



**KATYONİK LİGAND – METAL KOMPLEKSLERİ İLE OKSİDATİF
METAN AKTİVASYONU**

Yıldız OCAK

**YÜKSEK LİSANS
KİMYA ANA BİLİM DALI**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

OCAK 2020

Yıldız OCAK tarafından hazırlanan “KATYONİK LİGAND-METAL KOMPLEKSLERİ İLE OKSİDATİF METAN AKTİVASYONU” adlı tez çalışması aşağıdaki jüri tarafından OY BİRLİĞİ ile Gazi Üniversitesi Kimya Ana Bilim Dalında YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Danışman: Doç. Dr. Yavuz DEDE

Kimya Ana Bilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum.

.....

Başkan: Prof. Dr. Nurcan KARACAN

Kimya Ana Bilim Dalı, Gazi Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum.

.....

Üye: Dr. Ersin Emre ÖREN

Biyomedikal Mühendisliği Ana Bilim Dalı, TOBB Ekonomi ve Teknoloji Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum.

.....

Tez Savunma Tarihi: 03.01.2020

Jüri tarafından kabul edilen bu tezin Yüksek Lisans Tezi olması için gerekli şartları yerine getirdiğini onaylıyorum.

.....

Prof. Dr. Sena YAŞYERLİ
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

ETİK BEYAN

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

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

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

Yıldız OCAK

03/01/2020

KATYONİK LİGAND - METAL KOMPLEKSLERİ İLE OKSİDATİF METAN AKTİVASYONU

(Yüksek Lisans Tezi)

Yıldız OCAK

GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Ocak 2020

ÖZET

Küçük molekül aktivasyonu (KMA), doğadan kolayca elde edilebilen, az sayıda atomdan oluşan (su, oksijen, azot, karbondioksit, basit hidrokarbonlar vb.) bileşikleri daha karmaşık ve değerli kimyasallara çevirme süreçlerinin ilk basamağıdır ve çevresel, endüstriyel ile doğal enerji kaynaklarıyla alakalı uygulamaları sebebiyle katalitik kimya alanında önemli bir yere sahiptir. Küçük moleküller oldukça kararlıdır. KMA tepkimeleri bu kararlı yapılara önemli bir müdahale olması nedeniyle büyük bir enerji engeliyle karşılaşılır. Bu sebeple KMA’da en zor adım küçük molekülde bir kovalent bağın kırıldığı ve “aktivasyon” diye adlandırılan basamaktır. Bu tez, KMA’da “aktivasyon” olarak adlandırılan basamağı kolaylaştıracak çalışmalar üzerinedir. Geçiş metali (GM) merkezli aktivatör kompleksler ile bu komplekslerin kimyasal sistemlere uygulanabilirliği açısından birinci sıra geçiş metalleri (Cr, Mn, Fe, Co, Ni) ile çalışılmıştır. Bu komplekslerin düşük reaktiviteye sahip olan metan C–H bağının kırılmasını kolaylaştırması hedeflenmektedir. Tüm bu detaylar gözönünde bulundurulduğunda C–H bağının kırıldığı basamağı bir molekül içi asit-baz tepkimesi olarak değerlendirip bu tepkimeyi kolaylaştıracak katyonik ligandlar (LK) tasarlanmıştır. Ligandlardaki katyonik halkaların metanı polarize ederek C–H aktivasyon bariyerini (TS1/2) düşürmesi hedeflenmektedir. Burada yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) ile yapılan çalışmalar ile tepkimenin seyrine ilişkin genel bir bakış sağlanmıştır.

Bilim Kodu : 20119

Anahtar Kelimeler : Küçük molekül aktivasyonu (KMA), Geçiş metali (GM), CH₄, O₂, Yoğunluk fonksiyoneli teorisi (DFT)

Sayfa Adedi : 268

Danışman : Doç. Dr. Yavuz DEDE

OXIDATIVE METHANE ACTIVATION WITH CATIONIC LIGAND – METAL
COMPLEXES

(M. Sc. Thesis)

Yıldız OCAK

GAZİ UNIVERSITY

GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES

January 2020

ABSTRACT

Small molecule activation (SMA) is easily obtainable from nature, consisting of a small number of atoms (water, oxygen, nitrogen, carbon dioxide, simple hydrocarbons, etc.) is the first step of the processes of converting compounds into more complex and valuable chemicals and it has an important place in the field of catalytic chemistry due to its applications related to environmental, industrial and natural energy resources. Small molecules are very stable. KMA reactions are a major energy barrier due to the significant interference in these stable structures. For this reason, the most difficult step in SMA is the step in which a covalent bond is broken in the small molecule and called “activation”. This thesis is about the studies that will facilitate the step called “activation” in SMA. The transition metal (TM) based activator complexes and the first order transition metals (Cr, Mn, Fe, Co, Ni) were studied in terms of their applicability to chemical systems. These complexes are intended to facilitate the breakage of the low-reactivity methane C-H bond. In view of all these details, cationic ligands (LC) were designed to facilitate the reaction by evaluating the C-H bond breaking step as an intramolecular acid-base reaction. The cationic rings in the ligands are intended to reduce the C – H activation barrier (TS1/2) by polarizing methane. Here, an overview of the course of the reaction is provided by studies with density functional theory (DFT).

Science Code : 20119

Key Words : Small molecule activation (SMA), Transition metal (TM), CH₄, O₂, Density functional theory (DFT).

Page Number : 268

Supervisor : Assoc. Prof. Dr. Yavuz DEDE

TEŞEKKÜR

Bu tez çalışmasının oluşumunda, planlanmasında, araştırılmasında ve yürütülmesinde verdiği önemli destekle beraber, yüksek lisans eğitimim boyunca engin bilgi ve tecrübesinden yararlandığım, öğrencisi olmaktan onur ve mutluluk duyduğum değerli danışmanım Doç. Dr. Yavuz DEDE'ye teşekkürlerimi sunarım.

Tezimin konusunu oluşturan projeye (Proje kodu: 117Z337) finansal desteğinden dolayı, TÜBİTAK'a (Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu), CPU zamanı için TÜBİTAK ULAKBİM'e (Ulusal Akademik Ağ ve Bilgi Merkezi, TR-Grid) ve Gazi Üniversitesi Fizik Bölümü'ne (Pizag) müteşekkirim.

Yüksek lisans eğitimim boyunca, desteklerini esirgemeyen laboratuvar arkadaşlarım Muhammed BÜYÜKTEMİZ, Ufuk ŞAHİN, Osama QANDEEL ile bu süreçte her türlü yardıma koşan, nazımı çeken, desteğini bir an bile esirgemeyen Dilara Berna YILDIZ'a ve Gazi Üniversitesinde edindiğim dostlarıma teşekkür ederim.

Son olarak, her zaman yanımda olan aileme; ilgi ve anlayışıyla bana destek olan annem Gülfiye OCAK'a başarımına her zaman inanan babam Hüseyin OCAK'a, koruyucu meleğim abim Erencan OCAK'a ve her anımda yanımda olan sevgili Mert YILDIZ'a en içten teşekkürlerimi sunuyorum.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
ABSTRACT.....	v
TEŞEKKÜR.....	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	x
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....	xiv
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	xxi
1. GİRİŞ.....	1
2. KURAMSAL TEMELLER	3
2.1. Küçük Molekül Aktivasyonu	3
2.2. C–H Aktivasyonu.....	3
2.3. Non-heme Enzimler	4
2.4. 3d Geçiş Metalleri	4
2.5. Katyonik Ligandlar	5
3. GEREÇ VE YÖNTEM.....	7
3.1. Kuantum Kimyası	7
3.1.1. Potansiyel enerji yüzeyi	7
3.1.2. Born-oppenheimer yaklaşımı	8
3.1.3. Hartree-fock teorisi	8
3.1.4. Temel setler.....	9
3.1.5. Yoğunluk fonksiyonel teorisi.....	10
3.2. Hibrit Fonksiyoneller	11
3.3. Hesapsal Detaylar.....	11
4. BULGULAR VE YORUM.....	13

	Sayfa
4.1. Ligand Analizi.....	13
4.1.1. LK1 ligandı	14
4.1.2. LK2 ligandı	23
4.1.3. LK3 ligandı	31
4.1.4. LK4 ligandı	39
4.1.5. LK5 ligandı	48
4.1.6. LK6 ligandı	56
4.1.7. LK7 ligandı	64
4.1.8. LK8 ligandı	71
4.1.9. LK9 ligandı	79
4.1.10. LK10 ligandı	87
4.1.11. Katyonik ligand-metal komplekslerinde ESP ve C–H aktivasyon bariyerleri korelasyonu	94
4.1.12. Metal-C–H aktivasyon bariyerleri korelasyonu	105
5. SONUÇ	109
KAYNAKLAR	117
EKLER.....	123
EK-1. LK1 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları.....	124
EK-2. LK2 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları.....	132
EK-3. LK3 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları.....	138
EK-4. LK4 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları.....	145

Sayfa

EK-5. LK5 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları	153
EK-6. LK6 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları.	161
EK-7. LK7 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları	170
EK-8. LK8 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları	177
EK-9. LK9 ligandının 4 farklı metal (Fe(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları	186
EK-10. LK10 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları	192
EK-11. Katyonik Ligand – Metal Komplekslerinin 1 ve 2 numaralı yapılarının üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ, UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) Rölatif Enerjileri ($\text{kkal} \cdot \text{mol}^{-1}$).....	199
EK-12. Kartezyen koordinatlar	202
ÖZGEÇMİŞ	268

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.1. Fe(II)LK1-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	15
Çizelge 4.2. Ni(II)LK1-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	17
Çizelge 4.3. Co(II)LK1-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	19
Çizelge 4.4. Mn(II)LK1-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	20
Çizelge 4.5. Cr(II)LK1-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	22
Çizelge 4.6. Fe(II)LK2-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	24
Çizelge 4.7. Ni(II)LK2-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	25
Çizelge 4.8. Co(II)LK2-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	27
Çizelge 4.9. Mn(II)LK2-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	28
Çizelge 4.10. Cr(II)LK2-CH ₄ kompleksinin Å (Angstrom) cinsinden bağ uzunlukları.	29
Çizelge 4.11. Fe(II)LK3-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	31
Çizelge 4.12. Ni(II)LK3-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	33
Çizelge 4.13. Co(II)LK3-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	35
Çizelge 4.14. Mn(II)LK3-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	36
Çizelge 4.15. Cr(II)LK3-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	38
Çizelge 4.16. Fe(II)LK4-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	40
Çizelge 4.17. Ni(II)LK4-CH ₄ kompleksinin Å (Angstrom) cinsinden bağ uzunlukları.	42
Çizelge 4.18. Co(II)LK4-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	43
Çizelge 4.19. Mn(II)LK4-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	45
Çizelge 4.20. Cr(II)LK4-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	47
Çizelge 4.21. Fe(II)LK5-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	48
Çizelge 4.22. Ni(II)LK5-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	50
Çizelge 4.23. Co(II)LK5-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	51
Çizelge 4.24. Mn(II)LK5-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	53
Çizelge 4.25. Cr(II)LK5-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	55

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.26. Fe(II)LK6-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları.....	57
Çizelge 4.27. Ni(II)LK6-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	59
Çizelge 4.28. Co(II)LK6-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları.....	60
Çizelge 4.29. Mn(II)LK6-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları.....	61
Çizelge 4.30. Cr(II)LK6-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	63
Çizelge 4.31. Fe(II)LK7-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	64
Çizelge 4.32. Ni(II)LK7-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	66
Çizelge 4.33. Co(II)LK7-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları.....	67
Çizelge 4.34. Mn(II)LK7-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	69
Çizelge 4.35. Cr(II)LK7-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	70
Çizelge 4.36. Fe(II)LK8-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	72
Çizelge 4.37. Ni(II)LK8-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	74
Çizelge 4.38. Co(II)LK8-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları.....	75
Çizelge 4.39. Mn(II)LK8-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları.....	76
Çizelge 4.40. Cr(II)LK8-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	78
Çizelge 4.41. Fe(II)LK9-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	80
Çizelge 4.42. Ni(II)LK9-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	82
Çizelge 4.43. Co(II)LK9-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları.....	83
Çizelge 4.44. Mn(II)LK9-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	84
Çizelge 4.45. Cr(II)LK9-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	86
Çizelge 4.46. Fe(II)LK10-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları	87
Çizelge 4.47. Ni(II)LK10-CH ₄ kompleksinin Å (Angstrom) cinsinden bağ uzunlukları.....	89
Çizelge 4.48. Co(II)LK10-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları.....	90
Çizelge 4.49. Mn(II)LK10-CH ₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları.....	92
Çizelge 4.50. Cr(II)LK10-CH ₄ kompleksinin Å (Angstrom) cinsinden bağ uzunlukları.....	93

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.51. Katyonik Ligand – Fe(II) Kompleksinin (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H _c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol ⁻¹)	95
Çizelge 4.52. Katyonik Ligand – Ni(II) Kompleksinin (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H _c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol ⁻¹)	95
Çizelge 4.53. Katyonik Ligand – Co(II) Kompleksinin (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H _c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol ⁻¹)	96
Çizelge 4.54. Katyonik Ligand – Mn(II) Kompleksinin (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H _c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol ⁻¹)	97
Çizelge 4.55. Katyonik Ligand – Cr(II) Kompleksinin (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H _c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol ⁻¹)	97
Çizelge 4.56. Katyonik Ligand – Fe(II) Kompleksinin (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H _c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol ⁻¹)	98
Çizelge 4.57. Katyonik Ligand – Ni(II) Kompleksinin (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H _c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol ⁻¹)	98
Çizelge 4.58. Katyonik Ligand – Co(II) Kompleksinin (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H _c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol ⁻¹)	99
Çizelge 4.59. Katyonik Ligand – Mn(II) Kompleksinin (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H _c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol ⁻¹)	99
Çizelge 4.60. Katyonik Ligand – Cr(II) Kompleksinin (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H _c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol ⁻¹)	100
Çizelge 4.61. Katyonik Ligand – Fe(II) Kompleksinin (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H _c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol ⁻¹)	100
Çizelge 4.62. Katyonik Ligand – Ni(II) Kompleksinin (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H _c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol ⁻¹)	101

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.63. Katyonik Ligand – Co(II) Kompleksinin (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H _c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol ⁻¹)	102
Çizelge 4.64. Katyonik Ligand – Mn(II) Kompleksinin (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H _c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol ⁻¹)	102
Çizelge 4.65. Katyonik Ligand – Cr(II) Kompleksinin (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H _c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol ⁻¹)	103



ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Heme ve non-heme tipi enzimlerin yapısı	4
Şekil 2.2. Çalışılan birinci sıra geçiş metalleri	5
Şekil 3.1. Temsili potansiyel enerji yüzeyi	7
Şekil 4.1. İncelenen C–H bağ aktivasyonu/kırılması basamağı. L: Üç dişli ligand, 0: Aktivatör kompleks, 1: Aktivatör–süperokso—metan kompleksi (adduct), TS1/2: hidrojen/proton transferi aktifleşmiş kompleksi/geçiş hal yapısı, 2: Aktivatör–hidroperokso–metil kompleksi, M: Cr(II), Mn(II), Fe(II), Co(II), Ni(II)	13
Şekil 4.2. Tasarlanan katyonik ligandlar. iPr: izopropil	13
Şekil 4.3. Fe(II)LK1 kompleksinin 1, TS1/2 ve 2 yapılarının metan ile etkileşimi. Sadelik için hidrojen atomları gösterilmemiştir.....	14
Şekil 4.4. Fe(II)LK1 kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)	16
Şekil 4.5. Ni(II)LK1 kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)	18
Şekil 4.6. Co(II)LK1 kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)	19
Şekil 4.7. Mn(II)LK1 kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)	21
Şekil 4.8. Cr(II)LK1 kompleksinin Dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)	22
Şekil 4.9. Fe(II)LK2 kompleksinin 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının metan ile etkileşimi. Sadelik için hidrojen atomları gösterilmemiştir	23

Şekil	Sayfa
Şekil 4.10. Fe(II)LK2 kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	24
Şekil 4.11. Ni(II)LK2 kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	26
Şekil 4.12. Co(II)LK2 kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	27
Şekil 4.13. Mn(II)LK2-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	29
Şekil 4.14. Cr(II)LK2-CH ₄ kompleksinin Dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	30
Şekil 4.15. Fe(II)LK3 kompleksinin 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının metan ile etkileşimi. Sadelik için hidrojen atomları gösterilmemiştir.	31
Şekil 4.16. Fe(II)LK3-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	32
Şekil 4.17. Ni(II)LK3-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	34
Şekil 4.18. Co(II)LK3-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	35
Şekil 4.19. Mn(II)LK3-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	37

Şekil	Sayfa
Şekil 4.20. Cr(II)LK3-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	38
Şekil 4. 21. Fe(II)LK4 kompleksinin 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının metan ile etkileşimi. Sadelik için hidrojen atomları gösterilmemiştir	39
Şekil 4.22. Fe(II)LK4-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	41
Şekil 4.23. Ni(II)LK4-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	43
Şekil 4.24. Co(II)LK4-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	44
Şekil 4.25. Mn(II)LK4-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	46
Şekil 4.26. Cr(II)LK4-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	47
Şekil 4.27. Fe(II)LK5-CH ₄ kompleksinin 1, TS1/2 ve 2 nolu yapıları. Sadelik için hidrojen atomları gösterilmemiştir	48
Şekil 4.28. Fe(II)LK5-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	49
Şekil 4.29. Ni(II)LK5-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	51

Şekil	Sayfa
Şekil 4.30. Co(II)LK5-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	52
Şekil 4.31. Mn(II)LK5-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	54
Şekil 4.32. Cr(II)LK5-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	56
Şekil 4.33. Fe(II)LK6-CH ₄ kompleksinin 1, TS1/2 ve 2 nolu yapıları. Sadelik için hidrojen atomları gösterilmemiştir.	57
Şekil 4.34. Fe(II)LK6-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	58
Şekil 4.35. Ni(II)LK6-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	59
Şekil 4.36. Co(II)LK6-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	61
Şekil 4.37. Mn(II)LK6-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	62
Şekil 4.38. Cr(II)LK6-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)	63
Şekil 4.39. Fe(II)LK7-CH ₄ kompleksinin 1, TS1/2 ve 2 nolu yapıları. Sadelik için hidrojen atomları gösterilmemiştir.	64
Şekil 4.40. Fe(II)LK7-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	65

Şekil	Sayfa
Şekil 4.41. Ni(II)LK7-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	67
Şekil 4.42. Co(II)LK7-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	68
Şekil 4.43. Mn(II)LK7-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	69
Şekil 4.44. Cr(II)LK7-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	71
Şekil 4.45. Fe(II)LK8-CH ₄ kompleksinin 1, TS1/2 ve 2 nolu yapıları. Sadelik için hidrojen atomları gösterilmemiştir.	72
Şekil 4.46. Fe(II)LK8-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	73
Şekil 4.47. Ni(II)LK8-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	75
Şekil 4.48. Co(II)LK8-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	76
Şekil 4.49. Mn(II)LK8-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	77
Şekil 4.50. Cr(II)LK8-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	79
Şekil 4.51. Fe(II)LK9-CH ₄ kompleksinin 1, TS1/2 ve 2 nolu yapıları. Sadelik için hidrojen atomları gösterilmemiştir.	80
Şekil 4.52. Fe(II)LK9-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	81

Şekil	Sayfa
Şekil 4.53. Ni(II)LK9-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	82
Şekil 4.54. Co(II)LK9-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)	84
Şekil 4.55. Mn(II)LK9-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	85
Şekil 4.56. Cr(II)LK9-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	86
Şekil 4.57. Fe(II)LK10-CH ₄ kompleksinin 1, TS1/2 ve 2 nolu yapıları. Sadelik için hidrojen atomları gösterilmemiştir	87
Şekil 4.58. Fe(II)LK10-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	88
Şekil 4.59. Ni(II)LK10-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	90
Şekil 4.60. Co(II)LK10-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	91
Şekil 4.61. Mn(II)LK10-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	92
Şekil 4.62. Cr(II)LK10-CH ₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol).....	94
Şekil 4.63. LK1, LK2 ve LK3 ligandlarının C–H aktivasyon bariyerleri ile H _c atomik yük korelasyonu	104

Şekil	Sayfa
Şekil 4.64. LK1, LK2, LK3, LK4, LK5 ve LK6 ligandlarının C–H aktivasyon bariyerleri ile H_c atomik yük korelasyonu	104
Şekil 4.65. (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde ligandların metal-C–H aktivasyon bariyeri korelasyonu.....	105
Şekil 4.66. (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde ligandların metal-C–H aktivasyon bariyeri korelasyonu.....	106
Şekil 4.67. (U) ω B97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde ligandların metal-C–H aktivasyon bariyeri korelasyonu.....	107
Şekil 4.68. (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve (U) ω B97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde ligandların metal-C–H aktivasyon bariyeri korelasyonu.....	108

SİMGELER VE KISALTMALAR

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

Simgeler

Açıklamalar

$\text{\AA}$	Ångstrom (10^{-10} m)
E_h	Hartree (27,211 eV)
$\hat{H}_{el}$	Elektronik Hamiltonian
h	İndirgenmiş Planck sabiti ($1,055 \times 10^{-34}$ J.s)
s_i	Elektron spin operatörleri
ϵ	Dielektrik sabiti

Kısaltmalar

Açıklamalar

cc-pVTZ	Correlation consistent triple- zeta basis set (Korelasyon uyumlu triplezeta Dunning tipi temel set)
DFT	Density Funtional Theory (Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi)
ESP	Elektrostatik Potansiyel Yük
GGA	Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı
GM	Geçiş metali
GTO	Gaussian tipi orbital
KMA	Küçük molekül aktivasyonu
LANL2DZ	Los-Alamos National Laboratory Double- ζ ECP
LCAO	Linear Combination of Atomic Orbitals
LDA	Local Density Approximation
MK	Merz-Singh-Kollmann
MMO	Monooksijenaz enzimi
PES	Potansiyel Enerji Seviyesi
SCF	Self-Consistent Field
STO	Slater tipi orbital
TF	Thomas-Fermi
TS	Transition State (Geçiş hali)

1. GİRİŞ

Doğada bol miktarda bulunan bir sera gazı olan metanın [1] karbon döngüsüne kazandırılması kimyanın aktif araştırma konularından biridir. Metanotrofik bakteriler metan monooksijenaz enzimi (MMO) sayesinde metan-metanol çevrimini kolaylıkla gerçekleştirebilmektedirler [2-4]. Fakat laboratuvar ortamında bu dönüşümleri uygun koşullarda ve verimli bir şekilde gerçekleştirebilmek zor bir iştir.

Küçük molekül aktivasyonu (KMA), doğadan kolayca kazanılabilen, az sayıda atomdan oluşan (su, oksijen, azot, karbondioksit, basit hidrokarbonlar vb.) bileşikler daha karmaşık ve değerli kimyasallara çevirme süreçlerinin ilk basamaklarıdır [5, 6]. Biyolojik sistemler tarafından gerçekleştirilen KMA tepkimeleri pek çok yaşamsal faaliyetlerin devamlılığı için zorunludur. KMA'nın anlaşılması sayesinde yapay fotosentez, yenilenebilir enerji kaynaklarının etkinleştirilmesi ve fosil yakıtı bağımlılığının azalması gibi alanlarda önemli dönüşümler sağlanabilir [5, 6]. KMA'daki temel sorun basit molekülleri karmaşık sistemlere çevirme sürecinde sadece sınırlı sayıda tepkime için uygulanabiliyor olmasıdır. Bu duruma bir çözüm yolu olarak, öncelikle biyolojik ve katalitik sistemlerin reaktivitelerinin anlaşılmasına ve bunun sonucunda ortaya çıkan bulguların model kimyasal sistemlerde uygulanmasına gereksinim vardır [5, 6].

KMA'da en zor adım küçük molekülde bir kovalent bağın kırıldığı ve "aktivasyon" olarak adlandırılan basamaktır. Bunlardan biri olan metan aktivasyonunda da C-H bağını kırmak, bağın enerjisi açısından ($104 \text{ kkal} \cdot \text{mol}^{-1}$) zor bir iştir [7]. Bu basamağı kolaylaştıracak sistemler üzerine çalışmalar yapılmakta olup, bunlardan birisi geçiş metali merkezli (GM) ligand sistemleridir. GM'nin koordine olduğu ligand sistemi metal merkezini substratın koordine olmasını sağlayacak şekilde yapılandırabilir ve GM merkezini tepkimeye istekli bir konumda tutabilir.

Bu tez çalışmasında hem olmayan enzimler ile oluşturulmuş geçiş metali merkezli ve katyonik kısma sahip komplekslerin metan ile etkileşimleri incelenerek C-H bağ aktivasyonu çalışılmıştır. Kompleksteki katyonik kısım metanı polarize ederek $104 \text{ kkal} \cdot \text{mol}^{-1}$ 'lik bağ enerjisine sahip olan C-H bağının kırılmasını kolaylaştırmak için tasarlanmış olup, tezin detaylarında katyonik kısım ile metan arasındaki etkileşimden bahsedilmiştir. Bilindiği kadarıyla C-H bağ aktivasyonu ile ilgili literatürde benzer bir çalışma bulunmamaktadır.

Literatürde ligand ortamının metan aktivasyonuna etkisi ile ilgili birçok çalışma bulunmakta olup, bunlardan biri Cundari'nin, deneysel olarak bilinen bir sistemde, redoks aktif bir üç dişli ligand ve metal merkezi elektronik olarak etkileyen nitril ligandı ile yaptığı hesaplamalardır [8]. Alcarazo, Au(I) ve Pt(II) metal merkezli katyonik piridinofosfin gruplarını kullanarak hidroarilleme reaksiyonlarını ve indirgenme tepkimelerini incelemiştir [9-11]. Yine bir diğer çalışmasında α -katyonik fosfinlerle yaptığı deneylerde katyonik fosfinlerin Pt(II) ve Au(I) için hidroarilleme veya sikloizomerizasyon katalitik reaksiyonlarını raporlamıştır [12]. Alcarazo'nun yakın tarihli bir diğer çalışmasında ise bir Pt katalizörü geliştirilerek enin sikloizomerizasyonu ve siklopropana dönüşüm aktivitesi raporlanmıştır [10]. Katyonik ligandların potansiyelini açıklamaya yönelik olup metan veya C-H bağ aktivasyonu haricinde gerçekleştirilmiş Sonogashira kenetlenme reaksiyonları gibi deneysel çalışmalar da literatürde yerlerini almıştır [13].

Neumann ve arkadaşları katyonik ligand Pt(II) komplekslerini kullanarak flor ile zayıflatılmış (perfloro) alkollerin C-H bağlarını oksitleyebildiklerini raporlamışlardır [14]. Sanford ve arkadaşları ise Pd(II) ve Pt(II) komplekslerini kullanarak aromatik C-H bağ oksidasyonunu ve yer değişim tepkimelerini incelemişlerdir [15]. Yine bir diğer çalışmada dikatyonik ligandlar ile Pt merkezli oksidasyon çalışmalarında dumanlı H₂SO₄ gibi ekstrem oksidasyon koşulları kullandıklarını raporlamışlardır [16].

Metan C-H bağ aktivasyonunda yüksek enerjili (düşük kararlılıkta) katyonik gaz fazı yapılar çalışılmış olup önerilen bileşikler elektrosprey iyonizasyon gibi özel tekniklerle elde edilmekte ve kısa ömürlü olmaktadır [17-19]. Düşük kararlılıkta olan metal-oksijen katyonları [20, 21] KMA prensipleri için önemlidirler.

2. KURAMSAL TEMELLER

2.1. Küçük Molekül Aktivasyonu

Biyolojik yapılarda az sayıda atomdan oluşan bileşikler daha karmaşık ve değerli kimyasallara dönüştürecek sistemler var iken, KMA 'nın sorunu bu basit bileşikler karmaşık kimyasallara dönüştürecek süreçleri sınırlı sayıda tepkime için uygulayabiliyor olmasıdır. Bu sorunun çözümü olarak KMA çalışmaları ile bu küçük molekülleri aktive eden sistemlerin çalışma prensibinin anlaşılır olması esastır. Bu sayede yapay fotosentez, fosil yakıt talebinin azalması ve enerji kaynaklarının etkinleştirilmesi gibi alanlarda ilerleme kaydedilebilir [5, 6].

Literatürde geçiş metallerinin bu tür çalışmalar için bir alternatif oluşturduğu [22-24] ve GM komplekslerinin, molekülleri katalitik veya termodinamik tepkimelerle aktive ettiği çalışmalar bulunmaktadır [25-27].

2.2. C–H Aktivasyonu

Temel düzeyde karbon-hidrojen ve karbon-karbon bağları doğada en yaygın olan kimyasal bağlardır [28]. Alkanlar birincil yakıt kaynağıdır [28]. Doğalgazın ana bileşeni ve karbondioksitten daha zararlı bir sera gazı olan metanın [28], dönüştürülmesi önemli bir konudur.

Metan aktivasyonu, $104 \text{ kkal} \cdot \text{mol}^{-1}$ 'lük yüksek C–H bağı enerjisi sebebiyle zor bir hedeftir [7]. Metan-metanol oksidasyonu, metanotrofik bakterilerdeki metan monooksijenaz (MMO) enzimi ile gerçekleştirilmektedir [29-31]. Laboratuvar ortamında metanın metanole dönüştürülmesi sonucunda, zararlı bir sera gazı başka bir formda doğadan uzaklaştırılmış olacak ve depolanması daha kolay olan bir akaryakıtı dönüşümü sağlanabilecektir.

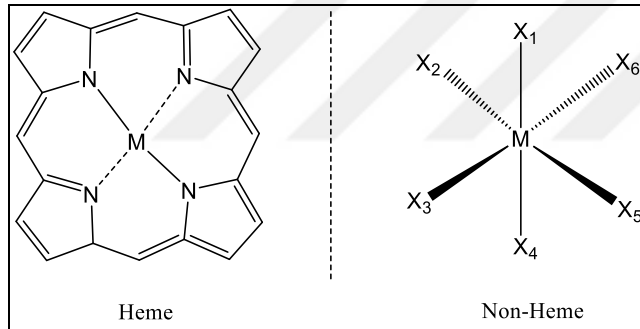
Schwarz ve arkadaşları ideal koşullar altında gaz fazındaki metanın termal aktivasyonunu araştırmak için mekanik varyantları tanımlamışlardır. Bu çalışmada Lewis-asidik alanların, metan aktivasyonunda kapalı kabuk metal oksit iyonları ile etkileşimi sunulmuştur [32] .

Horn ve Schlögl'in yaptıkları bir çalışmada hidrojen siyanür, etilen, metanol, formaldehit, metil klorür, metil bromür ve aromatlara dönüşen heterojen katalitik metan

dönüşümündeki gelişmelerini sunmaktadırlar. Ayrıca çalışmada metanın kimyasallara tek adımlı dönüşümü üzerine odaklanılmış olup metanın oksijen ve kükürt aracılığıyla etilene oksidatif bağlanması, metanın formaldehit ve metanole doğrudan oksidasyonu, metanın metil klorür ve metil bromüre halojenasyonu, oksi halojenasyonu ve son olarak benzene ve ilgili aromatlara oksidatif olmayan metan aromarizasyonundan bahsetmişlerdir [33].

2.3. Non-heme Enzimler

Heme tipi enzimlerde metal merkezine porfirin türevleri koordine olur [34]. Non-heme enzimler, substrat ve moleküler oksijeni aynı merkezde bulundurur. Non-heme (hem olmayan) enzimlere metan $\rightarrow$ metanol dönüşümünü gerçekleştiren metan monooksijenaz [35] örneği verilirken oksijen indirgenmesinin gerçekleştirildiği sitokrom c-Oksidaz [36] ise heme tipi enzimler için örnek teşkil etmektedir. Her iki enzim tipinde de aktif merkezinde tek metal atomu bulunmaktadır.



