyum içerisinde (75).

HOMO-LUMO enerji farkları hesaplamalarında modellere göre farklılıklar gözlemlendi. HF modelinin B3LYP modeline göre, HOMO-LUMO enerji farklarını daha büyük hesapladığı, bunun nedeninin ise HF modelinin elektron korelasyonunu hesaba katmaması ve B3LYP modeline göre moleküldeki π -elektronlarını daha lokalize olarak hesaba katılmasından kaynaklandığı şeklinde yorumlandı. Bu çalışmada hesap edilen HOMO-LUMO enerji farklarının, literatürde HF modeli ile çalışılan 3-phenyltiyofen molekülünün değerleri ile uyum içinde olduğu görüldü (34, 35).

Literatürde para-(feniltiyofen) ve tiyofen dimerleri ile ilgili HF ve B3LYP modelleri ile yapılan teorik çalışmalar, deneysel değerlerle karşılaştırılmış ve B3LYP modeli hesaplama sonuçlarının deneysel değerlerle uyum içinde olduğu görülmüştür (71). Çalışmamızda, B3LYP modeli ile yapılan hesaplamalarda Flor atomlarının sayı ve konumlarının, HOMO-LUMO enerji farkı üzerindeki etkisi FT < DFFT'ler < TriFFT'ler < TetraFFT'ler < PFFT şeklinde olmaktadır.

HF modeli hesaplamaları sonucunda, çalışılan moleküllerin denge durumu polarizebilite değerleri, HOMO-LUMO enerji farklarının tersi bir durum gösterdi ve polarizebilite değerleri sıralaması $FT > FFT'ler > TriFFT'ler > TetraFFT'ler > PFFT'ler$ şeklinde bulundu. Literatürde moleküler polarizebilite ve HOMO-LUMO enerji farkı ile ilgili çalışmalarda bu özelliklerin dihedral açığa bağlı olarak değişimleri hesaplamalarımızla uyumlu olacak şekilde ve genellikle birbirinin tersi olarak verilmiştir (82,83).

Her iki hesaplama modeli ile çalışılan moleküllerdeki flor-atomu sayısı ve konumu, indüklenmiş dipol moment ve hiperpolarizebilite değerlerini, polarizebilite ve HOMO-LUMO enerji farklarına göre daha fazla etkilemektedir. Flor atomlarını konumları indüklenmiş dipol moment değeri için önemlidir. İndüklenmiş dipol moment değerleri büyük olan moleküllerin (2,3-DFFT, 2,6-DFFT, 2,3,4-TFFT, 3,4,5-TFFT) hiperpolarizebilite değerlerinin de daha büyük olduğu görüldü. Yufang Lui ve arkadaşlarının Florlu fenilbisikloheksan molekülünün türevleri ile ilgili yapmış oldukları teorik çalışmada flor-atomunun konumunun polarizebilite ve anizotropik polarizebilite özelliklerinde daha az etkili olduğu, indüklenmiş dipol moment özelliklerini ise daha fazla etkilediği belirtilmiştir (80).

Hızlı ve kapasiteli bilgisayarların geliştirilmesi ile daha büyük moleküller (dimer vb) için süstitüe etkilerinin incelenmesi mümkündür. Bu etkilerin incelenmesi polimer kimyası konusunda deney yapmadan teorik olarak sonuçlar elde edilmesine yardımcı olacaktır.

KAYNAKLAR

1. Shirakawa, H., Ito, T. and Ikeda, S., "Simultaneous polymerization and formation of polyacetylene film on the surface of a concentrated soluble Ziegler-type catalyst solution ", **J. Polym. Sci., Polym. Chem.**, 12(1): 11-20 (1974).
2. Shirakawa, H., Ito, T. and Ikeda, S., "Thermal cis-trans isomerization and decomposition of polyacetylene", **J. Polym. Sci., Polym. Chem.**, 13(8): 1943-1950 (1975).
3. Shirakawa, H., Louis E. J., MacDiarmid, A. G., Chiang, C. K., and Heeger, A. J., "Synthesis of Electrically Conducting Organic Polymers; Halogen Derivatives of Polyacetylene, $(CH)_x$ ", **J. C. S. Chem. Commun.**, 16: 578-580 (1977).
4. Heeger, A.J., Shirakawa, H., MacDiarmid, A. G., "Conductive polymers", **The Nobel Prize in Chemistry**, 1-15 (2000).
5. Shirakawa, H., Louis E. J., MacDiarmid, A. G., Chiang, C. K., and Heeger, A. J., Fincher, C.R., Park, Y. W., Gau, S. C., " Electrical Conductivity in Doped Polyacetylene", **Phys. Rev. Lett.** 39(17): 1098-1101 (1977).
6. Kaneto, K., Yoshino, K. and Inuishi, Y., "Characteristics of Polythiophene Battery", **Jpn. J. Appl. Phys.**, 22(9): 567-568 (1983).
7. Kaneto, K., Ura, S., Yoshino, K. and Inuishi, Y., "Optical and Electrical Properties of Electrochemically Doped n- and p-Type Polythiophenes", **J. Appl. Phys.** 23(3): L189-L191 (1984).
8. Rudge, A., Raistrick, I., Gottesfeld, S., and Ferraris, J. P., " A Study of the Electrochemical Properties of Conducting Polymers for Applications in Electrochemical Capacitors", **Electrochim. Acta**, 39: 273-287 (1994).
9. Yu, G., Nishino, H., Heeger, A. J., Chen, T.A. and Rieke, R, D, "Enhanced electroluminescence from semiconducting polymer blends", **Synth. Met**, 72(3): 249-252 (1995).
10. Burroughes, J. H., Jones, C. A., Friend, R. H., "New semiconductor device physics in polymer diodes and transistors", **Nature**, 335: 137-141 (1988).
11. Dodabalapur, A., Katz, H.E., " Organic heterostructure field-effect transistors" **Science**, 269: 1560-1562 (1995).

12. Halls, J. J. M., Walsh, C. A., Greenham, N. C., Marseglia, E. A., Friend, R. H., Moratti, S. C., Holmes, A. B., "Efficient photodiodes from interpenetrating polymer Networks", **Nature**, 376: 498-500 (1995).
13. Yu, G.; Heeger, A. J., "Charge separation and photovoltaic conversion in polymer composites with internal donor/acceptor heterojunctions", **Journal of Applied Physics**, 78(7): 4510-4515 (1995).
14. Pei, Q., Gang, Y., "Polymer light-emitting electrochemical cells", **Science**, 269: 1086-1088 (1995).
15. Kudoh, Y., Tsuchiya, S., Kojima, T., Fukuyama, M and Yoshimura, S., "An aluminum solid electrolytic capacitor with an electroconducting-polymer electrolyte", **Synth. Met**, 41(3): 1133-1136 (1991).
16. Patil, A.O., Heeger, A.J., Wudl, F., "Optical properties of conducting polymers", **Chem. Rev.**, 88(1): 183-200 (1988).
17. Chowdhury, A.N., Harima, Y., Kunugi, Y. and Yamashita, K., "p- and n-type conductance of electrochemically synthesized poly(3-methyl thiophene) films", **Electrochimica Acta.**, 41(13): 1993-1997 (1996).
18. Roncali, J., "Conjugated poly(thiophenes): synthesis, functionalization, and applications ", **Chem. Rev.**, 92(4): 711-738 (1992).
19. Roncali, J., "Synthetic Principles for Bandgap Control in Linear π -Conjugated Systems", **Chem. Rev.**, 97(1): 173-206 (1997).
20. Pokhodenko, V.D., Krylov, V.A., Konoshchuk, N.V., "Effect of the electrolyte nature on the electrochemical doping of poly-3-phenylthiophene" **Synthetic Metals.**, 99: 91-95 (1999).
21. Rudge, A., Raistrick, I., Gottesfeld, S. and Ferraris, J.P., "Conducting Polymers as Active Materials in Electrochemical Capacitors", **J. Power Sources**, 47: 89-107 (1994).
22. Ferraris, J.P., Eissa, M.M., Brotherston, I.D., Loveday, D.C. and Moxey, A.A., "Preparation and electrochemical evaluation of poly (3-phenylthiophene) derivatives: potential materials for electrochemical capacitors", **J. Electroanal. Chem.**, 459: 57-69 (1998).
23. Zhang, Z., Shi, G., "Electrochemical polymerization of 3-phenyl thiophene ", **J. Electroanal. Chem.**, 569: 197-202 (2004).
24. Naudin, E., Dabo, P., Guay, D., Bélanger, D., "X-ray photoelectron spectroscopy studies of the electrochemically n-doped state of a conducting polymer", **Synth. Metals.**, 132: 71-79 (2002).

25. Sarker, H., Gofer, Y., Killian, J.G., Poehler, T.O., Searson, P.C., "Synthesis and characterization of a series of fluorine-substituted phenylene-thienyl polymers for battery applications", **Synth. Metals.**, 97: 1-6 (1998).
26. Schlindwein, W.S., Gofer, Y., Sarker, H., Poehler, T.O., Searson, P. C., "The electrochemical properties of a series of phenylene-thienyl polymers in tetramethylene sulfone based electrolytes", **J. Electroanal. Chem.**, 460: 46-52 (1999).
27. Semenikhin, O.A., Ovsyannikova, E.V., Ehrenburg, M.R., Alpatova, N.M., Kazarinov, V.E., "Electrochemical and photoelectrochemical behaviour of polythiophenes in non-aqueous solutions: Part 2. The effect of charge trapping", **J. Electroanal. Chem.**, 494: 1-11 (2000).
28. Levi, M.D., Gofer, Y., Aurbach, D., Berlin, A., "EIS evidence for charge trapping in n-doped poly-3-(3,4,5-trifluorophenyl) thiophene", **Electrochimica Acta**, 49: 433-444 (2004).
29. Semenikhin, O.A., Stromberg, C., Ehrenburg, M.R., König, U., Schultze, J.W., "Photoelectrochemical properties and microstructuring of polythiophenes", **Electrochimica Acta**, 47: 171-180 (2001).
30. Ferraris, J.P., Eissa, M.M., Brotherston, I.D., Loveday, D.C., "Performance Evaluation of Poly 3-(Phenylthiophene) Derivatives as Active Materials for Electrochemical Capacitor Applications", **Chem. Mater.**, 10(11): 3528-3535 (1998).
31. Semenikhin, O.A., Erenburg, M.R., Ovsyannikova, E.V., Alpatova, N.M., Efunov, O.N., Belov, M.Y., Kondrashov, Y.V., Kazarinov, V.E., "Effect of Light on the Poly-3-phenylthiophene Properties", **R. J.Electrochem.**, 36(9): 926-933 (2000).
32. Ferraris, J.P. Brotherston, I.D. Loveday, D.C. Mudigonda, D.S.K., Li, L., "Type III electrochemical capacitors based on poly(3-phenylthiophene) derivatives", **Proc. Electrochem. Soc.**, 98(15): 671-682 (1999).
33. Ando, S., Ueda, U., "Density functional theory calculations of the local spin densities of 3-substituted thiophenes and the oligomerization mechanism of 3-methylsulfanyl thiophene", **Synthetic Metals.**, 129: 207-213 (2002).
34. Galasso, V., De Alti, G., "MO Calculations on the Preferred Conformation and Electronic Structure of Phenyl- Derivatives of Pyrrole, Furan and Thiophene", **Tetrahedron**, 27: 4947-4951 (1971).

35. Hilal, R., Abu-Eittah, R., "Molecular orbital treatment of the conformations of composite molecules: Phenylthiophenes", **Tetrahedron**, 34(6): 785-789 (1977).
36. Di Bari, L., Forte, C., Veracini, C.A., Zannoni, C., "An internal order approach to the investigation of intramolecular rotations in liquid crystals by NMR: 3-Phenyl-thiophene in PCH and phase IV", **Chem. Phys. Letters**, 143(3): 263-269 (1988).
37. Chidichimo, G., Liguori, A., Longeri, M., Veracini, C. A., "Structure and Internal Rotation in 3-Phenylthiophene Using NMR Spectra of Liquid-Crystalline Solutions", **J. Magn. Reson**, 51: 438-445 (1983).
38. Tsuzuki, S., Uchimar, T., Matsumura, K., Mikami, M., Tanabe, K., "Torsional potential of biphenyl: Ab initio calculations with the Dunning correlation consistent basis sets", **J. Chem. Phys.**, 110(6): 2858-2861 (1999).
39. Duarte, H.A., Duani, H., De Almeida, W.B., "Ab initio correlated comparative study of the torsional potentials for 2,2'-bipyrrrole and 2,2'-bifuran five membered heterocyclic dimers", **Chem. Phys. Letters**, 369: 114-124 (2003).
40. Jianwei Zhao, J., Yin, G., Wang, N., "Conformational analysis of oligothiophenes in the external electric field", **Synth. Metals**, 145: 253-258 (2004).
41. Lukes, V., Breza, B., Biskupic, S., "Structure and electronic properties of bithiophenes. I. Torsional dependence", **J. Mol. Struct.**, 618: 93-100 (2002).
42. Di Césare, N., Belletête, M., Leclerc, M., Durocher, G., "A conformational study of ethyl-substituted bithiophenes. Semi-empirical versus ab initio methods", **Synth. Metals**, 94: 291-298 (1998).
43. Di Césare, N., Belletête, M., Leclerc, M., Durocher, G., "HF/3-21G* ab initio calculations on methoxy-substituted bithiophenes", **J. Mol. Struct.**, 467: 259-273 (1999).
44. Arulmozhiraja, S., Fujii, T., "Torsional barrier, ionization potential, and electron affinity of biphenyl—A theoretical study", **J. Chem. Phys.**, 115(23): 10589-10594 (2001).
45. Suzuki, H., "Relations between electronic absorption spectra and spatial configurations of conjugated systems. I. Biphenyl", **Bull. Chem. Soc. Jpn.**, 32: 1340-1348 (1959).

46. Bastiansen, O., Fernholt, L., Cyvin, B.N., Cyvin, S.J., Samdal, S., Almenningen, A., "Structure and barrier of internal rotation of biphenyl derivatives in the gaseous state. Part 3", **J. Mol. Struct.**, 128: 59-69 (1985).
47. Samdal, S., Bastiansen, O., "Structure and barrier of internal rotation of biphenyl derivatives in the gaseous state. Part 4", **J. Mol. Struct.**, 128: 115-123 (1985).
48. Roberts, R. M. G., "Conformational analysis of biphenyls using NMR spectroscopy", **Magn. Reson. Chem.**, 90: 1752-1763 (1986).
49. Settle, D., Eaton, V. J., "Dihedral Angle of Biphenyl in Solution and The Molecular Force Field", **J. Chem. Soc. Faraday Trans 2**, 69: 1601-1612 (1973).
50. Lippincott, E. R., Katon, J. E., "Structural phase transition in polyphenyls. X. Potential barrier heights in crystalline polyphenyls and in gaseous biphenyl determined uniquely from diffraction data", **Spectrochim. Acta**, 15: 627-635 (1959).
51. Wise, W. B., Kurland, R. J., "The proton magnetic resonance spectra and rotational barriers of 4-4'-Disubstituted Biphenyls", **J. Am. Chem. Soc.**, 86: 1877-1883 (1964).
52. Grein, F., "New theoretical studies on the dihedral angle and energy barriers of biphenyl", **J. Mol. Struct.**, 624: 23-28, (2003).
53. Frisch, M.J. et. al.; Gaussian 98w Revision A.9 ed. and GaussView 2.1; **Gaussian, Inc**: Pittsburgh, PA (1998).
54. Cramer, J. C., "Essential of Computational Chemistry, Theories and Models", **John Wiley&Sons**, USA, 100-101 (2004).
55. Veszpremi, T., Feher, M., "Quantum Chemistry: Fundamentals to Applications", **Kluwer Academic**, New York, 76-195 (1999).
56. Internet: Specifying the geometry of molecules, http://chemweb.ucc.ie/courses/RPB/CM3109/09_06_L2.doc (2005).
57. Peng, C., Ayala, P. Y., Schlegel, H. B. and Frisch, M. J., "Using Redundant Internal Coordinates to Optimize Equilibrium Geometries and Transition States", **J. Comp. Chem.**, 17: 49-56 (1996).
58. Internet: Introduction to Theoretical organic Chemistry, <http://www.chem.elte.hu/departments/szerves/szerves/oktatas/ea/Perczel/Fund.Theor.Org.Chem.1.5.pdf> (2006).

59. Foresman, J. B., Frisch, A., "Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, Second Edition", **Gaussian Inc.**, Pittsburgh, 276 (1996).
60. Internet: Computational Chemistry 3A1640, <http://www.theochem.kth.se/courses/comp-chem/lecture-4.pdf> (2005).
61. Koch, W., Holthousen, M. C., "A Chemist Guide to Density Functional Theory", **Wiley-VCH**, 176-177 (2001).
62. Simons, J., "An Introduction to Theoretical Chemistry", **Cambridge**, Utah, 188-191 (2003).
63. Hehre, W. J., Ditchfield R. And Pople, J. A., "Self—Consistent Molecular Orbital Methods. XII. Further Extensions of Gaussian—Type Basis Sets for Use in Molecular Orbital Studies of Organic Molecules", **J. Chem. Phys.**, 56: 2257-2261 (1972).
64. Dill, J.D. and Pople, J.A., "Self-consistent molecular orbital methods. XV. Extended Gaussian-type basis sets for lithium, beryllium, and boron", **J. Chem. Phys.**, 62: 2921-2923 (1975).
65. Francl, M.M., Petro, W.J., Hehre, W.J., Binkley, J.S., Gordon, M.S., DeFrees, D.J. and Pople, J.A., "Self-consistent molecular orbital methods. XXIII. A polarization-type basis set for second-row elements", **J. Chem. Phys.**, 77: 3654-3665 (1982).
66. Clark, T., Chandrasekhar, J., Schleyer, P.v.R., "Efficient diffuse function-augmented basis sets for anion calculations. III. The 3-21+G basis set for first-row elements, Li-F", **J. Comp. Chem.**, 4: 294-301 (1983).
67. Krishnam, R., Binkley, J.S., Seeger, R., Pople, J. A., "Self-consistent molecular orbital methods. XX. A basis set for correlated wave functions", **J. Chem. Phys.**, 72: 650-654 (1980).
68. Gill, P.M.W., Johnson, B.G., Pople, J.A. and Frisch, M.J., "The performance of the Becke—Lee—Yang—Parr (B—LYP) density functional theory with various basis sets ", **Chem. Phys. Lett.**, 197: 499-505 (1992).
69. Frisch, M.J., Pople, J.A. and Binkley, J.S., "Self-consistent molecular orbital methods 25. Supplementary functions for Gaussian basis sets ", **J. Chem. Phys.** 80: 3265-3269 (1984).
70. Aleman, C., Julia, L., "Characterization of the Quinoid Structure for the 2,2'-Bithiophene and 2,2',5',2"-Terthiophene Dications", **J. Phys. Chem.**, 100 (35): 14661-14664 (1996).