Şekil 2.1. Heme ve non-heme tipi enzimlerin yapısı

Ayrıca non-heme enzimler oksijen algılama, genetik kodların onarımı gibi biyolojik süreçlerde çeşitli görevler (oksidatif halkalaşma, oksijenasyon, dioksijenasyon, hidroperoksidasyon, epoksidasyon...) üstlenmişlerdir [37-39].

2.4. 3d Geçiş Metalleri

Küçük molekül aktivasyonu (KMA) literatürde biyolojik sistemlerdekine benzer şekilde [40-43] ikinci ve üçüncü sıra geçiş metalleri (Ru, Ir gibi) kullanılmaktadır [22, 23]. Bu ağır atomların bulunduğu bileşikler model çalışmalar açısından oldukça önemli bir yere sahiptir. Öte yandan dünyada eser miktarda bulunmaları yeni teknolojiler açısından engel teşkil etmektedir [44].

²⁴ Cr	²⁵ Mn	²⁶ Fe	²⁷ Co	²⁸ Ni
------------------	------------------	------------------	------------------	------------------

Şekil 2.2. Çalışılan birinci sıra geçiş metalleri

Diğer geçiş metalleri ile kıyaslandığında birinci sıra GM'leri (Cr, Mn, Fe, Co, Ni) doğadan kolayca elde edilebilirler [45, 46] ve biyolojik sistemlerde farklı yük ve spin halleri ile yer alırlar [44]. Bu sebeple son dönemlerde kimyasal sistemlerin pratik uygulamalarının hedeflendiği çalışmalarda birinci sıra geçiş metalleri tercih edilmektedir [47].

2.5. Katyonik Ligandlar

2015 yılında sonuçlanan Yavuz DEDE yürütücülüğündeki 212T047 nolu TÜBİTAK-1001/COST projesi nötral ligandlarla C–H aktivasyonu çalışmalarına değinmiş olup bu çalışmalar ışığında C–H aktivasyon bariyerini metanı polarize ederek düşürecek katyonik ligandların tasarımı ve çalışmalarının olduğu 117Z337 nolu TÜBİTAK-1001 proje ve beraberinde bu tez ortaya çıkmıştır.

Katyonik ligandların C–H bağı aktivasyonundaki rolü metanı pozitif polarize etme fikridir. Metanın inert yapısını polarize edebilmek için öncelikle metan, elektrostatik olarak pertürbe edilir ve proton transferine hazır hale getirilir. Bu durum molekül içi bir asit – baz tepkimesi gibi düşünülebilir. Bu tepkimeyi gerçekleştirebilecek bir ligand ortamı tasarlanmış olup (Şekil 4.2.), bu tasarlanan liganlarda katyonik kısmın rolü metan protonunun pozitifliğini arttırarak oksijene transferini kolaylaştırmaktır.

Literatürde katyonik ligand çalışmaları bulunmkata olup, bunlardan biri D. Berglund ve D. Week' e ait çalışmadır. Bu çalışmada dört üyeli halkada bir kuarterner fosfor atomu içeren monodentat fosfin sentezi yapılmıştır ve fosfin katyonunun trifenilfosfin işlevi gördüğü saptanmıştır. Sentezde üç atomdan uzakta bulunan pozitif yük, kuaterner olmayan fosfin grubunun koordinasyon özellikleri üzerinde çok az etki gösterdiği raporlanmıştır [48]. 2007 yılında Jenkins bir çalışmasında iki katyonik ligand ve bunların Ag (I) koordinasyon bileşiklerini oluşturup karakterize etmiştir ve organometalik polimer ile unimoleküler kompleksler elde edip yapısal farklılıklarını gözlemlemiştir [49]. 2019 yılında J. Dutton' a ait bir çalışmada ise azot bazlı ligandlar tarafından desteklenen katyonik Au (III)

komplekslerinin sentezi ve karakterizasyonu raporlanmıřtır. Bu alıřmada fosfin reaksiyonları ile elde edilmiř altın (I) komplekslerinin iyot (III) reaktifleri ile reaksiyonları fosfin ligandının oksidasyonu ile sonulanır [50].



3. GEREÇ VE YÖNTEM

3.1. Kuantum Kimyası

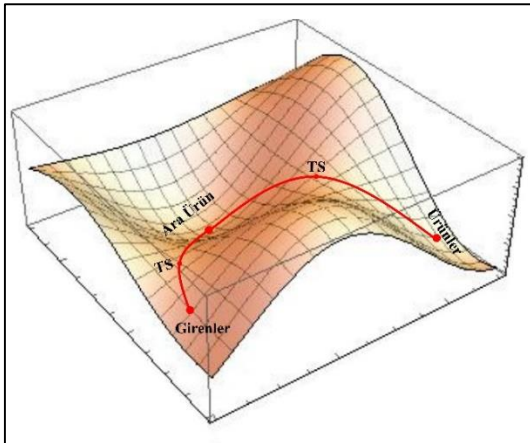
Kuantum kimyası, kimyasal sistemlerin teorik çalışmalarına kuantum mekaniğinin uygulanmasıdır. Tek tek atomların ve moleküllerin temel halini, uyarılmış hallerini ve kimyasal reaksiyonlar sırasında meydana gelen geçiş hallerini inceler. İncelenen sistemler için Schrödinger denklemini çözmeyi, atom ya da moleküllerin karmaşıklığı varsayımlarını ve yaklaşımlarının basitleştirilmesini amaçlar. Schrödinger dalga denkleminin zamandan bağımsız ve relativistik olmayan hali Eş. 2.1’de verilmiştir.

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (2.1)$$

Schrödinger dalga denkleminde $\hat{H}$ Hamiltonian operatörü, Ψ dalga fonksiyonu, E enerji öz değerini tanımlar. Hamiltonian operatörü, dalga fonksiyonuna uygulandığında elde edilen eigendeğer sistemin elektronik enerjisi bulunur.

3.1.1. Potansiyel enerji yüzeyi

Potansiyel enerji yüzeyi (PES), bir sistemin potansiyel enerjisi ile tanımlanan bir hiperyüzeydir [51].



Şekil 3.1. Temsili potansiyel enerji yüzeyi

Potansiyel enerji yalnızca bir molekülün iç koordinatlarına bağlıdır ve N atomlu bir molekül için 3N toplam koordinat (her atom için x, y, z) ile üç dönüş (doğrusal moleküller için sadece

iki dönüş) vardır. İç koordinatlar; gerilme, bükülme, burulma koordinatları veya simetriye uyulanmış doğrusal kombinasyonlar ile gösterilebilir.

Şekil 3.1. de görüldüğü üzere kararlı ya da yarı kararlı olan türler (girenler, ürünler ve geçiş haliler) minimum olarak adlandırılır. Kararlı yapılarda tüm frekanslar pozitifken geçiş hali (TS) geometrisinde sadece bir sanal frekans vardır.

3.1.2. Born-oppenheimer yaklaşımı

Born-Oppenheimer yaklaşımı çekirdek ve elektronların hareketini ayırmayı mümkün kılar [52]. Matematiksel olarak, bir molekülün dalga fonksiyonun elektronik ve nükleer bileşenlerine ayrılmasını sağlar. Bu yaklaşımda bir elektronun hareketi tarif edilirken çekirdek hareketsiz kabul edilir ve Hamiltonian denklemi sadeleştirilerek elektronik Hamiltonian elde edilir. (Eş. 2.2)

$$\hat{H}_{el} = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 - \sum_i \sum_k \frac{e^2 Z_k}{r_{ik}} + \sum_{i < j} \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (2.2)$$

Burada $\hat{H}_{el}$ elektronik Hamiltonian olup, $\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2$ kısmı elektronun kinetik enerjisini (T_E) verir. $\sum_i \sum_k \frac{e^2 Z_k}{r_{ik}}$ kısmı elektron-çekirdek potansiyel enerjisini (V_{EN}) verirken $\sum_{i < j} \frac{e^2}{r_{ij}}$ ise elektron-elektron potansiyel enerjisini (V_{EE}) vermektedir.

3.1.3. Hartree-fock teorisi

1927-1930 yıllarında İngiliz fizikçi Hartree ile Rus fizikçi Fock, orbitallerin olası en iyi şekillerini bulabilmek adına sistematik bir eşitlik geliştirmişlerdir.

Hidrojen atomu için kesin dalga fonksiyonu bilinmekte olup helyum ve lityum atomları için ise varyasyon fonksiyonlarına elektronik mesafeler dahil edilerek doğru dalga fonksiyonları hesaplanmıştır. Hartree-Fock metodu, daha yüksek atom numarasına sahip atomlar için doğru bir dalga fonksiyonu bulmanın bir yoludur. Hartree-Fock yöntemi, çok elektronlu sistemlerde atomik ve moleküler orbitallerin kullanımının temelidir. Hartree prosedürü Eş.2.3'te gösterilmektedir.

$$\phi_0 = s_1(r_1, \theta_1, \phi_1) s_2(r_2, \theta_2, \phi_2) \dots s_i(r_i, \theta_i, \phi_i) \quad (2.3)$$

Burada, s_i bir fonksiyondur ve ϕ_0 etkin atom numaralarına sahip hidrojen benzeri orbitallerin bir ürünüdür.

3.1.4. Temel setler

Temel set, belirlenen katsayılarla doğrusal bir kombinasyon olarak genişletilmiş moleküler orbitalleri oluşturmak için kullanılan bir fonksiyonlar kümesidir.

Slater tipi orbitaller (STO), hidrojen atomunun özfonksiyonları ile benzerliklerinden kaynaklı temel fonksiyonlar olarak kullanılmıştır. Slater tipi orbitaller için eşitlik, Eş. 2.4 te gösterilmiştir.

$$\phi_{abc}^{STO}(x, y, z) = N x^a y^b z^c e^{-\zeta r} \quad (2.4)$$

Burada N, normalizasyon sabiti olup a,b,c ise açısal momentumu ifade eder ($L = a + b + c$). ζ (zeta), çekirdeğin etkin yüküyle ilgili bir sabittir.

STO, Gaussian orbitallerinin lineer kombinasyonları olarak düşünülebilir [53]. GTO (Gauss tipi orbitaller), genellikle atomlar üzerindeki kuantum hesaplamalarından elde edilir (Hartree-Fock veya Hartree-Fock artı bazı korelasyonlar).

$$\phi_{abc}^{GTO}(x, y, z) = N x^a y^b z^c e^{-\zeta r^2} \quad (2.5)$$

Eş. 2.5'te ζ katsayı, a,b ve c ise orbitalin açısal momentumunu kontrol eden parametrelerdir. GTO'nun STO'dan farkı üstel fonksiyondaki r değişkeninin karesinin olmasıdır.

Pople [54] tipi temel seti, her bir atomik orbitalin bir STO (3 GTO) davranışını temsil eden minimum bir temeldir. Pople'ın bölünmüş değerlikli çift zeta (ζ) temel setine 6-31G denir. a-bcdG++(**) şeklindeki bir gösterimde a, iç kabuk orbitallerini; bcd sırasıyla iç, dış ve orta valans orbitallerini tanımlamak için kullanılan GTO'ları; artılar ise sırasıyla hidrojenen ağır atomlara ve hidrojene eklenen difüze fonksiyonları ifade ederken yıldızlardan birincisi hidrojenen ağır atomlara eklenen d, ikincisi ise hidrojene eklenen p tipi polarizasyon fonksiyonlarını belirtir.

Thom Dunning, Hartree-Fock seviyesinde optimize edilen baz kümelerinin korelasyonlu hesaplamalar için ideal olmayacağına dair çalışmalar yaptı. Korelasyon uyumlu temel setler, korelasyonlu (CISD) dalga fonksiyonları kullanılarak optimize edilebilir. Dunning [55] tipi korelasyon uyumlu polarize temel setler, çekirdek-elektron korelasyonunu tanımlar. Örneğin, bir "aug" öneki, temelde mevcut olan her açısal momentum için bir difüze fonksiyon seti eklendiği anlamındadır ve çekirdek korelasyonunu tanımlayan işlevler, aug-cc-pCVxZ veya cc-pCVxZ temel setlerinde "C" harfi ile tanımlanır.

3.1.5. Yoğunluk fonksiyonel teorisi

Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (YFT), elektron korelasyonu problemine bir yaklaşım sunarak incelenen bir sistemin elektron yoğunluğunu tanımlar [56]. YFT'de N-elektron dalga fonksiyonu yerine çok daha basit olan elektron yoğunluğu ($\rho(\vec{r})$) göz önüne alınır. İlgili ilk fikir Thomas-Fermi (TF) modelinde [57] açıklanır. Bu modelde, çok parçacıklı sistemdeki elektronik dağılımın istatistiksel olarak ifade edilebileceği belirtilmiştir.

YFT'ye göre çok parçacıklı sistemin toplam enerjisi elektron yoğunluğunun bir fonksiyoneli şeklinde tanımlanır;

$$E = T[n] + W[n] + U[n] + \varepsilon_{xc}[n] \quad (2.6)$$

Burada T, etkileşmeyen elektronlar için kinetik enerjiyi; W, elektronların dış potansiyelle olan etkileşmesini; U, elektronlar arası Coulomb etkileşmesini; ε_{xc} ise değiş-tokuş-korelasyon (EC) enerjisini göstermektedir. Pratikte EC enerji fonksiyoneli yaklaşık olarak temsil edilir ve bu yaklaşımlardan en yaygını Yerel Yoğunluk Yaklaşımı' dır (LDA) [58] ;

$$E_{xc}^{LDA}[n] = \int d^3 r n(\vec{r}) \varepsilon_{xc}(n(\vec{r})) \quad (2.7)$$

Burada ε_{xc} niceliği, elektron gazı için parçacık başına düşen EC enerjisidir. Sonrasında LDA'ya alternatif olarak Genelleştirilmiş Gradyen Yaklaşımı (GGA) geliştirilmiştir [59];

$$E_{xc}^{GGA}[n] = \int d^3 r f(\vec{r}) \varepsilon_{xc}(n, |\nabla n|) \quad (2.8)$$

Sistematik gradyent açılımları da LDA'yı iyileştirmeye yöneliktir, ancak nicel olarak etkileri azdır.

3.2. Hibrit Fonksiyoneller

Hartree–Fock teorisinde değişim enerjisinin tam tanımlanmış olması HF ve YFT’nin birlikte kullanılabilmesini sağlar. Fakat yine de korelasyon ve değişim enerjilerinin farklı teoriden alınması (HF, YFT) doğru olmayan sonuçlar elde edilmesine sebep olabilir. Korelasyon ve değişim ifadelerinin yeniden düzenlenmesiyle sistemi tanımlayan hibrit fonksiyoneller üretilmiştir.

B3LYP: 1980’li yılların başında geliştirilen, Becke’nin üç parametrelili fonksiyoneli ile Lee,Yang ve Parr’ın korelasyon düzeltmelerini içeren hibrit bir fonksiyoneldir [60-62]. *B3LYP*; LDA, GGA ve HF’in karışımıdır;

$$E_{XC}^{B3LYP} = E_{XC}^{LDA} + a_0(E_X^{HF} - E_X^{LDA}) + a_X(E_X^{GGA} - E_X^{LDA}) + a_C(E_C^{GGA} - E_C^{LDA}) \quad (2.9)$$

Metal kompleksleri ve metalik yüzeyler gibi sistemler modellenirken değişim veya dispersiyon enerjisi miktarı gibi parametreler dikkate alınarak, kullanılacak fonksiyonelin özenle seçilmesi, DFT analizlerinde önemli noktalardan biridir.

3.3. Hesapsal Detaylar

Geometri optimizasyonlarında spin kısıtsız (U) Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (YFT) [56, 58, 63] Becke’nin üç parametrelili fonksiyoneli ile Lee,Yang ve Parr’ın korelasyon düzeltmelerini içeren *B3LYP* [60-62, 64-66], Truhlar ve Zhao’nun M06 hibrit fonksiyonel ailesi [67] ve Chai ve Gordon’un uzun mesafe dispersiyon düzeltmelerini kapsayan ω B97XD [68] fonksiyonelleri kullanıldı. Optimizasyon, frekans, çözücü hesaplarında rölativistik katkı Los Alamos ECP (Effective Core Potential) LANL2DZ [69-71] temel seti kullanıldı ve tek nokta enerji hesaplarında Dunning tipi cc-pVTZ temel seti kullanıldı [72]. Uzun mesafe elektron korelasyonlarının derinlemesine belirlenebilmesi için dispersiyon düzeltilmiş YFT (Dispersion Corrected DFT (DFT-D)) kullanıldı ve YFT-D ile

termodinamik veriler daha yüksek doğrulukta hesaplandı [73]. Elektrostatik potansiyel (ESP) yükleri Merz-Singh-Kollman (MK) formülasyonu ile hesaplandı [74, 75]. Solvasyon hesaplarında SMD (Solvation Model based on Density) [76] yaklaşımı kullanıldı. Çözücü hesaplarında dielektrik sabiti ($\epsilon = 35.69$) olan asetonitril solventi kullanıldı.

Optimize geometrilerin (1 ve 2 nolu yapılar için) potansiyel enerji yüzeyinde (PES) birer minimum oldukları yapılan frekans hesapları sonucu Hessian matrislerinde sanal değer gözlenmemesiyle doğrulanmıştır. Geçiş hali (TS) yapılarının tepkime koordinatına denk gelen bir tek sanal frekansa sahip olduğu gözlemlendi.

Katyonik ligandlarla ilgili üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan rölatif enerjiler, mulliken spin yoğunlukları ve ligandların kartezyen koordinatları ekler kısmında verilmiştir.

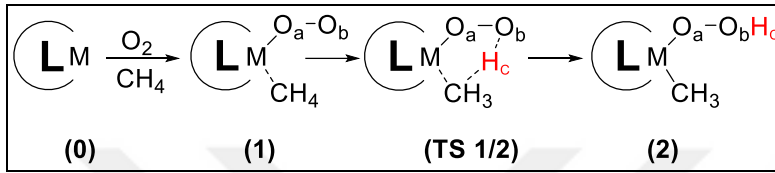
Metal merkezleri için yükseltgenme basamağı +2 olarak seçildi [77].

Hesaplar Gaussian 09 [78] yazılımı ile yapıldı.

4. BULGULAR VE YORUM

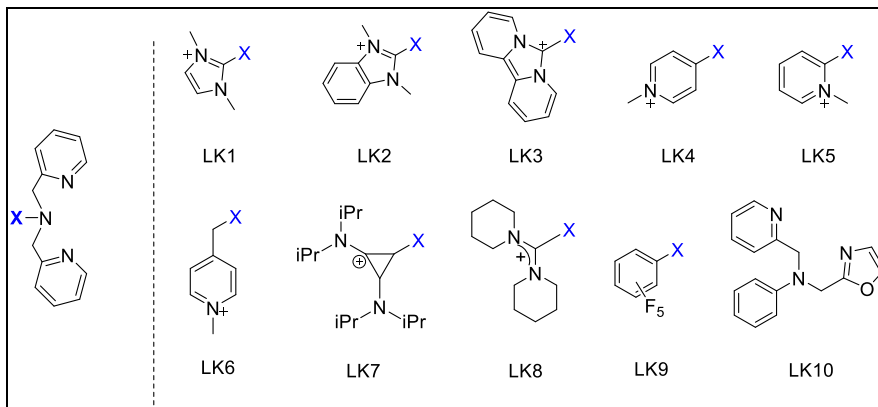
4.1. Ligand Analizi

İnert bir yapısı olan metanı polarize edebilmek için metanı elektrostatik olarak pertürbe ederek molekül içi bir asit – baz tepkimesini (1→2) (Şekil 4.1.) gerçekleştirebilecek ligand tasarımı yapılmıştır (Şekil 4.2).



Şekil 4.1. İncelenen C–H bağ aktivasyonu/kırılması basamağı. L: Üç dişli ligand, 0: Aktivatör kompleks, 1: Aktivatör–süperokso–metan kompleksi (adduct), TS1/2: hidrojen/proton transferi aktifleşmiş kompleksi/geçiş hal yapısı, 2: Aktivatör–hidroperokso–metil kompleksi, M: Cr(II), Mn(II), Fe(II), Co(II), Ni(II)

C-H baği aktivasyon basamağı şemasında belirtilen süperokso kompleksten (1) hidrosüperokso komplekse (2) geçiş, molekül içi asit-baz fragmanlarının etkileşimi gibi düşünülebilir. Bu sebeple tepkimenin gerçekleşmesi asidik ve bazik fragmanların kuvvetleri ile orantılıdır. Süperokso kompleksindeki O_b , Brønsted bazı olarak davranır, ancak metanın proton verme isteği oldukça düşüktür ($pK_a \sim 40$). Bunun sonucu olarak metanı polarize etme düşüncesi ortaya çıkmıştır.



Şekil 4.2. Tasarlanan katyonik ligandlar. iPr: izopropil

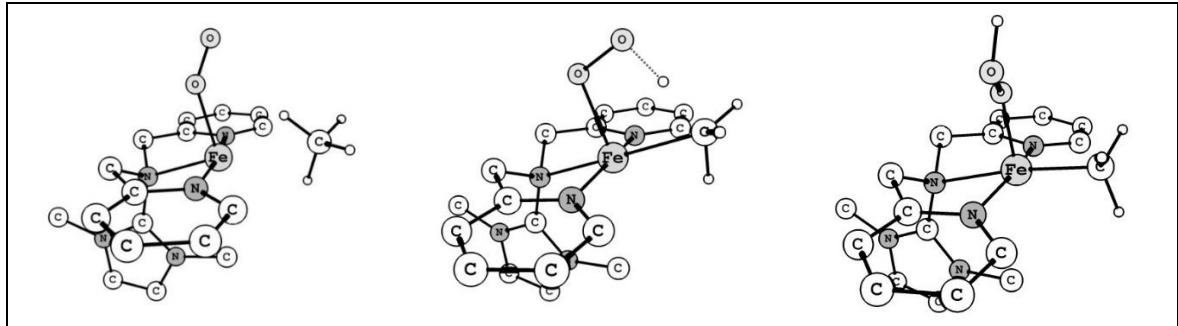
Metan-metanol oksidasyonunu laboratuvar ortamında gerçekleştirebilmek için non-heme metal merkezli komplekslerin CH_4 ve O_2 'yi aktive etme tepkimeleri hedeflenmiş olup Bis-2-pkolilamin temelli ana iskelete eklenen katyonik halkalar ile metanı polarize ederek TS1/2 bariyerleri hesaplanmıştır. Seçilen bu ana iskelet çoğu geçiş metali ile kolaylıkla kompleks oluşturabildiği için sentez ve modifikasyon için de kullanışlıdır. Bu doğrultuda, katyonik ligandlar ile birinci sıra geçiş metallerinin (GM) sık rastlanan yükseltgenme basamakları (Cr(II), Mn(II), Fe(II), Co(II), Ni(II)) çalışılmıştır. LK9 ve LK10 olarak adlandırılmış ligandlar katyonik değildir fakat elektron vericilikleri az olduğundan pozitif polarizasyon etkileri açısından incelenmiştir.

On farklı katyonik ligandın beş farklı geçiş metali (Cr(II), Mn(II), Fe(II), Co(II), Ni(II)) ile oluşturdukları komplekslerin geometri optimizasyon, frekans, tek nokta enerji, solvasyon, dispersiyon ve esp hesapları yapılmıştır. Komplekslerin üç veya dört spin hali mümkündür ve bu spin halleri çalışılmıştır. Hesaplar üç farklı fonksiyonel (UB3LYP, UωB97XD, UM06) ile gerçekleştirilmiştir.

Tartışılan tüm yapılar için spin çokluğu ($2S+1$), $S=0$ olduğunda singlet spin yüzeyi; $S=1$ olduğunda triplet spin yüzeyi; $S=2$ olduğunda kuintet spin yüzeyi ve $S=3$ olduğunda ise septet spin yüzeyi olarak tanımlanır. $S=1/2$ olduğunda dublet; $S=3/2$ olduğunda kuartet ve $S=5/2$ olduğunda ise sekstet spin yüzeyi olarak tanımlanır. S burada spin kuantum sayılarının toplamıdır.

4.1.1. LK1 ligandı

Fe(II)LK1 için 1, TS1/2 ve 2 optimize geometrileri Şekil 4.3.'te verilmiştir.



Şekil 4.3. Fe(II)LK1 kompleksinin 1, TS1/2 ve 2 yapılarının metan ile etkileşimi. Sadelik için hidrojen atomları gösterilmemiştir

Fe(II)LK1-CH₄ kompleksinin bağ uzunlukları Angstrom (Å) cinsinden Çizelge 4.1.'de verilmektedir. Reaktant (1), ürün (2) ve geçiş hali (TS1/2) yapılarının singlet, triplet, kuintet ve septet spin halleri çalışılmış olup, tabloda tanımlanan ⁷1, ⁵TS1/2 ve ⁵2 ve benzeri gösterimler, ilgili komplekslerin düşük enerjili spin hallerini belirtmek için kullanılmıştır. M olarak gösterilen tanımlar (M-O_a; M-CH₄; M-kuyruk merkez) ilgili kompleksin metalini temsil etmektedir. Buradaki kompleks için M: Fe(II) metalidir.

C-H bağ aktivasyon basamağında Şekil 4.3.'te gösterilen Fe(II)LK1-CH₄ kompleksinin 1, TS1/2 ve 2 nolu yapıları baz alınarak Çizelge 4.1.'deki mesafeler değerlendirilebilir. Kuyruk merkez olarak adlandırılan kısımda ise ana iskelete bağlı katyonik halkanın tüm atomları seçilerek katyonik kısmın ağırlık merkezi hesaplanır. Bu sayede metan ve metal ile ağırlık merkezi arasındaki mesafe hesaplanmıştır.

Çizelge 4.1. Fe(II)LK1-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

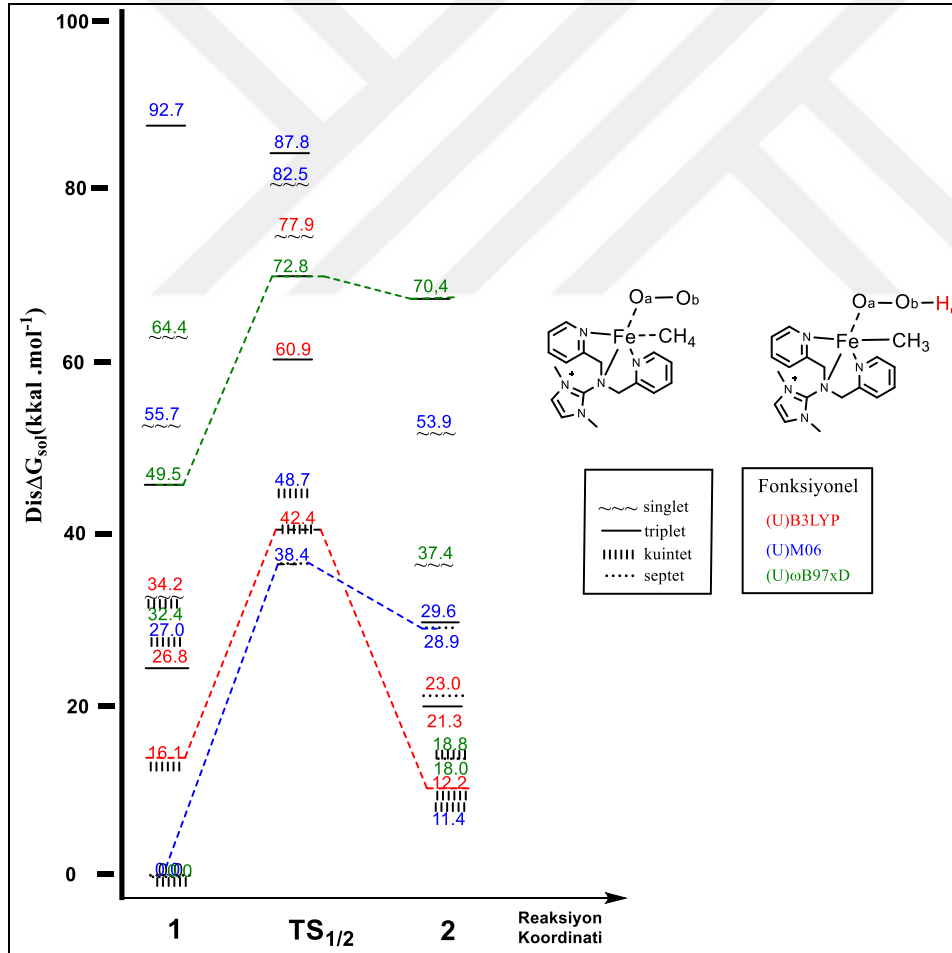
Fe(II)LK1	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁷ 1	⁵ TS1/2	³ 2	⁷ 1	³ TS1/2	³ 2	⁷ 1	¹ TS1/2	³ 2
M-O _a	2,418	2,131	1,963	2,295	2,104	1,854	2,396	1,905	2,146
O _a -O _b	1,263	1,350	1,404	1,250	1,337	1,411	1,247	1,344	1,358
M-CH ₄	2,815	2,298	2,146	2,612	2,173	2,139	2,738	2,126	2,167
M-kuyruk merkez	4,163	4,103	4,253	4,024	3,997	4,234	4,077	3,856	4,130
CH ₄ -kuyruk merkez	6,536	6,212	6,109	6,393	6,086	6,066	6,377	5,694	6,046

Kompleks için çalışılan (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde, 1 nolu yapının temel haldeki spin yüzeyi septet (⁷1) olarak hesaplanmıştır. 1 nolu yapıdan TS1/2 nolu yapıya geçişte Fe-O_a bağında kısalma gözlenirken ürüne (2) geçişte bu bağ, TS1/2 nolu yapıya göre daha kısadır. O_a-O_b bağı hesaplandığında TS1/2 yapısındaki mesafenin reaktanttaki mesafeye göre uzun olduğu bulunmuştur. Metal-CH₄ bağı hesaplandığında başta komplekse uzak bir yerde konumlanmış olan metan TS1/2 yapısında kompleksle bağ kuracak şekilde mesafeyi kısaltmıştır. Fe-kuyruk merkez mesafesi incelendiğinde, üç yapıda da 4 Å civarında olduğu gözlenir. Polarizasyon fikrimizin tartışılacağı metan-kuyruk merkez mesafesi incelendiğinde yapılan hesaplamalar sonucu her üç yapıda da bu mesafenin 6 Å civarında olduğu görülmüştür. Metanı aktive edecek katyonik kısım ile metan arasındaki mesafe istediğimiz etkileşimin gerçekleşmesi için fazla uzundur.

Kompleks için çalışılan (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde, 1 nolu yapılarının temel haldeki spin yüzeyi septettir (⁷1). 1 nolu yapıdan TS1/2 nolu yapıya geçişte Fe-O_a bağında kısalma gözlenirken ürüne (2)

geçişte bu bağ TS_{1/2} nolu yapıya göre daha kısadır. O_a–O_b bağı reaktantta TS_{1/2} yapısına göre daha kısadır. Metal–metan bağı TS_{1/2} yapısında etkileşim olacağından reaktanttaki bağa göre kısa olduğu hesaplanmıştır. Fe–kuyruk merkez ve metan–kuyruk merkez hesapları hesaplandığında diğer seviyede de ((U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ) bahsedildiği gibi benzer sonuçlar elde edilmiştir.

Şekil 4.4.'te Fe(II)LK1 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir. Kırmızı renk ile gösterilen veriler UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesine; mavi ile gösterilen veriler UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol ve son olarak yeşil rengin temsil ettiği veriler ise UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesine aittir.



Şekil 4.4. Fe(II)LK1 kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesinde hesaplamalar sonucu 1 nolu yapı için temel hal septet spin yüzeyinde iken geçiş halinde aktif yüzey kuintet spin yüzeyindedir. Fe(II)LK1 kompleksi kuintet spin yüzeyinde 42,4 kkal·mol⁻¹lük bir C–H aktivasyon bariyerine sahiptir. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde ise C–H aktivasyon bariyeri 38,4 kkal·mol⁻¹ olup temel hal ve aktif yüzeyin septet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmıştır. Son olarak UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal septet yüzeyinde iken aktif yüzey triplet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 72,8 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. Bu seviyede hesaplanabilen en düşük bariyer triplet yüzeyine aittir.