71. De Oliveira, M.A., Dos Santos, F., De Almeida, W.B., "Structure and torsional potential of p-phenylthiophene : a theoretical comparative study", **Phys. Chem. Chem. Phys.**, 2: 3373-3380 (2000).
72. Lee, S.Y., Boo, B.H., "Density Functional Theory Study of Vibrational Spectra of Fluorene", **J. Phys. Chem.**, 100(21): 8782-8785 (1996).
73. Lee, S.Y., Boo, B.H., "Molecular Structures and Vibrational Spectra of Pyrrole and Carbazole by Density Functional Theory and Conventional ab Initio Calculations ", **J. Phys. Chem.**, 100(37): 15073-15078 (1996).
74. Lee, S.Y., "Molecular Structure and Vibrational Spectra of Biphenyl in the Ground and the lowest Triplet States. Density Functional Theory Study", **Bull. Korean chem. Soc.**, 19(1): 93-98 (1998).
75. Pan, J. F., Chua, S.J., Huang, W., "Conformational analysis (ab initio HF/3-21G*) and optical properties of poly(thiophene-phenylene-thiophene) (PTPT)", **Chem. Phys. Letters**, 363: 18-24 (2002).
76. Duarte, H.A., Dos Santos, H.F., Rocha, W.R., De Almeida, W.B., "Improved quantum mechanical study of the potential energy surface for the bithiophene molecule", **J. Chem. Phys.**, 113(10): 4206-4215 (2000).
77. Hinchliffe, A., Soscun M.H.J., "Ab initio studies of the dipole polarizabilities of conjugated molecules. Part 2. Monocyclic azines", **J. Mol. Struct.**, 304: 109-120 (1994).
78. Aouchiche, H.A., Djennane, S., Boucekkine, A., "DFT study of conjugated biheterocyclic oligomers exhibiting a very low HOMO-LUMO energy gap", **Synth. Met.**, 140: 127-133 (2004).
79. Alguno, A.C., Chung, W.C., Bantaculo, R.V., Vequize, R.M., Miyata, H., Ignacio, E.W., Bacala, A.M., "Ab initio and Density Functional studies of polythiophene energy band gap", **Nectec Tecn. J.**, 2(9): 215-218 (2000).
80. Liu, Y., Ma, H., Xu, H., Sun, J., Han, K., "Study of the Molecular Configuration and the Dipole Moment in Fluorinated Liquid Crystals", **Inter. J. Quant. Chem.**, 102: 415-421 (2005).
81. Sarker, H., Gofer, Y., Killian, J.G., Poehler, T.O., Searson, P.C., "Synthesis and characterization of Fluoro-substituted poly phenylthiophenes for charge storage applications", **Synth. Met.**, 88: 179-185 (1997).

82. Mandal, K., Kar, T., Nandi, P.K., Bhattacharyya, S. P., "Theoretical study of the nonlinear polarizabilities in H₂N and NO₂ substituted chromophores two hetero aromatic rings", **Chem. Phys. Lett.**, 376: 116-124 (2003).
83. Leroux, F., Maurin, M., Nicod, N., Scopelliti, R., "The remarkable configurational stability of ortho-ortho'-tetrafluoro substituted biphenyls 2, 2',4,4',6,6'-hexafluorobiphenyl-3, 3'dicarboxylic acid as amodel", **Tetrahedron Lett.**, 45: 1899-1902 (2004).

EKLER

EK-1 3-feniltiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		HF /6-311++G**		HF /6-31++G(3df,2pd)	
		1. denge	2. denge	1. denge	2. denge	1. denge	2. denge
R1	R(1,2)	1,3466	1,3466	1,3442	1,3443	1,3429	1,3429
R2	R(1,5)	1,7229	1,7231	1,7229	1,7228	1,7103	1,7103
R3	R(1,6)	1,0713	1,0713	1,0712	1,0712	1,0686	1,0686
R4	R(2,3)	1,4436	1,4437	1,4431	1,4431	1,4373	1,4373
R5	R(2,7)	1,0737	1,0737	1,0735	1,0735	1,0711	1,0711
R6	R(3,4)	1,3527	1,3527	1,3503	1,3503	1,3494	1,3493
R7	R(3,9)	1,485	1,4849	1,4846	1,4846	1,4814	1,4814
R8	R(4,5)	1,7231	1,7232	1,7228	1,7228	1,7103	1,7103
R9	R(4,8)	1,0714	1,0714	1,0711	1,0711	1,0686	1,0686
R10	R(9,10)	1,3935	1,3939	1,3918	1,3922	1,3885	1,3889
R11	R(9,14)	1,3939	1,3935	1,3922	1,3918	1,3889	1,3885
R12	R(10,11)	1,3865	1,3862	1,3848	1,3845	1,3812	1,3809
R13	R(10,15)	1,0753	1,0756	1,0751	1,0754	1,0727	1,0729
R14	R(11,12)	1,3868	1,3871	1,3851	1,3854	1,3817	1,3818
R15	R(11,16)	1,0757	1,0757	1,0756	1,0756	1,0731	1,0731
R16	R(12,13)	1,3871	1,3868	1,3854	1,3851	1,3818	1,3817
R17	R(12,17)	1,0755	1,0755	1,0753	1,0753	1,0729	1,0729
R18	R(13,14)	1,3862	1,3865	1,3845	1,3848	1,3809	1,3812
R19	R(13,18)	1,0757	1,0757	1,0756	1,0756	1,0731	1,0731
R20	R(14,19)	1,08	1,08	1,0754	1,0751	1,0729	1,0727
A1	A(2,1,5)	111,8	111,8	111,8	111,8	111,7	111,7
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	127,7	127,6	127,5	127,5
A3	A(5,1,6)	120,6	120,6	120,5	120,5	120,8	120,8
A4	A(1,2,3)	113,0	113,0	113,0	113,0	113,0	113,0
A5	A(1,2,7)	123,5	123,5	123,5	123,5	123,5	123,5
A6	A(3,2,7)	123,5	123,5	123,5	123,5	123,5	123,5
A7	A(2,3,4)	111,4	111,4	111,4	111,4	111,3	111,3
A8	A(2,3,9)	123,9	123,9	123,9	123,9	123,9	123,9
A9	A(4,3,9)	124,8	124,8	124,7	124,7	124,8	124,8
A10	A(3,4,5)	112,6	112,6	112,5	112,5	112,5	112,5
A11	A(3,4,8)	127,2	127,2	127,4	127,4	127,2	127,2
A12	A(5,4,8)	120,2	120,2	120,1	120,1	120,3	120,3
A13	A(1,5,4)	91,2	91,2	91,2	91,2	91,6	91,6
A14	A(3,9,10)	121,0	120,6	121,0	120,5	121,0	120,6
A15	A(3,9,14)	120,6	121,0	120,5	121,0	120,6	121,0
A16	A(10,9,14)	118,5	118,5	118,5	118,5	118,4	118,4
A17	A(9,10,11)	120,8	120,8	120,8	120,8	120,8	120,8
A18	A(9,10,15)	119,6	119,7	119,6	119,7	119,6	119,7
A19	A(11,10,15)	119,7	119,5	119,7	119,5	119,6	119,4
A20	A(10,11,12)	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3	120,2
A21	A(10,11,16)	119,7	119,7	119,6	119,7	119,6	119,7
A22	A(12,11,16)	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1
A23	A(11,12,13)	119,5	119,5	119,5	119,5	119,4	119,4
A24	A(11,12,17)	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3
A25	A(13,12,17)	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3
A26	A(12,13,14)	120,3	120,3	120,3	120,3	120,2	120,3
A27	A(12,13,18)	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1
A28	A(14,13,18)	119,7	119,7	119,7	119,6	119,7	119,6
A29	A(9,14,13)	120,8	120,8	120,8	120,8	120,8	120,8
A30	A(9,14,19)	119,7	119,6	119,7	119,6	119,7	119,6
A31	A(13,14,19)	119,5	119,7	119,5	119,7	119,4	119,6
D16	D(2,3,9,14)	41,5	138,7	41,6	138,5	39,9	140,2

EK-1 (Devam) 3-feniltiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		B3LYP/6-31++G**		B3LYP/6-311++G**		B3LYP/6-311++G(3df,2pd)	
		1. denge	2. denge	1. denge	2. denge	1. denge	2. denge
R1	R(1,2)	1,3672	1,3672	1,3631	1,3631	1,3617	1,3617
R2	R(1,5)	1,7345	1,7345	1,7325	1,7324	1,7179	1,7178
R3	R(1,6)	1,0814	1,0814	1,0792	1,0791	1,0767	1,0767
R4	R(2,3)	1,4391	1,4391	1,4365	1,4365	1,431	1,431
R5	R(2,7)	1,0839	1,0839	1,082	1,0819	1,0795	1,0795
R6	R(3,4)	1,3779	1,3779	1,3738	1,3738	1,3728	1,3728
R7	R(3,9)	1,4796	1,4797	1,4782	1,4781	1,4744	1,4744
R8	R(4,5)	1,7312	1,7313	1,7293	1,7293	1,7147	1,7146
R9	R(4,8)	1,0813	1,0813	1,0791	1,0791	1,0766	1,0766
R10	R(9,10)	1,4065	1,4065	1,4032	1,403	1,3997	1,3996
R11	R(9,14)	1,4065	1,4066	1,4031	1,4031	1,3996	1,3997
R12	R(10,11)	1,3953	1,3958	1,3919	1,3924	1,388	1,3886
R13	R(10,15)	1,0861	1,086	1,0842	1,0841	1,0816	1,0815
R14	R(11,12)	1,3979	1,3975	1,3944	1,3939	1,3906	1,3901
R15	R(11,16)	1,0864	1,0864	1,0845	1,0845	1,0818	1,0818
R16	R(12,13)	1,3974	1,3979	1,3939	1,3943	1,3901	1,3906
R17	R(12,17)	1,086	1,086	1,0841	1,0841	1,0815	1,0815
R18	R(13,14)	1,3959	1,3953	1,3924	1,3919	1,3886	1,388
R19	R(13,18)	1,0864	1,0864	1,0845	1,0845	1,0818	1,0818
R20	R(14,19)	1,09	1,09	1,0842	1,0842	1,0815	1,0816
A1	A(2,1,5)	111,6	111,6	111,5	111,5	111,5	111,5
A2	A(2,1,6)	128,2	128,2	128,4	128,4	128,2	128,2
A3	A(5,1,6)	120,2	120,2	120,1	120,1	120,4	120,4
A4	A(1,2,3)	113,4	113,4	113,4	113,4	113,3	113,3
A5	A(1,2,7)	123,1	123,1	123,1	123,1	123,1	123,1
A6	A(3,2,7)	123,5	123,5	123,5	123,5	123,6	123,6
A7	A(2,3,4)	111,2	111,2	111,3	111,3	111,1	111,1
A8	A(2,3,9)	124,3	124,3	124,3	124,3	124,3	124,3
A9	A(4,3,9)	124,5	124,5	124,4	124,4	124,6	124,6
A10	A(3,4,5)	112,5	112,4	112,4	112,4	112,4	112,4
A11	A(3,4,8)	127,8	127,7	127,9	127,9	127,7	127,7
A12	A(5,4,8)	119,8	119,8	119,6	119,7	119,9	119,9
A13	A(1,5,4)	91,4	91,4	91,4	91,4	91,8	91,8
A14	A(3,9,10)	121,1	120,7	121,1	120,8	121,1	120,8
A15	A(3,9,14)	120,8	121,1	120,8	121,1	120,8	121,1
A16	A(10,9,14)	118,2	118,2	118,2	118,2	118,1	118,1
A17	A(9,10,11)	120,9	120,9	120,9	120,9	121,0	121,0
A18	A(9,10,15)	119,4	119,6	119,4	119,5	119,4	119,5
A19	A(11,10,15)	119,6	119,5	119,7	119,5	119,6	119,5
A20	A(10,11,12)	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3
A21	A(10,11,16)	119,6	119,6	119,7	119,6	119,7	119,6
A22	A(12,11,16)	120,1	120,1	120,0	120,1	120,1	120,1
A23	A(11,12,13)	119,4	119,4	119,4	119,4	119,4	119,4
A24	A(11,12,17)	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3
A25	A(13,12,17)	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3
A26	A(12,13,14)	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3
A27	A(12,13,18)	120,1	120,1	120,1	120,0	120,1	120,1
A28	A(14,13,18)	119,6	119,6	119,6	119,7	119,6	119,7
A29	A(9,14,13)	120,9	120,9	120,9	120,9	121,0	121,0
A30	A(9,14,19)	119,6	119,4	119,5	119,4	119,5	119,4
A31	A(13,14,19)	119,5	119,7	119,5	119,7	119,5	119,6
D16	D(2,3,9,14)	33,5	146,5	34,9	145,2	32,9	147,2

EK-1 (Devam) 3-feniltiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		B3LYP/6-31++G** 1. denge		
		(75,302)	(50,194)	(99,434)
R1	R(1,2)	1,3672	1,3674	1,3672
R2	R(1,5)	1,7345	1,7342	1,7346
R3	R(1,6)	1,0814	1,0814	1,0813
R4	R(2,3)	1,4391	1,439	1,439
R5	R(2,7)	1,0839	1,084	1,0839
R6	R(3,4)	1,3779	1,3779	1,3778
R7	R(3,9)	1,4796	1,4797	1,4796
R8	R(4,5)	1,7312	1,7304	1,7311
R9	R(4,8)	1,0813	1,0813	1,0812
R10	R(9,10)	1,4065	1,4065	1,4065
R11	R(9,14)	1,4065	1,4064	1,4064
R12	R(10,11)	1,3953	1,3953	1,3953
R13	R(10,15)	1,0861	1,0861	1,086
R14	R(11,12)	1,3979	1,3979	1,3979
R15	R(11,16)	1,0864	1,0865	1,0864
R16	R(12,13)	1,3974	1,3974	1,3974
R17	R(12,17)	1,086	1,0861	1,086
R18	R(13,14)	1,3959	1,3959	1,3958
R19	R(13,18)	1,0864	1,0864	1,0864
R20	R(14,19)	1,09	1,086	1,086
A1	A(2,1,5)	111,6	111,5	111,5
A2	A(2,1,6)	128,2	128,2	128,2
A3	A(5,1,6)	120,2	120,2	120,2
A4	A(1,2,3)	113,4	113,4	113,4
A5	A(1,2,7)	123,1	123,1	123,1
A6	A(3,2,7)	123,5	123,5	123,5
A7	A(2,3,4)	111,2	111,2	111,2
A8	A(2,3,9)	124,3	124,3	124,3
A9	A(4,3,9)	124,5	124,5	124,5
A10	A(3,4,5)	112,5	112,5	112,5
A11	A(3,4,8)	127,8	127,8	127,7
A12	A(5,4,8)	119,8	119,7	119,8
A13	A(1,5,4)	91,4	91,4	91,4
A14	A(3,9,10)	121,1	121,1	121,1
A15	A(3,9,14)	120,8	120,7	120,7
A16	A(10,9,14)	118,2	118,2	118,2
A17	A(9,10,11)	120,9	120,9	120,9
A18	A(9,10,15)	119,4	119,4	119,4
A19	A(11,10,15)	119,6	119,6	119,6
A20	A(10,11,12)	120,3	120,3	120,3
A21	A(10,11,16)	119,6	119,6	119,6
A22	A(12,11,16)	120,1	120,1	120,1
A23	A(11,12,13)	119,4	119,4	119,4
A24	A(11,12,17)	120,3	120,3	120,3
A25	A(13,12,17)	120,3	120,3	120,3
A26	A(12,13,14)	120,3	120,3	120,3
A27	A(12,13,18)	120,1	120,1	120,1
A28	A(14,13,18)	119,6	119,6	119,6
A29	A(9,14,13)	120,9	120,9	120,9
A30	A(9,14,19)	119,6	119,5	119,6
A31	A(13,14,19)	119,5	119,5	119,5
D16	D(2,3,9,14)	33,5	33,1	33,5

EK-2 3-(2-florofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		HF /6-311++G**	
		1. denge	2. denge	1. denge	2. denge
R1	R(1,2)	1,3457	1,346	1,3433	1,3437
R2	R(1,5)	1,7243	1,7226	1,7242	1,7225
R3	R(1,6)	1,0712	1,0712	1,0711	1,071
R4	R(2,3)	1,4434	1,4446	1,4428	1,4439
R5	R(2,7)	1,0725	1,0734	1,0724	1,0733
R6	R(3,4)	1,3524	1,3529	1,3499	1,3506
R7	R(3,9)	1,4846	1,484	1,4844	1,4837
R8	R(4,5)	1,7219	1,7207	1,7216	1,7202
R9	R(4,8)	1,0715	1,0699	1,0712	1,0698
R10	R(9,10)	1,3951	1,3963	1,3931	1,3945
R11	R(9,14)	1,3869	1,3877	1,3852	1,3861
R12	R(10,11)	1,3853	1,3845	1,3835	1,3826
R13	R(10,15)	1,0749	1,0748	1,0747	1,0746
R14	R(11,12)	1,3869	1,387	1,385	1,3852
R15	R(11,16)	1,0749	1,0749	1,0748	1,0748
R16	R(12,13)	1,3853	1,3846	1,3835	1,3827
R17	R(12,17)	1,075	1,075	1,0749	1,0749
R18	R(13,14)	1,3785	1,3788	1,3767	1,3772
R19	R(13,18)	1,0742	1,0742	1,0742	1,0742
R20	R(14,19)	1,33	1,33	1,3288	1,3288
A1	A(2,1,5)	112,0	111,8	111,9	111,7
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	127,6	127,6
A3	A(5,1,6)	120,6	120,7	120,5	120,6
A4	A(1,2,3)	112,8	113,0	112,8	113,1
A5	A(1,2,7)	123,6	123,3	123,6	123,3
A6	A(3,2,7)	123,6	123,7	123,5	123,6
A7	A(2,3,4)	111,6	111,3	111,6	111,4
A8	A(2,3,9)	124,7	122,9	124,6	122,9
A9	A(4,3,9)	123,7	125,8	123,7	125,7
A10	A(3,4,5)	112,5	112,5	112,5	112,5
A11	A(3,4,8)	127,2	127,4	127,3	127,5
A12	A(5,4,8)	120,3	120,1	120,2	120,0
A13	A(1,5,4)	91,2	91,4	91,2	91,3
A14	A(3,9,10)	121,3	120,8	121,3	120,8
A15	A(3,9,14)	122,2	123,0	122,0	122,9
A16	A(10,9,14)	116,5	116,2	116,6	116,3
A17	A(9,10,11)	121,7	121,9	121,6	121,9
A18	A(9,10,15)	118,7	118,8	118,7	118,8
A19	A(11,10,15)	119,7	119,3	119,7	119,3
A20	A(10,11,12)	119,9	119,9	119,9	119,9
A21	A(10,11,16)	119,8	119,8	119,8	119,8
A22	A(12,11,16)	120,3	120,3	120,3	120,3
A23	A(11,12,13)	119,8	119,7	119,8	119,7
A24	A(11,12,17)	120,4	120,5	120,4	120,5
A25	A(13,12,17)	119,8	119,8	119,7	119,8
A26	A(12,13,14)	118,9	119,1	119,0	119,2
A27	A(12,13,18)	121,9	121,9	121,9	121,8
A28	A(14,13,18)	119,2	119,1	119,2	119,0
A29	A(9,14,13)	123,2	123,3	123,1	123,1
A30	A(9,14,19)	119,1	119,4	119,1	119,5
A31	A(13,14,19)	117,7	117,3	117,8	117,4
D16	D(2,3,9,14)	46,1	143,9	46,7	143,7

EK-2 (Devam) 3-(2-florofenil) tiyofen molekülünün denge durumu
geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		B3LYP/6-31++G**		B3LYP/6-311++G**	
		1. denge	2. denge	1. denge	2. denge
R1	R(1,2)	1,3665	1,366	1,3624	1,362
R2	R(1,5)	1,7352	1,7341	1,7332	1,732
R3	R(1,6)	1,0813	1,0812	1,0791	1,079
R4	R(2,3)	1,4393	1,4413	1,4366	1,4384
R5	R(2,7)	1,0823	1,0835	1,0804	1,0815
R6	R(3,4)	1,3785	1,3791	1,3743	1,3752
R7	R(3,9)	1,4787	1,4779	1,4773	1,4764
R8	R(4,5)	1,7292	1,7289	1,7272	1,7267
R9	R(4,8)	1,0813	1,0793	1,0791	1,0772
R10	R(9,10)	1,4087	1,4097	1,4052	1,4063
R11	R(9,14)	1,4015	1,4029	1,3981	1,3996
R12	R(10,11)	1,3943	1,3941	1,3908	1,3905
R13	R(10,15)	1,0856	1,085	1,0837	1,0831
R14	R(11,12)	1,3979	1,3974	1,3942	1,3937
R15	R(11,16)	1,0856	1,0856	1,0836	1,0836
R16	R(12,13)	1,3958	1,3957	1,3922	1,392
R17	R(12,17)	1,0856	1,0855	1,0836	1,0835
R18	R(13,14)	1,3887	1,3882	1,3853	1,3848
R19	R(13,18)	1,0848	1,0848	1,083	1,083
R20	R(14,19)	1,36	1,36	1,3585	1,3591
A1	A(2,1,5)	111,7	111,5	111,7	111,5
A2	A(2,1,6)	128,1	128,2	128,3	128,3
A3	A(5,1,6)	120,2	120,3	120,0	120,2
A4	A(1,2,3)	113,1	113,4	113,1	113,4
A5	A(1,2,7)	123,3	122,8	123,3	122,8
A6	A(3,2,7)	123,6	123,8	123,6	123,7
A7	A(2,3,4)	111,4	111,1	111,5	111,2
A8	A(2,3,9)	125,4	123,1	125,3	123,1
A9	A(4,3,9)	123,2	125,8	123,2	125,7
A10	A(3,4,5)	112,4	112,4	112,3	112,4
A11	A(3,4,8)	127,7	127,9	127,9	128,1
A12	A(5,4,8)	119,9	119,6	119,8	119,5
A13	A(1,5,4)	91,4	91,5	91,4	91,5
A14	A(3,9,10)	121,3	121,0	121,3	121,0
A15	A(3,9,14)	122,9	123,5	122,7	123,4
A16	A(10,9,14)	115,9	115,5	116,0	115,7
A17	A(9,10,11)	121,9	122,1	121,9	122,1
A18	A(9,10,15)	118,4	118,7	118,4	118,7
A19	A(11,10,15)	119,7	119,2	119,7	119,3
A20	A(10,11,12)	120,1	120,1	120,0	120,1
A21	A(10,11,16)	119,7	119,6	119,8	119,7
A22	A(12,11,16)	120,2	120,3	120,2	120,2
A23	A(11,12,13)	119,6	119,5	119,6	119,5
A24	A(11,12,17)	120,6	120,7	120,5	120,6
A25	A(13,12,17)	119,8	119,9	119,8	119,9
A26	A(12,13,14)	119,0	119,1	119,0	119,1
A27	A(12,13,18)	122,0	122,0	121,9	121,9
A28	A(14,13,18)	119,1	119,0	119,1	118,9
A29	A(9,14,13)	123,5	123,7	123,4	123,5
A30	A(9,14,19)	119,2	119,3	119,2	119,3
A31	A(13,14,19)	117,3	117,0	117,5	117,2
D16	D(2,3,9,14)	37,3	153,8	38,5	152,6

EK-2 (Devam) 3-(2-florofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		B3LYP/6-31++G** 1. denge		
		(75,302)	(50,194)	(99,434)
R1	R(1,2)	1,3665	1,3666	1,3666
R2	R(1,5)	1,7352	1,7347	1,7353
R3	R(1,6)	1,0813	1,0813	1,0813
R4	R(2,3)	1,4393	1,4391	1,4392
R5	R(2,7)	1,0823	1,0824	1,0823
R6	R(3,4)	1,3785	1,3785	1,3785
R7	R(3,9)	1,4787	1,4789	1,4788
R8	R(4,5)	1,7292	1,7289	1,7292
R9	R(4,8)	1,0813	1,0813	1,0812
R10	R(9,10)	1,4087	1,4085	1,4087
R11	R(9,14)	1,4015	1,4015	1,4015
R12	R(10,11)	1,3943	1,3944	1,3943
R13	R(10,15)	1,0856	1,0856	1,0856
R14	R(11,12)	1,3979	1,3979	1,3979
R15	R(11,16)	1,0856	1,0856	1,0856
R16	R(12,13)	1,3958	1,3959	1,3958
R17	R(12,17)	1,0856	1,0856	1,0855
R18	R(13,14)	1,3887	1,3887	1,3887
R19	R(13,18)	1,0848	1,0848	1,0848
R20	R(14,19)	1,36	1,3629	1,3629
A1	A(2,1,5)	111,7	111,7	111,7
A2	A(2,1,6)	128,1	128,1	128,1
A3	A(5,1,6)	120,2	120,2	120,2
A4	A(1,2,3)	113,1	113,1	113,1
A5	A(1,2,7)	123,3	123,3	123,3
A6	A(3,2,7)	123,6	123,6	123,6
A7	A(2,3,4)	111,4	111,4	111,4
A8	A(2,3,9)	125,4	125,3	125,4
A9	A(4,3,9)	123,2	123,2	123,2
A10	A(3,4,5)	112,4	112,4	112,4
A11	A(3,4,8)	127,7	127,7	127,7
A12	A(5,4,8)	119,9	119,9	119,9
A13	A(1,5,4)	91,4	91,4	91,4
A14	A(3,9,10)	121,3	121,3	121,3
A15	A(3,9,14)	122,9	122,8	122,8
A16	A(10,9,14)	115,9	115,9	115,9
A17	A(9,10,11)	121,9	121,9	121,9
A18	A(9,10,15)	118,4	118,4	118,4
A19	A(11,10,15)	119,7	119,7	119,7
A20	A(10,11,12)	120,1	120,1	120,1
A21	A(10,11,16)	119,7	119,7	119,7
A22	A(12,11,16)	120,2	120,2	120,2
A23	A(11,12,13)	119,6	119,6	119,6
A24	A(11,12,17)	120,6	120,6	120,6
A25	A(13,12,17)	119,8	119,8	119,8
A26	A(12,13,14)	119,0	118,9	119,0
A27	A(12,13,18)	122,0	122,0	122,0
A28	A(14,13,18)	119,1	119,1	119,1
A29	A(9,14,13)	123,5	123,6	123,5
A30	A(9,14,19)	119,2	119,1	119,1
A31	A(13,14,19)	117,3	117,3	117,3
D16	D(2,3,9,14)	37,3	38,0	37,2

EK-2 (Devam) 3-(2-florofenil) tiyofen molekülünün durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		B3LYP/6-31++G** 2. denge		
		(75,302)	(50,194)	(99,434)
R1	R(1,2)	1,366	1,3663	1,3661
R2	R(1,5)	1,7341	1,7337	1,7342
R3	R(1,6)	1,0812	1,0812	1,0812
R4	R(2,3)	1,4413	1,441	1,4411
R5	R(2,7)	1,0835	1,0836	1,0834
R6	R(3,4)	1,3791	1,3793	1,3792
R7	R(3,9)	1,4779	1,478	1,478
R8	R(4,5)	1,7289	1,728	1,7289
R9	R(4,8)	1,0793	1,0793	1,0793
R10	R(9,10)	1,4097	1,4097	1,4097
R11	R(9,14)	1,4029	1,4029	1,4028
R12	R(10,11)	1,3941	1,3941	1,3942
R13	R(10,15)	1,085	1,0849	1,085
R14	R(11,12)	1,3974	1,3974	1,3974
R15	R(11,16)	1,0856	1,0856	1,0856
R16	R(12,13)	1,3957	1,3957	1,3957
R17	R(12,17)	1,0855	1,0855	1,0855
R18	R(13,14)	1,3882	1,3882	1,3882
R19	R(13,18)	1,0848	1,0848	1,0848
R20	R(14,19)	1,36	1,3633	1,3634
A1	A(2,1,5)	111,5	111,5	111,5
A2	A(2,1,6)	128,2	128,1	128,1
A3	A(5,1,6)	120,3	120,4	120,4
A4	A(1,2,3)	113,4	113,4	113,4
A5	A(1,2,7)	122,8	122,8	122,8
A6	A(3,2,7)	123,8	123,8	123,8
A7	A(2,3,4)	111,1	111,1	111,1
A8	A(2,3,9)	123,1	123,1	123,1
A9	A(4,3,9)	125,8	125,8	125,8
A10	A(3,4,5)	112,4	112,4	112,4
A11	A(3,4,8)	127,9	127,9	127,9
A12	A(5,4,8)	119,6	119,6	119,7
A13	A(1,5,4)	91,5	91,5	91,5
A14	A(3,9,10)	121,0	120,9	121,0
A15	A(3,9,14)	123,5	123,5	123,5
A16	A(10,9,14)	115,5	115,5	115,5
A17	A(9,10,11)	122,1	122,1	122,1
A18	A(9,10,15)	118,7	118,7	118,7
A19	A(11,10,15)	119,2	119,2	119,2
A20	A(10,11,12)	120,1	120,1	120,1
A21	A(10,11,16)	119,6	119,7	119,6
A22	A(12,11,16)	120,3	120,2	120,3
A23	A(11,12,13)	119,5	119,5	119,5
A24	A(11,12,17)	120,7	120,7	120,7
A25	A(13,12,17)	119,9	119,9	119,9
A26	A(12,13,14)	119,1	119,1	119,1
A27	A(12,13,18)	122,0	122,0	122,0
A28	A(14,13,18)	119,0	119,0	119,0
A29	A(9,14,13)	123,7	123,7	123,7
A30	A(9,14,19)	119,3	119,3	119,3
A31	A(13,14,19)	117,0	117,0	117,0
D16	D(2,3,9,14)	153,8	154,1	153,8

EK-3 3-(3-florofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		HF /6-311++G**	
		1. denge	2. denge	1. denge	2. denge
R1	R(1,2)	1,3465	1,3466	1,3442	1,3442
R2	R(1,5)	1,7228	1,7228	1,7227	1,7227
R3	R(1,6)	1,0713	1,0713	1,0711	1,0711
R4	R(2,3)	1,4432	1,4431	1,4426	1,4425
R5	R(2,7)	1,0736	1,0735	1,0734	1,0733
R6	R(3,4)	1,3528	1,3528	1,3504	1,3504
R7	R(3,9)	1,4842	1,4843	1,4839	1,4839
R8	R(4,5)	1,7219	1,7217	1,7215	1,7215
R9	R(4,8)	1,0713	1,0714	1,0711	1,0712
R10	R(9,10)	1,3939	1,3943	1,392	1,3924
R11	R(9,14)	1,3935	1,393	1,3915	1,3911
R12	R(10,11)	1,3861	1,3859	1,3843	1,384
R13	R(10,15)	1,0744	1,0747	1,0742	1,0744
R14	R(11,12)	1,3866	1,3868	1,3847	1,3849
R15	R(11,16)	1,0753	1,0753	1,0752	1,0752
R16	R(12,13)	1,3779	1,3777	1,3763	1,3761
R17	R(12,17)	1,0739	1,0739	1,0738	1,0738
R18	R(13,14)	1,3774	1,3777	1,3758	1,3761
R19	R(13,18)	1,3337	1,3337	1,3274	1,3274
R20	R(14,19)	1,07	1,07	1,0739	1,0737
A1	A(2,1,5)	111,9	111,9	111,8	111,8
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	127,6	127,6
A3	A(5,1,6)	120,6	120,6	120,5	120,5
A4	A(1,2,3)	112,9	112,9	112,9	112,9
A5	A(1,2,7)	123,5	123,5	123,5	123,5
A6	A(3,2,7)	123,6	123,6	123,6	123,5
A7	A(2,3,4)	111,5	111,5	111,5	111,5
A8	A(2,3,9)	123,9	123,9	123,9	123,9
A9	A(4,3,9)	124,6	124,7	124,6	124,6
A10	A(3,4,5)	112,5	112,5	112,4	112,5
A11	A(3,4,8)	127,3	127,3	127,4	127,4
A12	A(5,4,8)	120,2	120,2	120,1	120,1
A13	A(1,5,4)	91,3	91,3	91,3	91,3
A14	A(3,9,10)	121,0	120,6	121,0	120,6
A15	A(3,9,14)	120,1	120,5	120,1	120,5
A16	A(10,9,14)	118,9	118,9	118,9	118,9
A17	A(9,10,11)	120,5	120,5	120,5	120,5
A18	A(9,10,15)	119,7	119,8	119,7	119,9
A19	A(11,10,15)	119,8	119,6	119,8	119,6
A20	A(10,11,12)	120,8	120,8	120,8	120,8
A21	A(10,11,16)	119,7	119,7	119,7	119,7
A22	A(12,11,16)	119,5	119,5	119,5	119,5
A23	A(11,12,13)	117,8	117,8	117,8	117,8
A24	A(11,12,17)	122,2	122,1	122,1	122,1
A25	A(13,12,17)	120,1	120,1	120,1	120,1
A26	A(12,13,14)	122,8	122,9	122,7	122,7
A27	A(12,13,18)	118,8	118,8	118,8	118,8
A28	A(14,13,18)	118,4	118,4	118,5	118,5
A29	A(9,14,13)	119,2	119,2	119,3	119,3
A30	A(9,14,19)	121,6	121,5	121,5	121,4
A31	A(13,14,19)	119,2	119,4	119,2	119,3
D16	D(2,3,9,14)	40,5	139,9	40,6	139,8

EK-3 (Devam) 3-(3-florofenil) tiyofen molekülünün denge durumu
geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		B3LYP/6-31++G**		B3LYP/6-311++G**	
		1. denge	2. denge	1. denge	2. denge
R1	R(1,2)	1,3671	1,3669	1,363	1,363
R2	R(1,5)	1,7345	1,7346	1,7324	1,7323
R3	R(1,6)	1,0813	1,0813	1,0791	1,0791
R4	R(2,3)	1,4388	1,439	1,4362	1,4361
R5	R(2,7)	1,0839	1,0838	1,0819	1,0818
R6	R(3,4)	1,378	1,3777	1,374	1,3739
R7	R(3,9)	1,4789	1,4788	1,4773	1,4774
R8	R(4,5)	1,7299	1,7302	1,7279	1,7279
R9	R(4,8)	1,0812	1,0814	1,0791	1,0791
R10	R(9,10)	1,4072	1,407	1,4037	1,4035
R11	R(9,14)	1,4062	1,4062	1,4026	1,4027
R12	R(10,11)	1,3952	1,3958	1,3916	1,3921
R13	R(10,15)	1,0852	1,0852	1,0833	1,0832
R14	R(11,12)	1,3979	1,3974	1,3943	1,3938
R15	R(11,16)	1,0859	1,0859	1,084	1,0839
R16	R(12,13)	1,3889	1,3895	1,3855	1,3859
R17	R(12,17)	1,0843	1,0843	1,0825	1,0825
R18	R(13,14)	1,3876	1,3871	1,3843	1,3837
R19	R(13,18)	1,3614	1,3615	1,3571	1,3572
R20	R(14,19)	1,08	1,08	1,0826	1,0827
A1	A(2,1,5)	111,6	111,6	111,6	111,6
A2	A(2,1,6)	128,2	128,2	128,4	128,4
A3	A(5,1,6)	120,2	120,2	120,1	120,1
A4	A(1,2,3)	113,3	113,3	113,3	113,3
A5	A(1,2,7)	123,1	123,1	123,1	123,1
A6	A(3,2,7)	123,6	123,6	123,6	123,6
A7	A(2,3,4)	111,3	111,3	111,4	111,4
A8	A(2,3,9)	124,3	124,2	124,3	124,2
A9	A(4,3,9)	124,4	124,5	124,3	124,4
A10	A(3,4,5)	112,4	112,4	112,3	112,3
A11	A(3,4,8)	127,8	127,8	127,9	128,0
A12	A(5,4,8)	119,8	119,7	119,7	119,7
A13	A(1,5,4)	91,4	91,4	91,4	91,4
A14	A(3,9,10)	121,2	120,9	121,2	120,9
A15	A(3,9,14)	120,3	120,6	120,3	120,6
A16	A(10,9,14)	118,5	118,5	118,5	118,5
A17	A(9,10,11)	120,9	120,8	120,8	120,8
A18	A(9,10,15)	119,5	119,6	119,5	119,6
A19	A(11,10,15)	119,7	119,5	119,7	119,6
A20	A(10,11,12)	120,8	120,8	120,8	120,8
A21	A(10,11,16)	119,7	119,7	119,8	119,8
A22	A(12,11,16)	119,5	119,5	119,5	119,5
A23	A(11,12,13)	117,6	117,6	117,7	117,7
A24	A(11,12,17)	122,3	122,3	122,2	122,2
A25	A(13,12,17)	120,2	120,2	120,1	120,1
A26	A(12,13,14)	123,1	123,0	122,9	122,9
A27	A(12,13,18)	118,7	118,6	118,7	118,7
A28	A(14,13,18)	118,3	118,3	118,4	118,4
A29	A(9,14,13)	119,2	119,2	119,3	119,3
A30	A(9,14,19)	121,5	121,4	121,5	121,3
A31	A(13,14,19)	119,2	119,4	119,2	119,3
D16	D(2,3,9,14)	32,2	147,5	33,4	146,0