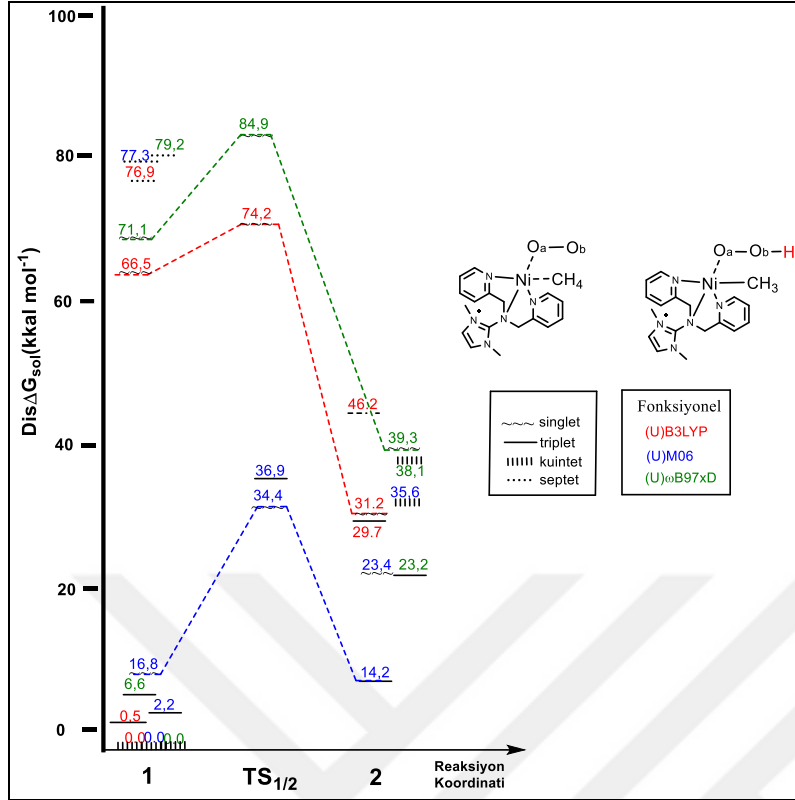
Ni(II)LK1-CH₄ kompleksinin bağ uzunlukları Angstrom (Å) cinsinden Çizelge 4.2.'de verilmektedir. Reaktant (1), ürün (2) ve geçiş hali (TS1/2) yapılarının singlet, triplet, kuintet ve septet spin halleri çalışılmış olup (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerindeki sırasıyla temel hal spin yüzeyleri kuartet, triplet ve kuartettir.

Çizelge 4.2. Ni(II)LK1-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Ni(II)LK1	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁵ ₁	¹ TS1/2	³ ₂	³ ₁	³ TS1/2	³ ₂	⁵ ₁	¹ TS1/2	³ ₂
M–O _a	2,174	2,036	2,169	2,788	2,102	2,096	2,339	2,101	2,175
O _a –O _b	1,263	1,330	1,371	1,251	1,311	1,354	1,247	1,297	1,342
M–CH ₄	2,760	2,174	2,029	2,390	2,145	1,995	2,672	2,082	2,074
M-kuyruk merkez	3,983	3,943	4,072	3,782	3,807	3,921	3,920	3,871	3,974
CH ₄ -kuyruk merkez	6,314	5,886	5,865	5,586	5,638	5,666	6,175	5,721	5,826

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde yapılan hesaplamalarda, Ni–O_a bağı TS1/2 yapısında 1 nolu yapıya göre daha kısadır. O_a–O_b bağı ise TS1/2 nolu yapıda O_b, H_c ile etkileştiğinden 1 nolu yapıya göre uzadığı hesaplanmıştır. Ni–CH₄ etkileşiminin üç seviyede de 1 nolu yapıya göre TS1/2 yapısında kısaldığı hesaplanmıştır. Metan ve kuyruk merkez arasındaki mesafenin 6 Å civarı olduğu hesaplanmıştır.

Şekil 4.5.'te Ni(II)LK1 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.5. Ni(II)LK1 kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesinde hesaplamalar sonucu temel hal kuintet spin yüzeyinde bulunurken aktif yüzey singlet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 74,2 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. Burada temel hal 1 nolu yapısının en düşük hali ve aktif yüzey ise en düşük bariyerin hesaplandığı spin yüzeyidir. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel halin kuintet spin yüzeyinde olduğu aktif yüzeyin ise triplet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmıştır ve C–H aktivasyon bariyeri 34,4 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel halin kuintet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmıştır. Aktif yüzey singlet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 84,9 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

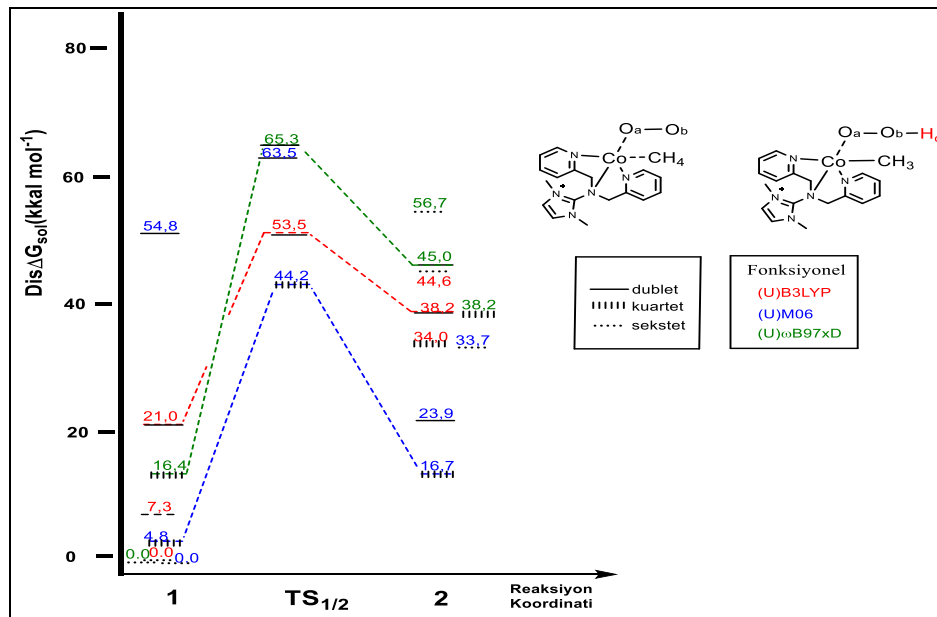
Co(II)LK1-CH₄ kompleksinin bağ uzunlukları Angstrom (Å) cinsinden Çizelge 4.3.'te verilmektedir. Reaktant (1), ürün (2) ve geçiş hali (TS_{1/2}) yapılarının olası spin halleri (dublet, kuartet ve sekstet) çalışılmış olup (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde sırasıyla temel hallerin sekstet, sekstet ve kuartet spin yüzeylerinde olduğu hesaplanmıştır.

Çizelge 4.3. Co(II)LK1-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Co(II)LK1	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁶ ₁	² TS _{1/2}	⁴ ₂	⁶ ₁	⁴ TS _{1/2}	⁴ ₂	⁴ ₁	² TS _{1/2}	⁴ ₂
M–O _a	2,460	1,910	2,214	2,134	2,095	1,903	2,495	1,887	2,205
O _a –O _b	1,264	1,358	1,375	1,250	1,315	1,382	1,248	1,339	1,353
M–CH ₄	2,733	2,156	2,051	2,685	2,142	2,071	2,504	2,126	2,108
M-kuyruk merkez	4,137	3,890	4,211	3,951	3,852	4,074	3,806	3,796	4,133
CH ₄ -kuyruk merkez	6,505	5,762	6,038	6,234	5,804	5,808	6,008	5,630	6,010

LK1 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) yapılan hesaplamalarda Co–O_a bağı geçiş halinde reaktantlara göre kısalmış, ürünler ise geçiş haline göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal–CH₄ mesafesi reaktantta bağ oluşmayacak bir konumda iken TS_{1/2} yapısında metan kompleks ile etkileşime girerek bu mesafenin kısalmasına olanak sağlar. Metan ve katyonik kısmın arasındaki mesafe her üç seviyede de 5 ila 6 Å arasında değişmektedir ve burada etkileşimden bahsetmek güçtür.

Şekil 4.6.'da Co(II)LK1 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir. Üç farklı seviyede de temel halin sekstet spin yüzeyinde olduğu bulunmuştur.



Şekil 4.6. Co(II)LK1 kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamaları sonucu aktif yüzeyin dublet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmıştır. Co(II)LK1 kompleksi dublet spin yüzeyinde 53,5 kkal·mol⁻¹ 'lük bir C–H aktivasyon bariyerine sahiptir. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde aktif yüzey dublet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 44,2 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde aktif yüzey dublet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 65,3 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

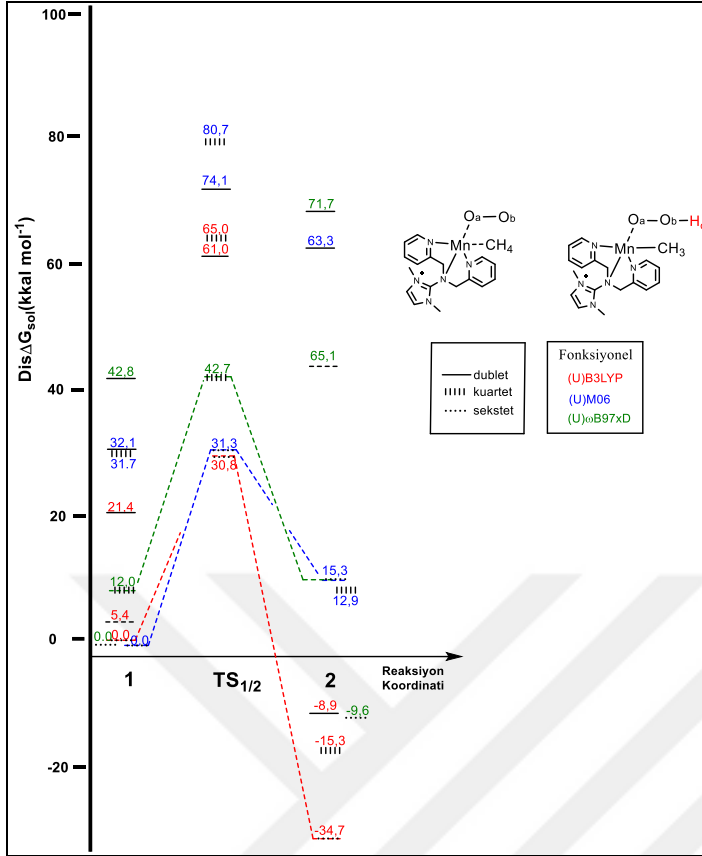
LK1 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ) yapılan hesaplamalar Çizelge 4.4'te verilmektedir.

Çizelge 4.4. Mn(II)LK1-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Mn(II)LK1	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁶ 1	⁶ TS1/2	⁴ 2	⁴ 1	⁴ TS1/2	⁴ 2	² 1	² TS1/2	⁴ 2
M–O _a	2,384	2,216	2,214	2,254	2,182	2,112	2,377	1,890	2,264
O _a –O _b	1,266	1,349	1,376	1,252	1,326	1,359	1,249	1,346	1,349
M–CH ₄	2,819	2,353	2,050	2,722	2,258	2,050	2,544	2,177	2,090
M-kuyruk merkez	4,298	4,169	4,236	4,124	4,015	4,068	3,953	3,876	4,184
CH ₄ -kuyruk merkez	6,581	6,358	5,971	6,315	6,056	5,767	6,101	5,763	5,962

Burada, Mn–O_a bağı geçiş halinde reaktantlara göre kısalmış, ürünler ise geçiş haline göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş halinde ve üründe gerçekleşmiştir. Metal–CH₄ mesafesinde başlangıçta etkileşime girmeyecek şekilde konumlanmış olan metan TS1/2 yapısında komplekse yaklaşarak mesafeyi kısaltır ve sonucunda bir etkileşim gözlenir. Metan ve katyonik kısmın arasındaki mesafe her üç seviyede de 5 ila 6 Å arasında değişmektedir ve bu mesafe katyonik kısım ile metan arasında bir etkileşimden bahsedebilmek için oldukça fazladır.

Şekil 4.7.'de Mn(II)LK1 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir. Burada üç farklı seviyede yapılan hesaplamalarda temel halin sekstet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmıştır.



Şekil 4.7. Mn(II)LK1 kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: U ω B97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel halin sekstet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmıştır ve aktif yüzey sekstet spin yüzeyinde olup 30,8 kkal·mol⁻¹'lük bir C–H aktivasyon bariyerine sahiptir. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde aktif yüzey sekstet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 31,3 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. U ω B97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde aktif yüzey dublet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 42,7 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

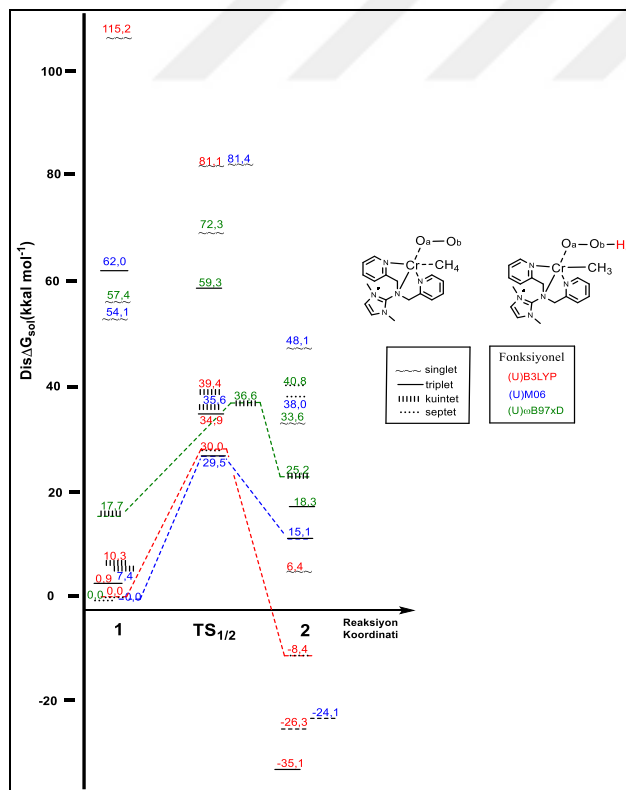
LK1 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; U ω B97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ) yapılan hesaplamalar Çizelge 4.5'te verilmektedir.

Çizelge 4.5. Cr(II)LK1-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Cr(II)LK1	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁷ 1	⁷ TS1/2	³ 2	³ 1	⁵ TS1/2	³ 2	⁷ 1	⁵ TS1/2	³ 2
M–O _a	2,716	2,195	1,810	2,241	1,900	1,764	2,597	1,955	1,927
O _a –O _b	1,264	1,360	1,418	1,258	1,347	1,403	1,248	1,357	1,359
M–CH ₄	2,642	3,550	2,052	2,500	2,170	2,069	2,599	2,175	2,077
M-kuyruk merkez	4,065	4,100	4,257	3,934	3,872	4,156	4,018	3,903	4,218
CH ₄ -kuyruk merkez	6,428	6,993	5,354	6,152	5,778	5,518	6,298	5,821	5,309

Burada, Cr–O_a bağı geçiş halinde reaktantlara göre kısalmıştır, üründe bu mesafe her iki yapıya göre daha da kısadır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal–CH₄ mesafesinde başlangıçta etkileşime girmeyecek şekilde konumlanmış olan metan TS1/2 yapısında komplekse yaklaştığından bağ kısalmış ve etkileşim olmuştur. Metan ve katyonik kısmın arasındaki mesafe her üç seviyede de 5 ila 6 Å arasında değişmektedir ve bu mesafe etkileşimden bahsedilmesi için fazlaca uzaktır.

Şekil 4.8.'de Cr(II)LK1 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.

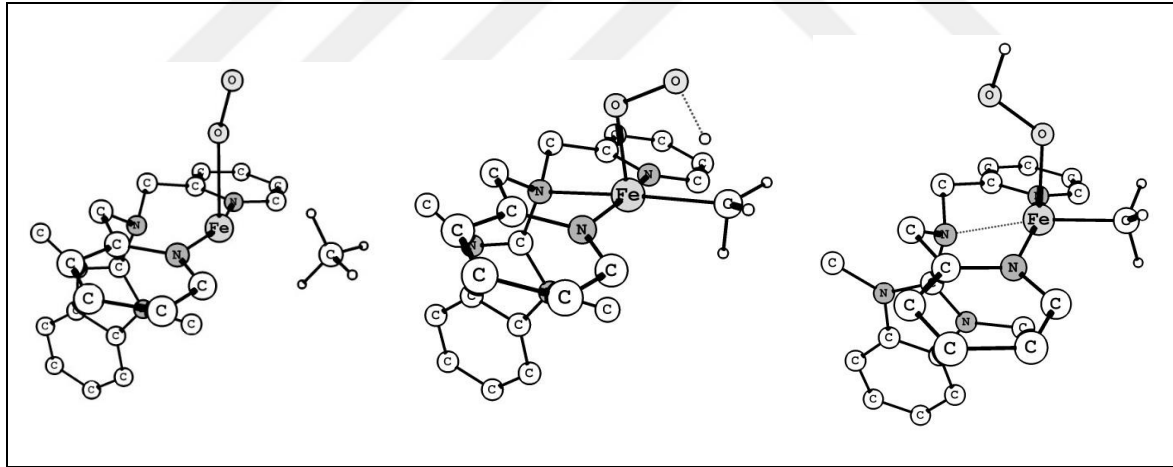


Şekil 4.8. Cr(II)LK1 kompleksinin Dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal ve aktif yüzey septet spin yüzeyinde olup, C–H aktivasyon bariyeri 30,0 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde aktif yüzey triplet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 29,5 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal septet spin yüzeyinde olup aktif yüzey kuintet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 36,6 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

4.1.2. LK2 ligandı

Metan-metanol oksidasyonunu laboratuvar ortamında gerçekleştirebilmek için non-heme (hem olmayan) metal merkezli komplekslerin CH₄ ve O₂'i aktive etme tepkimelerinin hedeflenmiş olduğundan daha önce de bahsetmiştik. Bu doğrultuda tasarlanan ligandlar için bir Bis-2-pkolilamin temelli ana iskelete eklenen katyonik halkalar ile metanı polarize ederek TS1/2 bariyerinin düşürülmesi çalışılmıştır. Bu bağlamda çalışılan ligandlardan biri olan LK2 ligandı Şekil 4.9.'da verilmiştir.



Şekil 4.9. Fe(II)LK2 kompleksinin 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının metan ile etkileşimi. Sadelik için hidrojen atomları gösterilmemiştir

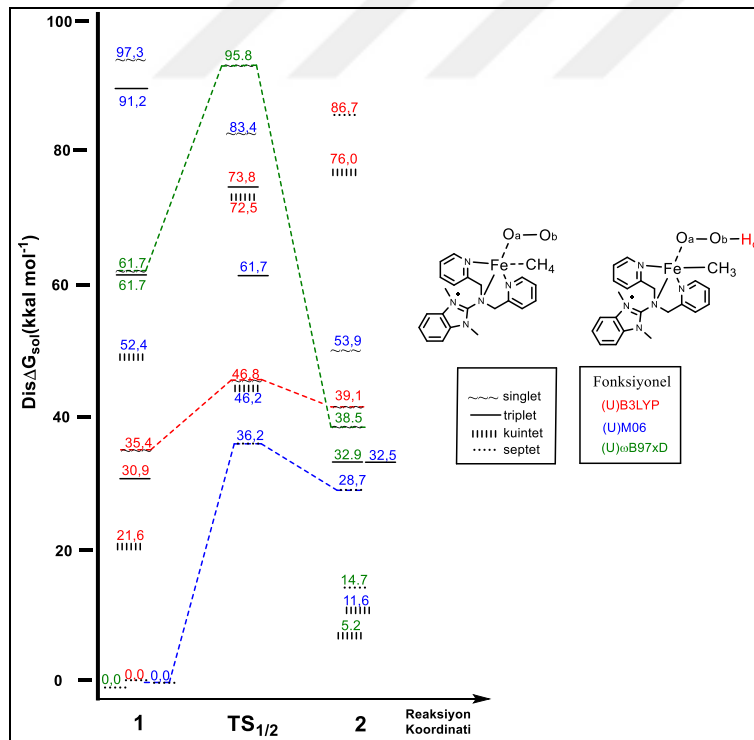
LK2 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) yapılan hesaplamalar ile kompleksin bağ uzunlukları Çizelge 4.6'da verilmektedir.

Çizelge 4.6. Fe(II)LK2-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Fe(II)LK2	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁵ ₁	³ TS _{1/2}	⁵ ₂	³ ₁	⁷ TS _{1/2}	⁵ ₂	⁷ ₁	¹ TS _{1/2}	⁵ ₂
M–O _a	2,430	1,918	1,954	2,302	2,210	1,853	2,398	1,703	2,205
O _a –O _b	1,263	1,372	1,407	1,250	1,338	1,413	1,247	1,340	1,353
M–CH ₄	2,826	2,165	2,140	2,754	2,176	2,138	2,747	2,129	2,108
M-kuyruk merkez	5,049	4,851	5,194	4,901	4,943	5,060	4,961	4,782	4,133
CH ₄ -kuyruk merkez	7,258	6,622	6,944	7,046	6,934	6,771	7,094	6,488	6,010

Her üç seviyede de Fe–O_a bağı geçiş halinde reaktantlara göre kısalırken ürünlerde bu mesafe geçiş haline göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metan ve katyonik kısmın etkileşimi hesaplandığında her üç seviyede de bu uzaklık 6 ila 7 Å arasında değişmektedir. Metanı aktive edecek katyonik kısım ile metan arasındaki mesafe etkileşimin gerçekleşmesi için fazla uzundur.

Şekil 4.10.'da Fe(II)LK2 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir. Hesaplar sonucu üç farklı seviyede de temel halin septet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmıştır.



Şekil 4.10. Fe(II)LK2 kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu aktif yüzeyin septet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmıştır ve C–H aktivasyon bariyeri 46,8 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde aktif yüzey triplet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 36,2 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde aktif yüzey kuintet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 95,8 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. Bu seviyede hesaplar sonucu yakınsanan tek geçiş hali singlet spin yüzeyindedir.

LK2 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) yapılan hesaplamalar ile kompleksin bağ uzunlukları Çizelge 4.7.'de verilmektedir.

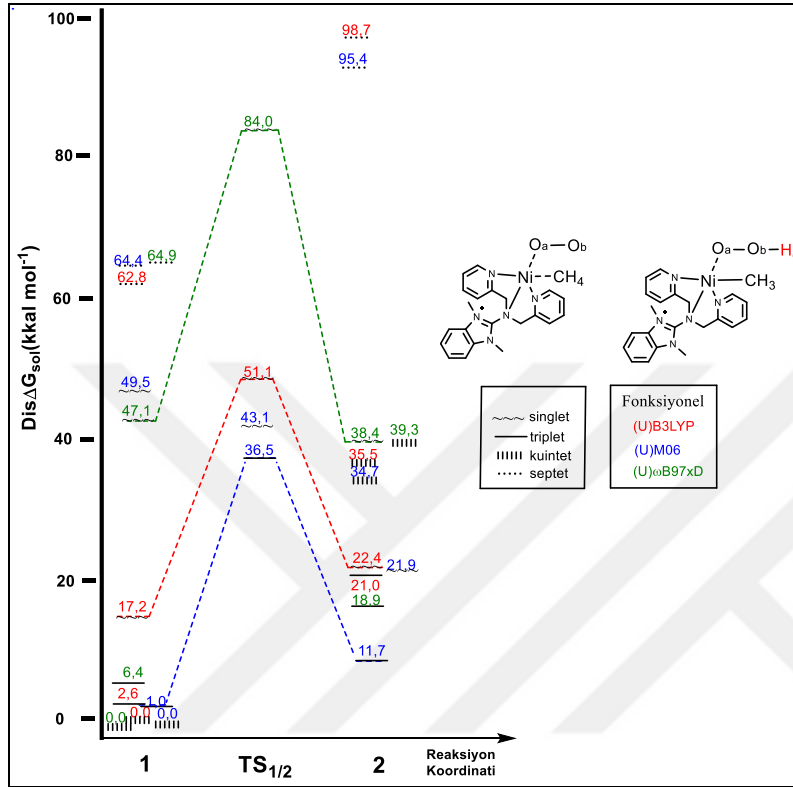
Çizelge 4.7. Ni(II)LK2-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Ni(II)LK2	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁵ ₁	¹ TS1/2	³ ₂	³ ₁	³ TS1/2	⁵ ₂	⁵ ₁	¹ TS1/2	⁵ ₂
M–O _a	2,387	2,068	2,172	2,781	2,101	2,102	2,345	2,090	2,146
O _a –O _b	1,263	1,332	1,371	1,251	1,312	1,354	1,247	1,300	1,358
M–CH ₄	2,779	1,165	2,027	2,399	2,148	1,994	2,683	2,089	2,164
M-kuyruk merkez	4,880	4,898	4,990	4,703	4,289	4,838	4,816	4,796	5,042
CH ₄ -kuyruk merkez	7,072	6,752	6,686	6,824	6,058	6,486	6,929	6,564	6,857

Her üç seviyede yapılan hesaplamalar sonucunda Ni–O_a bağı UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde reaktantta (1) 2,387 Å iken bu mesafe geçiş halinde (TS1/2) 2,068 Å ve üründe (2) 2,172 Å olarak hesaplanmıştır. O_a–O_b bağı ise 1 nolu yapıda 1,263 Å iken TS1/2 de 1,332 Å'a uzar ve 2 nolu yapıda 1,371 Å olarak hesaplanmıştır. Metal–CH₄ mesafesine bakıldığında başta komplekse uzak bir yerde konumlanmış olan metan TS1/2 yapısında kompleksle bağ kurarak mesafeyi 2,779 Å'dan 1,165 Å'a kadar kısaltmıştır. Üründe ise metal ve metan arasındaki bağ uzaklığı 2,027 Å olarak hesaplanır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimine bakıldığında mesafe 6 ila 7 Å arasında değişmektedir.

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerindeki hesaplamalarda da UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesindeki benzer değişimler söz konusudur. Metal–O_a bağı 1 nolu yapıda TS1/2 yapısına göre daha kısadır. O_a–O_b bağı hesaplandığında TS1/2 yapısındaki bağ 1 nolu yapıdaki bağa nazaran daha uzundur. Metan ve katyonik kısmın etkileşimine bakıldığında ise mesafe 6 Å arasında değişmektedir.

Şekil 4.11.'de Ni(II)LK2 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri ($\text{kkal}\cdot\text{mol}^{-1}$) verilmiştir. Hesaplamalar sonucu üç farklı seviyede de temel halin septet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmıştır.



Şekil 4.11. Ni(II)LK2 kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu aktif yüzeyin septet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmıştır ve C–H aktivasyon bariyeri $51,1 \text{ kkal}\cdot\text{mol}^{-1}$ 'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde aktif yüzey triplet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri $36,5 \text{ kkal}\cdot\text{mol}^{-1}$ olarak hesaplanmıştır. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde ve aktif yüzey kuintet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri $84,0 \text{ kkal}\cdot\text{mol}^{-1}$ olarak hesaplanmıştır.

LK2 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) yapılan hesaplamalar ile kompleksin bağ uzunlukları Çizelge 4.8.'de verilmektedir.

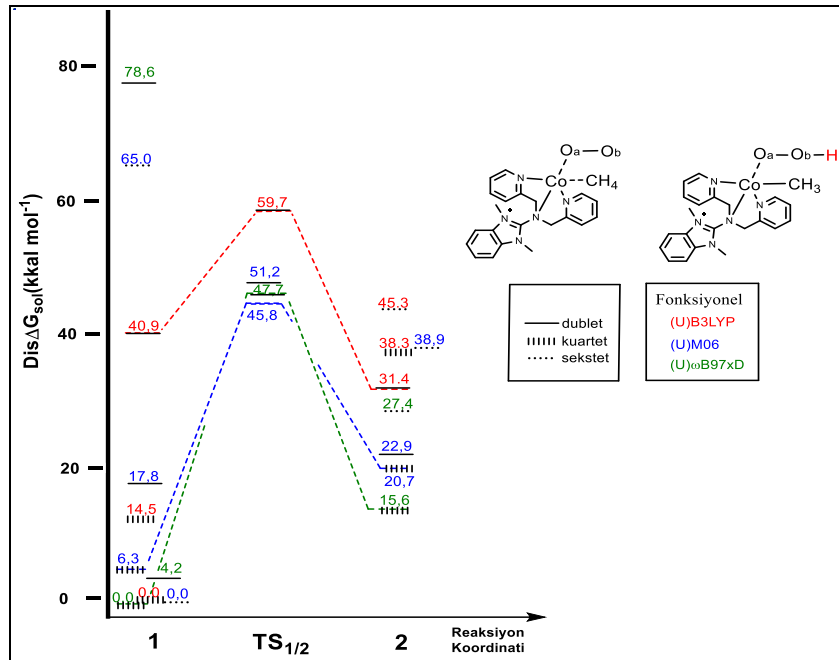
Çizelge 4.8. Co(II)LK2-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Co(II)LK2	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁶ ₁	² TS _{1/2}	⁴ ₂	⁶ ₁	⁴ TS _{1/2}	⁵ ₂	⁶ ₁	² TS _{1/2}	² ₂
M–O _a	2,426	1,878	2,211	2,355	2,094	1,896	2,406	1,881	2,201
O _a –O _b	1,263	1,361	1,375	1,250	1,316	1,384	1,248	1,340	1,353
M–CH ₄	2,755	2,159	2,046	2,705	2,144	2,072	2,676	2,130	2,105
M-kuyruk merkez	4,956	4,749	5,147	4,354	4,764	5,032	4,932	4,694	5,040
CH ₄ -kuyruk merkez	7,167	6,492	6,891	4,684	6,627	6,680	7,060	6,409	6,815

Yapılan hesaplamalar sonucunda Co–O_a bağı UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde reaktantta (1) 2,426 Å iken bu mesafe geçiş halinde (TS_{1/2}) 1,878 Å'a kısalmıştır ve üründe (2) 2,211 Å olarak hesaplanmıştır. O_a–O_b bağı ise 1 nolu yapıda 1,263 Å'dan TS_{1/2} de 1,361 Å'a uzamıştır ve 2 nolu yapıda 1,375 Å olarak hesaplanmıştır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimine bakıldığında ise mesafe 6 ila 7 Å arasında değişmektedir.

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerindeki hesaplamalarda da benzer sonuçlar gözlenmiştir.

Şekil 4.12. de Co(II)LK2-CH₄ kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.12. Co(II)LK2 kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal kuartet spin yüzeyinde iken aktif yüzey sekstet spin yüzeyindedir. C–H aktivasyon bariyeri 59,7 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde sistemin temel hali sekstet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey kuartet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 45,8 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel halin kuartet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmıştır ve aktif yüzey kuintet spin yüzeyindedir. C–H aktivasyon bariyeri 47,7 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

LK2 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) yapılan hesaplamalar ile kompleksin bağ uzunlukları Çizelge 4.9.'da verilmektedir.