EK-4 3-(4-florofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		HF /6-311++G**	
		1. denge	2. denge	1. denge	2. denge
R1	R(1,2)	1,3467	1,3467	1,3443	1,3444
R2	R(1,5)	1,7226	1,7227	1,7225	1,7225
R3	R(1,6)	1,0713	1,0713	1,0712	1,0712
R4	R(2,3)	1,4435	1,4435	1,4429	1,4429
R5	R(2,7)	1,0738	1,0738	1,0736	1,0736
R6	R(3,4)	1,3527	1,3526	1,3502	1,3502
R7	R(3,9)	1,4849	1,4849	1,4845	1,4845
R8	R(4,5)	1,723	1,7231	1,7227	1,7227
R9	R(4,8)	1,0715	1,0715	1,0712	1,0712
R10	R(9,10)	1,3932	1,3937	1,3912	1,3918
R11	R(9,14)	1,3937	1,3932	1,3918	1,3912
R12	R(10,11)	1,3863	1,3858	1,3845	1,3839
R13	R(10,15)	1,0749	1,0752	1,0747	1,075
R14	R(11,12)	1,3774	1,3779	1,3758	1,3763
R15	R(11,16)	1,0742	1,0742	1,0741	1,0741
R16	R(12,13)	1,3779	1,3775	1,3763	1,3758
R17	R(12,17)	1,3336	1,3337	1,3273	1,3274
R18	R(13,14)	1,3858	1,3863	1,3839	1,3845
R19	R(13,18)	1,0742	1,0742	1,0741	1,0741
R20	R(14,19)	1,08	1,07	1,075	1,0747
A1	A(2,1,5)	111,9	111,9	111,8	111,8
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	127,6	127,6
A3	A(5,1,6)	120,6	120,6	120,5	120,5
A4	A(1,2,3)	113,0	113,0	113,0	113,0
A5	A(1,2,7)	123,5	123,5	123,5	123,5
A6	A(3,2,7)	123,5	123,5	123,5	123,5
A7	A(2,3,4)	111,4	111,4	111,4	111,4
A8	A(2,3,9)	123,9	123,9	123,8	123,8
A9	A(4,3,9)	124,8	124,8	124,7	124,7
A10	A(3,4,5)	112,5	112,5	112,5	112,5
A11	A(3,4,8)	127,2	127,3	127,4	127,4
A12	A(5,4,8)	120,2	120,2	120,1	120,1
A13	A(1,5,4)	91,2	91,2	91,2	91,2
A14	A(3,9,10)	121,1	120,7	121,1	120,7
A15	A(3,9,14)	120,7	121,1	120,7	121,1
A16	A(10,9,14)	118,3	118,3	118,2	118,2
A17	A(9,10,11)	121,3	121,3	121,2	121,3
A18	A(9,10,15)	119,6	119,7	119,6	119,7
A19	A(11,10,15)	119,1	119,0	119,1	119,0
A20	A(10,11,12)	118,6	118,6	118,7	118,6
A21	A(10,11,16)	121,5	121,6	121,5	121,5
A22	A(12,11,16)	119,9	119,9	119,8	119,8
A23	A(11,12,13)	122,1	122,1	121,9	121,9
A24	A(11,12,17)	119,0	118,9	119,0	119,0
A25	A(13,12,17)	118,9	119,0	119,0	119,0
A26	A(12,13,14)	118,6	118,6	118,7	118,7
A27	A(12,13,18)	119,9	119,9	119,8	119,8
A28	A(14,13,18)	121,6	121,5	121,5	121,5
A29	A(9,14,13)	121,3	121,3	121,3	121,2
A30	A(9,14,19)	119,7	119,6	119,7	119,6
A31	A(13,14,19)	119,0	119,1	119,0	119,1
D16	D(2,3,9,14)	42,8	137,4	42,9	137,2

EK-4 (Devam) 3-(4-florofenil) tiyofen molekülünün denge durumu
geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		B3LYP/6-31++G**		B3LYP/6-311++G**	
		1.denge	2.denge	1.denge	2.denge
R1	R(1,2)	1,3673	1,3673	1,3632	1,3632
R2	R(1,5)	1,7341	1,7342	1,732	1,732
R3	R(1,6)	1,0813	1,0813	1,0791	1,0791
R4	R(2,3)	1,4389	1,439	1,4363	1,4363
R5	R(2,7)	1,084	1,084	1,082	1,082
R6	R(3,4)	1,3778	1,3777	1,3738	1,3738
R7	R(3,9)	1,4794	1,4794	1,4779	1,478
R8	R(4,5)	1,7311	1,7311	1,7291	1,7291
R9	R(4,8)	1,0813	1,0813	1,0791	1,0792
R10	R(9,10)	1,4066	1,4066	1,4031	1,403
R11	R(9,14)	1,4066	1,4067	1,403	1,4031
R12	R(10,11)	1,3952	1,3957	1,3917	1,3921
R13	R(10,15)	1,0856	1,0856	1,0837	1,0837
R14	R(11,12)	1,3893	1,3889	1,3858	1,3855
R15	R(11,16)	1,0847	1,0847	1,083	1,083
R16	R(12,13)	1,3889	1,3893	1,3855	1,3859
R17	R(12,17)	1,3607	1,3607	1,3563	1,3562
R18	R(13,14)	1,3957	1,3952	1,3921	1,3917
R19	R(13,18)	1,0847	1,0847	1,083	1,083
R20	R(14,19)	1,09	1,09	1,0837	1,0837
A1	A(2,1,5)	111,6	111,6	111,6	111,6
A2	A(2,1,6)	128,2	128,2	128,4	128,4
A3	A(5,1,6)	120,2	120,2	120,1	120,1
A4	A(1,2,3)	113,3	113,3	113,4	113,4
A5	A(1,2,7)	123,1	123,1	123,1	123,1
A6	A(3,2,7)	123,6	123,6	123,6	123,5
A7	A(2,3,4)	111,3	111,3	111,3	111,3
A8	A(2,3,9)	124,2	124,2	124,2	124,2
A9	A(4,3,9)	124,5	124,5	124,4	124,4
A10	A(3,4,5)	112,4	112,4	112,4	112,4
A11	A(3,4,8)	127,8	127,8	128,0	128,0
A12	A(5,4,8)	119,8	119,7	119,6	119,6
A13	A(1,5,4)	91,4	91,4	91,4	91,4
A14	A(3,9,10)	121,1	120,8	121,1	120,8
A15	A(3,9,14)	120,8	121,1	120,8	121,1
A16	A(10,9,14)	118,1	118,1	118,1	118,1
A17	A(9,10,11)	121,4	121,4	121,3	121,3
A18	A(9,10,15)	119,5	119,7	119,5	119,7
A19	A(11,10,15)	119,1	119,0	119,1	119,0
A20	A(10,11,12)	118,5	118,5	118,6	118,6
A21	A(10,11,16)	121,6	121,6	121,6	121,6
A22	A(12,11,16)	119,9	119,9	119,8	119,8
A23	A(11,12,13)	122,2	122,2	122,1	122,1
A24	A(11,12,17)	118,9	118,9	119,0	119,0
A25	A(13,12,17)	118,9	118,9	119,0	119,0
A26	A(12,13,14)	118,5	118,5	118,6	118,6
A27	A(12,13,18)	119,9	119,9	119,8	119,8
A28	A(14,13,18)	121,6	121,6	121,6	121,6
A29	A(9,14,13)	121,4	121,4	121,3	121,3
A30	A(9,14,19)	119,6	119,5	119,7	119,5
A31	A(13,14,19)	119,0	119,1	119,0	119,1
D16	D(2,3,9,14)	34,5	145,7	35,6	144,5

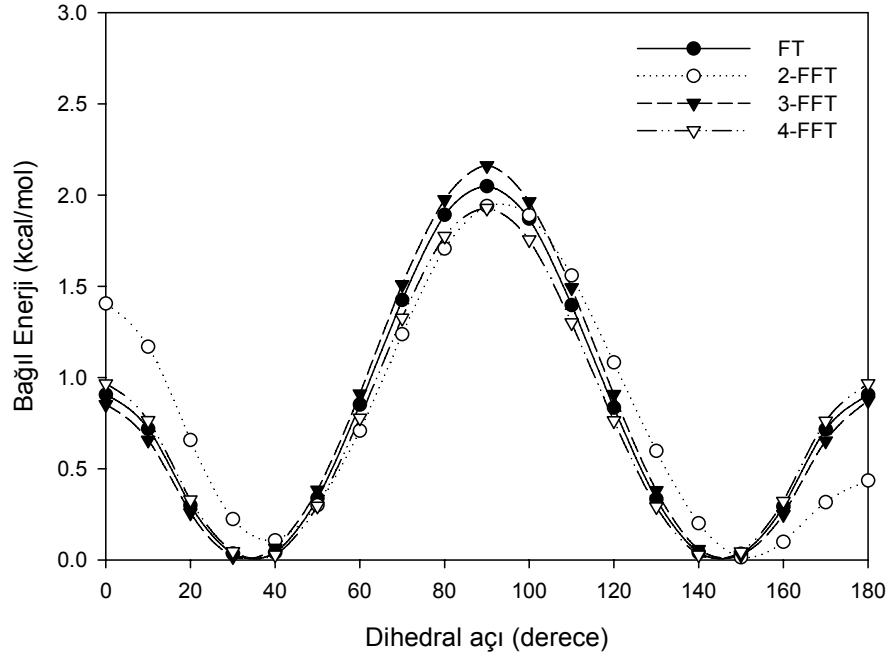
EK-4 (Devam) 3-(4-florofenil) tiyofen molekülünün denge durumu
geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		B3LYP/6-31++G** 1. denge		
		(75,302)	(50,194)	(99,434)
R1	R(1,2)	1,3673	1,3675	1,3673
R2	R(1,5)	1,7341	1,7338	1,7341
R3	R(1,6)	1,0813	1,0814	1,0813
R4	R(2,3)	1,4389	1,4387	1,4389
R5	R(2,7)	1,084	1,0841	1,084
R6	R(3,4)	1,3778	1,3778	1,3778
R7	R(3,9)	1,4794	1,4795	1,4794
R8	R(4,5)	1,7311	1,7302	1,7311
R9	R(4,8)	1,0813	1,0813	1,0813
R10	R(9,10)	1,4066	1,4066	1,4066
R11	R(9,14)	1,4066	1,4065	1,4066
R12	R(10,11)	1,3952	1,3953	1,3952
R13	R(10,15)	1,0856	1,0856	1,0856
R14	R(11,12)	1,3893	1,3893	1,3893
R15	R(11,16)	1,0847	1,0847	1,0847
R16	R(12,13)	1,3889	1,3889	1,3889
R17	R(12,17)	1,3607	1,3607	1,3607
R18	R(13,14)	1,3957	1,3957	1,3957
R19	R(13,18)	1,0847	1,0847	1,0847
R20	R(14,19)	1,09	1,0856	1,0856
A1	A(2,1,5)	111,6	111,6	111,6
A2	A(2,1,6)	128,2	128,2	128,2
A3	A(5,1,6)	120,2	120,2	120,2
A4	A(1,2,3)	113,3	113,3	113,3
A5	A(1,2,7)	123,1	123,1	123,1
A6	A(3,2,7)	123,6	123,5	123,6
A7	A(2,3,4)	111,3	111,3	111,3
A8	A(2,3,9)	124,2	124,3	124,2
A9	A(4,3,9)	124,5	124,5	124,5
A10	A(3,4,5)	112,4	112,4	112,4
A11	A(3,4,8)	127,8	127,8	127,8
A12	A(5,4,8)	119,8	119,7	119,8
A13	A(1,5,4)	91,4	91,4	91,4
A14	A(3,9,10)	121,1	121,1	121,1
A15	A(3,9,14)	120,8	120,8	120,8
A16	A(10,9,14)	118,1	118,1	118,1
A17	A(9,10,11)	121,4	121,3	121,4
A18	A(9,10,15)	119,5	119,5	119,5
A19	A(11,10,15)	119,1	119,1	119,1
A20	A(10,11,12)	118,5	118,5	118,5
A21	A(10,11,16)	121,6	121,6	121,6
A22	A(12,11,16)	119,9	119,9	119,9
A23	A(11,12,13)	122,2	122,2	122,2
A24	A(11,12,17)	118,9	118,9	118,9
A25	A(13,12,17)	118,9	118,9	118,9
A26	A(12,13,14)	118,5	118,5	118,5
A27	A(12,13,18)	119,9	119,9	119,9
A28	A(14,13,18)	121,6	121,6	121,6
A29	A(9,14,13)	121,4	121,4	121,4
A30	A(9,14,19)	119,6	119,6	119,6
A31	A(13,14,19)	119,0	119,0	119,0
D16	D(2,3,9,14)	34,5	34,1	34,5

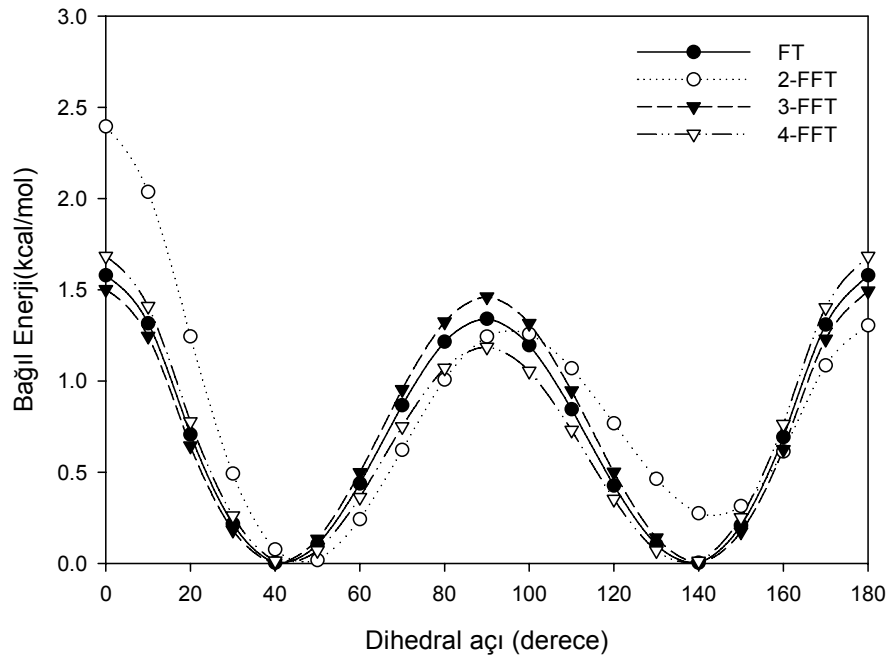
EK-5 Bazı moleküller için HF ve B3LYP metotlarında 6-31++G**, 6-311++G**, 6-31++G(3df,2pd) temel setlerinde hesaplanan denge dipol moment değerleri

Molekölün adı	Dihedral açı(derece)		Dipol moment(D)	
<i>HF/6-31++G**</i>	$\emptyset_1$	$\emptyset_2$	$\emptyset_1$	$\emptyset_2$
FT	41,5	138,7	0,89	0,89
2-FFT	46,1	143,9	1,81	2,18
3-FFT	40,5	139,9	1,33	1,98
4-FFT	42,8	137,4	1,24	1,24
<i>B3LYP/6-31++G**</i>				
FT	33,5	146,5	0,50	0,50
2-FFT	37,3	153,8	1,42	1,77
3-FFT	32,2	147,5	1,46	1,92
4-FFT	34,5	145,7	1,46	1,46
<i>HF/6-311++G**</i>				
FT	41,6	138,5	0,88	0,88
2-FFT	46,7	143,7	1,81	2,17
3-FFT	40,6	139,8	1,32	1,98
4-FFT	42,9	137,2	1,24	1,24
<i>B3LYP/6-311++G**</i>				
FT	34,9	145,2	0,48	0,48
2-FFT	38,5	152,6	1,43	1,77
3-FFT	33,4	146,0	1,49	1,93
4-FFT	35,6	144,5	1,49	1,49
<i>B3LYP/6-31++G** (Grid(50.194))</i>				
FT	33,1		0,49	
2-FFT	38,0	154,1	1,43	1,77
4-FFT	34,1		1,46	
<i>B3LYP/6-31++G** (Grid(99.434))</i>				
FT	33,5		0,50	
2-FFT	37,2	153,8	1,42	1,77
4-FFT	34,5		1,46	

EK-6 FT, 2-FFT, 3-FFT ve 4-FFT moleküllerinin PES eğrileri

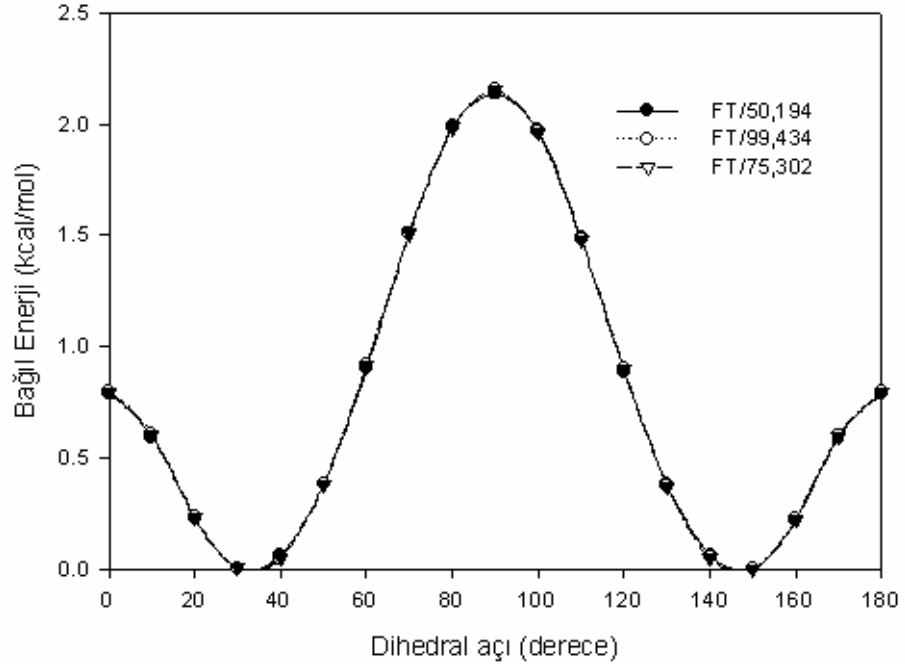


Şekil 6. 1. B3LYP/6-311++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT ve 4-FFT moleküllerinin PES eğrileri

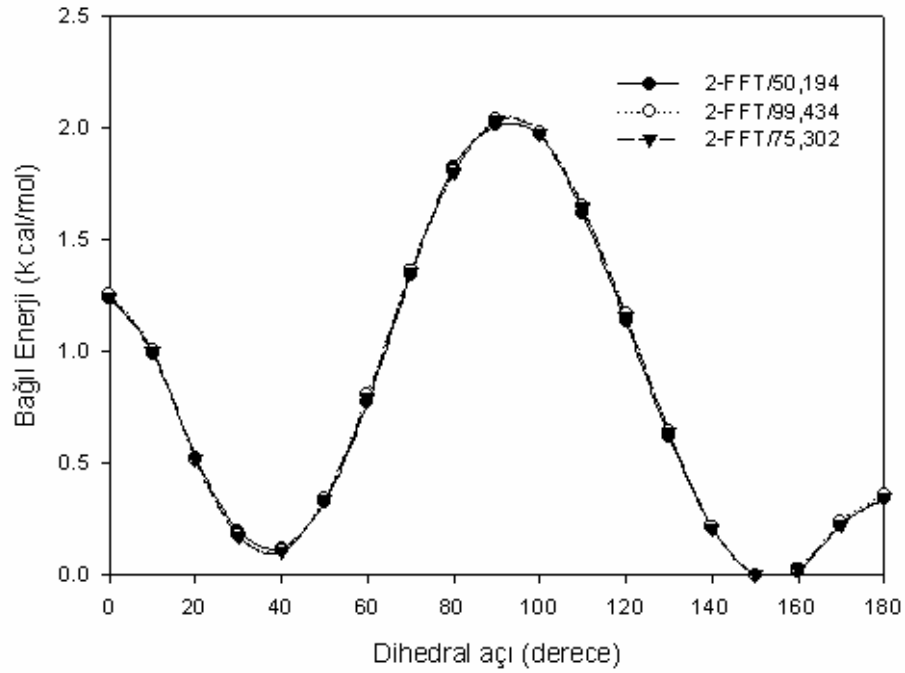


Şekil 6.2. HF/6-311++G** modeli ile hesaplanan FT, 2-FFT, 3-FFT ve 4-FFT moleküllerinin PES eğrileri

EK-6 (Devam) FT, 2-FFT, 3-FFT ve 4-FFT moleküllerinin PES eğrileri

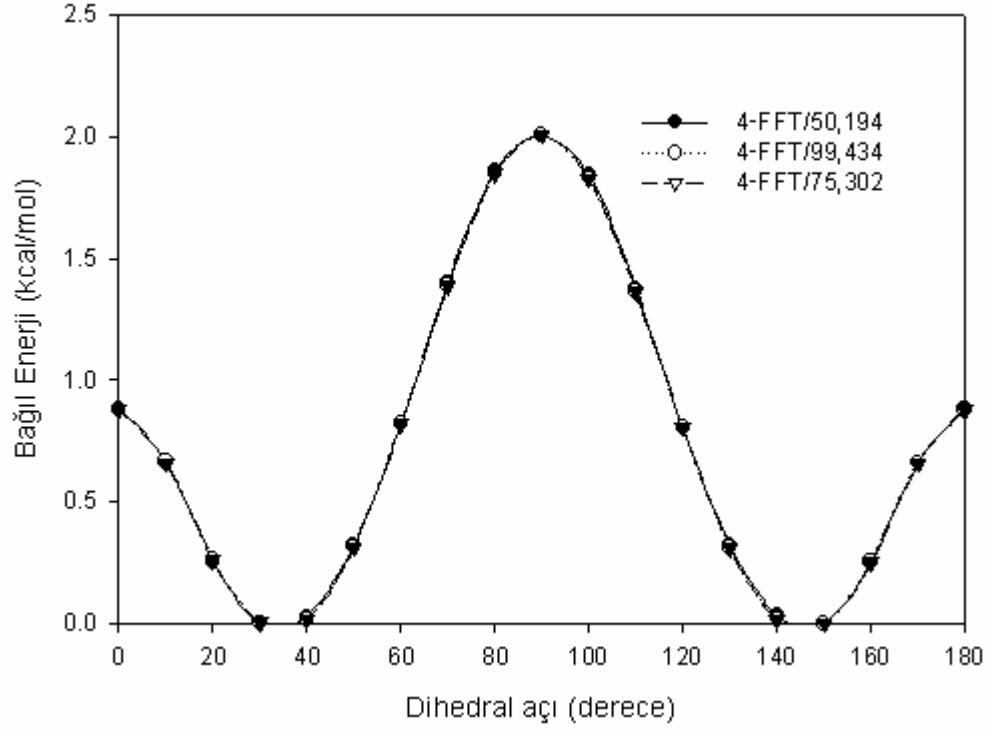


Şekil 6. 3. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan FT molekülünün farklı grid değerlerindeki PES eğrileri



Şekil 6. 4. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 2-FFT molekülünün farklı grid değerlerindeki PES eğrileri

EK-6 (Devam) FT, 2-FFT, 3-FFT ve 4-FFT moleküllerinin PES eğrileri



Şekil 6.5. B3LYP/6-31++G** modeli ile hesaplanan 4-FFT molekülünün farklı grid değerlerindeki PES eğrileri

EK-7 3-feniltiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		B3LYP/6-31++G**	
		1.denge	2.denge	1.denge	2.denge
R1	R(1,2)	1,3466	1,3466	1,3672	1,3672
R2	R(1,5)	1,7229	1,7231	1,7345	1,7345
R3	R(1,6)	1,0713	1,0713	1,0814	1,0814
R4	R(2,3)	1,4436	1,4437	1,4391	1,4391
R5	R(2,7)	1,0737	1,0737	1,0839	1,0839
R6	R(3,4)	1,3527	1,3527	1,3779	1,3779
R7	R(3,9)	1,485	1,4849	1,4796	1,4797
R8	R(4,5)	1,7231	1,7232	1,7312	1,7313
R9	R(4,8)	1,0714	1,0714	1,0813	1,0813
R10	R(9,10)	1,3935	1,3939	1,4065	1,4065
R11	R(9,14)	1,3939	1,3935	1,4065	1,4066
R12	R(10,11)	1,3865	1,3862	1,3953	1,3958
R13	R(10,15)	1,0753	1,0756	1,0861	1,086
R14	R(11,12)	1,3868	1,3871	1,3979	1,3975
R15	R(11,16)	1,0757	1,0757	1,0864	1,0864
R16	R(12,13)	1,3871	1,3868	1,3974	1,3979
R17	R(12,17)	1,0755	1,0755	1,086	1,086
R18	R(13,14)	1,3862	1,3865	1,3959	1,3953
R19	R(13,18)	1,0757	1,0757	1,0864	1,0864
R20	R(14,19)	1,08	1,08	1,09	1,09
A1	A(2,1,5)	111,8	111,8	111,6	111,6
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	128,2	128,2
A3	A(5,1,6)	120,6	120,6	120,2	120,2
A4	A(1,2,3)	113,0	113,0	113,4	113,4
A5	A(1,2,7)	123,5	123,5	123,1	123,1
A6	A(3,2,7)	123,5	123,5	123,5	123,5
A7	A(2,3,4)	111,4	111,4	111,2	111,2
A8	A(2,3,9)	123,9	123,9	124,3	124,3
A9	A(4,3,9)	124,8	124,8	124,5	124,5
A10	A(3,4,5)	112,6	112,6	112,5	112,4
A11	A(3,4,8)	127,2	127,2	127,8	127,7
A12	A(5,4,8)	120,2	120,2	119,8	119,8
A13	A(1,5,4)	91,2	91,2	91,4	91,4
A14	A(3,9,10)	121,0	120,6	121,1	120,7
A15	A(3,9,14)	120,6	121,0	120,8	121,1
A16	A(10,9,14)	118,5	118,5	118,2	118,2
A17	A(9,10,11)	120,8	120,8	120,9	120,9
A18	A(9,10,15)	119,6	119,7	119,4	119,6
A19	A(11,10,15)	119,7	119,5	119,6	119,5
A20	A(10,11,12)	120,3	120,3	120,3	120,3
A21	A(10,11,16)	119,7	119,7	119,6	119,6
A22	A(12,11,16)	120,1	120,1	120,1	120,1
A23	A(11,12,13)	119,5	119,5	119,4	119,4
A24	A(11,12,17)	120,3	120,3	120,3	120,3
A25	A(13,12,17)	120,3	120,3	120,3	120,3
A26	A(12,13,14)	120,3	120,3	120,3	120,3
A27	A(12,13,18)	120,1	120,1	120,1	120,1
A28	A(14,13,18)	119,7	119,7	119,6	119,6
A29	A(9,14,13)	120,8	120,8	120,9	120,9
A30	A(9,14,19)	119,7	119,6	119,6	119,4
A31	A(13,14,19)	119,5	119,7	119,5	119,7
D16	D(2,3,9,14)	41,5	138,7	33,5	146,5

EK-8 3-(2-florofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerini
yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		B3LYP/6-31++G**	
		1.denge	2.denge	1.denge	2.denge
R1	R(1,2)	1,3457	1,346	1,3665	1,366
R2	R(1,5)	1,7243	1,7226	1,7352	1,7341
R3	R(1,6)	1,0712	1,0712	1,0813	1,0812
R4	R(2,3)	1,4434	1,4446	1,4393	1,4413
R5	R(2,7)	1,0725	1,0734	1,0823	1,0835
R6	R(3,4)	1,3524	1,3529	1,3785	1,3791
R7	R(3,9)	1,4846	1,484	1,4787	1,4779
R8	R(4,5)	1,7219	1,7207	1,7292	1,7289
R9	R(4,8)	1,0715	1,0699	1,0813	1,0793
R10	R(9,10)	1,3951	1,3963	1,4087	1,4097
R11	R(9,14)	1,3869	1,3877	1,4015	1,4029
R12	R(10,11)	1,3853	1,3845	1,3943	1,3941
R13	R(10,15)	1,0749	1,0748	1,0856	1,085
R14	R(11,12)	1,3869	1,387	1,3979	1,3974
R15	R(11,16)	1,0749	1,0749	1,0856	1,0856
R16	R(12,13)	1,3853	1,3846	1,3958	1,3957
R17	R(12,17)	1,075	1,075	1,0856	1,0855
R18	R(13,14)	1,3785	1,3788	1,3887	1,3882
R19	R(13,18)	1,0742	1,0742	1,0848	1,0848
R20	R(14,19)	1,33	1,33	1,36	1,36
A1	A(2,1,5)	112,0	111,8	111,7	111,5
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	128,1	128,2
A3	A(5,1,6)	120,6	120,7	120,2	120,3
A4	A(1,2,3)	112,8	113,0	113,1	113,4
A5	A(1,2,7)	123,6	123,3	123,3	122,8
A6	A(3,2,7)	123,6	123,7	123,6	123,8
A7	A(2,3,4)	111,6	111,3	111,4	111,1
A8	A(2,3,9)	124,7	122,9	125,4	123,1
A9	A(4,3,9)	123,7	125,8	123,2	125,8
A10	A(3,4,5)	112,5	112,5	112,4	112,4
A11	A(3,4,8)	127,2	127,4	127,7	127,9
A12	A(5,4,8)	120,3	120,1	119,9	119,6
A13	A(1,5,4)	91,2	91,4	91,4	91,5
A14	A(3,9,10)	121,3	120,8	121,3	121,0
A15	A(3,9,14)	122,2	123,0	122,9	123,5
A16	A(10,9,14)	116,5	116,2	115,9	115,5
A17	A(9,10,11)	121,7	121,9	121,9	122,1
A18	A(9,10,15)	118,7	118,8	118,4	118,7
A19	A(11,10,15)	119,7	119,3	119,7	119,2
A20	A(10,11,12)	119,9	119,9	120,1	120,1
A21	A(10,11,16)	119,8	119,8	119,7	119,6
A22	A(12,11,16)	120,3	120,3	120,2	120,3
A23	A(11,12,13)	119,8	119,7	119,6	119,5
A24	A(11,12,17)	120,4	120,5	120,6	120,7
A25	A(13,12,17)	119,8	119,8	119,8	119,9
A26	A(12,13,14)	118,9	119,1	119,0	119,1
A27	A(12,13,18)	121,9	121,9	122,0	122,0
A28	A(14,13,18)	119,2	119,1	119,1	119,0
A29	A(9,14,13)	123,2	123,3	123,5	123,7
A30	A(9,14,19)	119,1	119,4	119,2	119,3
A31	A(13,14,19)	117,7	117,3	117,3	117,0
D16	D(2,3,9,14)	46,1	143,9	37,3	153,8

EK-9 3-(3-florofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		B3LYP/6-31++G**	
		1.denge	2.denge	1.denge	2.denge
R1	R(1,2)	1,3465	1,3466	1,3671	1,3669
R2	R(1,5)	1,7228	1,7228	1,7345	1,7346
R3	R(1,6)	1,0713	1,0713	1,0813	1,0813
R4	R(2,3)	1,4432	1,4431	1,4388	1,439
R5	R(2,7)	1,0736	1,0735	1,0839	1,0838
R6	R(3,4)	1,3528	1,3528	1,378	1,3777
R7	R(3,9)	1,4842	1,4843	1,4789	1,4788
R8	R(4,5)	1,7219	1,7217	1,7299	1,7302
R9	R(4,8)	1,0713	1,0714	1,0812	1,0814
R10	R(9,10)	1,3939	1,3943	1,4072	1,407
R11	R(9,14)	1,3935	1,393	1,4062	1,4062
R12	R(10,11)	1,3861	1,3859	1,3952	1,3958
R13	R(10,15)	1,0744	1,0747	1,0852	1,0852
R14	R(11,12)	1,3866	1,3868	1,3979	1,3974
R15	R(11,16)	1,0753	1,0753	1,0859	1,0859
R16	R(12,13)	1,3779	1,3777	1,3889	1,3895
R17	R(12,17)	1,0739	1,0739	1,0843	1,0843
R18	R(13,14)	1,3774	1,3777	1,3876	1,3871
R19	R(13,18)	1,3337	1,3337	1,3614	1,3615
R20	R(14,19)	1,07	1,07	1,08	1,08
A1	A(2,1,5)	111,9	111,9	111,6	111,6
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	128,2	128,2
A3	A(5,1,6)	120,6	120,6	120,2	120,2
A4	A(1,2,3)	112,9	112,9	113,3	113,3
A5	A(1,2,7)	123,5	123,5	123,1	123,1
A6	A(3,2,7)	123,6	123,6	123,6	123,6
A7	A(2,3,4)	111,5	111,5	111,3	111,3
A8	A(2,3,9)	123,9	123,9	124,3	124,2
A9	A(4,3,9)	124,6	124,7	124,4	124,5
A10	A(3,4,5)	112,5	112,5	112,4	112,4
A11	A(3,4,8)	127,3	127,3	127,8	127,8
A12	A(5,4,8)	120,2	120,2	119,8	119,7
A13	A(1,5,4)	91,3	91,3	91,4	91,4
A14	A(3,9,10)	121,0	120,6	121,2	120,9
A15	A(3,9,14)	120,1	120,5	120,3	120,6
A16	A(10,9,14)	118,9	118,9	118,5	118,5
A17	A(9,10,11)	120,5	120,5	120,9	120,8
A18	A(9,10,15)	119,7	119,8	119,5	119,6
A19	A(11,10,15)	119,8	119,6	119,7	119,5
A20	A(10,11,12)	120,8	120,8	120,8	120,8
A21	A(10,11,16)	119,7	119,7	119,7	119,7
A22	A(12,11,16)	119,5	119,5	119,5	119,5
A23	A(11,12,13)	117,8	117,8	117,6	117,6
A24	A(11,12,17)	122,2	122,1	122,3	122,3
A25	A(13,12,17)	120,1	120,1	120,2	120,2
A26	A(12,13,14)	122,8	122,9	123,1	123,0
A27	A(12,13,18)	118,8	118,8	118,7	118,6
A28	A(14,13,18)	118,4	118,4	118,3	118,3
A29	A(9,14,13)	119,2	119,2	119,2	119,2
A30	A(9,14,19)	121,6	121,5	121,5	121,4
A31	A(13,14,19)	119,2	119,4	119,2	119,4
D16	D(2,3,9,14)	40,5	139,9	32,2	147,5

EK-10 3-(4-florofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		B3LYP/6-31++G**	
		1.denge	2.denge	1.denge	2.denge
R1	R(1,2)	1,3467	1,3467	1,3673	1,3673
R2	R(1,5)	1,7226	1,7227	1,7341	1,7342
R3	R(1,6)	1,0713	1,0713	1,0813	1,0813
R4	R(2,3)	1,4435	1,4435	1,4389	1,439
R5	R(2,7)	1,0738	1,0738	1,084	1,084
R6	R(3,4)	1,3527	1,3526	1,3778	1,3777
R7	R(3,9)	1,4849	1,4849	1,4794	1,4794
R8	R(4,5)	1,723	1,7231	1,7311	1,7311
R9	R(4,8)	1,0715	1,0715	1,0813	1,0813
R10	R(9,10)	1,3932	1,3937	1,4066	1,4066
R11	R(9,14)	1,3937	1,3932	1,4066	1,4067
R12	R(10,11)	1,3863	1,3858	1,3952	1,3957
R13	R(10,15)	1,0749	1,0752	1,0856	1,0856
R14	R(11,12)	1,3774	1,3779	1,3893	1,3889
R15	R(11,16)	1,0742	1,0742	1,0847	1,0847
R16	R(12,13)	1,3779	1,3775	1,3889	1,3893
R17	R(12,17)	1,3336	1,3337	1,3607	1,3607
R18	R(13,14)	1,3858	1,3863	1,3957	1,3952
R19	R(13,18)	1,0742	1,0742	1,0847	1,0847
R20	R(14,19)	1,08	1,07	1,09	1,09
A1	A(2,1,5)	111,9	111,9	111,6	111,6
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	128,2	128,2
A3	A(5,1,6)	120,6	120,6	120,2	120,2
A4	A(1,2,3)	113,0	113,0	113,3	113,3
A5	A(1,2,7)	123,5	123,5	123,1	123,1
A6	A(3,2,7)	123,5	123,5	123,6	123,6
A7	A(2,3,4)	111,4	111,4	111,3	111,3
A8	A(2,3,9)	123,9	123,9	124,2	124,2
A9	A(4,3,9)	124,8	124,8	124,5	124,5
A10	A(3,4,5)	112,5	112,5	112,4	112,4
A11	A(3,4,8)	127,2	127,3	127,8	127,8
A12	A(5,4,8)	120,2	120,2	119,8	119,7
A13	A(1,5,4)	91,2	91,2	91,4	91,4
A14	A(3,9,10)	121,1	120,7	121,1	120,8
A15	A(3,9,14)	120,7	121,1	120,8	121,1
A16	A(10,9,14)	118,3	118,3	118,1	118,1
A17	A(9,10,11)	121,3	121,3	121,4	121,4
A18	A(9,10,15)	119,6	119,7	119,5	119,7
A19	A(11,10,15)	119,1	119,0	119,1	119,0
A20	A(10,11,12)	118,6	118,6	118,5	118,5
A21	A(10,11,16)	121,5	121,6	121,6	121,6
A22	A(12,11,16)	119,9	119,9	119,9	119,9
A23	A(11,12,13)	122,1	122,1	122,2	122,2
A24	A(11,12,17)	119,0	118,9	118,9	118,9
A25	A(13,12,17)	118,9	119,0	118,9	118,9
A26	A(12,13,14)	118,6	118,6	118,5	118,5
A27	A(12,13,18)	119,9	119,9	119,9	119,9
A28	A(14,13,18)	121,6	121,5	121,6	121,6
A29	A(9,14,13)	121,3	121,3	121,4	121,4
A30	A(9,14,19)	119,7	119,6	119,6	119,5
A31	A(13,14,19)	119,0	119,1	119,0	119,1
D16	D(2,3,9,14)	42,8	137,4	34,5	145,7

EK-11 3-(2,3-diflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu
geometrilere yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		B3LYP/6-31++G**	
		1.denge	2.denge	1.denge	2.denge
R1	R(1,2)	1,3457	1,3459	1,3665	1,366
R2	R(1,5)	1,7241	1,7225	1,7351	1,7339
R3	R(1,6)	1,0712	1,0711	1,0813	1,0812
R4	R(2,3)	1,443	1,4441	1,4391	1,4408
R5	R(2,7)	1,0725	1,0733	1,0824	1,0833
R6	R(3,4)	1,3525	1,3531	1,3787	1,3794
R7	R(3,9)	1,4843	1,4836	1,4786	1,4778
R8	R(4,5)	1,7207	1,7195	1,7281	1,7276
R9	R(4,8)	1,0714	1,07	1,0812	1,0795
R10	R(9,10)	1,396	1,3972	1,4092	1,4102
R11	R(9,14)	1,3857	1,3865	1,4007	1,4019
R12	R(10,11)	1,3838	1,383	1,3935	1,3934
R13	R(10,15)	1,0741	1,074	1,0848	1,0842
R14	R(11,12)	1,3872	1,3873	1,3979	1,3975
R15	R(11,16)	1,0746	1,0745	1,0852	1,0851
R16	R(12,13)	1,3755	1,3748	1,3869	1,3868
R17	R(12,17)	1,0739	1,0738	1,0844	1,0843
R18	R(13,14)	1,3796	1,3801	1,3932	1,3926
R19	R(13,18)	1,3262	1,3263	1,3518	1,3518
R20	R(14,19)	1,33	1,33	1,35	1,35
A1	A(2,1,5)	112,0	111,8	111,7	111,5
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	128,1	128,1
A3	A(5,1,6)	120,5	120,7	120,2	120,4
A4	A(1,2,3)	112,7	112,9	113,1	113,3
A5	A(1,2,7)	123,7	123,4	123,3	122,8
A6	A(3,2,7)	123,6	123,7	123,7	123,8
A7	A(2,3,4)	111,7	111,4	111,5	111,2
A8	A(2,3,9)	124,7	122,9	125,5	123,1
A9	A(4,3,9)	123,6	125,7	123,1	125,7
A10	A(3,4,5)	112,4	112,5	112,3	112,4
A11	A(3,4,8)	127,2	127,5	127,7	128,0
A12	A(5,4,8)	120,3	120,1	119,9	119,7
A13	A(1,5,4)	91,2	91,4	91,4	91,6
A14	A(3,9,10)	121,3	120,8	121,3	121,0
A15	A(3,9,14)	121,5	122,3	122,0	122,7
A16	A(10,9,14)	117,2	117,0	116,7	116,3
A17	A(9,10,11)	121,4	121,6	121,8	121,9
A18	A(9,10,15)	118,8	119,0	118,5	118,8
A19	A(11,10,15)	119,8	119,5	119,7	119,3
A20	A(10,11,12)	120,4	120,4	120,5	120,6
A21	A(10,11,16)	119,9	119,9	119,8	119,8
A22	A(12,11,16)	119,7	119,7	119,6	119,7
A23	A(11,12,13)	118,5	118,3	118,3	118,1
A24	A(11,12,17)	122,2	122,2	122,3	122,4
A25	A(13,12,17)	119,4	119,5	119,4	119,5
A26	A(12,13,14)	121,2	121,3	121,3	121,4
A27	A(12,13,18)	120,2	120,2	120,2	120,2
A28	A(14,13,18)	118,7	118,5	118,6	118,5
A29	A(9,14,13)	121,4	121,4	121,5	121,7
A30	A(9,14,19)	120,6	120,9	120,7	120,8
A31	A(13,14,19)	118,1	117,7	117,8	117,5
D16	D(2,3,9,14)	45,4	144,2	36,7	153,4