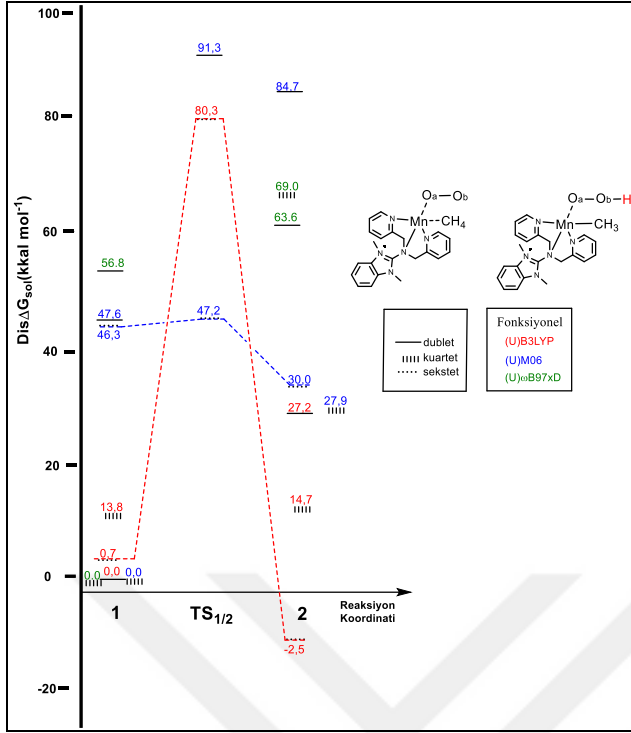
Çizelge 4.9. Mn(II)LK2-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Mn(II)LK2	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ	
	⁶ ₁	² TS1/2	⁴ ₂	⁴ ₁	⁴ TS1/2	⁴ ₂	² ₁	⁶ ₂
M–O _a	2,667	2,216	2,180	2,268	2,186	2,116	2,385	2,330
O _a –O _b	1,264	1,349	1,379	1,252	1,327	1,360	1,249	1,351
M–CH ₄	2,568	2,353	2,048	2,732	2,248	2,048	2,545	2,076
M-kuyruk merkez	4,893	4,169	5,156	5,007	4,370	4,968	4,861	5,064
CH ₄ -kuyruk merkez	7,042	6,358	6,767	7,018	6,310	6,547	6,877	6,735

Hesaplamalar sonucu Mn–O_a bağı UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde reaktantta (1) 2,667 Å iken bu mesafe geçiş halinde (TS1/2) 2,216 Å a kısalmıştır ve üründe (2) 2,180 Å olduğu hesaplanmıştır. O_a–O_b bağı 1 nolu yapıda 1,264 Å iken TS1/2 de 1,349 Å'a uzamıştır ve 2 nolu yapıda 1,379 Å olduğu hesaplanmıştır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimine bakıldığında ise mesafe 6 ila 7 Å arasında değişmektedir.

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesindeki hesaplamalarda da benzer sonuçlar gözlenmektedir.

Şekil 4.13. de Mn(II)LK2-CH₄ kompleksinin iki farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.13. Mn(II)LK2-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel halin dublet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey sekstet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 80,3 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey sekstet spin yüzeyindedir. C–H aktivasyon bariyeri 47,2 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde LK2 ligandının Mn(II) ile oluşturduğu kompleks hesaplarında aktivasyon enerjisi saptanamamıştır.

Çizelge 4.10.'da LK2 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

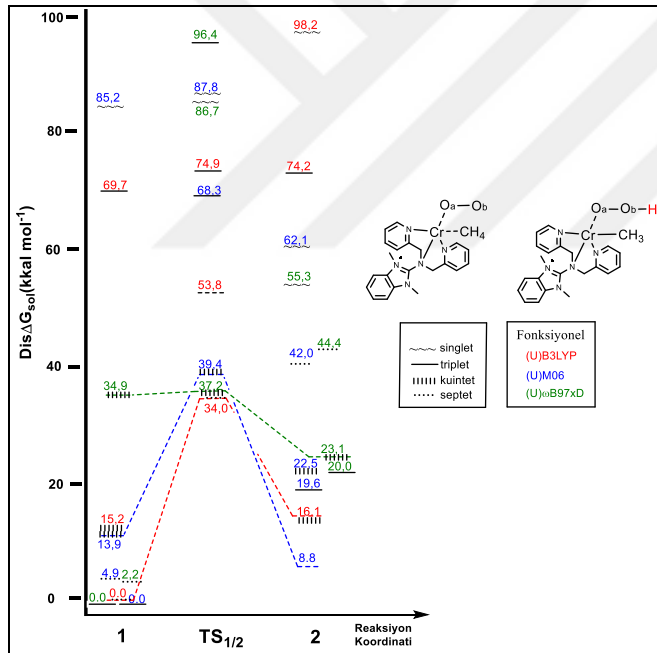
Çizelge 4.10. Cr(II)LK2-CH₄ kompleksinin Å (Angstrom) cinsinden bağ uzunlukları

Cr(II)LK2	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	³ ₁	³ TS1/2	³ ₂	³ ₁	³ TS1/2	³ ₂	³ ₁	³ TS1/2	⁶ ₂
M–O _a	2,359	1,916	1,796	2,242	1,901	1,774	2,417	1,909	1,920
O _a –O _b	1,269	1,372	1,427	1,260	1,348	1,401	1,250	1,352	1,362
M–CH ₄	2,684	2,202	2,050	2,507	2,172	2,093	2,545	2,176	2,074
M–kuyruk merkez	4,989	4,892	5,146	4,841	4,769	5,136	4,938	4,810	5,130
CH ₄ -kuyruk merkez	7,126	6,732	6,080	6,944	6,554	5,939	7,154	6,613	6,009

Burada Cr–O_a bağı UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde reaktantta (1) 2,359 Å iken geçiş halinde (TS_{1/2}) 1,916 Å a kısalmıştır ve üründe (2) 1,796 Å olarak hesaplanmıştır. O_a–O_b bağı ise 1 nolu yapıda 1,269 Å iken TS_{1/2} de 1,372 Å'a uzamıştır ve 2 nolu yapıda 1,427 Å olarak hesaplanmıştır. Metal ve katyonik kısmın mesafesi hesaplandığında sırasıyla 4,989; 4,892 ve 5,146 Å şeklindedir. Metan ve katyonik kısmın etkileşimine bakıldığında ise mesafe 6 ila 7 Å arasında değişmektedir.

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerindeki hesaplamalarda da benzer sonuçlar gözlenmektedir.

Şekil 4.14.'de Cr(II)LK2-CH₄ kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



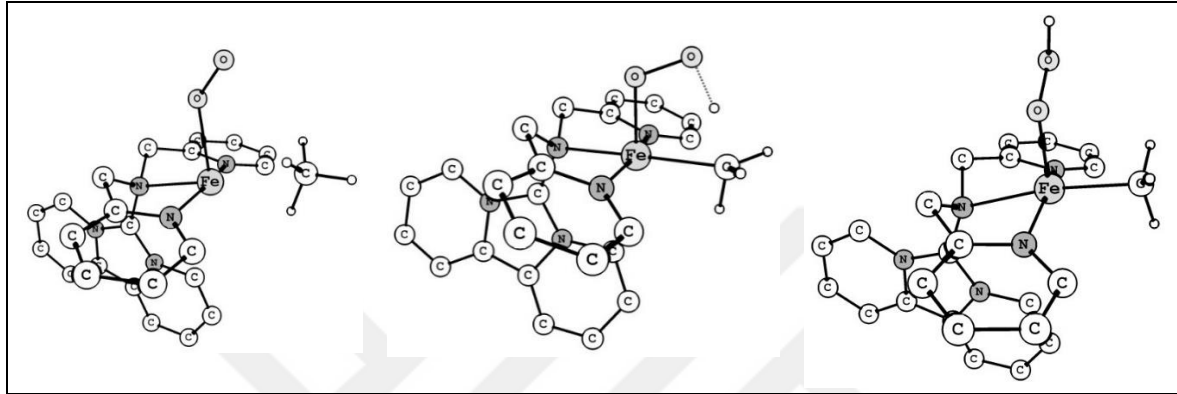
Şekil 4.14. Cr(II)LK2-CH₄ kompleksinin Dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal ve aktif yüzey septet spin yüzeyindedir. C–H aktivasyon bariyeri 34,0 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal triplet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 39,4 kkal·mol⁻¹ olup aktif yüzey kuintet spin yüzeyindedir.

U ω B97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal triplet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey kuintet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 37,2 kkal·mol⁻¹'dür.

4.1.3. LK3 ligandı

Fe(II)LK3 için 1, TS1/2 ve 2 optimize geometrileri Şekil 4.15.'te verilmiştir.



Şekil 4.15. Fe(II)LK3 kompleksinin 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının metan ile etkileşimi. Sadelik için hidrojen atomları gösterilmemiştir.

Çizelge 4.11.'de LK3 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; U ω B97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

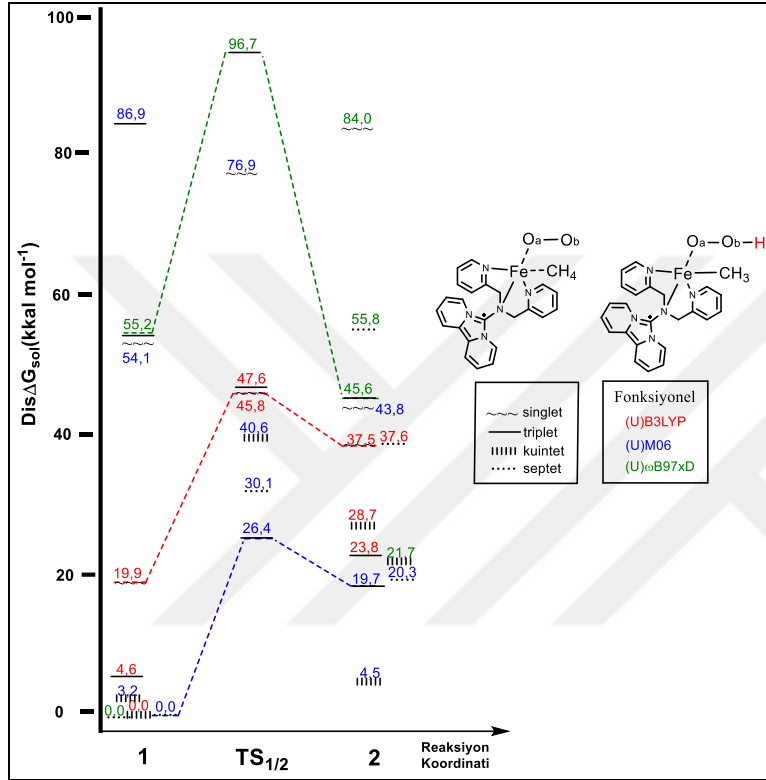
Çizelge 4.11. Fe(II)LK3-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Fe(II)LK3	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U) ω B97XD/LANL2DZ		
	⁷ 1	³ TS1/2	⁵ 2	³ 1	⁷ TS1/2	⁵ 2	⁷ 1	³ TS1/2	⁵ 2
M–O _a	2,943	1,926	1,944	2,255	2,023	1,846	2,389	1,902	2,120
O _a –O _b	1,263	1,372	1,410	1,250	1,366	1,418	1,247	1,352	1,359
M–CH ₄	2,681	2,164	2,130	2,614	2,076	2,130	2,738	2,147	2,152
M-kuyruk merkez	5,199	4,173	5,063	4,862	6,947	4,938	4,818	4,482	4,937
CH ₄ -kuyruk merkez	6,294	6,484	6,809	7,169	8,920	6,645	7,001	6,179	6,742

Burada Metal–O_a bağı UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde reaktantta (1) 2,943 Å'dur. Geçiş halinde (TS1/2) 1,926 Å ve üründe (2) 1,944 Å olarak hesaplanmıştır. O_a–O_b bağı 1 nolu yapıda 1,263 Å iken TS1/2 de 1,372 Å'a uzamıştır ve 2 nolu yapıda 1,410 Å olarak hesaplanmıştır. Metal ve katyonik kısım arasındaki mesafeye bakıldığında bu değerler sırasıyla 4,199; 4,173 ve 5,063 Å şeklindedir. Metan ve katyonik kısmın etkileşimine bakıldığında ise mesafe 6 Å civarındadır.

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve U ω B97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerindeki hesaplamalarda da benzer sonuçlar gözlenmiştir.

Şekil 4.16.'da Fe(II)LK3-CH₄ kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.16. Fe(II)LK3-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: U ω B97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal kuintet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey ise singlet spin yüzeyindedir. C–H aktivasyon bariyeri 45,8 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel halin septet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmış olup aktif yüzey ise triplet spin yüzeyindedir. C–H aktivasyon bariyeri 26,4 kkal·mol⁻¹'dür. U ω B97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal septet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey ise triplet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 96,7 kkal·mol⁻¹'dür.

Çizelge 4.12.'de LK3 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

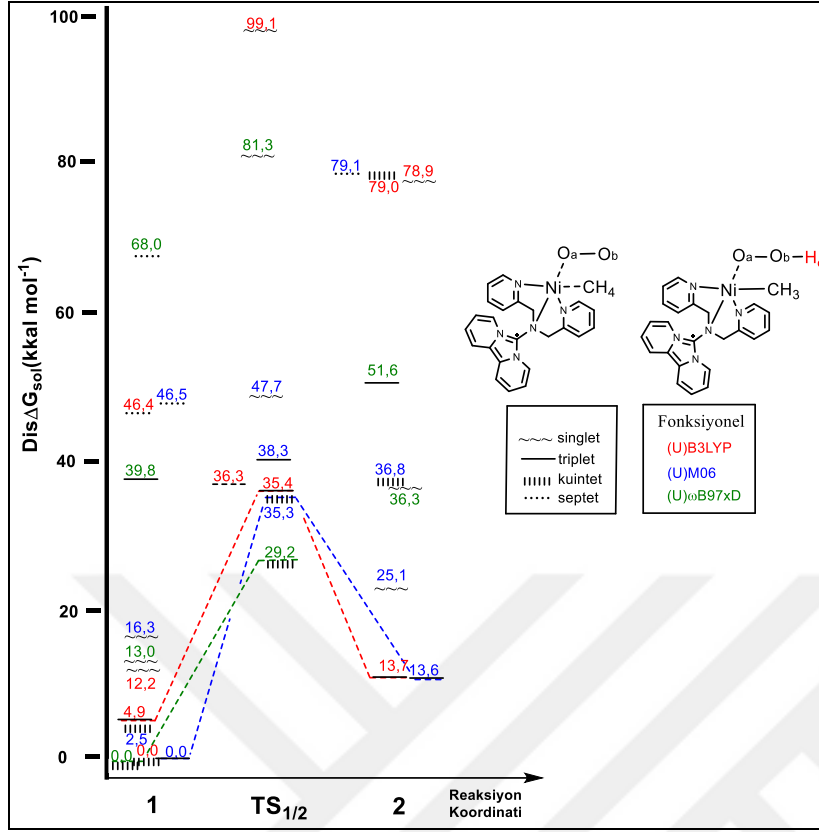
Çizelge 4.12. Ni(II)LK3-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Ni(II)LK3	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁵ ₁	⁵ TS1/2	³ ₂	³ ₁	¹ TS1/2	³ ₂	⁵ ₁	³ TS1/2	⁵ ₂
M–O _a	2,462	2,044	2,091	3,066	2,111	2,093	2,362	2,034	2,141
O _a –O _b	1,264	1,372	1,389	1,251	1,319	1,354	1,247	1,353	1,352
M–CH ₄	2,778	2,152	2,023	2,339	2,384	1,988	2,685	2,126	2,085
M-kuyruk merkez	4,686	5,952	4,909	4,593	4,704	4,730	4,546	5,561	4,766
CH ₄ -kuyruk merkez	6,926	8,032	6,644	6,768	6,761	6,394	6,633	7,560	6,512

Burada Ni–O_a bağı UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde reaktantta (1) 2,462 Å iken geçiş halinde (TS1/2) 2,044 Å olduğu hesaplanmıştır ve üründe (2) 2,091 Å'dur. O_a–O_b bağı 1 nolu yapıda 1,264 Å iken TS1/2 de 1,372 Å'a uzamıştır ve 2 nolu yapıda 1,389 Å olarak hesaplanmıştır. Metal–CH₄ mesafesinde başlangıçta kompleksle etkileşim olmayacak mesafede (2,778 Å) konumlanmış olan metan TS1/2 yapısında kompleksle bağ kuracak konuma gelerek bağ uzunluğunu 2,152 Å kadar kısaltmıştır. Üründe ise metal ve metan arasındaki bağ 2,023 Å olarak hesaplanmıştır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimine bakıldığında ise mesafe 6 ila 8 Å arasında değişim göstermektedir.

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerindeki hesaplamalarda da benzer sonuçlar gözlenmektedir.

Şekil 4.17.'de Ni(II)LK3-CH₄ kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.17. Ni(II)LK3-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel halin kuintet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmıştır ve aktif yüzey ise singlet spin yüzeyindedir. C–H aktivasyon bariyeri 35,4 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal triplet spin yüzeyinde olup aktif yüzey de triplet spin yüzeyindedir. C–H aktivasyon bariyeri 35,3 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey kuintet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 29,2 kkal·mol⁻¹'dür.

Çizelge 4.13.'de LK3 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

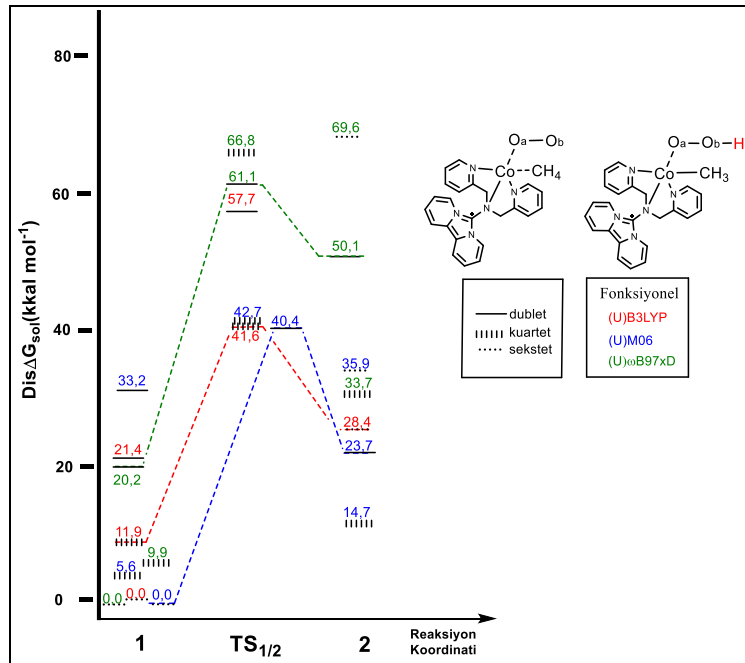
Çizelge 4.13. Co(II)LK3-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Co(II)LK3	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁶ ₁	⁴ TS1/2	⁶ ₂	⁶ ₁	⁴ TS1/2	⁴ ₂	⁶ ₁	⁴ TS1/2	⁴ ₂
M–O _a	2,482	2,112	1,887	2,278	2,098	1,887	2,406	2,099	2,162
O _a –O _b	1,263	1,348	1,492	1,249	1,317	1,386	1,247	1,349	1,352
M–CH ₄	2,751	2,222	2,174	2,590	2,143	2,065	2,676	2,133	1,992
M-kuyruk merkez	4,962	4,902	6,962	4,796	4,676	4,882	4,841	4,906	4,873
CH ₄ -kuyruk merkez	7,258	6,875	9,129	7,108	6,549	6,523	7,015	6,766	5,898

Burada Metal–O_a bağı UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde reaktantta (1) 2,482 Å iken geçiş halinde (TS1/2) 2,112 Å'a kısalmıştır ve üründe (2) 1,887 Å olarak hesaplanmıştır. O_a–O_b bağı 1 nolu yapıda 1,263 Å iken TS1/2 de 1,3748 Å'a uzamıştır ve 2 nolu yapıda 1,492 Å olarak hesaplanmıştır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimine bakıldığında ise mesafe 6 ila 7 Å arasında değişim göstermektedir.

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerindeki hesaplamalarda da benzer sonuçlar gözlenmektedir.

Şekil 4.18.'de Co(II)LK3 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.18. Co(II)LK3-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal sekstet spin yüzeyinde, aktif yüzey ise kuartet spin yüzeyindedir. C–H aktivasyon bariyeri 41,6 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal sekstet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey dublet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 40,4 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey dublet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 61,1 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

Çizelge 4.14.'de LK3 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

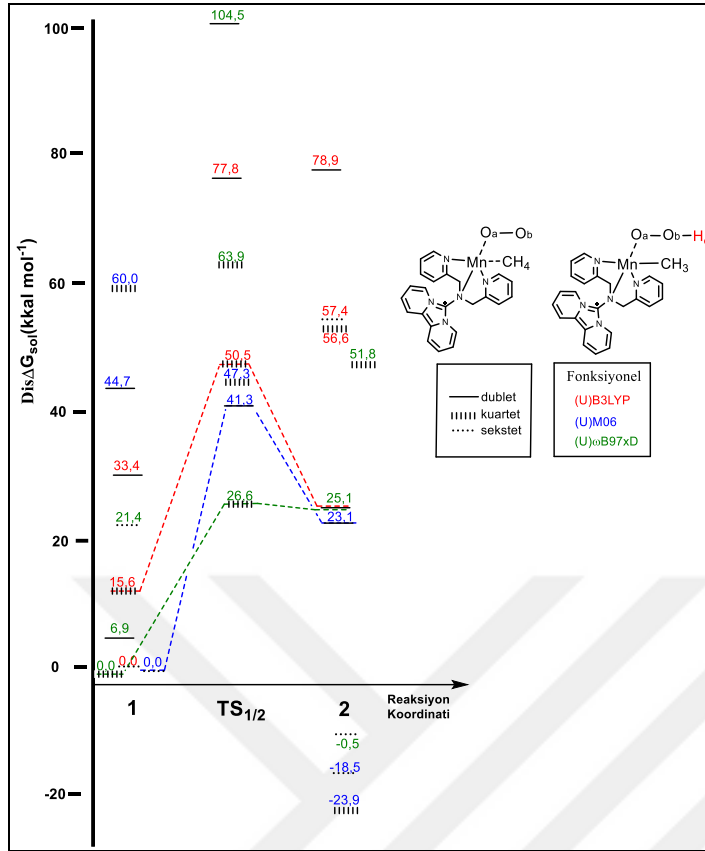
Çizelge 4.14. Mn(II)LK3-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Mn(II)LK3	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁶ 1	⁶ TS1/2	⁶ 2	⁴ 1	⁴ TS1/2	⁴ 2	⁶ 1	¹ TS1/2	⁴ 2
M–O _a	2,373	2,200	2,350	2,234	2,167	2,100	2,377	1,894	2,255
O _a –O _b	1,266	1,353	1,374	1,251	1,327	1,360	1,248	1,346	1,349
M–CH ₄	2,846	2,324	2,045	2,548	2,252	2,045	2,592	2,181	2,072
M-kuyruk merkez	5,140	4,996	5,069	5,014	4,863	4,906	5,010	4,445	4,986
CH ₄ -kuyruk merkez	7,332	7,067	6,741	7,176	6,816	6,504	7,244	6,167	6,636

Burada Metal–O_a bağı UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde reaktantta (1) 2,373 Å iken geçiş halinde (TS1/2) 2,200 Å olarak hesaplanmıştır ve üründe (2) 2,350 Å 'dur. O_a–O_b bağı 1 nolu yapıda 1,266 Å iken TS1/2 de 1,353 Å'a uzamıştır ve 2 nolu yapıda 1,374 Å olarak hesaplanmıştır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimine bakıldığında ise mesafe 6 ila 7 Å arasında değişmektedir.

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerindeki hesaplamalarda da benzer sonuçlar gözlenmiştir.

Şekil 4.19.'da Mn(II)LK3 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.19. Mn(II)LK3-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal sekstet spin yüzeyinde olup aktif yüzey kuartet spin yüzeyindedir. C–H aktivasyon bariyeri 50,5 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde ise temel hal sekstet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey dublet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 41,3 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey kuartet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 26,6 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

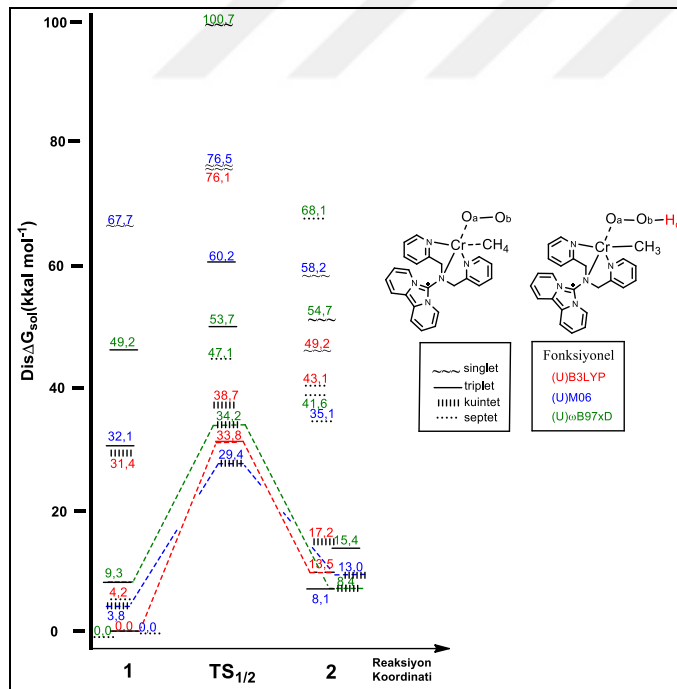
Çizelge 4.14.'de LK3 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

Çizelge 4.15. Cr(II)LK3-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Cr(II)LK3	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	³ ₁	³ TS _{1/2}	⁵ ₂	³ ₁	³ TS _{1/2}	³ ₂	⁷ ₁	⁵ TS _{1/2}	³ ₂
M–O _a	2,350	1,923	1,915	2,246	1,932	1,772	2,615	1,986	1,924
O _a –O _b	1,269	1,372	1,539	1,259	1,348	1,403	1,248	1,356	1,360
M–CH ₄	2,686	2,204	2,019	2,488	2,189	2,089	2,501	2,184	2,071
M-kuyruk merkez	4,917	4,647	6,846	4,778	4,355	4,945	4,788	4,341	4,960
CH ₄ -kuyruk merkez	7,100	6,444	8,820	6,916	6,099	5,657	7,025	6,064	5,711

Her üç seviyede yapılan hesaplamalarda metal–O_a bağı geçiş halinde (TS_{1/2}) reaktantlara (1) göre kısalırken ürünlerde (2) bu mesafe geçiş haline (TS_{1/2}) göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafe hesaplandığında, reaktant geometrisinde her üç seviyede 4 ila 5 Å civarında bir uzaklık söz konusudur ve geçiş halinde bu mesafe kısalır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimi hesaplandığında her üç seviyede de bu uzaklık 6 ila 8 Å arasında değişmektedir.

Şekil 4.20.'de Cr(II)LK3 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.

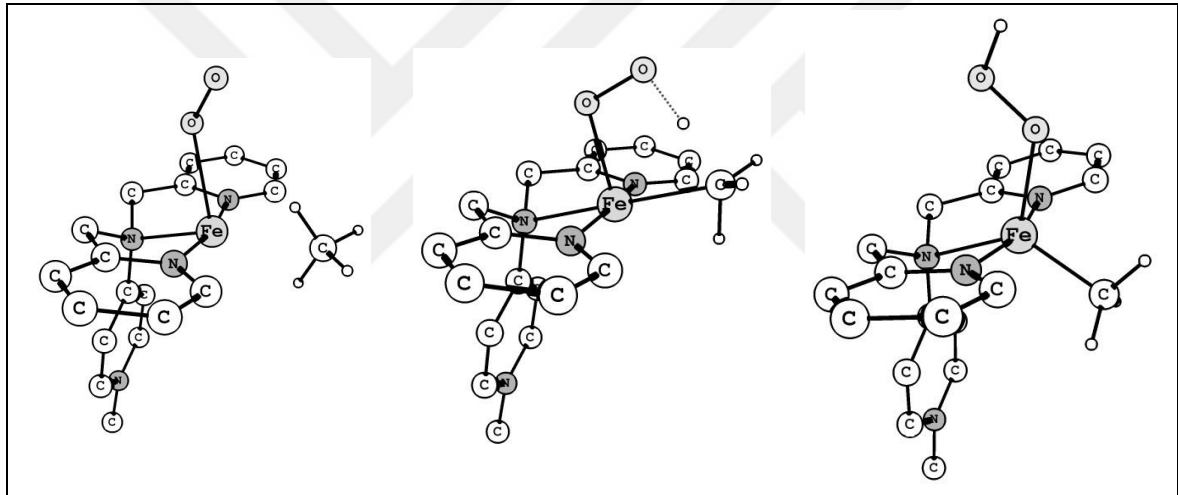


Şekil 4.20. Cr(II)LK3-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal ve aktif yüzeyin triplet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmıştır. C–H aktivasyon bariyeri 33,8 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde ise temel hal septet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey kuintet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 29,4 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey kuintet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 34,2 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

4.1.4. LK4 ligandı

Fe(II)LK4 için 1, TS1/2 ve 2 optimize geometrileri Şekil 4.21.'de verilmiştir.



Şekil 4. 21. Fe(II)LK4 kompleksinin 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının metan ile etkileşimi. Sadelik için hidrojen atomları gösterilmemiştir

Fe(II)LK4-CH₄ kompleksinin bağ uzunlukları Angstrom (Å) cinsinden Çizelge 4.16.'da verilmektedir.

Reaktant (1), ürün (2) ve geçiş hali (TS1/2) yapılarının singlet, triplet, kuintet ve septet spin halleri çalışılmış olup (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde sırasıyla temel hallerin septet, triplet ve septet spin yüzeylerinde olduğu hesaplanmıştır.

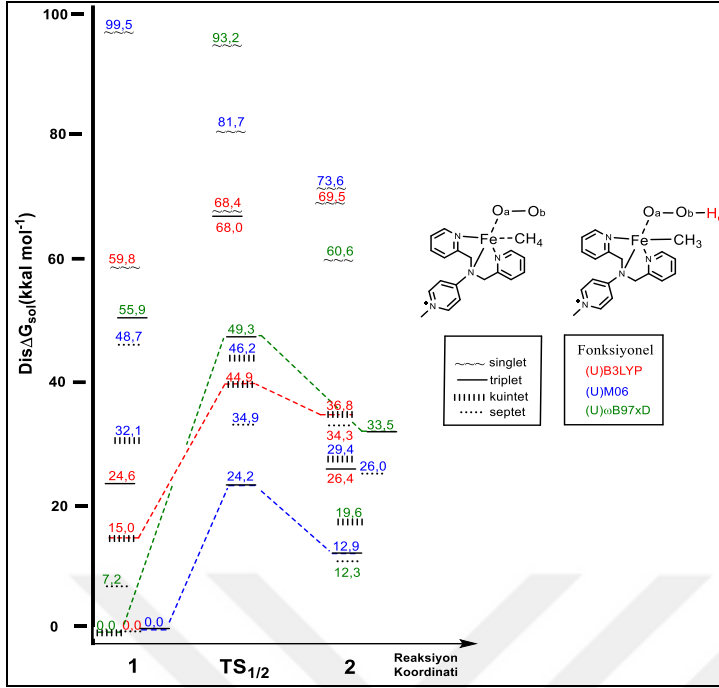
Çizelge 4.16. Fe(II)LK4-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Fe(II)LK4	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁷ ₁	⁵ TS1/2	⁵ ₂	³ ₁	⁷ TS1/2	³ ₂	⁷ ₁	³ TS1/2	⁵ ₂
M–O _a	2,434	2,012	2,156	2,282	2,110	1,853	2,413	1,912	2,159
O _a –O _b	1,263	1,353	1,381	1,251	1,337	1,413	1,247	1,353	1,358
M–CH ₄	2,775	2,251	2,009	2,707	2,171	2,143	2,711	2,126	2,164
M-kuyruk merkez	5,186	5,161	5,088	5,019	5,160	5,228	5,085	4,981	5,158
CH ₄ -kuyruk merkez	6,919	6,995	5,316	6,613	7,085	6,784	6,685	6,553	6,834

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesindeki hesaplamalar sonucu, Fe–O_a bağı reaktantta (1) 2,434 Å olarak hesaplanmıştır. Geçiş halinde (TS1/2) bu mesafe 2,012 Å olmuştur üründe (2) 2,156 Å olarak hesaplanmıştır. O_a–O_b bağı reaktantta 1,263 Å olarak hesaplanırken, geçiş halinde O_a–O_b etkileşimi azalacağından bu mesafe 1,353 Å olarak hesaplanmıştır. Fe metali ile Dummy atom aracılığı ile ağırlık merkezi hesaplanan kuyruk merkez arasındaki mesafe reaktanta 5,186 Å'dur. Geçiş halinde bu mesafe 5,161 Å iken üründe 5,088 Å olduğu hesaplanmıştır. Metan-kuyruk merkez mesafesi reaktant için 6,919 Å iken, geçiş halinde bu mesafe 6,995 Å ve üründe 5,31 Å olarak hesaplanmıştır.