EK-12 3-(2,4-diflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		B3LYP/6-31++G**	
		1.denge	2.denge	1.denge	2.denge
R1	R(1,2)	1,3458	1,3462	1,3666	1,3663
R2	R(1,5)	1,724	1,7222	1,7349	1,7337
R3	R(1,6)	1,0712	1,0712	1,0813	1,0812
R4	R(2,3)	1,4431	1,4441	1,4389	1,4407
R5	R(2,7)	1,0727	1,0736	1,0825	1,0836
R6	R(3,4)	1,3523	1,3526	1,3784	1,3789
R7	R(3,9)	1,4846	1,4842	1,4788	1,4779
R8	R(4,5)	1,7219	1,7207	1,7292	1,7289
R9	R(4,8)	1,0716	1,0702	1,0813	1,0795
R10	R(9,10)	1,3943	1,3956	1,4081	1,409
R11	R(9,14)	1,3873	1,3878	1,402	1,4033
R12	R(10,11)	1,3852	1,3843	1,3944	1,3942
R13	R(10,15)	1,0745	1,0745	1,0851	1,0846
R14	R(11,12)	1,378	1,3782	1,3895	1,389
R15	R(11,16)	1,0735	1,0735	1,084	1,084
R16	R(12,13)	1,3773	1,3764	1,3884	1,3882
R17	R(12,17)	1,3292	1,3292	1,3569	1,3569
R18	R(13,14)	1,379	1,3797	1,3895	1,3891
R19	R(13,18)	1,0729	1,0729	1,0833	1,0833
R20	R(14,19)	1,33	1,33	1,36	1,36
A1	A(2,1,5)	112,0	111,8	111,7	111,5
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	128,1	128,1
A3	A(5,1,6)	120,5	120,7	120,2	120,4
A4	A(1,2,3)	112,8	113,0	113,1	113,4
A5	A(1,2,7)	123,7	123,3	123,3	122,8
A6	A(3,2,7)	123,6	123,7	123,6	123,8
A7	A(2,3,4)	111,6	111,4	111,5	111,2
A8	A(2,3,9)	124,6	122,9	125,3	123,1
A9	A(4,3,9)	123,8	125,7	123,2	125,8
A10	A(3,4,5)	112,5	112,5	112,3	112,4
A11	A(3,4,8)	127,2	127,4	127,7	127,9
A12	A(5,4,8)	120,3	120,1	119,9	119,7
A13	A(1,5,4)	91,2	91,4	91,4	91,6
A14	A(3,9,10)	121,5	120,9	121,3	121,0
A15	A(3,9,14)	122,2	123,0	122,8	123,5
A16	A(10,9,14)	116,3	116,1	115,9	115,5
A17	A(9,10,11)	122,2	122,5	122,5	122,7
A18	A(9,10,15)	118,6	118,8	118,4	118,7
A19	A(11,10,15)	119,1	118,7	119,1	118,6
A20	A(10,11,12)	118,2	118,2	118,2	118,3
A21	A(10,11,16)	121,7	121,7	121,7	121,6
A22	A(12,11,16)	120,1	120,2	120,1	120,1
A23	A(11,12,13)	122,3	122,2	122,3	122,2
A24	A(11,12,17)	119,2	119,2	119,2	119,3
A25	A(13,12,17)	118,5	118,6	118,5	118,6
A26	A(12,13,14)	117,4	117,6	117,4	117,5
A27	A(12,13,18)	121,6	121,6	121,7	121,7
A28	A(14,13,18)	121,0	120,8	121,0	120,9
A29	A(9,14,13)	123,5	123,5	123,8	123,9
A30	A(9,14,19)	119,2	119,6	119,3	119,5
A31	A(13,14,19)	117,3	116,9	116,9	116,6
D16	D(2,3,9,14)	47,8	141,8	38,8	152,0

EK-13 3-(2,5-diflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		B3LYP/6-31++G**	
		1.denge	2.denge	1.denge	2.denge
R1	R(1,2)	1,3457	1,3459	1,3665	1,3659
R2	R(1,5)	1,7241	1,7225	1,735	1,7339
R3	R(1,6)	1,0712	1,0711	1,0813	1,0812
R4	R(2,3)	1,443	1,4442	1,4391	1,4409
R5	R(2,7)	1,0723	1,0734	1,0822	1,0834
R6	R(3,4)	1,3527	1,3532	1,3788	1,3796
R7	R(3,9)	1,4839	1,4832	1,478	1,477
R8	R(4,5)	1,7205	1,7193	1,728	1,7274
R9	R(4,8)	1,0715	1,0698	1,0813	1,0792
R10	R(9,10)	1,3947	1,396	1,4081	1,4092
R11	R(9,14)	1,3872	1,3882	1,4026	1,404
R12	R(10,11)	1,3764	1,3756	1,3865	1,3862
R13	R(10,15)	1,0735	1,0734	1,0841	1,0835
R14	R(11,12)	1,3775	1,3774	1,3895	1,389
R15	R(11,16)	1,3338	1,3339	1,3606	1,3607
R16	R(12,13)	1,3854	1,3848	1,3958	1,3958
R17	R(12,17)	1,0736	1,0735	1,084	1,0839
R18	R(13,14)	1,3778	1,378	1,3888	1,3882
R19	R(13,18)	1,0739	1,0739	1,0845	1,0844
R20	R(14,19)	1,34	1,34	1,36	1,36
A1	A(2,1,5)	112,0	111,8	111,7	111,5
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	128,1	128,1
A3	A(5,1,6)	120,5	120,7	120,2	120,4
A4	A(1,2,3)	112,7	113,0	113,0	113,3
A5	A(1,2,7)	123,7	123,3	123,3	122,7
A6	A(3,2,7)	123,6	123,8	123,7	123,9
A7	A(2,3,4)	111,6	111,4	111,5	111,2
A8	A(2,3,9)	124,7	122,9	125,4	123,2
A9	A(4,3,9)	123,6	125,7	123,1	125,7
A10	A(3,4,5)	112,4	112,5	112,3	112,4
A11	A(3,4,8)	127,3	127,4	127,8	127,9
A12	A(5,4,8)	120,3	120,1	119,9	119,7
A13	A(1,5,4)	91,2	91,4	91,4	91,6
A14	A(3,9,10)	120,8	120,3	120,8	120,5
A15	A(3,9,14)	122,2	123,1	122,9	123,6
A16	A(10,9,14)	116,9	116,6	116,3	115,9
A17	A(9,10,11)	120,1	120,3	120,3	120,5
A18	A(9,10,15)	120,5	120,7	120,4	120,7
A19	A(11,10,15)	119,4	119,0	119,3	118,8
A20	A(10,11,12)	122,4	122,5	122,7	122,8
A21	A(10,11,16)	118,6	118,6	118,5	118,4
A22	A(12,11,16)	118,9	119,0	118,8	118,8
A23	A(11,12,13)	118,1	118,0	117,8	117,7
A24	A(11,12,17)	120,3	120,4	120,4	120,5
A25	A(13,12,17)	121,6	121,7	121,8	121,8
A26	A(12,13,14)	119,5	119,7	119,5	119,6
A27	A(12,13,18)	121,3	121,3	121,4	121,4
A28	A(14,13,18)	119,2	119,1	119,2	119,0
A29	A(9,14,13)	123,0	123,0	123,4	123,6
A30	A(9,14,19)	119,2	119,6	119,2	119,4
A31	A(13,14,19)	117,8	117,4	117,4	117,1
D16	D(2,3,9,14)	44,7	145,5	36,4	155,0

EK-14 3-(2,6-diflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		B3LYP/6-31++G**	
		1.denge	2.denge	1.denge	2.denge
R1	R(1,2)	1,3453	1,3453	1,3657	1,3657
R2	R(1,5)	1,7241	1,7242	1,7349	1,7349
R3	R(1,6)	1,0711	1,0711	1,0812	1,0812
R4	R(2,3)	1,4436	1,4437	1,4409	1,441
R5	R(2,7)	1,0724	1,0724	1,0819	1,0819
R6	R(3,4)	1,3517	1,3517	1,379	1,379
R7	R(3,9)	1,4847	1,4847	1,4784	1,4784
R8	R(4,5)	1,7195	1,7195	1,7268	1,7268
R9	R(4,8)	1,0705	1,0705	1,0797	1,0797
R10	R(9,10)	1,3901	1,3902	1,4061	1,4058
R11	R(9,14)	1,3902	1,3901	1,4058	1,4061
R12	R(10,11)	1,3786	1,3776	1,388	1,3881
R13	R(10,15)	1,33	1,3307	1,3592	1,3595
R14	R(11,12)	1,3845	1,385	1,3955	1,3953
R15	R(11,16)	1,0735	1,0735	1,0841	1,0841
R16	R(12,13)	1,385	1,3845	1,3953	1,3955
R17	R(12,17)	1,0745	1,0745	1,0849	1,0849
R18	R(13,14)	1,3776	1,3786	1,3882	1,388
R19	R(13,18)	1,0735	1,0735	1,084	1,0841
R20	R(14,19)	1,33	1,33	1,36	1,36
A1	A(2,1,5)	112,0	111,8	111,7	111,5
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	128,1	128,2
A3	A(5,1,6)	120,6	120,7	120,2	120,3
A4	A(1,2,3)	112,8	113,0	113,1	113,4
A5	A(1,2,7)	123,6	123,3	123,3	122,8
A6	A(3,2,7)	123,6	123,7	123,6	123,8
A7	A(2,3,4)	111,6	111,3	111,4	111,1
A8	A(2,3,9)	124,7	122,9	125,4	123,1
A9	A(4,3,9)	123,7	125,8	123,2	125,8
A10	A(3,4,5)	112,5	112,5	112,4	112,4
A11	A(3,4,8)	127,2	127,4	127,7	127,9
A12	A(5,4,8)	120,3	120,1	119,9	119,6
A13	A(1,5,4)	91,2	91,4	91,4	91,5
A14	A(3,9,10)	121,3	120,8	121,3	121,0
A15	A(3,9,14)	122,2	123,0	122,9	123,5
A16	A(10,9,14)	116,5	116,2	115,9	115,5
A17	A(9,10,11)	121,7	121,9	121,9	122,1
A18	A(9,10,15)	118,7	118,8	118,4	118,7
A19	A(11,10,15)	119,7	119,3	119,7	119,2
A20	A(10,11,12)	119,9	119,9	120,1	120,1
A21	A(10,11,16)	119,8	119,8	119,7	119,6
A22	A(12,11,16)	120,3	120,3	120,2	120,3
A23	A(11,12,13)	119,8	119,7	119,6	119,5
A24	A(11,12,17)	120,4	120,5	120,6	120,7
A25	A(13,12,17)	119,8	119,8	119,8	119,9
A26	A(12,13,14)	118,9	119,1	119,0	119,1
A27	A(12,13,18)	121,9	121,9	122,0	122,0
A28	A(14,13,18)	119,2	119,1	119,1	119,0
A29	A(9,14,13)	123,2	123,3	123,5	123,7
A30	A(9,14,19)	119,1	119,4	119,2	119,3
A31	A(13,14,19)	117,7	117,3	117,3	117,0
D16	D(2,3,9,14)	46,1	143,9	37,3	153,8

EK-15 3-(3,4-diflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		B3LYP/6-31++G**	
		1.denge	2.denge	1.denge	2.denge
R1	R(1,2)	1,3467	1,3466	1,3672	1,367
R2	R(1,5)	1,7224	1,7227	1,7341	1,7342
R3	R(1,6)	1,0713	1,0713	1,0813	1,0813
R4	R(2,3)	1,443	1,4431	1,4385	1,4388
R5	R(2,7)	1,0737	1,0736	1,084	1,0839
R6	R(3,4)	1,3527	1,3527	1,3779	1,3777
R7	R(3,9)	1,4843	1,4843	1,4787	1,4787
R8	R(4,5)	1,7218	1,7221	1,7299	1,7303
R9	R(4,8)	1,0714	1,0715	1,0813	1,0814
R10	R(9,10)	1,3922	1,3928	1,4063	1,4061
R11	R(9,14)	1,394	1,3933	1,4066	1,4067
R12	R(10,11)	1,3868	1,3862	1,3955	1,396
R13	R(10,15)	1,0741	1,0744	1,0848	1,0848
R14	R(11,12)	1,3762	1,3766	1,3885	1,388
R15	R(11,16)	1,0742	1,0743	1,0848	1,0849
R16	R(12,13)	1,3786	1,3781	1,3926	1,3932
R17	R(12,17)	1,3261	1,3261	1,3511	1,3511
R18	R(13,14)	1,3761	1,3766	1,3868	1,3864
R19	R(13,18)	1,3259	1,3259	1,3515	1,3514
R20	R(14,19)	1,07	1,07	1,08	1,08
A1	A(2,1,5)	111,9	111,9	111,6	111,6
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	128,2	128,2
A3	A(5,1,6)	120,6	120,6	120,2	120,2
A4	A(1,2,3)	112,9	112,9	113,3	113,3
A5	A(1,2,7)	123,5	123,5	123,1	123,1
A6	A(3,2,7)	123,6	123,6	123,7	123,6
A7	A(2,3,4)	111,5	111,5	111,4	111,4
A8	A(2,3,9)	123,9	123,8	124,3	124,2
A9	A(4,3,9)	124,6	124,7	124,4	124,5
A10	A(3,4,5)	112,5	112,5	112,4	112,4
A11	A(3,4,8)	127,3	127,3	127,8	127,9
A12	A(5,4,8)	120,3	120,2	119,8	119,7
A13	A(1,5,4)	91,3	91,3	91,4	91,4
A14	A(3,9,10)	121,2	120,8	121,3	120,9
A15	A(3,9,14)	120,2	120,6	120,4	120,7
A16	A(10,9,14)	118,6	118,6	118,4	118,4
A17	A(9,10,11)	121,0	121,0	121,2	121,2
A18	A(9,10,15)	119,8	119,9	119,6	119,8
A19	A(11,10,15)	119,2	119,1	119,2	119,0
A20	A(10,11,12)	119,5	119,5	119,4	119,4
A21	A(10,11,16)	121,4	121,5	121,5	121,5
A22	A(12,11,16)	119,1	119,1	119,0	119,1
A23	A(11,12,13)	120,1	120,1	120,0	120,0
A24	A(11,12,17)	120,5	120,5	120,5	120,5
A25	A(13,12,17)	119,4	119,5	119,5	119,5
A26	A(12,13,14)	120,8	120,9	120,9	120,9
A27	A(12,13,18)	119,2	119,2	119,2	119,2
A28	A(14,13,18)	119,9	119,9	119,9	120,0
A29	A(9,14,13)	120,0	120,0	120,1	120,1
A30	A(9,14,19)	121,5	121,4	121,5	121,3
A31	A(13,14,19)	118,5	118,6	118,4	118,6
D16	D(2,3,9,14)	41,9	138,9	33,3	146,4

EK-16 3-(3,5-diflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		B3LYP/6-31++G**	
		1.denge	2.denge	1.denge	2.denge
R1	R(1,2)	1,3465	1,3465	1,3669	1,3669
R2	R(1,5)	1,7226	1,7227	1,7344	1,7344
R3	R(1,6)	1,0712	1,0712	1,0813	1,0813
R4	R(2,3)	1,4427	1,4427	1,4385	1,4385
R5	R(2,7)	1,0735	1,0735	1,0838	1,0838
R6	R(3,4)	1,353	1,353	1,3781	1,3781
R7	R(3,9)	1,4835	1,4835	1,4782	1,4782
R8	R(4,5)	1,7205	1,7205	1,7289	1,7289
R9	R(4,8)	1,0714	1,0714	1,0813	1,0813
R10	R(9,10)	1,3933	1,3937	1,4066	1,4065
R11	R(9,14)	1,3937	1,3933	1,4065	1,4067
R12	R(10,11)	1,3779	1,3777	1,3874	1,388
R13	R(10,15)	1,073	1,0732	1,0836	1,0836
R14	R(11,12)	1,3785	1,3787	1,3903	1,3898
R15	R(11,16)	1,3293	1,3293	1,3577	1,3575
R16	R(12,13)	1,3786	1,3785	1,3897	1,3903
R17	R(12,17)	1,0726	1,0726	1,0829	1,0829
R18	R(13,14)	1,3777	1,3779	1,388	1,3874
R19	R(13,18)	1,3293	1,3293	1,3577	1,3576
R20	R(14,19)	1,07	1,07	1,08	1,08
A1	A(2,1,5)	111,9	111,9	111,6	111,6
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	128,2	128,2
A3	A(5,1,6)	120,6	120,6	120,2	120,2
A4	A(1,2,3)	112,8	112,8	113,2	113,2
A5	A(1,2,7)	123,5	123,5	123,1	123,1
A6	A(3,2,7)	123,7	123,7	123,7	123,7
A7	A(2,3,4)	111,6	111,6	111,4	111,4
A8	A(2,3,9)	123,9	123,9	124,3	124,3
A9	A(4,3,9)	124,5	124,5	124,3	124,3
A10	A(3,4,5)	112,4	112,4	112,3	112,3
A11	A(3,4,8)	127,3	127,3	127,8	127,8
A12	A(5,4,8)	120,3	120,3	119,8	119,8
A13	A(1,5,4)	91,3	91,3	91,5	91,5
A14	A(3,9,10)	120,5	120,1	120,7	120,3
A15	A(3,9,14)	120,1	120,5	120,3	120,7
A16	A(10,9,14)	119,4	119,4	119,0	119,0
A17	A(9,10,11)	118,9	119,0	119,2	119,2
A18	A(9,10,15)	121,6	121,7	121,5	121,6
A19	A(11,10,15)	119,5	119,3	119,4	119,3
A20	A(10,11,12)	123,2	123,2	123,4	123,3
A21	A(10,11,16)	118,6	118,6	118,5	118,5
A22	A(12,11,16)	118,2	118,2	118,1	118,1
A23	A(11,12,13)	116,3	116,3	116,0	116,0
A24	A(11,12,17)	121,9	121,9	122,0	122,0
A25	A(13,12,17)	121,9	121,9	122,0	122,0
A26	A(12,13,14)	123,2	123,2	123,4	123,4
A27	A(12,13,18)	118,2	118,2	118,1	118,1
A28	A(14,13,18)	118,6	118,6	118,5	118,5
A29	A(9,14,13)	119,0	119,0	119,2	119,2
A30	A(9,14,19)	121,7	121,6	121,6	121,5
A31	A(13,14,19)	119,3	119,5	119,2	119,4
D16	D(2,3,9,14)	39,3	140,9	31,6	148,4

EK-17 3-(2,3,4-triflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu
geometrilere yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		B3LYP/6-31++G**	
		1.denge	2.denge	1.denge	2.denge
R1	R(1,2)	1,3458	1,3461	1,3666	1,3663
R2	R(1,5)	1,7238	1,7221	1,7348	1,7336
R3	R(1,6)	1,0712	1,0712	1,0813	1,0812
R4	R(2,3)	1,4428	1,4436	1,4387	1,4402
R5	R(2,7)	1,0727	1,0735	1,0825	1,0836
R6	R(3,4)	1,3524	1,3528	1,3785	1,379
R7	R(3,9)	1,4844	1,4838	1,4786	1,4777
R8	R(4,5)	1,7208	1,7195	1,7282	1,7278
R9	R(4,8)	1,0715	1,0703	1,0813	1,0797
R10	R(9,10)	1,3937	1,395	1,4077	1,4086
R11	R(9,14)	1,3868	1,3872	1,4014	1,4024
R12	R(10,11)	1,3846	1,3837	1,3941	1,394
R13	R(10,15)	1,0738	1,0738	1,0845	1,084
R14	R(11,12)	1,3771	1,3774	1,3886	1,3883
R15	R(11,16)	1,0736	1,0736	1,0842	1,0842
R16	R(12,13)	1,3773	1,3764	1,3917	1,3915
R17	R(12,17)	1,3228	1,3228	1,3487	1,3487
R18	R(13,14)	1,3793	1,38	1,3933	1,393
R19	R(13,18)	1,3195	1,3195	1,3431	1,3432
R20	R(14,19)	1,32	1,32	1,35	1,35
A1	A(2,1,5)	112,0	111,8	111,7	111,5
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	128,1	128,1
A3	A(5,1,6)	120,5	120,7	120,2	120,3
A4	A(1,2,3)	112,7	112,9	113,0	113,3
A5	A(1,2,7)	123,7	123,4	123,3	122,9
A6	A(3,2,7)	123,7	123,7	123,7	123,8
A7	A(2,3,4)	111,7	111,5	111,5	111,3
A8	A(2,3,9)	124,6	122,9	125,4	123,0
A9	A(4,3,9)	123,7	125,6	123,1	125,7
A10	A(3,4,5)	112,4	112,4	112,3	112,3
A11	A(3,4,8)	127,2	127,5	127,7	128,0
A12	A(5,4,8)	120,4	120,1	119,9	119,7
A13	A(1,5,4)	91,2	91,4	91,4	91,6
A14	A(3,9,10)	121,5	121,0	121,4	121,1
A15	A(3,9,14)	121,5	122,3	122,1	122,7
A16	A(10,9,14)	117,0	116,8	116,5	116,3
A17	A(9,10,11)	121,9	122,1	122,3	122,5
A18	A(9,10,15)	118,8	119,0	118,5	118,8
A19	A(11,10,15)	119,2	118,9	119,2	118,8
A20	A(10,11,12)	119,0	119,0	119,1	119,2
A21	A(10,11,16)	121,6	121,6	121,6	121,6
A22	A(12,11,16)	119,3	119,4	119,3	119,3
A23	A(11,12,13)	120,6	120,5	120,5	120,4
A24	A(11,12,17)	120,6	120,7	120,7	120,8
A25	A(13,12,17)	118,8	118,9	118,8	118,8
A26	A(12,13,14)	119,4	119,6	119,4	119,4
A27	A(12,13,18)	120,5	120,5	120,6	120,6
A28	A(14,13,18)	120,1	119,9	120,1	120,0
A29	A(9,14,13)	122,0	122,0	122,2	122,3
A30	A(9,14,19)	120,6	121,0	120,8	120,9
A31	A(13,14,19)	117,4	117,0	117,0	116,8
D16	D(2,3,9,14)	47,1	142,2	38,4	151,3

EK-18 3-(2,3,5-triflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu
geometrilere yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		B3LYP/6-31++G**	
		1.denge	2.denge	1.denge	2.denge
R1	R(1,2)	1,3457	1,3458	1,3664	1,3658
R2	R(1,5)	1,7238	1,7225	1,7348	1,734
R3	R(1,6)	1,0711	1,0711	1,0812	1,0812
R4	R(2,3)	1,4426	1,4438	1,4388	1,4404
R5	R(2,7)	1,0723	1,0733	1,0822	1,0834
R6	R(3,4)	1,3529	1,3535	1,379	1,3797
R7	R(3,9)	1,4837	1,4827	1,478	1,4768
R8	R(4,5)	1,7192	1,7182	1,7269	1,7267
R9	R(4,8)	1,0715	1,0699	1,0813	1,0794
R10	R(9,10)	1,3958	1,3971	1,409	1,4099
R11	R(9,14)	1,3856	1,3865	1,4012	1,4025
R12	R(10,11)	1,3751	1,3744	1,3857	1,3855
R13	R(10,15)	1,0728	1,0727	1,0834	1,0829
R14	R(11,12)	1,379	1,3789	1,3906	1,3901
R15	R(11,16)	1,3297	1,3297	1,3572	1,3573
R16	R(12,13)	1,3765	1,376	1,3879	1,3879
R17	R(12,17)	1,0727	1,0726	1,0831	1,083
R18	R(13,14)	1,3796	1,3798	1,3934	1,3929
R19	R(13,18)	1,3222	1,3223	1,3484	1,3485
R20	R(14,19)	1,33	1,33	1,35	1,35
A1	A(2,1,5)	112,0	111,8	111,8	111,5
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	128,1	128,1
A3	A(5,1,6)	120,5	120,7	120,2	120,4
A4	A(1,2,3)	112,6	112,9	113,0	113,3
A5	A(1,2,7)	123,7	123,3	123,3	122,8
A6	A(3,2,7)	123,7	123,8	123,8	123,9
A7	A(2,3,4)	111,7	111,5	111,6	111,3
A8	A(2,3,9)	124,7	122,9	125,4	123,1
A9	A(4,3,9)	123,5	125,5	123,0	125,6
A10	A(3,4,5)	112,4	112,4	112,3	112,3
A11	A(3,4,8)	127,3	127,5	127,8	128,0
A12	A(5,4,8)	120,4	120,1	119,9	119,7
A13	A(1,5,4)	91,3	91,4	91,5	91,6
A14	A(3,9,10)	120,8	120,3	120,8	120,5
A15	A(3,9,14)	121,5	122,3	122,1	122,7
A16	A(10,9,14)	117,8	117,5	117,2	116,8
A17	A(9,10,11)	119,8	120,0	120,1	120,3
A18	A(9,10,15)	120,7	120,8	120,4	120,7
A19	A(11,10,15)	119,6	119,2	119,5	119,0
A20	A(10,11,12)	122,8	122,8	123,1	123,1
A21	A(10,11,16)	118,8	118,8	118,7	118,6
A22	A(12,11,16)	118,4	118,4	118,2	118,3
A23	A(11,12,13)	117,0	116,8	116,7	116,5
A24	A(11,12,17)	121,9	122,0	122,1	122,2
A25	A(13,12,17)	121,1	121,2	121,3	121,3
A26	A(12,13,14)	121,6	121,7	121,6	121,7
A27	A(12,13,18)	119,6	119,6	119,7	119,6
A28	A(14,13,18)	118,8	118,7	118,7	118,6
A29	A(9,14,13)	121,1	121,2	121,4	121,5
A30	A(9,14,19)	120,7	121,1	120,8	120,9
A31	A(13,14,19)	118,1	117,8	117,8	117,5
D16	D(2,3,9,14)	44,0	145,7	36,1	154,3

EK-19 3-(2,3,6-triflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu
geometrilere yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		B3LYP/6-31++G**	
		1.denge	2.denge	1.denge	2.denge
R1	R(1,2)	1,3452	1,3452	1,3657	1,3656
R2	R(1,5)	1,7239	1,7239	1,7347	1,7347
R3	R(1,6)	1,0711	1,0711	1,0811	1,0811
R4	R(2,3)	1,4434	1,4433	1,4406	1,4406
R5	R(2,7)	1,0724	1,0723	1,082	1,0819
R6	R(3,4)	1,352	1,3521	1,3793	1,3791
R7	R(3,9)	1,4843	1,4843	1,478	1,478
R8	R(4,5)	1,7183	1,7183	1,7257	1,7259
R9	R(4,8)	1,0704	1,0706	1,0797	1,0799
R10	R(9,10)	1,3911	1,3911	1,407	1,4065
R11	R(9,14)	1,389	1,3889	1,4048	1,4048
R12	R(10,11)	1,3763	1,3754	1,3869	1,387
R13	R(10,15)	1,3307	1,3313	1,3589	1,359
R14	R(11,12)	1,3856	1,3861	1,3963	1,3961
R15	R(11,16)	1,0733	1,0733	1,0838	1,0838
R16	R(12,13)	1,3745	1,3741	1,3862	1,3864
R17	R(12,17)	1,0736	1,0736	1,0839	1,084
R18	R(13,14)	1,3786	1,3796	1,3925	1,3924
R19	R(13,18)	1,3266	1,3267	1,3514	1,3515
R20	R(14,19)	1,32	1,32	1,35	1,35
A1	A(2,1,5)	111,9	111,9	111,7	111,7
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	128,1	128,1
A3	A(5,1,6)	120,6	120,6	120,3	120,2
A4	A(1,2,3)	112,7	112,7	113,0	113,0
A5	A(1,2,7)	123,6	123,7	123,2	123,3
A6	A(3,2,7)	123,7	123,7	123,8	123,7
A7	A(2,3,4)	111,7	111,7	111,5	111,5
A8	A(2,3,9)	123,9	123,8	124,3	124,2
A9	A(4,3,9)	124,4	124,5	124,2	124,3
A10	A(3,4,5)	112,4	112,4	112,3	112,3
A11	A(3,4,8)	127,4	127,4	127,9	128,0
A12	A(5,4,8)	120,3	120,3	119,8	119,8
A13	A(1,5,4)	91,3	91,3	91,6	91,6
A14	A(3,9,10)	123,0	122,3	123,3	122,9
A15	A(3,9,14)	121,6	122,3	122,2	122,5
A16	A(10,9,14)	115,4	115,4	114,5	114,6
A17	A(9,10,11)	123,5	123,7	124,2	124,2
A18	A(9,10,15)	118,8	118,5	118,6	118,5
A19	A(11,10,15)	117,6	117,9	117,2	117,3
A20	A(10,11,12)	119,2	119,1	119,3	119,2
A21	A(10,11,16)	119,4	119,5	119,3	119,3
A22	A(12,11,16)	121,4	121,5	121,5	121,5
A23	A(11,12,13)	118,9	118,9	118,6	118,6
A24	A(11,12,17)	121,6	121,6	121,8	121,8
A25	A(13,12,17)	119,5	119,5	119,7	119,6
A26	A(12,13,14)	120,7	120,9	121,0	121,0
A27	A(12,13,18)	120,4	120,4	120,3	120,3
A28	A(14,13,18)	118,9	118,8	118,7	118,7
A29	A(9,14,13)	122,2	122,0	122,4	122,4
A30	A(9,14,19)	119,8	120,2	120,0	120,1
A31	A(13,14,19)	118,0	117,8	117,5	117,5
D16	D(2,3,9,14)	44,1	135,4	34,4	144,5

EK-20 3-(2,4,5-triflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu
geometrilinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		B3LYP/6-31++G**	
		1.denge	2.denge	1.denge	2.denge
R1	R(1,2)	1,3458	1,3461	1,3665	1,3661
R2	R(1,5)	1,7237	1,7221	1,7346	1,7336
R3	R(1,6)	1,0712	1,0711	1,0812	1,0812
R4	R(2,3)	1,4427	1,4438	1,4388	1,4405
R5	R(2,7)	1,0725	1,0736	1,0823	1,0836
R6	R(3,4)	1,3525	1,3529	1,3787	1,3793
R7	R(3,9)	1,4841	1,4834	1,4781	1,4771
R8	R(4,5)	1,7206	1,7194	1,728	1,7276
R9	R(4,8)	1,0716	1,0701	1,0814	1,0794
R10	R(9,10)	1,395	1,3963	1,4083	1,4093
R11	R(9,14)	1,3858	1,3865	1,4018	1,4031
R12	R(10,11)	1,3751	1,3742	1,3855	1,3853
R13	R(10,15)	1,0736	1,0736	1,0842	1,0837
R14	R(11,12)	1,3784	1,3785	1,3932	1,3926
R15	R(11,16)	1,3264	1,3263	1,351	1,3512
R16	R(12,13)	1,3762	1,3755	1,3877	1,3876
R17	R(12,17)	1,3221	1,3221	1,3477	1,3477
R18	R(13,14)	1,3793	1,3798	1,39	1,3894
R19	R(13,18)	1,0731	1,073	1,0835	1,0835
R20	R(14,19)	1,33	1,33	1,36	1,36
A1	A(2,1,5)	112,0	111,8	111,7	111,5
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	128,1	128,1
A3	A(5,1,6)	120,5	120,7	120,2	120,4
A4	A(1,2,3)	112,7	112,9	113,0	113,3
A5	A(1,2,7)	123,7	123,3	123,3	122,8
A6	A(3,2,7)	123,6	123,8	123,7	123,9
A7	A(2,3,4)	111,7	111,5	111,5	111,3
A8	A(2,3,9)	124,6	122,9	125,3	123,1
A9	A(4,3,9)	123,7	125,6	123,2	125,6
A10	A(3,4,5)	112,4	112,4	112,3	112,4
A11	A(3,4,8)	127,3	127,4	127,8	127,9
A12	A(5,4,8)	120,3	120,1	119,9	119,7
A13	A(1,5,4)	91,2	91,4	91,4	91,6
A14	A(3,9,10)	121,0	120,4	120,9	120,6
A15	A(3,9,14)	122,3	123,2	122,9	123,6
A16	A(10,9,14)	116,7	116,4	116,2	115,8
A17	A(9,10,11)	121,0	121,2	121,3	121,5
A18	A(9,10,15)	120,4	120,6	120,3	120,5
A19	A(11,10,15)	118,6	118,2	118,5	118,0
A20	A(10,11,12)	120,4	120,4	120,5	120,6
A21	A(10,11,16)	120,2	120,1	120,1	120,0
A22	A(12,11,16)	119,4	119,4	119,3	119,4
A23	A(11,12,13)	120,3	120,2	120,1	120,0
A24	A(11,12,17)	119,7	119,7	119,8	119,9
A25	A(13,12,17)	120,0	120,1	120,1	120,2
A26	A(12,13,14)	118,3	118,5	118,3	118,4
A27	A(12,13,18)	120,8	120,8	120,8	120,8
A28	A(14,13,18)	120,9	120,8	120,9	120,8
A29	A(9,14,13)	123,2	123,3	123,6	123,8
A30	A(9,14,19)	119,4	119,8	119,4	119,6
A31	A(13,14,19)	117,3	117,0	117,0	116,7
D16	D(2,3,9,14)	46,2	143,4	37,4	153,6

EK-21 3-(2,4,6-triflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu
geometrilere yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		B3LYP/6-31++G**	
		1.denge	2.denge	1.denge	2.denge
R1	R(1,2)	1,3455	1,3455	1,3658	1,3658
R2	R(1,5)	1,7239	1,7239	1,7346	1,7346
R3	R(1,6)	1,0711	1,0711	1,0812	1,0812
R4	R(2,3)	1,443	1,4431	1,4404	1,4404
R5	R(2,7)	1,0727	1,0727	1,0821	1,0821
R6	R(3,4)	1,3514	1,3514	1,3786	1,3786
R7	R(3,9)	1,485	1,485	1,4786	1,4785
R8	R(4,5)	1,7196	1,7195	1,7269	1,7268
R9	R(4,8)	1,0708	1,0708	1,0799	1,0799
R10	R(9,10)	1,3897	1,3899	1,4058	1,4055
R11	R(9,14)	1,3899	1,3897	1,4055	1,4058
R12	R(10,11)	1,3795	1,3784	1,3889	1,389
R13	R(10,15)	1,3255	1,3262	1,3551	1,3555
R14	R(11,12)	1,3768	1,3774	1,3881	1,3879
R15	R(11,16)	1,0723	1,0723	1,0828	1,0828
R16	R(12,13)	1,3774	1,3767	1,3879	1,3881
R17	R(12,17)	1,3252	1,3252	1,3534	1,3534
R18	R(13,14)	1,3784	1,3795	1,389	1,3889
R19	R(13,18)	1,0723	1,0723	1,0828	1,0828
R20	R(14,19)	1,33	1,33	1,36	1,36
A1	A(2,1,5)	111,9	111,9	111,7	111,7
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	128,1	128,1
A3	A(5,1,6)	120,6	120,6	120,3	120,2
A4	A(1,2,3)	112,7	112,7	113,1	113,1
A5	A(1,2,7)	123,6	123,6	123,2	123,2
A6	A(3,2,7)	123,6	123,7	123,7	123,7
A7	A(2,3,4)	111,7	111,7	111,5	111,5
A8	A(2,3,9)	123,8	123,8	124,3	124,3
A9	A(4,3,9)	124,5	124,5	124,3	124,3
A10	A(3,4,5)	112,4	112,4	112,3	112,3
A11	A(3,4,8)	127,3	127,3	127,9	127,9
A12	A(5,4,8)	120,3	120,3	119,8	119,8
A13	A(1,5,4)	91,3	91,3	91,5	91,5
A14	A(3,9,10)	123,1	122,3	123,3	122,9
A15	A(3,9,14)	122,3	123,1	122,9	123,3
A16	A(10,9,14)	114,6	114,6	113,8	113,8
A17	A(9,10,11)	124,2	124,4	124,7	124,7
A18	A(9,10,15)	118,8	118,4	118,6	118,5
A19	A(11,10,15)	117,0	117,2	116,7	116,7
A20	A(10,11,12)	117,2	117,0	117,2	117,1
A21	A(10,11,16)	121,0	121,1	121,0	121,0
A22	A(12,11,16)	121,8	121,8	121,8	121,9
A23	A(11,12,13)	122,6	122,6	122,5	122,5
A24	A(11,12,17)	118,7	118,7	118,8	118,8
A25	A(13,12,17)	118,7	118,7	118,8	118,8
A26	A(12,13,14)	117,0	117,2	117,2	117,2
A27	A(12,13,18)	121,8	121,8	121,9	121,8
A28	A(14,13,18)	121,1	121,0	121,0	121,0
A29	A(9,14,13)	124,4	124,2	124,7	124,7
A30	A(9,14,19)	118,4	118,8	118,6	118,7
A31	A(13,14,19)	117,2	117,0	116,7	116,7
D16	D(2,3,9,14)	47,9	131,8	36,4	143,4