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde de UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesindeki gibi benzer sonuçlar gözlenmektedir.

Şekil 4.22.'de Fe(II)LK4 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.22. Fe(II)LK4-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal septet spin yüzeyinde iken aktif yüzey kuintet spin yüzeyinde olarak hesaplanmıştır. C–H aktivasyon bariyeri 44,9 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde ise temel hal ve aktif yüzey triplet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 24,2 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey triplet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 49,3 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

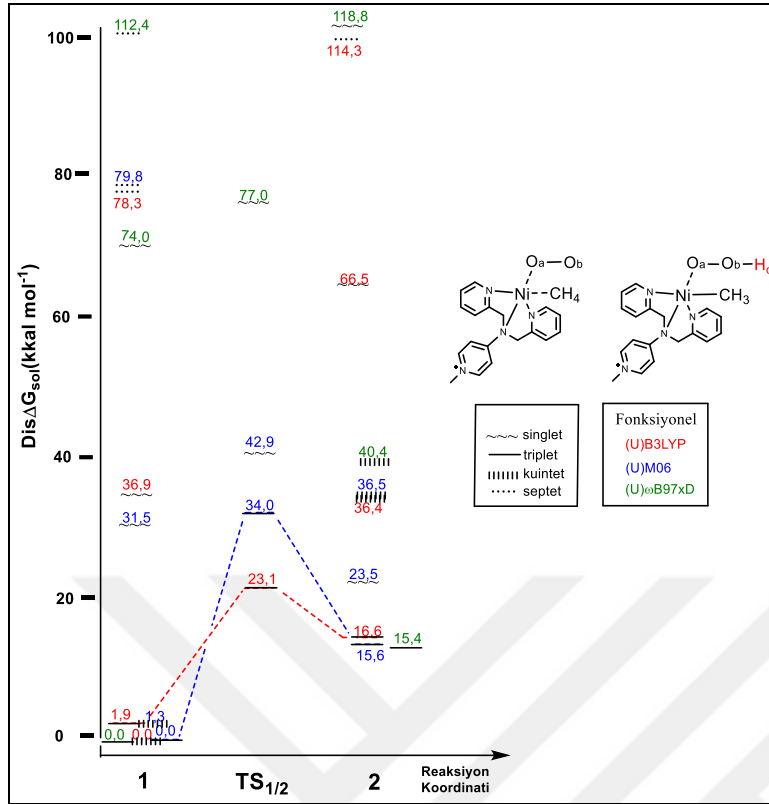
Çizelge 4.17.'de LK4 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

Çizelge 4.17. Ni(II)LK4-CH₄ kompleksinin Å (Angstrom) cinsinden bağ uzunlukları

Ni(II)LK4	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁵ ₁	¹ TS1/2	³ ₂	³ ₁	³ TS1/2	³ ₂	³ ₁	¹ TS1/2	³ ₂
M–O _a	2,410	2,030	2,186	2,625	2,114	2,129	3,075	2,090	2,150
O _a –O _b	1,263	1,333	1,376	1,251	1,313	1,342	1,249	1,300	1,352
M–CH ₄	2,647	2,165	2,042	2,410	2,130	1,969	2,335	2,081	2,101
M-kuyruk merkez	5,037	4,988	5,184	4,838	4,911	4,983	4,859	4,898	5,018
CH ₄ -kuyruk merkez	5,812	6,639	4,777	6,604	6,449	6,477	6,879	6,452	6,621

Üç seviyede de (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ) yapılan hesaplamalarda Ni–O_a bağı geçiş halinde (TS1/2) reaktantlara (1) göre kısalmıştır, ürünlerde (2) geçiş haline (TS1/2) göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafe, reaktant geometrisinde her üç seviyede 2 ila 3 Å civarındadır ve geçiş halinde bu mesafe 2 Å'dur. Metan ve katyonik kısmın etkileşimi hesaplandığında her üç seviyede de bu uzaklık 5 ila 6 Å arasında değişmektedir.

Şekil 4.23.'de Ni(II)LK4 kompleksinin iki farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.23. Ni(II)LK4-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal kuintet spin yüzeyinde iken aktif yüzey triplet spin yüzeyindedir. C–H aktivasyon bariyeri 17,8 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde ise temel hal ve aktif yüzey triplet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 34,0 kkal·mol⁻¹'dür.

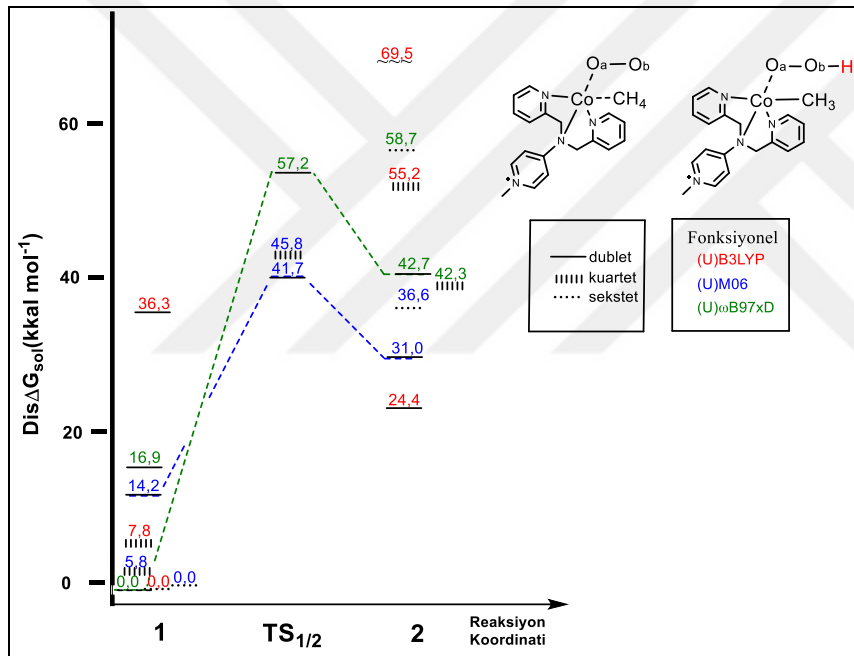
Çizelge 4.18.'de LK4 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

Çizelge 4.18. Co(II)LK4-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Co(II)LK4	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁶ 1	⁴ TS1/2	² 2	⁶ 1	⁴ TS1/2	⁴ 2	² 1	² TS1/2	⁴ 2
M–O _a	2,672	1,763	1,894	2,425	2,091	1,890	2,378	1,893	2,210
O _a –O _b	1,264	1,414	1,393	1,250	1,324	1,385	1,248	1,340	1,354
M–CH ₄	2,627	1,843	1,976	2,559	2,208	2,076	2,480	2,118	2,110
M-kuyruk merkez	5,090	5,077	5,077	4,465	4,983	5,180	4,844	4,908	5,120
CH ₄ -kuyruk merkez	5,932	6,558	4,404	5,454	6,636	6,643	6,375	6,428	6,746

Üç seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ) yapılan hesaplamalarda Co–O_a bağı geçiş halinde (TS1/2) reaktantlara (1) göre kısalmışken ürünlerde (2) bu mesafe geçiş haline (TS1/2) göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafe, reaktant geometrisinde her üç seviyede 2 ila 3 Å civarındadır ve geçiş halinde bu mesafe kısalmıştır. Metan ve katyonik kısmın mesafesi incelendiğinde her üç seviyede de bu uzaklık 5 ila 6 Å arasında değişmektedir.

Şekil 4.24.'de Co(II)LK4 kompleksinin iki farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.24. Co(II)LK4-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal sekstet spin yüzeyinde olup aktif yüzey dublet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 41,7 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey dublet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 57,2 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

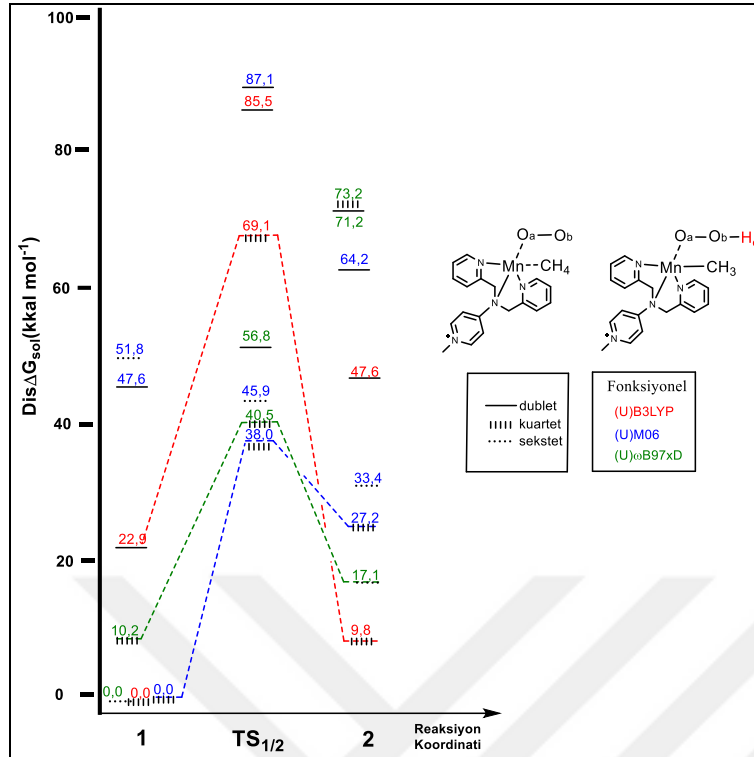
Çizelge 4.19.'da LK4 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

Çizelge 4.19. Mn(II)LK4-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Mn(II)LK4	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁶ 1	⁴ TS1/2	⁶ 2	⁴ 1	⁶ TS1/2	⁴ 2	² 1	⁴ TS1/2	⁴ 2
M–O _a	2,575	2,219	2,346	2,247	2,163	2,114	2,347	1,954	2,291
O _a –O _b	1,263	1,347	1,376	1,251	1,328	1,359	1,248	1,351	1,350
M–CH ₄	2,570	2,351	2,056	2,473	2,270	2,051	2,524	2,168	2,086
M-kuyruk merkez	4,997	5,243	5,152	5,023	5,089	5,144	4,927	5,011	5,162
CH ₄ -kuyruk merkez	6,542	7,209	5,761	4,975	6,908	6,529	6,269	6,640	6,689

Üç seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ) yapılan hesaplamalarda metal–O_a bağı geçiş halinde (TS1/2) reaktantlara (1) göre kısalırken ürünlerde (2) bu mesafe geçiş haline (TS1/2) göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafe, reaktant geometrisinde her üç seviyede 2,5 Å civarındadır ve geçiş halinde bu mesafe kısalmıştır. Metan ve katyonik kısmın arasındaki mesafe her üç seviyede de 5 ila 7 Å arasında değişmektedir.

Şekil 4.25.'de Mn(II)LK4 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.25. Mn(II)LK4-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal kuartet spin yüzeyinde iken aktif yüzeyin dublet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmıştır. C–H aktivasyon bariyeri 69,1 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde ise temel hal ve aktif yüzey dublet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 38,0 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal sekstet spin yüzeyinde iken aktif yüzey kuartet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 40,5 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

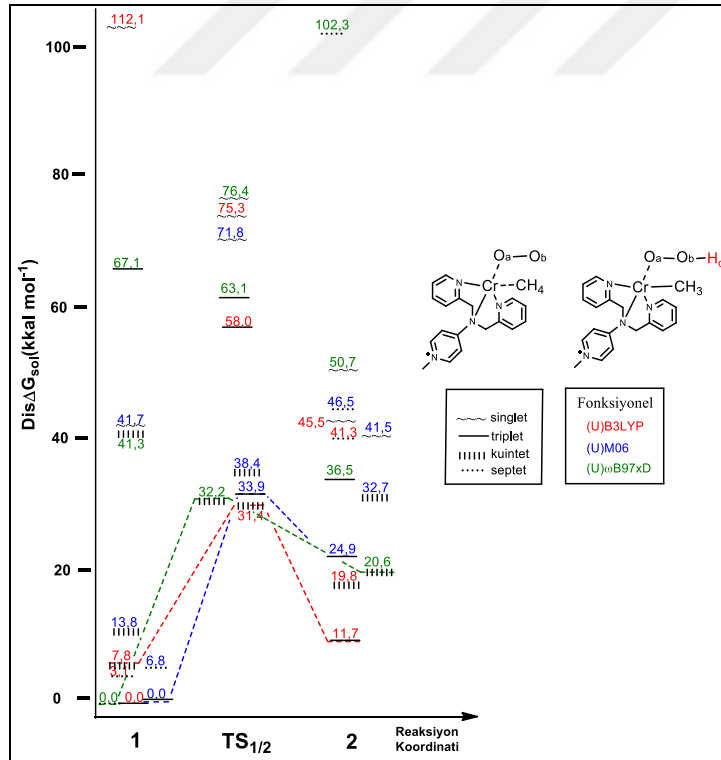
Çizelge 4.19.'da LK4 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

Çizelge 4.20. Cr(II)LK4-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Cr(II)LK4	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	³ ₁	³ TS _{1/2}	³ ₂	³ ₁	³ TS _{1/2}	³ ₂	³ ₁	¹ TS _{1/2}	³ ₂
M–O _a	2,340	1,912	1,939	2,212	1,888	1,734	2,441	1,706	1,780
O _a –O _b	1,268	1,373	1,340	1,257	1,350	1,392	1,250	1,388	1,354
M–CH ₄	2,672	2,198	2,038	2,526	2,170	2,039	2,598	2,191	2,030
M-kuyruk merkez	5,089	5,155	5,122	4,953	5,063	5,369	4,998	5,176	5,003
CH ₄ -kuyruk merkez	6,715	6,870	4,487	6,313	6,742	6,714	6,783	7,090	4,364

Üç seviye ile yapılan hesaplamalarda Cr–O_a bağı geçiş halinde (TS_{1/2}) reaktantlara (1) göre kısılırken ürünlerde (2) bu mesafe geçiş haline (TS_{1/2}) göre uzamıştır. O_a–O_b bağı uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafe, reaktant geometrisinde her üç seviyede 2,5 Å civarındadır ve geçiş halinde bu mesafe kısalmıştır. Metan ve katyonik kısım mesafesi hesaplandığında her üç seviyede de bu uzaklık 4 ila 7 Å arasında değişmektedir.

Şekil 4.26.'da Cr(II)LK4 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.

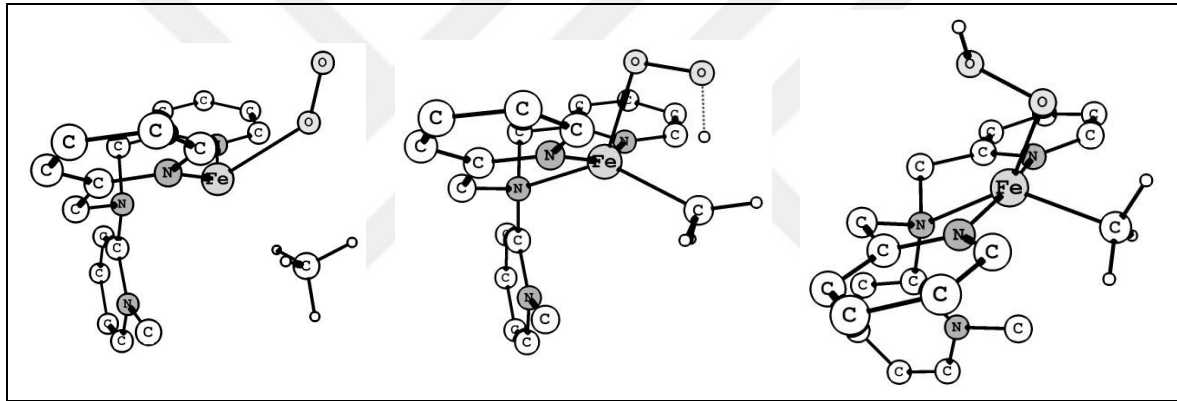


Şekil 4.26. Cr(II)LK4-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal triplet spin yüzeyinde iken aktif yüzeyin kuintet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmıştır. C–H aktivasyon bariyeri 31,4 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey triplet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 33,9 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey kuintet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 32,2 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

4.1.5. LK5 ligandı

Fe(II)LK5 için 1, TS1/2 ve 2 optimize geometrileri Şekil 4.27.'de verilmiştir.



Şekil 4.27. Fe(II)LK5-CH₄ kompleksinin 1, TS1/2 ve 2 nolu yapıları. Sadelik için hidrojen atomları gösterilmemiştir

Fe(II)LK5-CH₄ kompleksinin bağ uzunlukları Angstrom (Å) cinsinden Çizelge 4.21.'de verilmektedir. Reaktant (1), ürün (2) ve geçiş hali (TS1/2) yapılarının singlet, triplet, kuintet ve septet spin halleri çalışılmış olup (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde temel hallerin septet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmıştır.

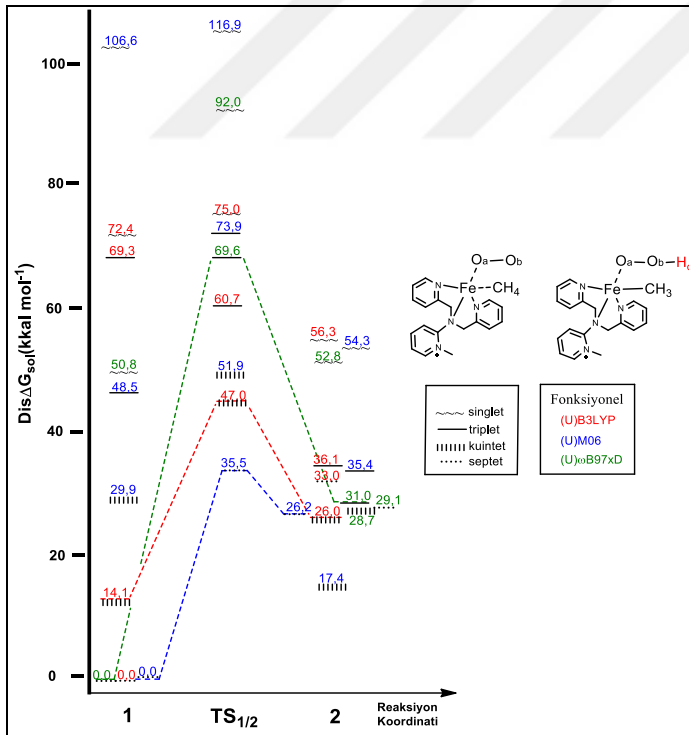
Çizelge 4.21. Fe(II)LK5-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Fe(II)LK5	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁷ 1	⁵ TS1/2	⁵ 2	⁷ 1	⁷ TS1/2	⁵ 2	⁷ 1	³ TS1/2	⁵ 2
M–O _a	2,483	2,145	1,965	2,559	2,129	1,835	2,426	1,902	2,169
O _a –O _b	1,263	1,355	1,405	1,250	1,352	1,410	1,247	1,351	1,352
M–CH ₄	2,590	2,173	2,145	2,520	2,118	2,176	2,525	2,143	2,201
M-kuyruk merkez	4,356	4,175	4,426	4,108	4,185	4,349	4,231	3,978	4,352
CH ₄ -kuyruk merkez	4,991	5,023	6,160	5,708	4,493	3,843	4,599	5,680	4,152

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesindeki hesaplamalar sonucu, Fe–O_a bağı reaktantta (1) 2,483 Å iken geçiş halinde (TS1/2) 2,145 Å' a kadar azalmış ve üründe (2) 1,965 Å olarak hesaplanmıştır. O_a–O_b bağı reaktantta 1,263 Å iken, geçiş halinde 1,355 Å olmuştur. Metal–CH₄ mesafesi reaktantta 2,590 Å iken TS1/2 yapısında kısalmıştır (2,173 Å) ve üründe bu bağ 2,145 Å olarak hesaplanmıştır. Fe metali ile kuyruk merkez arasındaki mesafe reaktanta 4,356 Å'dur. Geçiş halinde bu mesafe 4,175 Å olarak hesaplanmışken üründe 4,426 Å'dur. Metan-kuyruk merkez mesafesi reaktantta 4,991 Å iken, geçiş halinde bu mesafe 5,023 Å'dur ve üründe 6,160 Å olarak hesaplanmıştır.

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerindeki hesaplamalar da UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesi ile benzer yolu izlemektedir.

Şekil 4.28.'de Fe(II)LK5 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.28. Fe(II)LK5-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal septet spin yüzeyinde, aktif yüzey ise kuintet spin yüzeyindedir. C–H aktivasyon bariyeri 47,0 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey septet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 35,5 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde aktif yüzey triplet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 69,6 kkal·mol⁻¹'dür.

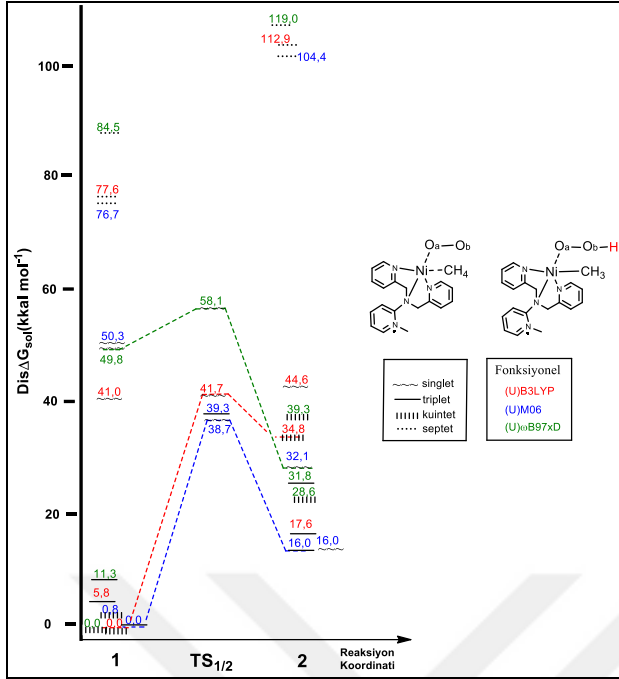
Çizelge 4.22.'de LK5 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

Çizelge 4.22. Ni(II)LK5-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Ni(II)LK5	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁵ ₁	¹ TS1/2	⁵ ₂	³ ₁	³ TS1/2	³ ₂	⁵ ₁	³ TS1/2	³ ₂
M–O _a	2,374	2,033	2,166	2,931	2,136	2,156	2,487	2,202	2,165
O _a –O _b	1,262	1,331	1,372	1,251	1,315	1,357	1,247	1,292	1,354
M–CH ₄	2,767	2,175	2,028	2,384	2,099	2,004	2,478	2,064	2,117
M-kuyruk merkez	4,127	4,102	4,231	3,913	3,946	4,287	4,095	3,975	4,281
CH ₄ -kuyruk merkez	6,263	5,926	5,916	5,765	5,267	4,515	4,683	5,488	4,371

Yukarıda verilen üç seviyedeki hesaplamalarda Ni–O_a bağı geçiş halinde (TS1/2) reaktantlara (1) göre kısalırken ürünlerde (2) bu mesafe geçiş haline (TS1/2) göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafede, reaktant geometrisinde her üç seviyede 2 ila 3 Å civarındadır ve geçiş haline gelindiğinde 2 Å civarındadır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimi hesaplandığında her üç seviyede de bu uzaklık 4 ila 6 Å arasında değişmektedir.

Şekil 4.29.'da Ni(II)LK5 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.29. Ni(II)LK5-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel halin kuintet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmıştır. Aktif yüzey singlet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 41,7 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde ise temel hal triplet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey singlet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 38,7 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal kuintet spin yüzeyinde olup aktif yüzey singlet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 58,1 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

Çizelge 4.23.'de LK5 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

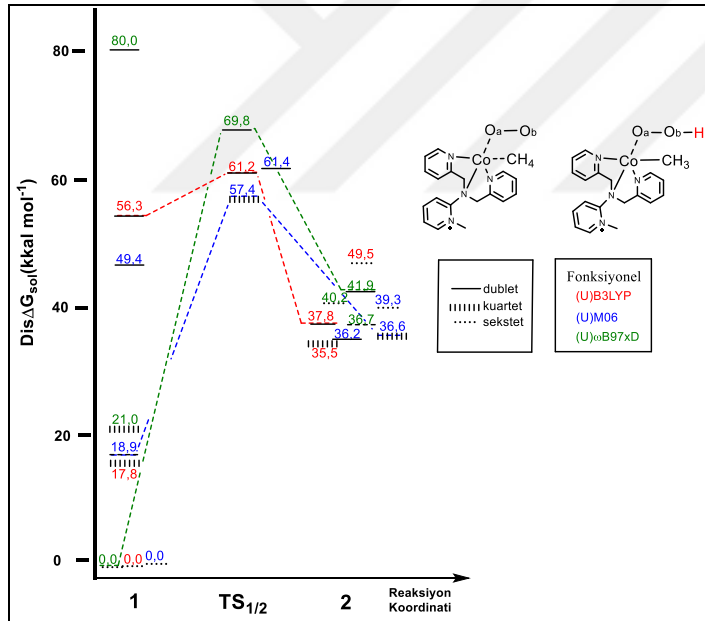
Çizelge 4.23. Co(II)LK5-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Co(II)LK5	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁶ ₁	² TS _{1/2}	⁴ ₂	⁶ ₁	⁴ TS _{1/2}	⁴ ₂	⁶ ₁	¹ TS _{1/2}	⁴ ₂
M–O _a	2,999	1,903	2,208	2,728	2,072	2,027	2,726	1,880	2,263
O _a –O _b	1,264	1,359	1,376	1,250	1,335	1,362	1,248	1,340	1,356
M–CH ₄	2,503	2,157	2,049	2,469	2,092	1,976	2,454	2,129	2,163
M-kuyruk merkez	4,175	4,002	4,392	4,067	4,051	4,184	4,088	3,914	4,248
CH ₄ -kuyruk merkez	5,714	5,721	6,126	5,632	4,790	4,733	5,581	5,597	4,913

Burada Metal–O_a bağı UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde reaktantta (1) 2,999 Å iken geçiş halinde (TS1/2) 1,903 Å'a kısalmıştır ve üründe (2) 2,208 Å olarak hesaplanmıştır. O_a–O_b bağı 1 nolu yapıda 1,264 Å iken TS1/2 de 1,359 Å'a uzamıştır ve 2 nolu yapıda 1,376 Å olduğu hesaplanmıştır. Metal ve katyonik kısım arasındaki mesafe hesaplandığında değerler reaktant, geçiş hali ve ürün için sırasıyla 4,175; 4,002 ve 4,392 Å şeklindedir. Metan ve katyonik kısmın etkileşimine bakıldığında ise mesafe 4 ila 5 Å civarındadır.

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerindeki hesaplamalarda da benzer sonuçlar gözlenmiştir.

Şekil 4.30.'da Co(II)LK5 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.30. Co(II)LK5-CH4 kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal sekstet spin yüzeyinde iken aktif yüzeyin dublet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmıştır. C–H aktivasyon bariyeri 61,2 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal sekstet spin yüzeyinde olup aktif yüzey dublet spin yüzeyindedir ve

C–H aktivasyon bariyeri $57,4 \text{ kkal} \cdot \text{mol}^{-1}$ 'dir. $U\omega B97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol$ seviyesinde temel hal sekstet spin yüzeyinde olup aktif yüzey dublet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri $69,8 \text{ kkal} \cdot \text{mol}^{-1}$ olarak hesaplanmıştır.

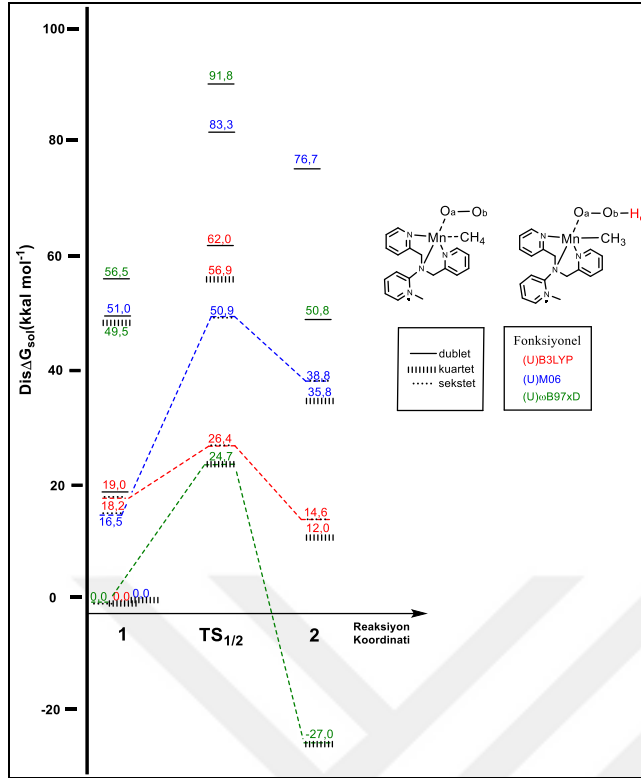
Çizelge 4.24.'de LK5 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; $U\omega B97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ$) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

Çizelge 4.24. Mn(II)LK5-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Mn(II)LK5	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U) ω B97XD/LANL2DZ		
	⁶ ₁	⁶ TS1/2	⁴ ₂	⁴ ₁	⁴ TS1/2	⁴ ₂	⁴ ₁	¹ TS1/2	⁶ ₂
M–O _a	2,407	2,250	2,205	2,338	2,255	2,122	2,375	1,889	2,325
O _a –O _b	1,266	1,351	1,377	1,251	1,329	1,359	1,247	1,347	1,351
M–CH ₄	2,552	2,251	2,049	2,470	2,190	2,048	2,502	2,180	2,078
M-kuyruk merkez	4,412	4,228	4,403	4,279	4,138	4,246	4,296	3,979	4,343
CH ₄ -kuyruk merkez	5,201	5,551	6,000	5,571	5,467	5,793	4,929	5,710	6,000

Üç seviyede yapılan hesaplamalarda metal–O_a bağı geçiş halinde (TS1/2) reaktantlara (1) göre kısalırken ürünlerde (2) bu mesafe geçiş haline (TS1/2) göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki bağ, reaktant geometrisinde her üç seviyede $2,5 \text{ Å}$ civarındadır ve geçiş haline gelindiğinde bu mesafe 2 Å 'a kadar kısalmıştır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimi hesaplandığında her üç seviyede de bu uzaklık $5 \text{ ila } 6 \text{ Å}$ arasında değişmektedir.

Şekil 4.31.'de Mn(II)LK5 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri ($\text{kkal} \cdot \text{mol}^{-1}$) verilmiştir.



Şekil 4.31. Mn(II)LK5-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal kuartet spin yüzeyinde iken aktif yüzeyin sekstet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmıştır. C–H aktivasyon bariyeri 26,4 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal kuartet spin yüzeyinde olup aktif yüzey sekstet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 50,9 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal sekstet spin yüzeyinde olup aktif yüzey kuartet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 24,7 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

Çizelge 4.25.'te LK5 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

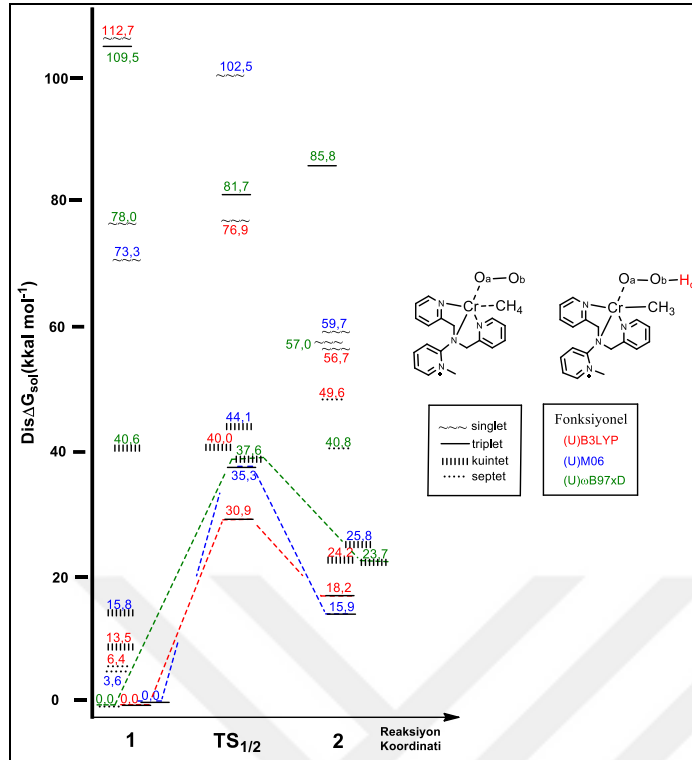
Çizelge 4.25. Cr(II)LK5-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Cr(II)LK5	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	³ ₁	⁵ TS1/2	⁵ ₂	³ ₁	³ TS1/2	³ ₂	³ ₁	³ TS1/2	⁵ ₂
M–O _a	2,055	1,970	1,790	2,246	1,901	2,150	2,373	1,907	2,148
O _a –O _b	1,262	1,377	1,430	1,254	1,347	1,354	1,249	1,352	1,347
M–CH ₄	3,137	2,200	2,056	2,515	2,169	2,054	2,553	2,176	2,021
M-kuyruk merkez	4,199	4,119	4,311	4,070	4,017	4,151	4,122	4,052	4,168
CH ₄ -kuyruk merkez	5,343	5,927	5,304	5,517	5,825	4,140	5,524	5,825	3,975

Burada Metal–O_a bağı UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde reaktantta (1) 2,055 Å iken geçiş halinde (TS1/2) 1,970 Å'a kısalmıştır ve üründe (2) 1,790 Å olarak hesaplanmıştır. O_a–O_b bağı 1 nolu yapıda 1,262 Å iken TS1/2 de 1,377 Å'a uzamıştır ve 2 nolu yapıda 1,430 Å olarak hesaplanmıştır. Metal ve katyonik kısım arasındaki mesafe hesaplandığında reaktant, geçiş hali ve ürün olmak koşusuyla sırasıyla 4,199; 4,119 ve 4,311 Å şeklindedir. Metan ve katyonik kısmın etkileşiminde ise mesafe 4 ila 6 Å arasındadır.

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerindeki hesaplamalarda da benzer sonuçlar gözlenmiştir.

Şekil 4.32.'de Cr(II)LK5 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.

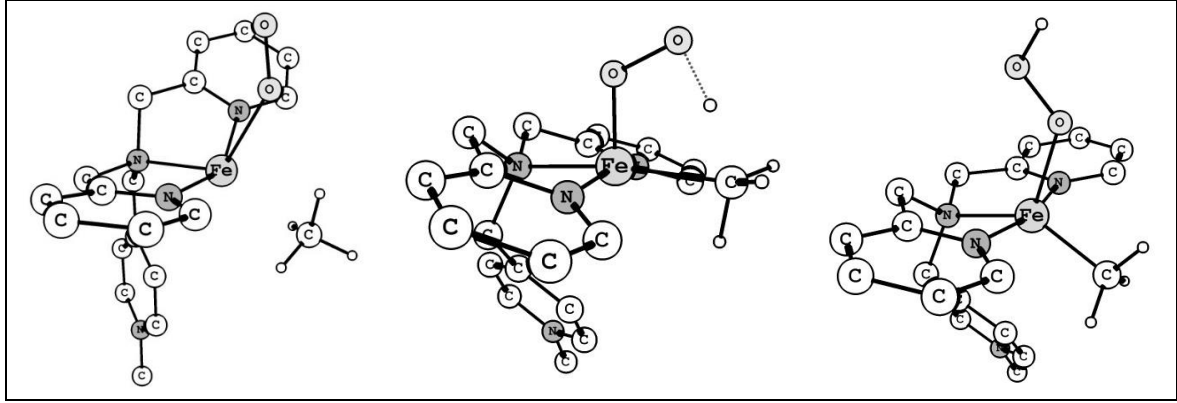


Şekil 4.32. Cr(II)LK5-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal ve aktif yüzey triplet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 30,9 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey triplet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 35,3 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal septet spin yüzeyinde olup aktif yüzey quintet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 37,6 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

4.1.6. LK6 ligandı

Fe(II)LK6 için 1, TS1/2 ve 2 optimize geometrileri Şekil 4.33.'te verilmiştir.



Şekil 4.33. Fe(II)LK6-CH₄ kompleksinin 1, TS1/2 ve 2 nolu yapıları. Sadelik için hidrojen atomları gösterilmemiştir.

Fe(II)LK6-CH₄ kompleksinin bağ uzunlukları Angstrom (Å) cinsinden Çizelge 4.26.'da verilmektedir. (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde temel hallerin septet ve triplet spin yüzeylerinde olduğu hesaplanmıştır.

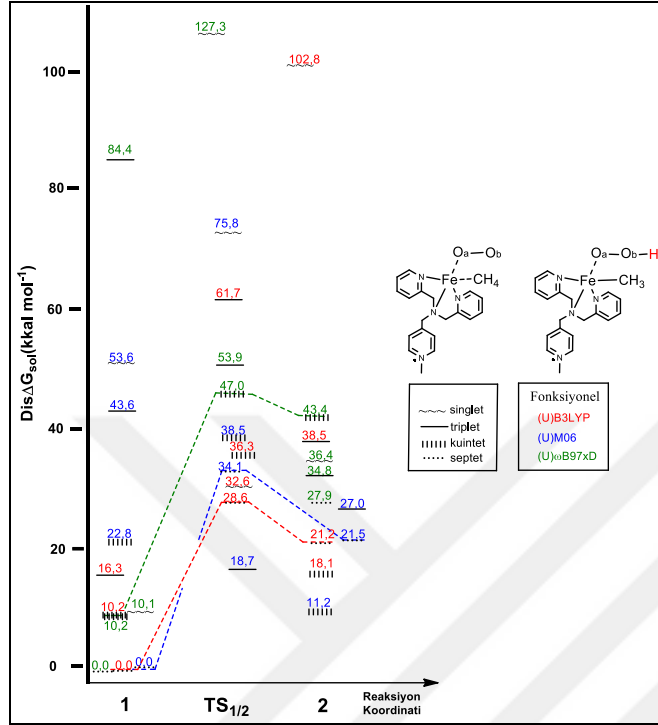
Çizelge 4.26. Fe(II)LK6-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Fe(II)LK6	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁷ 1	⁷ TS1/2	³ 2	³ 1	⁷ TS1/2	⁵ 2	³ 1	⁵ TS1/2	⁵ 2
M–O _a	2,389	2,155	1,798	2,420	2,119	1,850	2,364	2,089	2,092
O _a –O _b	1,264	1,363	1,467	1,250	1,338	1,416	1,248	1,340	1,360
M–CH ₄	2,713	2,192	2,047	2,486	2,164	2,123	2,618	2,182	2,199
M-kuyruk merkez	5,406	5,475	5,338	4,970	4,776	5,113	5,159	4,785	5,266
CH ₄ -kuyruk merkez	5,759	4,670	4,548	5,516	6,309	6,356	4,642	6,150	4,483

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesindeki hesaplamalar sonucu, Fe–O_a bağı reaktantta (1) 2,389 Å iken geçiş halinde (TS1/2) 2,155 Å'a kadar azalmış ve üründe (2) 1,798 Å olarak hesaplanmıştır. O_a–O_b bağı reaktantta 1,264 Å iken, geçiş halinde 1,363 Å olarak hesaplanmıştır. Metal–CH₄ mesafesi reaktantta 2,713 Å iken TS1/2 yapısında kısalarak 2,192 Å olmuştur ve üründe 2,047 Å olduğu hesaplanmıştır. Fe metali ile kuyruk merkez arasındaki mesafe reaktanta 5,406 Å olarak hesaplanmıştır. Geçiş halinde 5,475 Å olur iken üründe 5,338 Å'dur. Metan-kuyruk merkez mesafesi reaktant için 5,759 Å iken, geçiş halinde bu mesafe 4,670 Å ve üründe 4,548 Å olduğu hesaplanmıştır.

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerindeki hesaplamalarda UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesi ile benzer yolu izlemektedir.

Şekil 4.34.'de LK6-Fe(II) kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri ($\text{kkal}\cdot\text{mol}^{-1}$) verilmiştir.



Şekil 4.34. Fe(II)LK6-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal ve aktif yüzey septet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri $28,6 \text{ kkal}\cdot\text{mol}^{-1}$ 'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey septet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri $34,1 \text{ kkal}\cdot\text{mol}^{-1}$ 'dür. UB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal septet spin yüzeyinde olup aktif yüzey quintet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri $47,0 \text{ kkal}\cdot\text{mol}^{-1}$ olarak hesaplanmıştır.

Çizelge 4.27.'de LK6 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

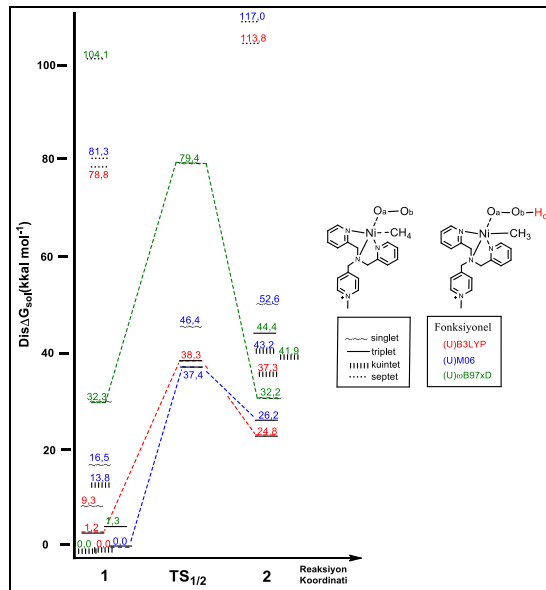
Çizelge 4.27. Ni(II)LK6-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Ni(II)LK6	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	³ ₁	³ TS _{1/2}	³ ₂	³ ₁	³ TS _{1/2}	³ ₂	⁵ ₁	¹ TS _{1/2}	³ ₂
M–O _a	3,170	2,090	2,237	2,591	2,103	2,211	2,332	2,054	2,192
O _a –O _b	1,265	1,343	1,376	1,251	1,317	1,358	1,247	1,306	1,354
M–CH ₄	2,471	2,210	2,011	2,350	2,127	1,975	2,690	2,097	2,101
M-kuyruk merkez	4,909	5,011	5,486	4,656	4,528	5,133	4,777	4,862	5,199
CH ₄ -kuyruk merkez	6,810	6,400	5,367	6,314	5,595	4,831	6,091	6,031	4,654

Burada Metal–O_a bağı UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde reaktantta (1) 3,170 Å iken geçiş halinde (TS_{1/2}) 2,090 Å'a kısalmıştır ve üründe (2) 2,237 Å olduğu hesaplanmıştır. O_a–O_b bağı 1 nolu yapıda 1,265 Å iken TS_{1/2} de 1,343 Å'a uzamıştır ve 2 nolu yapıda bağ 1,376 Å olarak hesaplanmıştır. Metal ve katyonik kısım arasındaki mesafe hesaplandığında bağ uzunlukları reaktant, geçiş hali ve ürün sırasıyla 4,909; 5,011 ve 5,486 Å şeklindedir. Metan ve katyonik kısmın etkileşimine bakıldığında ise mesafe 5 ila 6 Å civarındadır.

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerindeki hesaplamalarda da benzer sonuçlar gözlenmiştir.

Şekil 4.35.'de Ni(II)LK6 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.35. Ni(II)LK6-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal kuintet spin yüzeyinde ve aktif yüzey triplet spin yüzeyindedir. C–H aktivasyon bariyeri 38,3 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey triplet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 37,4 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal triplet spin yüzeyinde olup aktif yüzey singlet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 79,4 kkal·mol⁻¹'dür.

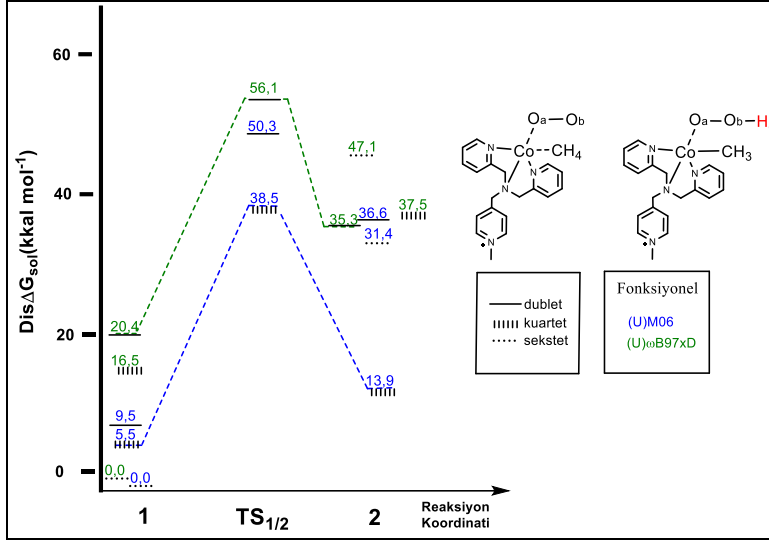
Çizelge 4.28.'de LK6 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

Çizelge 4.28. Co(II)LK6-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Co(II)LK6	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁶ 1	⁴ TS1/2	² 2	⁶ 1	⁴ TS1/2	⁴ 2	⁴ 1	² TS1/2	⁴ 2
M–O _a	3,429	1,919	1,825	2,391	2,105	1,886	2,480	1,894	2,206
O _a –O _b	1,265	1,422	1,407	1,249	1,320	1,387	1,248	1,341	1,355
M–CH ₄	2,424	2,045	1,975	2,608	2,127	2,048	2,496	2,124	2,072
M-kuyruk merkez	5,218	5,321	5,321	4,734	4,534	4,758	4,587	4,460	4,861
CH ₄ -kuyruk merkez	5,499	6,727	4,635	5,391	5,801	5,729	5,918	5,463	6,151

Üç farklı seviyedeki hesaplamalarda metal–O_a bağında geçiş halinde (TS1/2) reaktantlara (1) göre kısalmışken ürünlerde (2) bu mesafe geçiş haline (TS1/2) göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafe hesaplandığında, reaktant geometrisinde her üç seviyede 2,5 Å civarındadır ve geçiş haline gelindiğinde bu mesafe 2 Å'a kısalmıştır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimi hesaplandığında her üç seviyede de mesafe 4 ila 6 Å arasında değişmektedir.

Şekil 4.36.'da Co(II)LK6 kompleksinin iki farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.36. Co(II)LK6-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D₂ + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D₂ + Sol)

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D₂ + Sol seviyesinde temel hal sekstet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey kuartet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 38,5 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D₂ + Sol seviyesinde temel hal sekstet spin yüzeyinde olup aktif yüzey dublet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 56,1 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

Çizelge 4.29.'da LK6 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

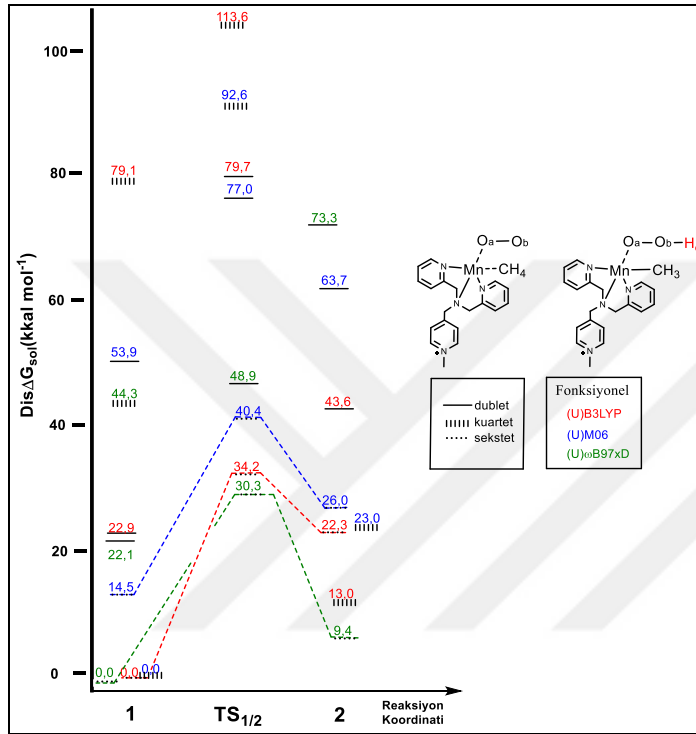
Çizelge 4.29. Mn(II)LK6-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Mn(II)LK6	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁴ 1	⁴ TS1/2	⁴ 2	⁴ 1	⁴ TS1/2	⁴ 2	² 1	⁶ TS1/2	⁶ 2
M–O _a	2,365	2,242	1,802	2,235	2,150	2,124	2,381	2,147	2,334
O _a –O _b	1,266	1,354	1,473	1,253	1,331	1,358	1,249	1,340	1,351
M–CH ₄	2,582	2,212	2,056	2,735	2,227	2,030	2,549	2,256	2,042
M-kuyruk merkez	5,458	5,163	5,344	4,857	4,783	4,788	4,689	4,824	4,874
CH ₄ -kuyruk merkez	5,156	5,698	4,622	5,743	6,065	5,723	5,923	6,252	6,015

Üç seviyede yapılan hesaplamalarda metal–O_a bağı geçiş halinde (TS1/2) reaktantlara (1) göre kısalmışken üründe (2) bu mesafe geçiş haline (TS1/2) göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafe hesaplandığında reaktant geometrisinde her üç seviyede 4 ila 5 Å civarındadır. Metan ve

katyonik kısmın etkileşimi hesaplandığında her üç seviyede de bu uzaklık 4 ila 6 Å arasında değişmektedir.

Şekil 4.37.'de Mn(II)LK6 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri ($\text{kkal}\cdot\text{mol}^{-1}$) verilmiştir.



Şekil 4.37. Mn(II)LK6-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal ve aktif yüzey sektet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri $34,2 \text{ kkal}\cdot\text{mol}^{-1}$ 'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal kuartet spin yüzeyinde olup aktif yüzey sektet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri $40,4 \text{ kkal}\cdot\text{mol}^{-1}$ 'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey sektet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri $30,3 \text{ kkal}\cdot\text{mol}^{-1}$ 'dür.

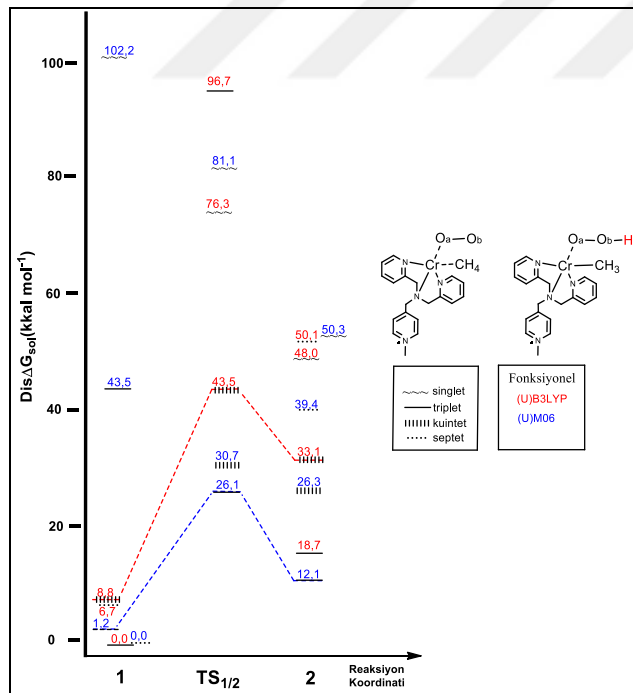
Çizelge 4.30.'da LK6 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

Çizelge 4.30. Cr(II)LK6-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Cr(II)LK6	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	³ ₁	³ TS _{1/2}	³ ₂	³ ₁	³ TS _{1/2}	³ ₂	³ ₁	⁵ TS _{1/2}	⁶ ₂
M–O _a	2,005	1,966	1,871	2,182	1,888	1,782	2,431	1,962	1,910
O _a –O _b	1,265	1,372	1,404	1,258	1,351	1,402	1,250	1,357	1,341
M–CH ₄	3,220	2,186	2,019	2,598	2,177	2,060	2,620	2,181	2,020
M-kuyruk merkez	5,219	5,452	5,289	4,703	4,566	5,310	4,740	4,534	4,934
CH ₄ -kuyruk merkez	5,393	4,868	4,761	5,558	5,728	5,126	6,139	5,688	5,982

Bahsi geçen hesaplamalarda Cr–O_a bağı geçiş halinde (TS_{1/2}) reaktantlara (1) göre kısılrken ürünlerde (2) bu mesafe geçiş haline (TS_{1/2}) göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafe hesaplandığında reaktant geometrisinde her üç seviyede 2 ila 3 Å civarındadır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimi hesaplandığında ise her üç seviyede de bu uzaklık 4 ila 6 Å arasında değişmektedir.

Şekil 4.38.'de Cr(II)LK6 kompleksinin iki farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



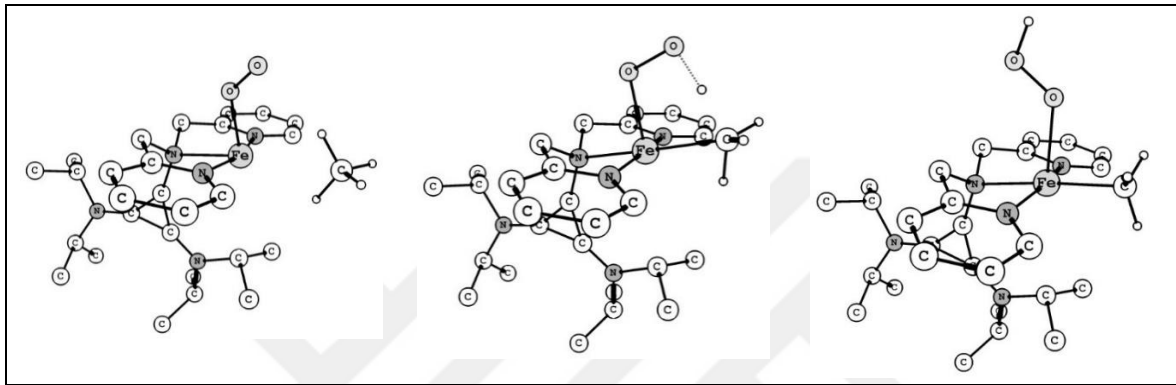
Şekil 4.38. Cr(II)LK6-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal triplet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey kuintet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri

43,5 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal septet spin yüzeyinde olup aktif yüzey kuintet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 26,1 kkal·mol⁻¹'dür.

4.1.7. LK7 ligandı

Fe(II)LK7 için 1, TS1/2 ve 2 optimize geometrileri Şekil 4.39.'da verilmiştir.



Şekil 4.39. Fe(II)LK7-CH₄ kompleksinin 1, TS1/2 ve 2 nolu yapıları. Sadelik için hidrojen atomları gösterilmemiştir.

Fe(II)LK7-CH₄ kompleksinin bağ uzunlukları Angstrom (Å) cinsinden Çizelge 4.31.'de verilmektedir. (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde temel hallerin septet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmıştır.

Çizelge 4.31. Fe(II)LK7-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

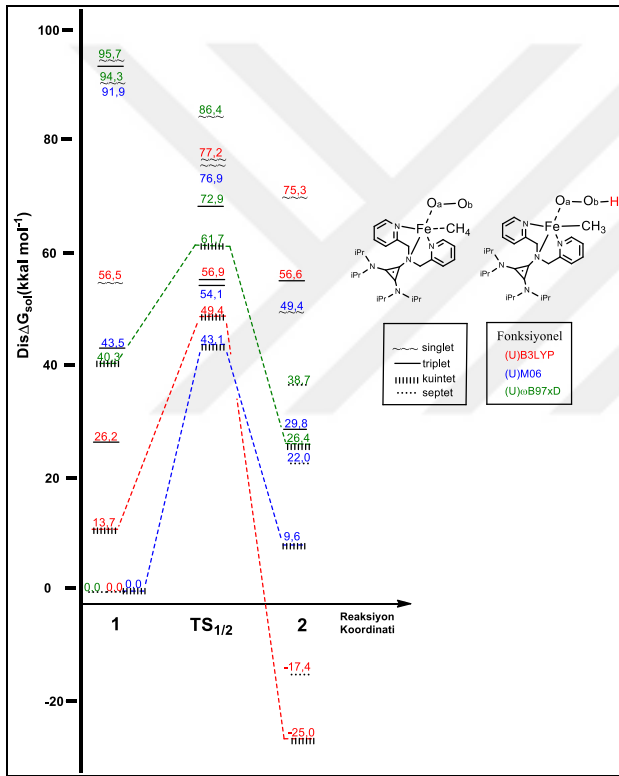
Fe(II)LK7	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁷ 1	⁵ TS1/2	⁵ 2	⁷ 1	⁵ TS1/2	⁵ 2	⁷ 1	⁵ TS1/2	⁵ 2
M–O _a	2,476	2,128	1,949	2,334	2,095	1,855	2,412	2,094	2,140
O _a –O _b	1,263	1,357	1,411	1,250	1,336	1,416	1,247	1,340	1,359
M–CH ₄	2,855	2,212	2,107	2,772	2,209	2,126	2,760	2,186	2,120
M-kuyruk merkez	5,048	4,992	5,146	4,891	4,854	5,011	4,899	4,836	4,934
CH ₄ -kuyruk merkez	7,284	6,856	6,749	7,015	6,657	6,605	7,006	6,624	6,581

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesindeki hesaplamalar sonucu, M–O_a bağı reaktantta (1) 2,476 Å iken geçiş halinde (TS1/2) 2,128 Å'a kadar azalmış ve üründe (2) 1,949 Å olarak hesaplanmıştır. O_a–O_b bağı reaktantta 1,263 Å iken, geçiş 1,357 Å olarak hesaplanmıştır. Metal-CH₄ mesafesi reaktantta 2,855 Å iken TS1/2 yapısında kısalarak 2,212 Å olur ve üründe 2,107 Å olarak hesaplanmıştır. Fe metali ile kuyruk merkez arasındaki mesafe

reaktanta 5,048 Å olarak hesaplanmıştır. Geçiş halinde bu mesafe 4,992 Å iken üründe 5,146 Å'dur. Metan-kuyruk merkez mesafesi reaktant için 7,284 Å olarak hesaplanmışken, geçiş halinde bu mesafe 6,856 Å ve üründe ise 6,749 Å'dur.

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerindeki hesaplamalar da UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesi ile benzer yolu izlemektedir.

Şekil 4.40.'da Fe(II)LK7 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.40. Fe(II)LK7-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal septet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey kuintet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 49,4 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey kuintet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 43,1 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal septet spin yüzeyindedir

ve aktif yüzey kuintet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 61,7 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

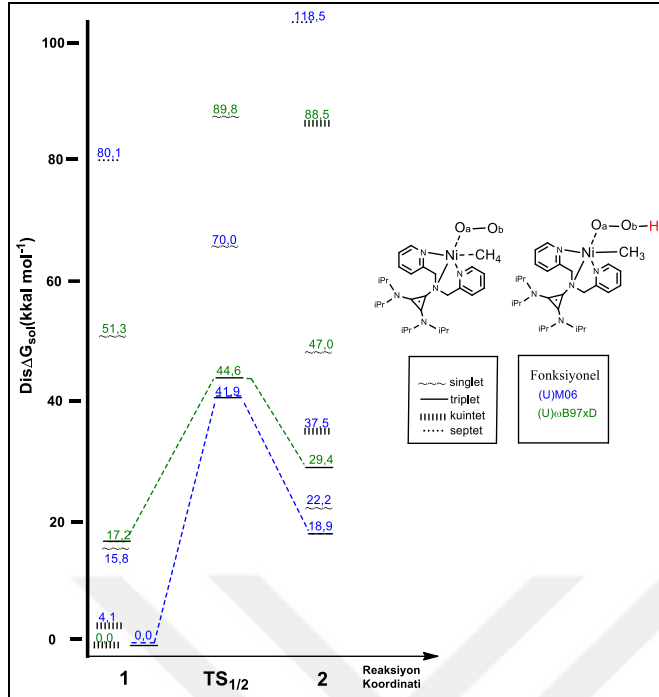
Çizelge 4.32.’de LK7 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

Çizelge 4.32. Ni(II)LK7-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Ni(II)LK7	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁵ ₁	⁵ TS1/2	³ ₂	³ ₁	³ TS1/2	³ ₂	⁵ ₁	³ TS1/2	³ ₂
M–O _a	2,467	2,242	2,172	3,027	2,111	2,124	2,694	2,480	2,148
O _a –O _b	1,263	1,354	1,373	1,251	1,316	1,343	1,248	1,327	1,353
M–CH ₄	2,813	2,212	2,012	2,314	2,142	1,957	2,659	2,119	2,076
M-kuyruk merkez	4,872	5,103	4,984	4,743	4,777	4,816	4,828	4,927	4,828
CH ₄ -kuyruk merkez	7,123	6,698	6,601	6,777	6,434	6,386	6,987	6,787	6,478

Bahsi geçen seviyelerdeki hesaplamalarda Ni–O_a bağı geçiş halinde (TS1/2) reaktantlara (1) göre kısalırken ürünlerde (2) bu mesafe geçiş haline (TS1/2) göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafe hesaplandığında reaktant geometrisinde her üç seviyede 2,314 ila 2,813 Å arasındadır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimi hesaplandığında her üç seviyede de bu uzaklık 6 ila 7 Å arasında değişmektedir.

Şekil 4.41.’de Ni(II)LK7 kompleksinin iki farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.41. Ni(II)LK7-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey triplet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 41,9 kkal mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal kuintet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey triplet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 44,6 kkal mol⁻¹'dür.

Çizelge 4.33.'de LK7 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

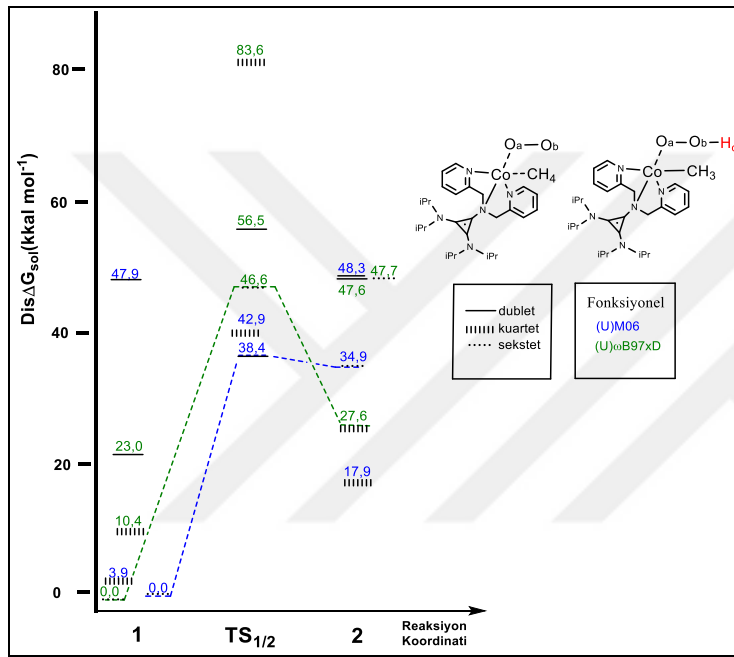
Çizelge 4.33. Co(II)LK7-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Co(II)LK7	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁶ ₁	⁴ TS _{1/2}	⁴ ₂	⁶ ₁	⁴ TS _{1/2}	⁴ ₂	⁶ ₁	⁶ TS _{1/2}	⁶ ₂
M–O _a	2,570	1,808	2,213	2,307	2,091	1,890	2,426	2,075	2,205
O _a –O _b	1,263	1,420	1,377	1,249	1,325	1,388	1,247	1,359	1,354
M–CH ₄	2,788	1,974	2,024	2,621	2,327	2,057	2,684	2,127	2,073
M-kuyruk merkez	5,075	4,963	5,083	4,832	4,823	4,976	4,871	5,800	4,908
CH ₄ -kuyrukmerkez	7,313	6,447	6,718	7,053	6,674	6,495	6,944	7,695	6,530

Bahsi geçen seviyelerdeki hesaplamalarda Co–O_a bağı geçiş halinde (TS_{1/2}) reaktantlara (1) göre kısalırken ürünlerde (2) bu mesafe geçiş haline (TS_{1/2}) göre uzamıştır. O_a–O_b

bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafe hesaplandığında, reaktant geometrisinde her üç seviyede 2 ila 3 Å civarındadır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimi hesaplandığında her üç seviyede de bu uzaklık 6 ila 7 Å arasında değişmektedir.