EK-22 3-(3,4,5-triflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu
geometrilere yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		B3LYP/6-31++G**	
		1.denge	2.denge	1.denge	2.denge
R1	R(1,2)	1,3467	1,3466	1,3671	1,3671
R2	R(1,5)	1,7222	1,7223	1,734	1,734
R3	R(1,6)	1,0712	1,0712	1,0813	1,0813
R4	R(2,3)	1,4424	1,4424	1,4382	1,4383
R5	R(2,7)	1,0736	1,0736	1,0838	1,0838
R6	R(3,4)	1,3529	1,3529	1,378	1,378
R7	R(3,9)	1,4836	1,4836	1,4781	1,4781
R8	R(4,5)	1,7205	1,7206	1,7289	1,729
R9	R(4,8)	1,0715	1,0714	1,0813	1,0813
R10	R(9,10)	1,3924	1,3929	1,4061	1,406
R11	R(9,14)	1,3929	1,3924	1,4061	1,4061
R12	R(10,11)	1,3775	1,3771	1,3869	1,3874
R13	R(10,15)	1,0732	1,0734	1,0839	1,0839
R14	R(11,12)	1,3781	1,3784	1,3933	1,3929
R15	R(11,16)	1,3226	1,3226	1,3491	1,3491
R16	R(12,13)	1,3784	1,3781	1,3929	1,3933
R17	R(12,17)	1,3196	1,3196	1,3427	1,3427
R18	R(13,14)	1,3771	1,3775	1,3874	1,3869
R19	R(13,18)	1,3226	1,3226	1,3491	1,3491
R20	R(14,19)	1,07	1,07	1,08	1,08
A1	A(2,1,5)	111,9	111,9	111,6	111,6
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	128,2	128,2
A3	A(5,1,6)	120,6	120,6	120,2	120,2
A4	A(1,2,3)	112,8	112,8	113,2	113,2
A5	A(1,2,7)	123,5	123,5	123,1	123,1
A6	A(3,2,7)	123,7	123,7	123,7	123,7
A7	A(2,3,4)	111,6	111,6	111,4	111,4
A8	A(2,3,9)	123,9	123,9	124,2	124,2
A9	A(4,3,9)	124,5	124,5	124,3	124,3
A10	A(3,4,5)	112,4	112,4	112,3	112,3
A11	A(3,4,8)	127,3	127,3	127,8	127,8
A12	A(5,4,8)	120,3	120,3	119,8	119,8
A13	A(1,5,4)	91,3	91,3	91,5	91,5
A14	A(3,9,10)	120,7	120,2	120,8	120,4
A15	A(3,9,14)	120,2	120,6	120,4	120,8
A16	A(10,9,14)	119,1	119,1	118,8	118,8
A17	A(9,10,11)	119,7	119,7	119,9	119,9
A18	A(9,10,15)	121,6	121,7	121,4	121,6
A19	A(11,10,15)	118,7	118,6	118,6	118,5
A20	A(10,11,12)	121,6	121,5	121,6	121,6
A21	A(10,11,16)	120,0	120,0	120,1	120,0
A22	A(12,11,16)	118,5	118,5	118,3	118,4
A23	A(11,12,13)	118,4	118,4	118,1	118,1
A24	A(11,12,17)	120,8	120,8	120,9	121,0
A25	A(13,12,17)	120,8	120,8	121,0	120,9
A26	A(12,13,14)	121,5	121,6	121,6	121,6
A27	A(12,13,18)	118,5	118,5	118,4	118,3
A28	A(14,13,18)	120,0	120,0	120,0	120,1
A29	A(9,14,13)	119,7	119,7	119,9	119,9
A30	A(9,14,19)	121,7	121,6	121,6	121,4
A31	A(13,14,19)	118,6	118,7	118,5	118,6
D16	D(2,3,9,14)	40,6	139,6	32,8	147,3

EK-23 3-(2,3,4,5-tetraflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu
geometrilere yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		B3LYP/6-31++G**	
		1.denge	2.denge	1.denge	2.denge
R1	R(1,2)	1,3456	1,346	1,3665	1,366
R2	R(1,5)	1,724	1,7222	1,7345	1,7335
R3	R(1,6)	1,0711	1,0711	1,0813	1,0812
R4	R(2,3)	1,4425	1,4434	1,4386	1,4402
R5	R(2,7)	1,0725	1,0734	1,0824	1,0835
R6	R(3,4)	1,3526	1,3531	1,3788	1,3794
R7	R(3,9)	1,4839	1,4831	1,478	1,4769
R8	R(4,5)	1,72	1,7184	1,7271	1,7267
R9	R(4,8)	1,0715	1,0701	1,0814	1,0796
R10	R(9,10)	1,3948	1,396	1,4083	1,4092
R11	R(9,14)	1,385	1,3856	1,4005	1,4018
R12	R(10,11)	1,3746	1,3737	1,3851	1,3848
R13	R(10,15)	1,073	1,073	1,0837	1,0832
R14	R(11,12)	1,3789	1,3789	1,3935	1,3929
R15	R(11,16)	1,3232	1,3232	1,349	1,349
R16	R(12,13)	1,3773	1,3766	1,392	1,3919
R17	R(12,17)	1,3165	1,3166	1,3405	1,3406
R18	R(13,14)	1,3802	1,3806	1,3939	1,3935
R19	R(13,18)	1,3164	1,3164	1,3409	1,341
R20	R(14,19)	1,3245	1,3246	1,3502	1,3507
A1	A(2,1,5)	112,0	111,8	111,8	111,6
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	128,1	128,1
A3	A(5,1,6)	120,5	120,7	120,2	120,3
A4	A(1,2,3)	112,6	112,8	112,9	113,2
A5	A(1,2,7)	123,7	123,4	123,3	122,9
A6	A(3,2,7)	123,7	123,8	123,8	123,9
A7	A(2,3,4)	111,8	111,6	111,6	111,4
A8	A(2,3,9)	124,6	122,9	125,3	123,1
A9	A(4,3,9)	123,6	125,5	123,1	125,6
A10	A(3,4,5)	112,3	112,4	112,2	112,3
A11	A(3,4,8)	127,3	127,5	127,8	128,0
A12	A(5,4,8)	120,3	120,1	119,9	119,7
A13	A(1,5,4)	91,2	91,4	91,5	91,6
A14	A(3,9,10)	120,9	120,4	120,9	120,6
A15	A(3,9,14)	121,6	122,4	122,2	122,8
A16	A(10,9,14)	117,5	117,2	117,0	116,7
A17	A(9,10,11)	120,7	120,9	121,1	121,3
A18	A(9,10,15)	120,5	120,7	120,3	120,6
A19	A(11,10,15)	118,8	118,4	118,6	118,1
A20	A(10,11,12)	121,1	121,1	121,2	121,3
A21	A(10,11,16)	120,3	120,2	120,2	120,2
A22	A(12,11,16)	118,6	118,7	118,5	118,6
A23	A(11,12,13)	118,9	118,8	118,6	118,5
A24	A(11,12,17)	121,0	121,0	121,1	121,3
A25	A(13,12,17)	120,1	120,2	120,3	120,3
A26	A(12,13,14)	120,1	120,3	120,1	120,2
A27	A(12,13,18)	119,8	119,7	119,8	119,7
A28	A(14,13,18)	120,1	120,0	120,1	120,0
A29	A(9,14,13)	121,7	121,7	122,0	122,1
A30	A(9,14,19)	120,8	121,2	120,9	121,1
A31	A(13,14,19)	117,5	117,1	117,1	116,8
D16	D(2,3,9,14)	45,6	143,7	37,1	153,0

EK-24 3-(2,3,4,6-tetraflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu
geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		B3LYP/6-31++G**	
		1.denge	2.denge	1.denge	2.denge
R1	R(1,2)	1,3454	1,3455	1,3658	1,3658
R2	R(1,5)	1,7237	1,7236	1,7345	1,7345
R3	R(1,6)	1,0711	1,0711	1,0811	1,0811
R4	R(2,3)	1,4427	1,4428	1,44	1,4402
R5	R(2,7)	1,0726	1,0726	1,0821	1,0822
R6	R(3,4)	1,3517	1,3517	1,3788	1,3788
R7	R(3,9)	1,4847	1,4847	1,4782	1,4783
R8	R(4,5)	1,7184	1,7183	1,726	1,7258
R9	R(4,8)	1,0708	1,0707	1,0801	1,0799
R10	R(9,10)	1,3896	1,3898	1,4052	1,4051
R11	R(9,14)	1,3891	1,389	1,405	1,4054
R12	R(10,11)	1,3794	1,3783	1,3926	1,3927
R13	R(10,15)	1,3194	1,32	1,3471	1,3474
R14	R(11,12)	1,3762	1,3768	1,3912	1,3909
R15	R(11,16)	1,3201	1,32	1,3431	1,343
R16	R(12,13)	1,3772	1,3766	1,3878	1,3879
R17	R(12,17)	1,319	1,319	1,3456	1,3456
R18	R(13,14)	1,3772	1,3782	1,3884	1,3883
R19	R(13,18)	1,0725	1,0725	1,0831	1,0831
R20	R(14,19)	1,327	1,3264	1,3555	1,3552
A1	A(2,1,5)	111,9	111,9	111,7	111,7
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	128,1	128,1
A3	A(5,1,6)	120,6	120,6	120,3	120,3
A4	A(1,2,3)	112,6	112,7	113,0	113,0
A5	A(1,2,7)	123,6	123,6	123,3	123,2
A6	A(3,2,7)	123,7	123,8	123,8	123,8
A7	A(2,3,4)	111,8	111,8	111,6	111,6
A8	A(2,3,9)	123,8	123,8	124,2	124,3
A9	A(4,3,9)	124,5	124,4	124,2	124,2
A10	A(3,4,5)	112,3	112,3	112,2	112,2
A11	A(3,4,8)	127,4	127,4	128,0	127,9
A12	A(5,4,8)	120,3	120,3	119,8	119,9
A13	A(1,5,4)	91,4	91,4	91,6	91,6
A14	A(3,9,10)	122,4	121,6	122,5	122,2
A15	A(3,9,14)	122,4	123,2	123,0	123,4
A16	A(10,9,14)	115,3	115,2	114,5	114,5
A17	A(9,10,11)	122,7	122,9	123,1	123,2
A18	A(9,10,15)	120,2	119,8	120,1	120,0
A19	A(11,10,15)	117,1	117,3	116,8	116,8
A20	A(10,11,12)	119,1	119,0	119,1	119,1
A21	A(10,11,16)	120,2	120,3	120,2	120,2
A22	A(12,11,16)	120,7	120,7	120,7	120,7
A23	A(11,12,13)	120,9	120,9	120,7	120,7
A24	A(11,12,17)	119,0	119,0	119,1	119,1
A25	A(13,12,17)	120,1	120,1	120,3	120,2
A26	A(12,13,14)	117,9	118,1	118,1	118,1
A27	A(12,13,18)	121,0	120,9	121,0	121,0
A28	A(14,13,18)	121,1	121,0	121,0	120,9
A29	A(9,14,13)	124,1	123,9	124,5	124,5
A30	A(9,14,19)	118,6	119,0	118,7	118,8
A31	A(13,14,19)	117,3	117,1	116,8	116,8
D16	D(2,3,9,14)	46,8	133,1	36,6	143,6

EK-25 3-(2,3,5,6-tetraflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu
geometrilere yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		B3LYP/6-31++G**	
		1.denge	2.denge	1.denge	2.denge
R1	R(1,2)	1,3452	1,3452	1,3656	1,3656
R2	R(1,5)	1,7238	1,7237	1,7347	1,7347
R3	R(1,6)	1,071	1,071	1,0811	1,0811
R4	R(2,3)	1,4431	1,4431	1,4403	1,4403
R5	R(2,7)	1,0722	1,0722	1,0818	1,0819
R6	R(3,4)	1,3525	1,3525	1,3796	1,3795
R7	R(3,9)	1,4839	1,4839	1,4777	1,4777
R8	R(4,5)	1,7171	1,717	1,7247	1,7247
R9	R(4,8)	1,0705	1,0705	1,0798	1,0798
R10	R(9,10)	1,3899	1,3899	1,4059	1,4055
R11	R(9,14)	1,3898	1,3898	1,4055	1,4059
R12	R(10,11)	1,3775	1,3767	1,3911	1,3914
R13	R(10,15)	1,3238	1,3243	1,3498	1,3499
R14	R(11,12)	1,3763	1,3766	1,3881	1,3878
R15	R(11,16)	1,3229	1,3228	1,3484	1,3484
R16	R(12,13)	1,3766	1,3763	1,3879	1,3882
R17	R(12,17)	1,0728	1,0728	1,0831	1,0831
R18	R(13,14)	1,3767	1,3775	1,3914	1,3912
R19	R(13,18)	1,3228	1,3229	1,3484	1,3484
R20	R(14,19)	1,32	1,32	1,35	1,35
A1	A(2,1,5)	111,9	111,9	111,7	111,7
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	128,0	128,0
A3	A(5,1,6)	120,6	120,6	120,3	120,3
A4	A(1,2,3)	112,6	112,6	112,9	112,9
A5	A(1,2,7)	123,6	123,6	123,2	123,2
A6	A(3,2,7)	123,8	123,8	123,9	123,9
A7	A(2,3,4)	111,8	111,8	111,6	111,6
A8	A(2,3,9)	123,9	123,9	124,3	124,3
A9	A(4,3,9)	124,3	124,3	124,1	124,1
A10	A(3,4,5)	112,3	112,3	112,2	112,2
A11	A(3,4,8)	127,4	127,4	127,9	127,9
A12	A(5,4,8)	120,3	120,3	119,9	119,9
A13	A(1,5,4)	91,4	91,4	91,6	91,6
A14	A(3,9,10)	122,2	121,5	122,4	122,1
A15	A(3,9,14)	121,5	122,2	122,1	122,4
A16	A(10,9,14)	116,3	116,3	115,5	115,5
A17	A(9,10,11)	121,7	121,9	122,2	122,2
A18	A(9,10,15)	120,3	120,0	120,2	120,1
A19	A(11,10,15)	118,0	118,2	117,7	117,7
A20	A(10,11,12)	121,3	121,1	121,4	121,3
A21	A(10,11,16)	119,0	119,1	118,9	118,9
A22	A(12,11,16)	119,7	119,8	119,7	119,8
A23	A(11,12,13)	117,8	117,8	117,5	117,5
A24	A(11,12,17)	121,1	121,1	121,2	121,3
A25	A(13,12,17)	121,1	121,1	121,3	121,3
A26	A(12,13,14)	121,1	121,3	121,3	121,4
A27	A(12,13,18)	119,8	119,7	119,8	119,7
A28	A(14,13,18)	119,1	119,0	118,9	118,9
A29	A(9,14,13)	121,9	121,7	122,2	122,1
A30	A(9,14,19)	120,0	120,3	120,1	120,2
A31	A(13,14,19)	118,2	118,0	117,7	117,7
D16	D(2,3,9,14)	43,3	136,5	34,4	145,2

EK-26 3-(2,3,4,5,6-pentaflorofenil) tiyofen molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik parametre		HF /6-31++G**		B3LYP/6-31++G**	
		1.denge	2.denge	1.denge	2.denge
R1	R(1,2)	1,3454	1,3454	1,3658	1,3657
R2	R(1,5)	1,7234	1,7234	1,7344	1,7344
R3	R(1,6)	1,0711	1,0711	1,0811	1,0811
R4	R(2,3)	1,4425	1,4425	1,4398	1,44
R5	R(2,7)	1,0725	1,0725	1,0821	1,0821
R6	R(3,4)	1,3521	1,3521	1,3791	1,3791
R7	R(3,9)	1,4845	1,4845	1,4781	1,4781
R8	R(4,5)	1,7172	1,7172	1,725	1,725
R9	R(4,8)	1,0707	1,0707	1,08	1,08
R10	R(9,10)	1,3888	1,389	1,405	1,4046
R11	R(9,14)	1,3889	1,3888	1,4046	1,4049
R12	R(10,11)	1,3783	1,3774	1,3917	1,392
R13	R(10,15)	1,3204	1,321	1,3475	1,3477
R14	R(11,12)	1,3773	1,3778	1,3922	1,392
R15	R(11,16)	1,3171	1,3171	1,3411	1,341
R16	R(12,13)	1,3778	1,3773	1,3919	1,3922
R17	R(12,17)	1,3135	1,3136	1,3386	1,3386
R18	R(13,14)	1,3774	1,3784	1,392	1,3918
R19	R(13,18)	1,317	1,3172	1,3411	1,3411
R20	R(14,19)	1,321	1,3205	1,3477	1,3475
A1	A(2,1,5)	111,9	111,9	111,7	111,7
A2	A(2,1,6)	127,5	127,5	128,0	128,1
A3	A(5,1,6)	120,6	120,6	120,3	120,2
A4	A(1,2,3)	112,6	112,6	112,9	112,9
A5	A(1,2,7)	123,6	123,7	123,2	123,2
A6	A(3,2,7)	123,8	123,8	123,9	123,9
A7	A(2,3,4)	111,9	111,9	111,6	111,6
A8	A(2,3,9)	123,8	123,8	124,2	124,2
A9	A(4,3,9)	124,3	124,3	124,1	124,1
A10	A(3,4,5)	112,3	112,3	112,2	112,2
A11	A(3,4,8)	127,4	127,4	127,9	128,0
A12	A(5,4,8)	120,3	120,3	119,9	119,9
A13	A(1,5,4)	91,4	91,4	91,6	91,6
A14	A(3,9,10)	122,3	121,6	122,5	122,2
A15	A(3,9,14)	121,6	122,3	122,1	122,5
A16	A(10,9,14)	116,1	116,1	115,4	115,4
A17	A(9,10,11)	122,4	122,5	122,9	122,9
A18	A(9,10,15)	120,4	120,0	120,2	120,2
A19	A(11,10,15)	117,3	117,5	116,9	116,9
A20	A(10,11,12)	119,8	119,7	119,9	119,8
A21	A(10,11,16)	120,3	120,4	120,3	120,3
A22	A(12,11,16)	119,9	119,9	119,9	119,9
A23	A(11,12,13)	119,5	119,5	119,2	119,2
A24	A(11,12,17)	120,3	120,2	120,4	120,4
A25	A(13,12,17)	120,2	120,2	120,4	120,4
A26	A(12,13,14)	119,7	119,8	119,8	119,9
A27	A(12,13,18)	119,9	119,9	119,9	119,9
A28	A(14,13,18)	120,4	120,3	120,3	120,3
A29	A(9,14,13)	122,5	122,4	122,9	122,9
A30	A(9,14,19)	120,0	120,4	120,2	120,2
A31	A(13,14,19)	117,5	117,3	116,9	116,9
D16	D(2,3,9,14)	45,7	134,0	36,1	143,8

ÖZGEÇMİŞ

Güventürk UĞURLU 1961 yılında Kars'ta doğdu. İlk, Orta ve Lise öğrenimini burada tamamladı. 1985 yılında İnönü Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'nden mezun oldu. 1989 yılında Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilimdalında Yüksek Lisansını tamamladı. 1987-1992 yılları arasında Türkiye Demir Çelik İşletmeleri Divriği Madenleri Müessesinde çalıştı. 1994 yılından beri Kafkas Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünde çalışmaktadır.

2547 sayılı YÖK kanununun 35. maddesine göre 1999 yılında Gazi Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü'ne geçici olarak görevlendirilen Güventürk UĞURLU halen bu görevini sürdürmektedir.