Şekil 4.42.'de Co(II)LK7 kompleksinin iki farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.42. Co(II)LK7-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal sekstet spin yüzeyinde olup aktif yüzey dublet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 38,4 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey sekstet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 46,6 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

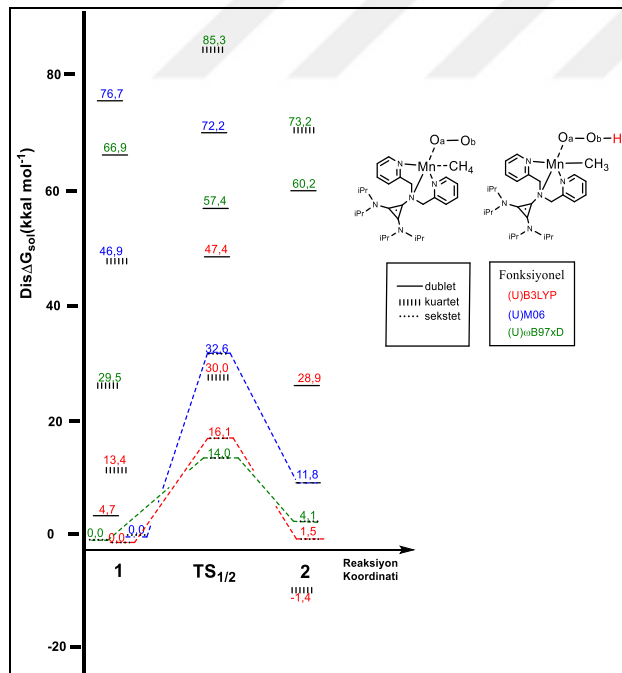
Çizelge 4.34.'te LK7 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

Çizelge 4.34. Mn(II)LK7-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Mn(II)LK7	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁶ ₁	⁶ TS _{1/2}	² ₂	⁴ ₁	⁴ TS _{1/2}	⁴ ₂	² ₁	⁴ TS _{1/2}	⁶ ₂
M–O _a	2,741	2,184	1,780	2,253	2,170	2,113	2,409	2,189	2,334
O _a –O _b	1,264	1,358	1,441	1,252	1,330	1,362	1,249	1,330	1,351
M–CH ₄	2,572	2,284	1,998	2,605	2,233	2,037	2,552	2,282	2,043
M-kuyruk merkez	4,944	5,063	5,363	4,961	4,926	4,970	4,826	4,916	4,966
CH ₄ -kuyruk merkez	7,081	6,987	5,954	7,083	6,774	6,529	6,793	6,792	6,510

Bahsi geçen seviyelerdeki hesaplamalarda Mn–O_a bağı geçiş halinde (TS_{1/2}) reaktantlara (1) göre kısalırken ürünlerde (2) bu mesafe geçiş haline (TS_{1/2}) göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafe hesaplandığında, reaktant geometrisinde her üç seviyede 2 ila 2,5 Å civarındadır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimi hesaplandığında her üç seviyede de bu uzaklık 6 ila 7 Å arasında değişmektedir.

Şekil 4.43.'de Mn(II)LK7 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.43. Mn(II)LK7-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal ve aktif yüzey sekstet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 16,1 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey sekstet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 32,6 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey sekstet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 14,0 kkal·mol⁻¹ olarak saptanmıştır.

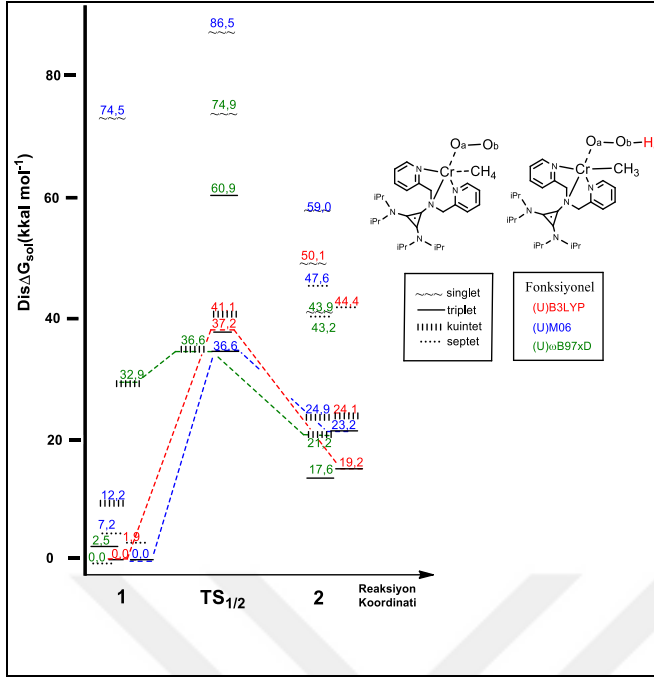
Çizelge 4.35.'te LK7 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

Çizelge 4.35. Cr(II)LK7-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Cr(II)LK7	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁷ 1	³ TS1/2	³ 2	⁷ 1	³ TS1/2	⁵ 2	⁷ 1	⁵ TS1/2	³ 2
M–O _a	2,793	1,927	1,769	2,562	1,906	1,848	2,661	1,976	1,961
O _a –O _b	1,264	1,372	1,451	1,251	1,349	1,456	1,248	1,356	1,358
M–CH ₄	2,650	2,212	2,024	2,544	2,176	2,310	2,601	2,189	2,021
M-kuyruk merkez	5,025	4,930	5,156	4,852	4,812	4,797	4,886	4,777	4,924
CH ₄ -kuyruk merkez	7,247	6,709	5,695	6,866	6,560	6,796	6,966	6,527	4,480

Bahsi geçen hesaplamalarda M–O_a bağı geçiş halinde (TS1/2) reaktantlara (1) göre kısalırken ürünlerde (2) bu mesafe geçiş haline (TS1/2) göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafe hesaplandığında, reaktant geometrisinde her üç seviyede 2,5 Å civarındadır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimi hesaplandığında her üç seviyede de bu uzaklık 5 ila 7 Å arasında değişmektedir.

Şekil 4.44.'te Cr(II)LK7 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.

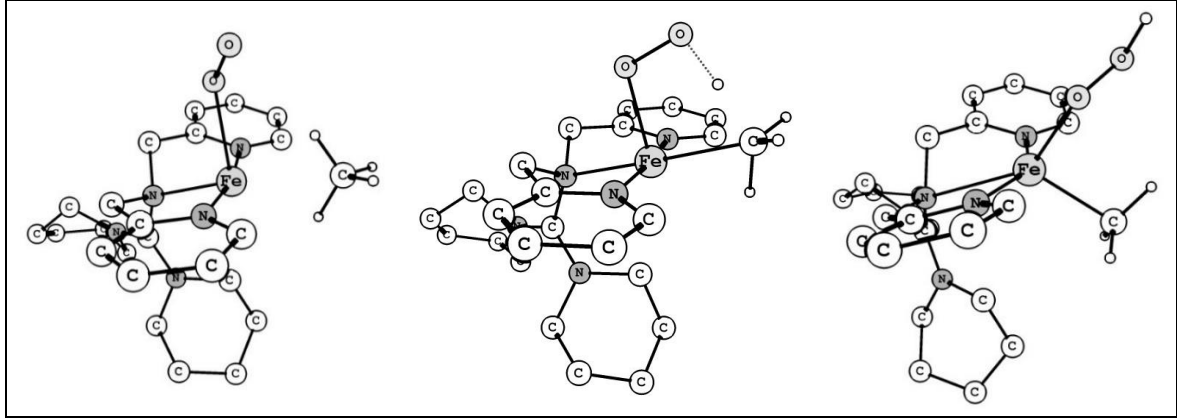


Şekil 4.44. Cr(II)LK7-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal ve aktif yüzey triplet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 37,2 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey triplet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 36,6 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal septet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey quintet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 36,6 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

4.1.8. LK8 ligandı

Fe(II)LK8 için 1 ve TS1/2 optimize geometrileri Şekil 4.45.'te verilmiştir.



Şekil 4.45. Fe(II)LK8-CH₄ kompleksinin 1, TS1/2 ve 2 nolu yapıları. Sadelik için hidrojen atomları gösterilmemiştir.

Fe(II)LK8-CH₄ kompleksinin bağ uzunlukları Angstrom (Å) cinsinden Çizelge 4.36.'da verilmektedir. (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde temel hallerin sırasıyla septet, triplet ve septet spin yüzeylerinde olduğu hesaplanmıştır.

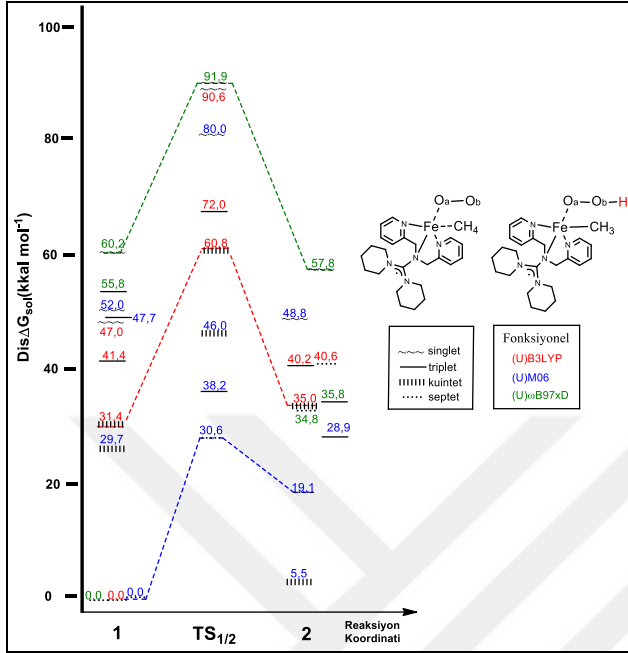
Çizelge 4.36. Fe(II)LK8-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Fe(II)LK8	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁷ 1	⁵ TS1/2	⁵ 2	³ 1	³ TS1/2	⁵ 2	⁷ 1	³ TS1/2	⁵ 2
M-O _a	3,005	2,140	1,987	2,539	2,347	1,844	2,731	1,904	2,165
O _a -O _b	1,264	1,352	1,398	1,250	1,326	1,408	1,248	1,351	1,356
M-CH ₄	2,637	2,271	2,198	2,580	2,396	2,198	2,559	2,174	2,220
M-kuyruk merkez	4,467	4,569	5,080	4,362	4,366	4,945	4,437	4,208	4,724
CH ₄ -kuyruk merkez	6,389	6,591	5,896	6,130	6,126	5,843	6,273	6,038	5,892

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesindeki hesaplamalar sonucu, M-O_a bağı reaktantta (1) 3,005 Å olarak hesaplanırken geçiş halinde (TS1/2) 2,140 Å'a kadar azalmış ve üründe (2) 1,987 Å olarak hesaplanmıştır. O_a-O_b bağı reaktantta 1,264 Å iken, geçiş halinde 1,352 Å'dur. Üründe bu mesafe 1,398 Å olarak hesaplanmıştır. Metal-CH₄ mesafesi reaktantta 2,637 Å iken TS1/2 yapısında kısalarak 2,271 Å olmuştur ve üründe bu bağ 2,198 Å'dur. Fe metali kuyruk merkez arasındaki mesafe reaktanta 4,467 Å olarak hesaplanmıştır. Geçiş halinde bu mesafe 4,569 Å iken üründe 5,080 Å olarak hesaplanmıştır. Metan-kuyruk merkez mesafesi reaktant için 6,389 Å iken, geçiş halinde 6,591 Å ve üründe 5,896 Å olarak hesaplanmıştır.

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerindeki hesaplamalar da UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesi ile benzer yolu izlemektedir.

Şekil 4.46.'da Fe(II)LK8 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri ($\text{kkal}\cdot\text{mol}^{-1}$) verilmiştir.



Şekil 4.46. Fe(II)LK8-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal septet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey kuintet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri $60,8 \text{ kkal}\cdot\text{mol}^{-1}$ 'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey septet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri $30,6 \text{ kkal}\cdot\text{mol}^{-1}$ 'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal septet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey singlet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri $91,9 \text{ kkal}\cdot\text{mol}^{-1}$ olarak hesaplanmıştır.

Çizelge 4.37.'de LK8 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

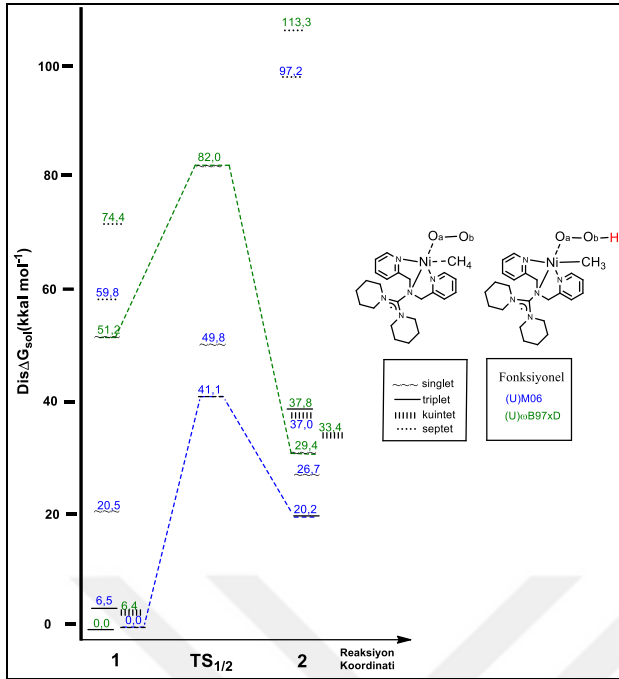
Çizelge 4.37. Ni(II)LK8-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Ni(II)LK8	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁷ ₁	⁵ TS1/2	⁵ ₂	⁵ ₁	³ TS1/2	³ ₂	⁵ ₁	¹ TS1/2	³ ₂
M–O _a	2,182	1,888	1,782	2,567	2,106	2,158	2,394	2,064	2,201
O _a –O _b	1,258	1,351	1,402	1,250	1,313	1,342	1,247	1,306	1,352
M–CH ₄	2,598	2,177	2,060	2,660	2,160	1,969	2,707	2,115	2,128
M-kuyruk merkez	4,703	4,566	5,310	4,241	4,367	4,420	4,321	4,340	4,426
CH ₄ -kuyruk merkez	5,558	5,728	5,126	6,068	6,192	6,105	6,616	6,185	5,887

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesindeki hesaplamalar sonucu, M–O_a bağı reaktantta (1) 2,182 Å iken geçiş halinde (TS1/2) bu mesafe 1,888 Å'a kadar azalmıştır ve üründe (2) 1,782 Å olarak hesaplanmıştır. O_a–O_b bağı reaktantta 1,258 Å iken, geçiş halinde 1,351 Å olarak hesaplanmıştır. Üründe bu bağ 1,402 Å'dur. Metal-CH₄ mesafesi reaktantta 2,598 Å iken TS1/2 yapısında kısalarak 2,177 Å olmuştur ve üründe bu bağ 2,060 Å olarak hesaplanmıştır. Fe metali ile kuyruk merkez arasındaki mesafe reaktanta 4,703 Å'dur. Geçiş halinde bu mesafe 4,566 Å olarak hesaplanırken üründe 5,310 Å olmuştur. Metan-kuyruk merkez mesafesi reaktant için 5,558 Å iken, geçiş halinde bu mesafe 5,728 Å ve üründe 5,126 Å olarak hesaplanmıştır.

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerindeki hesaplamalar da UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesindeki hesaplarla benzer yolu izlemektedir.

Şekil 4.47.'de Ni(II)LK8 kompleksinin iki farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.47. Ni(II)LK8-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey triplet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 41,1 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal triplet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey singlet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 82,0 kkal·mol⁻¹'dür.

Çizelge 4.38.'de LK8 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

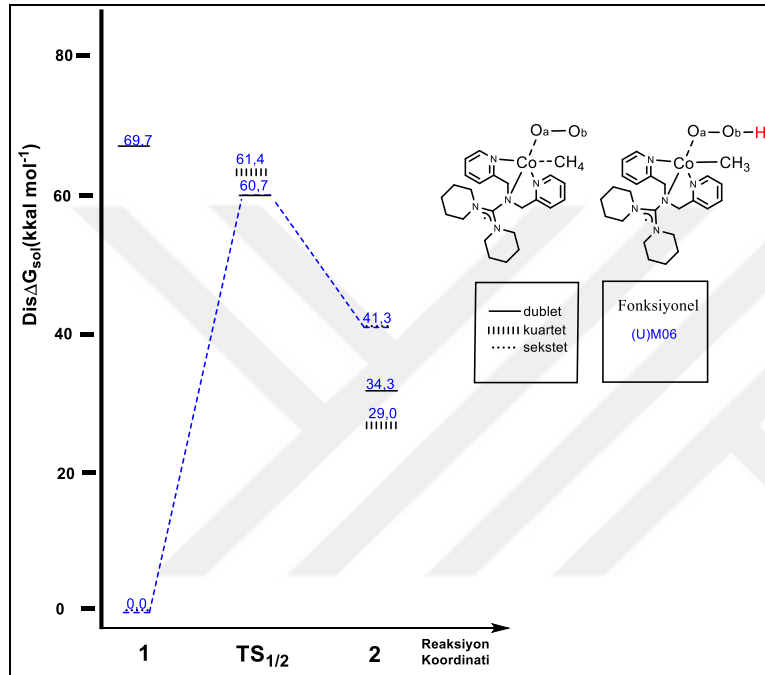
Çizelge 4.38. Co(II)LK8-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Co(II)LK8	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ	
	² ₁	² TS _{1/2}	⁴ ₂	² ₁	⁴ TS _{1/2}	⁴ ₂	⁶ ₁	⁴ ₂
M–O _a	2,378	1,893	2,210	2,682	2,059	1,920	2,467	2,302
O _a –O _b	1,248	1,340	1,354	1,250	1,318	1,380	1,248	1,355
M–CH ₄	2,480	2,118	2,110	2,560	2,156	2,067	2,714	2,172
M-kuyruk merkez	4,844	4,908	5,120	4,296	4,372	4,585	4,439	4,461
CH ₄ -kuyruk merkez	6,375	6,428	6,746	6,075	6,280	6,265	6,683	5,894

Bahsi geçen hesaplamalarda M–O_a bağı geçiş halinde (TS_{1/2}) reaktantlara (1) göre kısılırken ürünlerde (2) bu mesafe geçiş haline (TS_{1/2}) göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafe

hesaplandığında, reaktant geometrisinde her üç seviyede 2,5 Å civarındadır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimi hesaplandığında ise her üç seviyede de bu uzaklık 5 ila 6 Å arasında değişmektedir.

Şekil 4.48.'de Co(II)LK8 kompleksinin UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde C–H aktivasyon bariyeri (kcal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.48. Co(II)LK8-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

Co(II)LK8 kompleksi için temel hal sektet spin yüzeyinde olup aktif yüzey dublet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 60,7 kcal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

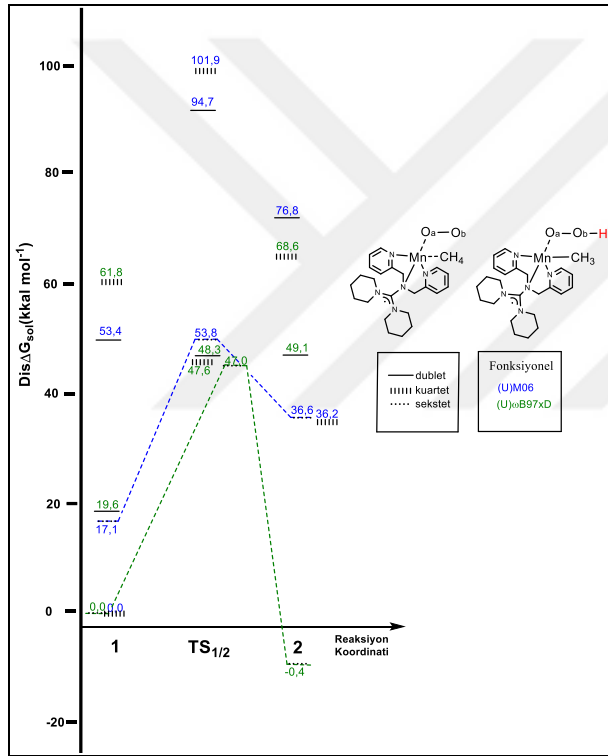
Çizelge 4.39.'de LK8 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

Çizelge 4.39. Mn(II)LK8-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Mn(II)LK8	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁴ 1	² TS1/2	⁴ 2	⁴ 1	⁴ TS1/2	⁴ 2	⁶ 1	⁶ TS1/2	⁴ 2
M–O _a	2,234	2,167	2,100	2,410	2,295	2,386	2,500	2,225	2,321
O _a –O _b	1,251	1,327	1,360	1,251	1,329	1,356	1,248	1,326	1,353
M–CH ₄	2,548	2,252	2,045	2,502	2,209	2,077	2,537	2,340	2,135
M-kuyruk merkez	5,014	4,863	4,906	4,527	4,451	4,535	4,541	4,526	4,634
CH ₄ -kuyruk merkez	7,176	6,816	6,504	6,119	5,951	5,861	6,148	6,634	5,878

Bahsi geçen seviyelerdeki hesaplamalarda $M-O_a$ bağı geçiş halinde (TS1/2) reaktantlara (1) göre kısalırken, üründe (2) bu mesafe geçiş haline (TS1/2) göre uzamıştır. O_a-O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafe hesaplandığında, reaktant geometrisinde her üç seviyede 2,5 Å civarındadır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimi hesaplandığında ise her üç seviyede de bu uzaklık 5 ila 6,5 Å arasında değişmektedir.

Şekil 4.49.'da Mn(II)LK8 kompleksinin iki farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal mol^{-1}) verilmiştir.



Şekil 4.49. Mn(II)LK8-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal kuartet spin yüzeyinde olup aktif yüzey sekstet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 53,8 kkal mol^{-1} 'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey sekstet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 47,0 kkal mol^{-1} olarak hesaplanmıştır.

Çizelge 4.40.'da LK8 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu kompleks için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ; UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) hesaplanan optimize geometrilerin bağ uzunlukları verilmiştir.

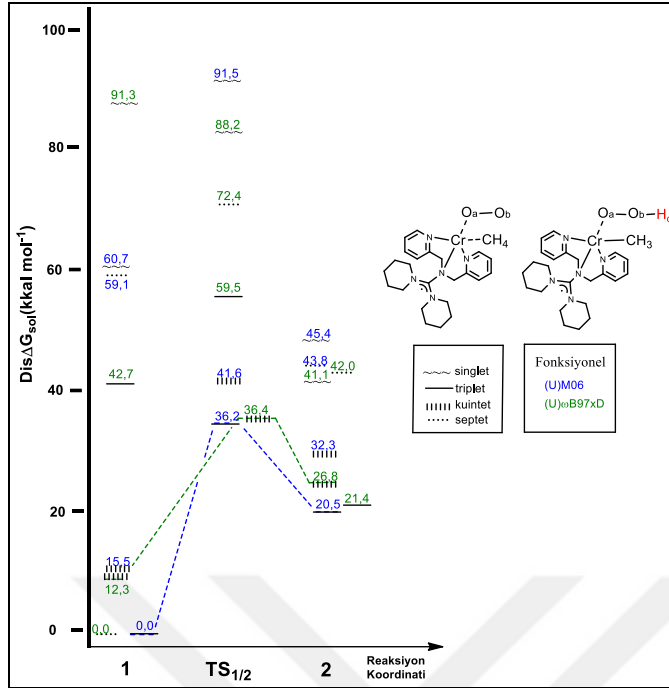
Çizelge 4.40. Cr(II)LK8-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Cr(II)LK8	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	³ ₁	³ TS1/2	⁵ ₂	³ ₁	³ TS1/2	³ ₂	⁷ ₁	⁵ TS1/2	³ ₂
M–O _a	2,373	1,907	2,148	2,027	1,917	1,807	2,603	1,952	1,908
O _a –O _b	1,249	1,352	1,347	1,253	1,348	1,402	1,248	1,356	1,368
M–CH ₄	2,553	2,176	2,021	2,869	2,182	2,081	2,545	2,189	2,069
M-kuyruk merkez	4,122	4,052	4,168	4,379	4,321	4,524	4,431	4,322	4,552
CH ₄ -kuyruk merkez	5,524	5,825	3,975	6,037	6,176	5,630	6,153	6,191	5,627

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesindeki hesaplamalar sonucu, M–O_a bağı reaktantta (1) 2,373 Å iken geçiş halinde (TS1/2) bu mesafe 1,907 Å'a kadar azalmış ve üründe (2) 2,148 Å mesafesine ulaşmıştır. O_a–O_b bağı reaktantta 1,249 Å olarak hesaplanırken, geçiş halinde 1,352 Å olarak hesaplanmıştır. Üründe bu bağ 1,347 Å'dur. Metal–CH₄ mesafesi reaktantta 2,553 Å iken TS1/2 yapısında kısalarak 2,176 Å olmuştur ve üründe bu bağ 2,021 Å olarak hesaplanmıştır. Fe metali ile kuyruk merkez arasındaki mesafe reaktanta 4,122 Å olarak saptanmıştır. Geçiş halinde bu mesafe 4,052 Å iken üründe 4,168 Å olarak hesaplanmıştır. Metan-kuyruk merkez mesafesi reaktant için 5,524 Å iken, geçiş halinde bu mesafe 5,825 Å ve üründe ise 3,975 Å olarak hesaplanmıştır.

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerindeki hesaplamalar da UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesindeki hesaplarla benzer yolu izlemektedir.

Şekil 4.50.'de Cr(II)LK8 kompleksinin iki farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.

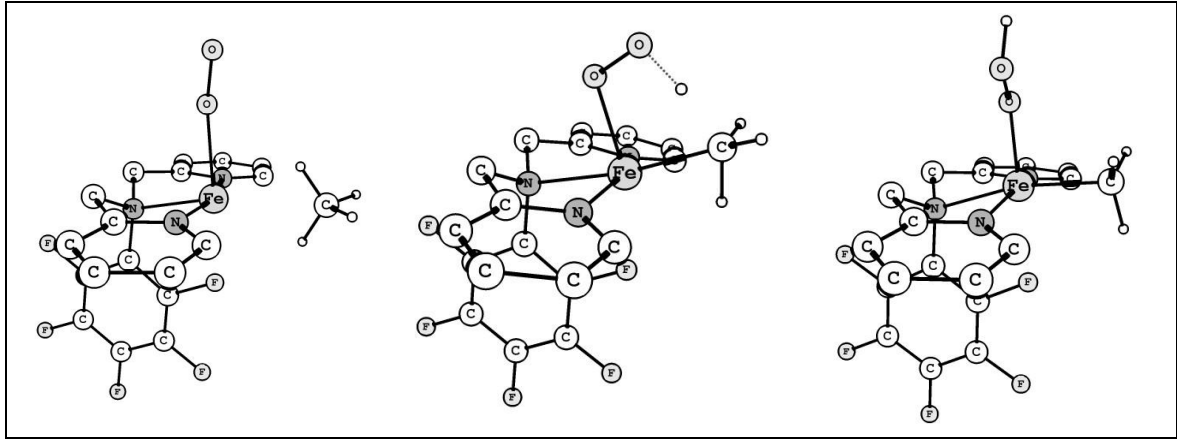


Şekil 4.50. Cr(II)LK8-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey triplet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 36,2 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal septet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey kuintet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 36,4 kkal·mol⁻¹'dür.

4.1.9. LK9 ligandı

Fe(II)LK9 için 1, TS_{1/2} ve 2 optimize geometrileri Şekil 4.51.'de verilmiştir.



Şekil 4.51. Fe(II)LK9-CH₄ kompleksinin 1, TS1/2 ve 2 nolu yapıları. Sadelik için hidrojen atomları gösterilmemiştir.

Fe(II)LK9-CH₄ kompleksinin bağ uzunlukları Angstrom (Å) cinsinden Çizelge 4.41.'de verilmektedir. (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde temel hallerin septet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmıştır.

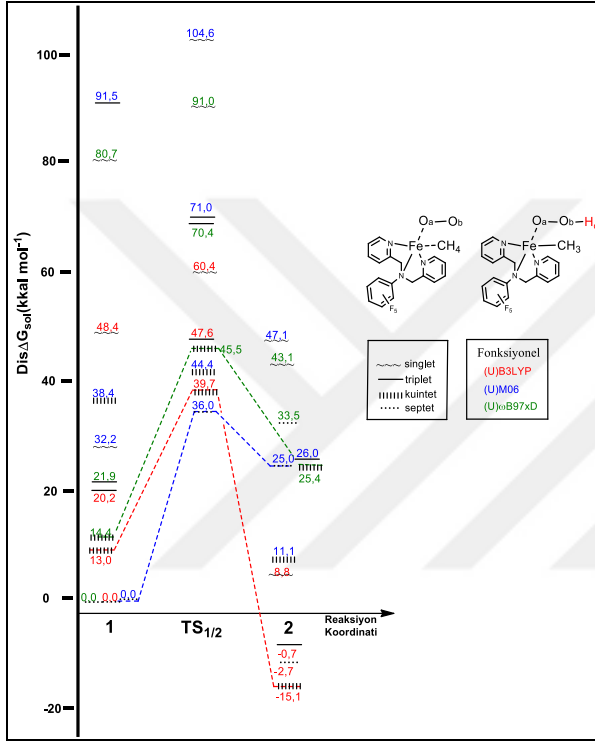
Çizelge 4.41. Fe(II)LK9-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Fe(II)LK9	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁷ 1	⁵ TS1/2	⁵ 2	⁷ 1	⁷ TS1/2	⁵ 2	⁷ 1	⁵ TS1/2	⁷ 2
M–O _a	2,472	2,138	1,912	2,314	2,125	1,852	2,446	2,109	2,182
O _a –O _b	1,263	1,361	1,425	1,250	1,343	1,420	1,246	1,342	1,359
M–CH ₄	2,842	2,212	2,119	2,751	2,149	2,128	2,758	2,191	2,559
M-kuyruk merkez	4,418	4,400	4,461	4,372	4,350	4,411	4,384	4,359	4,461
CH ₄ -kuyruk merkez	6,476	6,240	5,973	6,409	6,235	5,938	6,443	6,173	5,835

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesindeki hesaplamalar sonucu, M–O_a bağı reaktantta (1) 2,472 Å iken geçiş halinde (TS1/2) bu mesafe 2,138 Å'a kadar azalmış ve üründe (2) 1,912 Å mesafesine ulaşmıştır. O_a–O_b bağı reaktantta 1,263 Å iken, geçiş halinde 1,361 Å olarak hesaplanmıştır. Üründe bu bağ 1,425 Å'dur. Metal–CH₄ mesafesi reaktantta 2,842 Å iken TS1/2 yapısında kısalarak 2,212 Å olmuştur ve üründe bu bağ 2,119 Å olarak hesaplanmıştır. Fe metali kuyruk merkez arasındaki mesafe reaktanta 4,418 Å'dur. Geçiş halinde bu mesafe 4,400 Å iken üründe 4,461 Å'dur. Metan-kuyruk merkez mesafesi reaktant için 6,476 Å olarak hesaplanırken, geçiş halinde bu mesafe 6,240 Å ve üründe ise 5,973 Å olarak hesaplanmıştır.

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve U ω B97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerindeki hesaplamalar da UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesindeki hesaplarla benzer yolu izlemektedir.

Şekil 4.52.'de Fe(II)LK9 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.52. Fe(II)LK9-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: U ω B97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal septet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey kuintet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 39,7 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey septet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 36,0 kkal·mol⁻¹'dür. U ω B97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal septet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey kuintet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 45,5 kkal·mol⁻¹'dür.

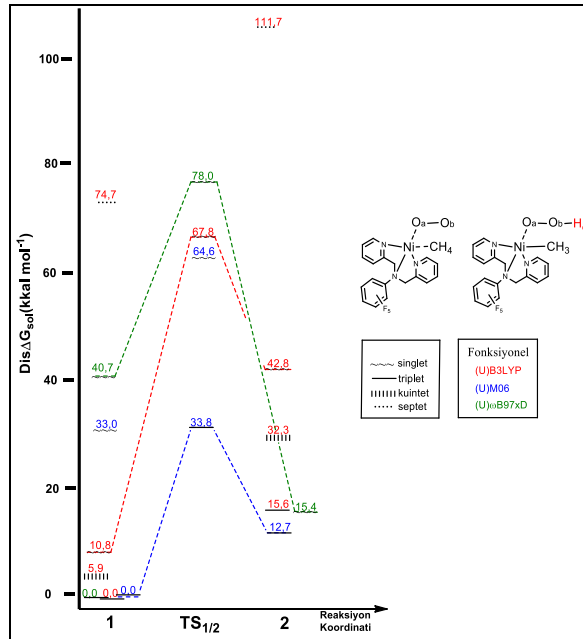
Ni(II)LK9-CH₄ kompleksi (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde optimize edilen geometrilerin bağ uzunlukları Angstrom (Å) cinsinden Çizelge 4.42.'de verilmektedir.

Çizelge 4.42. Ni(II)LK9-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Ni(II)LK9	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	³ ₁	¹ TS _{1/2}	³ ₂	³ ₁	⁷ TS _{1/2}	¹ ₂	³ ₁	¹ TS _{1/2}	³ ₂
M–O _a	3,291	1,962	2,168	2,611	2,085	2,138	3,124	1,988	2,155
O _a –O _b	1,265	1,352	1,376	1,252	1,321	1,358	1,249	1,322	1,355
M–CH ₄	2,385	2,205	2,017	2,471	2,151	1,970	2,348	2,127	2,085
M-kuyruk merkez	4,334	4,299	4,350	4,268	4,282	4,296	4,292	4,275	4,310
CH ₄ -kuyruk merkez	6,511	6,089	5,941	6,311	5,973	5,874	6,404	5,992	5,963

Bahsi geçen seviyelerdeki hesaplamalarda Ni–O_a bağı geçiş halinde (TS_{1/2}) reaktantlara (1) göre kısalırken ürünlerde (2) bu mesafe geçiş haline (TS_{1/2}) göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafe hesaplandığında reaktant geometrisinde her üç seviyede 2 Å civarındadır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimi hesaplandığında her üç seviyede de bu uzaklık 6 Å civarındadır.

Şekil 4.53.'de Ni(II)LK9 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.53. Ni(II)LK9-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal triplet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey kuintet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 67,8 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey triplet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 33,8 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal triplet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey singlet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 78,0 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

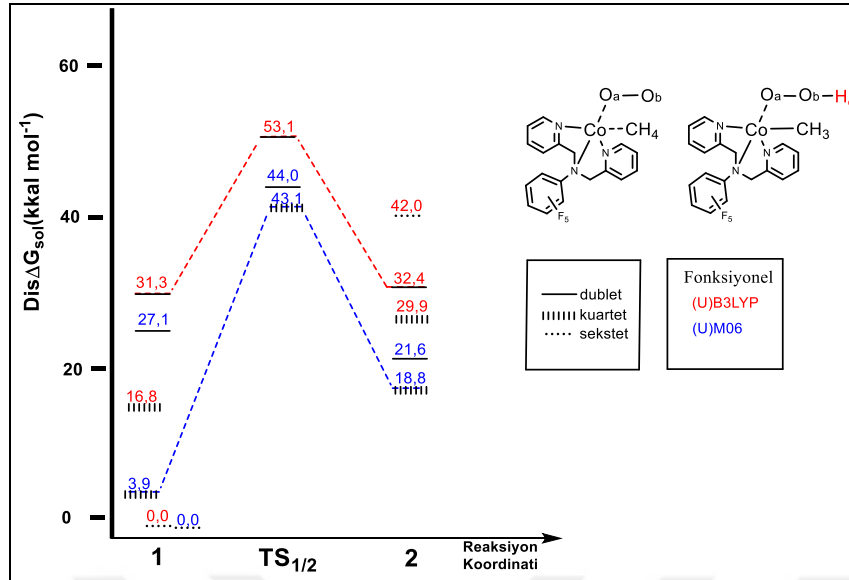
Co(II)LK9-CH₄ kompleksi (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde optimize edilen geometrilerin bağ uzunlukları Angstrom (Å) cinsinden Çizelge 4.43.'de verilmektedir.

Çizelge 4.43. Co(II)LK9-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Co(II)LK9	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ	
	⁶ ₁	² TS1/2	⁴ ₂	⁶ ₁	⁴ TS1/2	⁴ ₂	⁶ ₁	⁴ ₂
M–O _a	2,595	1,879	2,173	2,385	2,089	1,881	2,436	2,186
O _a –O _b	1,262	1,368	1,381	1,249	1,325	1,394	1,246	1,357
M–CH ₄	2,814	2,159	2,032	2,762	2,148	2,060	2,763	2,084
M-kuyruk merkez	4,373	4,203	4,434	4,297	4,284	4,395	4,315	4,380
CH ₄ -kuyruk merkez	6,334	5,850	6,017	6,370	6,086	5,878	6,396	6,003

Bahsi geçen seviyelerdeki hesaplamalarda Co–O_a bağı geçiş halinde (TS1/2) reaktantlara (1) göre kısalırken ürünlerde (2) bu mesafe geçiş haline (TS1/2) göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafe hesaplandığında, reaktant geometrisinde her üç seviyede 2,060 ila 2,814 Å civarındadır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimi hesaplandığında her üç seviyede de bu uzaklık 6 Å olarak hesaplanmıştır.

Şekil 4.54.'de Co(II)LK9 kompleksinin iki farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.54. Co(II)LK9-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucunda temel hal sekstet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey dublet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 53,1 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal sekstet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey kuartet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 43,1 kkal·mol⁻¹'dür.

Mn(II)LK9-CH₄ kompleksi (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde optimize edilen geometrilerin bağ uzunlukları Angstrom (Å) cinsinden Çizelge 4.44.'de verilmektedir.

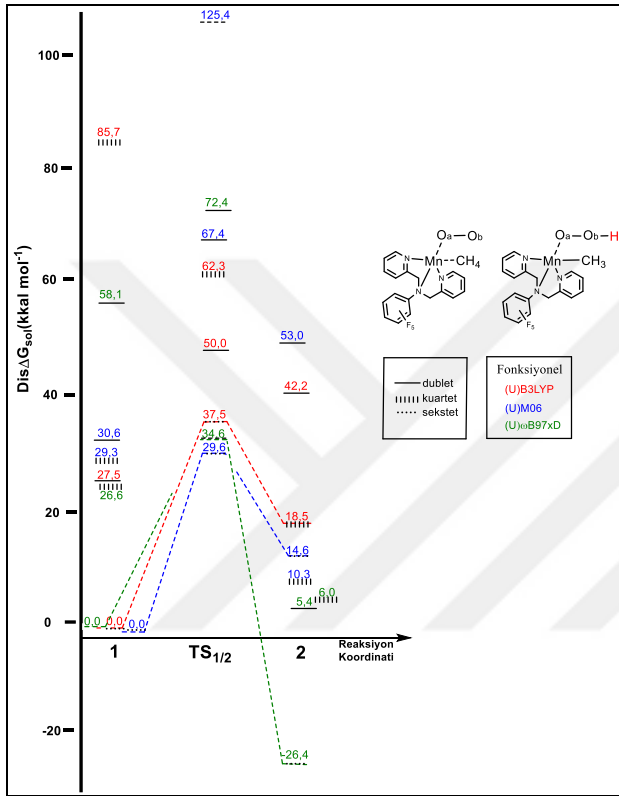
Çizelge 4.44. Mn(II)LK9-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Mn(II)LK9	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁴ ₁	⁶ TS1/2	⁴ ₂	⁴ ₁	⁴ TS1/2	⁴ ₂	⁶ ₁	⁶ TS1/2	⁴ ₂
M–O _a	2,378	2,205	1,958	2,261	2,199	1,991	2,433	2,180	2,289
O _a –O _b	1,266	1,361	1,419	1,255	1,332	1,384	1,249	1,341	1,356
M–CH ₄	2,877	2,269	2,039	2,745	2,217	2,043	2,760	2,247	2,044
M-kuyruk merkez	4,450	4,451	4,467	4,433	4,400	4,411	4,457	4,410	4,461
CH ₄ -kuyruk merkez	4,412	6,347	5,978	6,351	6,231	5,944	6,485	6,277	6,079

Bahsi geçen seviyelerdeki hesaplamalarda Mn–O_a bağı geçiş halinde (TS1/2) reaktantlara (1) göre kısalırken ürünlerde (2) bu mesafe geçiş haline (TS1/2) göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafe hesaplandığında, reaktant geometrisinde her üç seviyede de 2,700 Å civarındadır ve geçiş

haline gelindiğinde bu mesafe 2 Å'a kısalmıştır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimi hesaplandığında her üç seviyede de bu uzaklık 4 ila 6,5 Å arasında değişmektedir.

Şekil 4.55.'de Mn(II)LK9 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri ($\text{kkal}\cdot\text{mol}^{-1}$) verilmiştir.



Şekil 4.55. Mn(II)LK9-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucunda temel hal ve aktif yüzey sekstet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 37,5 $\text{kkal}\cdot\text{mol}^{-1}$ 'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey sekstet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 29,2 $\text{kkal}\cdot\text{mol}^{-1}$ 'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey sekstet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 16,0 $\text{kkal}\cdot\text{mol}^{-1}$ olarak hesaplanmıştır.

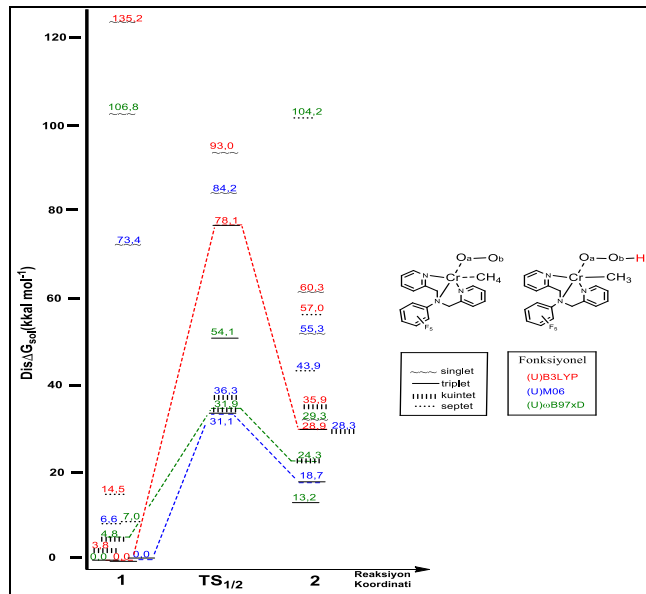
Cr(II)LK9-CH₄ kompleksi (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde optimize edilen geometrilerin bağ uzunlukları Angstrom (Å) cinsinden Çizelge 4.45.'te verilmektedir.

Çizelge 4.45. Cr(II)LK9-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Cr(II)LK9	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁷ 1	³ TS1/2	³ 2	³ 1	³ TS1/2	⁴ 2	⁷ 1	⁵ TS1/2	³ 2
M–O _a	2,793	1,935	1,885	2,080	1,901	1,765	2,691	1,985	1,765
O _a –O _b	1,264	1,373	1,377	1,277	1,353	1,387	1,248	1,357	1,434
M–CH ₄	2,661	2,211	2,034	2,512	2,176	2,034	2,612	2,186	2,088
M-kuyruk merkez	4,454	4,321	4,386	4,352	4,281	4,383	4,428	4,279	4,388
CH ₄ -kuyruk merkez	6,614	6,109	5,907	6,335	6,003	5,866	6,545	6,017	5,624

Bahsi geçen seviyelerdeki hesaplamalarda Cr–O_a bağı geçiş halinde (TS1/2) reaktantlara (1) göre kısalırken ürünlerde (2) bu bağ geçiş haline (TS1/2) göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafe hesaplandığında, reaktant geometrisinde her üç seviyede 2,5 Å ve geçiş halinde bu mesafe 2 Å'a kısalmıştır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimi hesaplandığında ise her üç seviyede de bu uzaklık 5,5 ila 6,5 Å civarındadır.

Şekil 4.56.'da Cr(II)LK9 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.

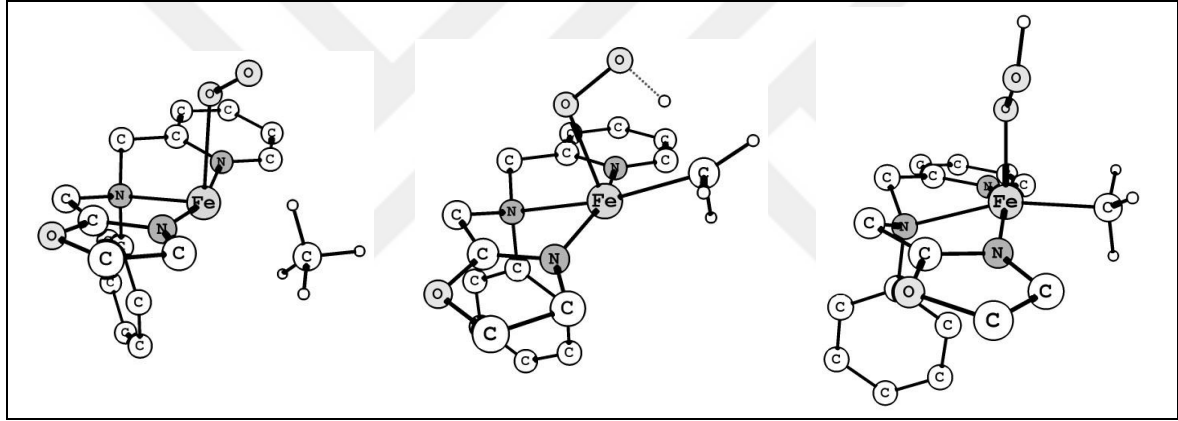


Şekil 4.56. Cr(II)LK9-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal ve aktif yüzey triplet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 78,1 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey triplet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 31,1 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal triplet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey kuintet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 31,9 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır.

4.1.10. LK10 ligandı

Fe(II)LK10 için 1, TS1/2 ve 2 optimize geometrileri Şekil 4.57.'de verilmiştir.



Şekil 4.57. Fe(II)LK10-CH₄ kompleksinin 1, TS1/2 ve 2 nolu yapıları. Sadelik için hidrojen atomları gösterilmemiştir

Fe(II)LK10-CH₄ kompleksi (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde optimize edilen geometrilerin bağ uzunlukları Angstrom (Å) cinsinden Çizelge 4.46.'de verilmektedir.

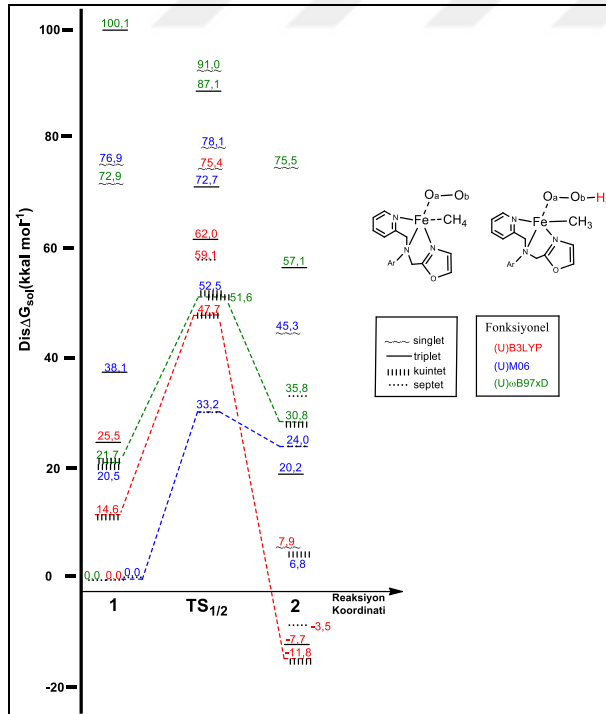
Çizelge 4.46. Fe(II)LK10-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Fe(II)LK10	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁷ 1	⁷ TS1/2	⁵ 2	⁷ 1	⁷ TS1/2	⁷ 2	⁷ 1	⁵ TS1/2	⁵ 2
M–O _a	2,625	2,093	1,915	2,431	2,130	1,849	2,564	2,095	2,106
O _a –O _b	1,263	1,381	1,424	1,250	1,341	1,421	1,247	1,345	1,364
M–CH ₄	2,627	2,123	2,100	2,525	2,151	2,117	2,536	2,165	2,118
M-kuyruk merkez	4,015	6,450	4,441	3,865	4,260	4,389	3,884	4,248	4,329
CH ₄ -kuyruk merkez	5,250	8,568	5,843	4,937	6,136	5,815	4,962	5,891	5,846

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesindeki hesaplamalar sonucu, M–O_a bağı reaktantta (1) 2,625 Å iken, geçiş halinde (TS_{1/2}) bu bağ 2,093 Å'a kadar azalmış ve üründe (2) 1,915 Å mesafesine ulaşmıştır. O_a–O_b bağı reaktantta 1,263 Å olarak hesaplanırken, geçiş halinde 1,381 Å olmuştur. Üründe bu bağ 1,424 Å olarak hesaplanmıştır. Metal–CH₄ mesafesi reaktantta 2,627 Å iken TS_{1/2} yapısında kısalarak 2,123 Å olmuştur ve üründe bu bağ 2,100 Å olarak hesaplanmıştır. Fe metali kuyruk merkez arasındaki mesafe reaktanta 4,015 Å olarak hesaplanmıştır. Geçiş halinde bu mesafe 6,450 Å iken üründe 4,441 Å olarak hesaplanmıştır. Metan-kuyruk merkez mesafesi reaktant için 5,250 Å iken, geçiş halinde bu mesafe 8,568 Å ve üründe ise 5,843 Å olarak hesaplanmıştır.

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerindeki hesaplamalar da UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesindeki hesaplarla benzer sonuçlar gözlenmiştir.

Şekil 4.58.'de Fe(II)LK10 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kcal mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.58. Fe(II)LK10-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal septet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey kuintet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 47,7 kkal·mol⁻¹'dür. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey septet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 33,2 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal septet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey kuintet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 51,6 kkal·mol⁻¹'dür.

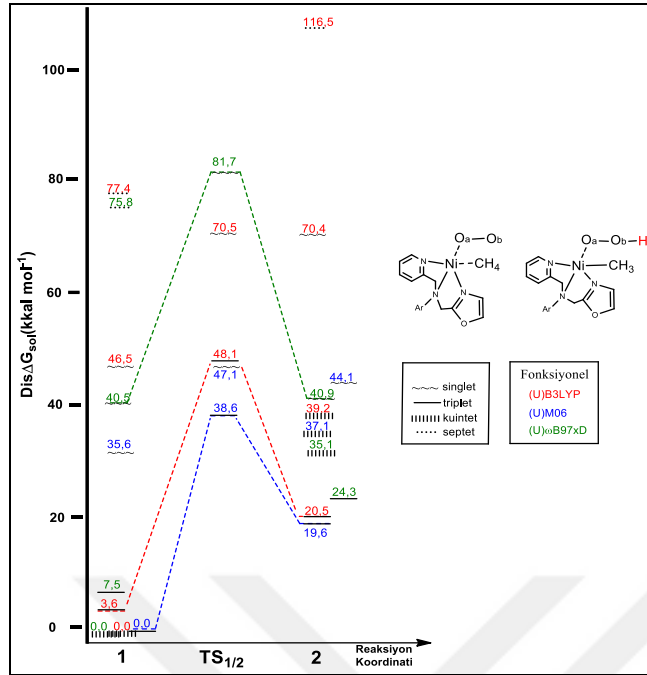
Ni(II)LK10-CH₄ kompleksi (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde optimize edilen geometrilerin bağ uzunlukları Angstrom (Å) cinsinden Çizelge 4.47.'de verilmektedir.

Çizelge 4.47. Ni(II)LK10-CH₄ kompleksinin Å (Angstrom) cinsinden bağ uzunlukları

Ni(II)LK10	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁵ ₁	³ TS1/2	³ ₂	³ ₁	³ TS1/2	³ ₂	⁷ ₁	⁷ TS1/2	⁵ ₂
M–O _a	2,551	2,104	2,122	2,851	2,131	2,112	2,435	2,034	2,166
O _a –O _b	1,262	1,350	1,380	1,252	1,324	1,345	1,247	1,322	1,345
M–CH ₄	2,654	2,183	2,016	2,299	2,095	1,956	2,554	2,104	2,033
M-kuyruk merkez	3,942	4,128	4,276	4,103	3,978	4,201	3,902	3,998	4,201
CH ₄ -kuyruk merkez	5,213	5,523	5,747	5,867	5,194	5,675	5,045	5,336	5,711

Bahsi geçen seviyelerdeki hesaplamalarda Ni–O_a bağı geçiş halinde (TS1/2) reaktantlara (1) göre kısalırken ürünlerde (2) bu mesafe geçiş haline (TS1/2) göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafe hesaplandığında, reaktant geometrisinde her üç seviyede 2,299 ila 2,654 Å civarındadır ve geçiş halinde 2 Å civarı hesaplanmıştır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimi hesaplandığında ise her üç seviyede de bu uzaklık 5 ila 6 Å civarında değişmektedir.

Şekil 4.59.'da Ni(II)LK10 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.59. Ni(II)LK10-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal kuintet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey triplet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 48,1 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey triplet spin yüzeyindedir ve C–H aktivasyon bariyeri 38,6 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal kuintet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey singlet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 81,7 kkal·mol⁻¹'dür.

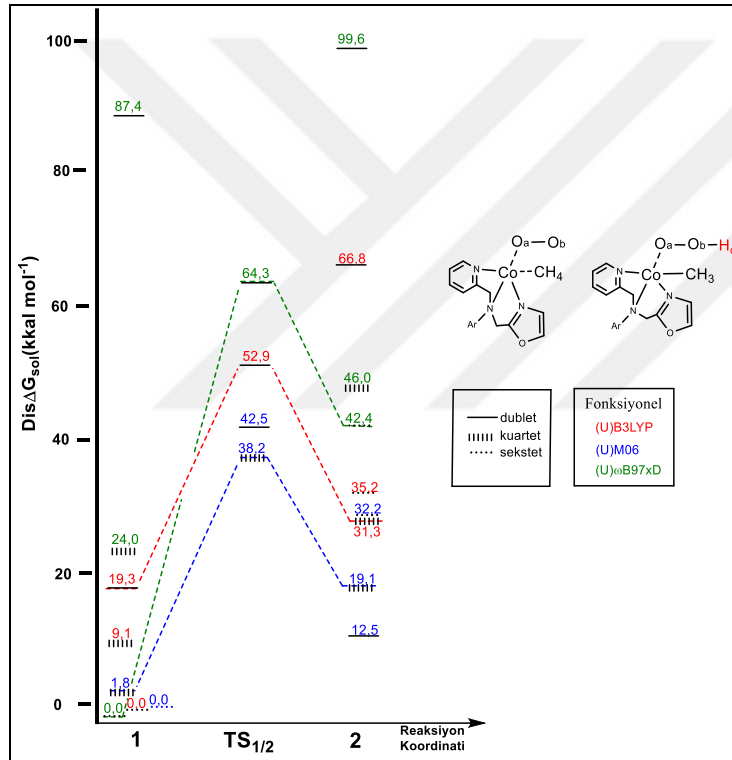
Co(II)LK10-CH₄ kompleksi (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde optimize edilen geometrilerin bağ uzunlukları Angstrom (Å) cinsinden Çizelge 4.48.'de verilmektedir.

Çizelge 4.48. Co(II)LK10-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Co(II)LK10	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁶ ₁	² TS _{1/2}	⁴ ₂	⁴ ₁	⁴ TS _{1/2}	² ₂	⁶ ₁	² TS _{1/2}	⁶ ₂
M–O _a	3,042	1,900	2,161	2,410	2,097	1,764	2,826	1,896	2,236
O _a –O _b	1,264	1,368	1,382	1,250	1,326	1,427	1,248	1,347	1,356
M–CH ₄	2,505	2,115	2,022	2,444	2,122	2,083	2,452	2,094	2,367
M-kuyruk merkez	3,628	3,767	4,407	4,158	4,166	4,180	3,503	3,560	3,791
CH ₄ -kuyruk merkez	4,477	4,914	5,920	5,970	5,840	3,735	4,190	4,579	3,551

Yukarıda bahsedilen seviyelerdeki hesaplamalarda Co–O_a bağı geçiş halinde (TS1/2) reaktantlara (1) göre kısalırken ürünlerde (2) bu mesafe geçiş haline (TS1/2) göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafe hesaplandığında, reaktant geometrisinde her üç seviyede 2,5 Å civarındadır ve geçiş halinde bu mesafe 2 Å'a kadar kısalmıştır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimi hesaplandığında ise her üç seviyede de bu uzaklık 3,5 ila 6 Å civarında değişmektedir.

Şekil 4.60.'da Co(II)LK10 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.60. Co(II)LK10-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal sekstet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey dublet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 52,9 kkal mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal sekstet spin yüzeyindedir. Aktif yüzey kuartet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 38,2 kkal mol⁻¹'dir. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey sekstet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 64,3 kkal mol⁻¹'dir.

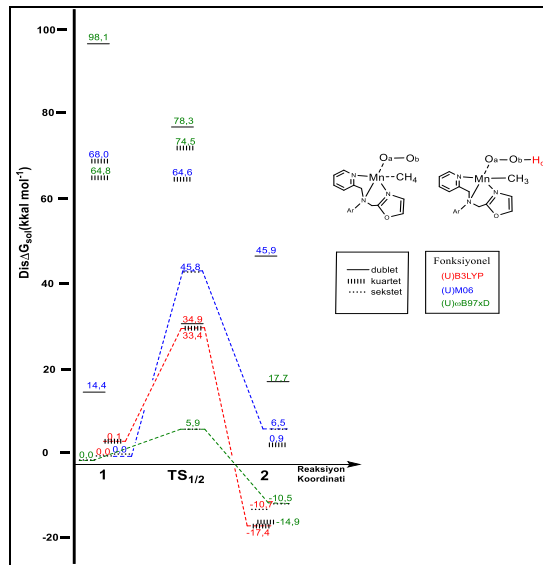
Mn(II)LK10-CH₄ kompleksi (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde optimize edilen geometrilerin bağ uzunlukları Angstrom (Å) cinsinden Çizelge 4.49.'da verilmektedir.

Çizelge 4.49. Mn(II)LK10-CH₄ kompleksinin Å cinsinden bağ uzunlukları

Mn(II)LK10	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁶ ₁	⁴ TS _{1/2}	⁶ ₂	⁶ ₁	⁶ TS _{1/2}	⁴ ₂	⁶ ₁	⁴ TS _{1/2}	⁶ ₂
M–O _a	2,718	1,932	2,404	2,043	2,151	2,054	2,648	2,163	2,396
O _a –O _b	1,263	1,382	1,376	1,291	1,341	1,370	1,247	1,392	1,359
M–CH ₄	2,542	2,134	2,029	2,644	2,210	2,033	2,478	2,158	2,040
M-kuyruk merkez	4,045	3,674	4,200	3,891	4,266	4,318	3,962	4,278	4,026
CH ₄ -kuyruk merkez	5,530	4,527	5,284	3,686	5,909	5,508	5,384	5,851	4,973

Bu üç seviyedeki hesaplamalarda Mn–O_a bağı geçiş halinde (TS_{1/2}) reaktantlara (1) göre kısalmışken ürünlerde (2) geçiş haline (TS_{1/2}) göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafe hesaplandığında, reaktant geometrisinde her üç seviyede 2,5 Å civarındadır ve geçiş halinde bu mesafe 2 Å'a kadar kısalmıştır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimi hesaplandığında ise her üç seviyede de bu uzaklık 3 ila 6 Å civarında değişmektedir.

Şekil 4.61.'de Mn(II)LK10 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.61. Mn(II)LK10-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal sekstet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey kuartet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 33,4 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey sekstet spin yüzeyindedir. C–H aktivasyon bariyeri 16,7 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal ve aktif yüzey sekstet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 5,9 kkal·mol⁻¹'dür.

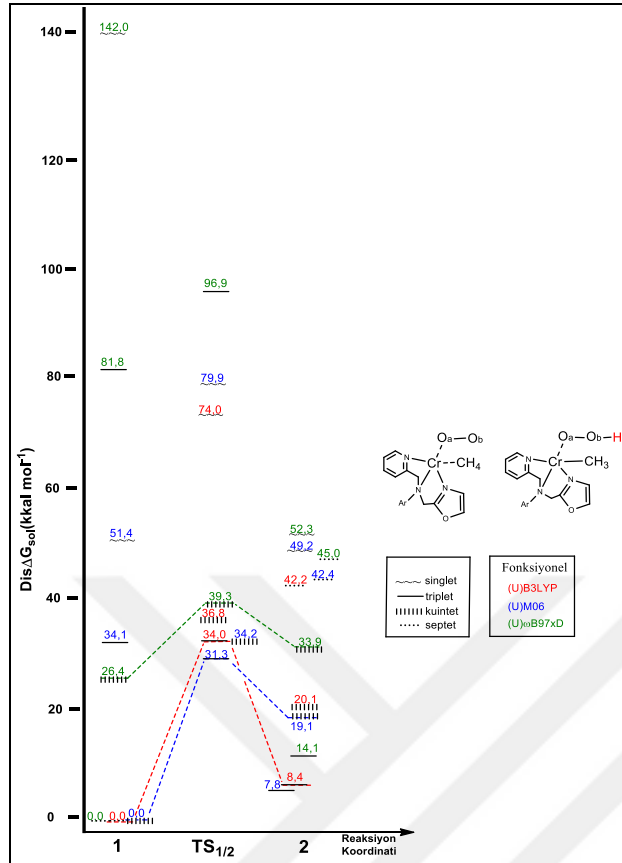
Cr(II)LK10-CH₄ kompleksinin bağ uzunlukları Angstrom (Å) cinsinden Çizelge 4.50.'de verilmektedir. (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde temel hallerin septet spin yüzeyinde olduğu hesaplanmıştır.

Çizelge 4.50. Cr(II)LK10-CH₄ kompleksinin Å (Angstrom) cinsinden bağ uzunlukları

Cr(II)LK10	(U)B3LYP/LANL2DZ			(U)M06/LANL2DZ			(U)ωB97XD/LANL2DZ		
	⁷ 1	³ TS1/2	³ 2	⁷ 1	³ TS1/2	³ 2	⁷ 1	⁵ TS1/2	³ 2
M–O _a	2,775	1,958	1,780	2,565	1,958	1,778	2,681	2,008	1,758
O _a –O _b	1,264	1,374	1,461	1,250	1,351	1,431	1,248	1,357	1,441
M–CH ₄	2,640	2,166	2,023	2,446	2,145	2,034	2,500	2,144	2,023
M-kuyruk merkez	4,351	3,825	3,975	4,027	3,568	3,818	4,069	3,602	3,813
CH ₄ -kuyruk merkez	6,398	5,001	3,841	5,402	4,597	3,608	5,501	4,645	3,623

Bahsi geçen hesaplamalarda M–O_a bağı geçiş halinde (TS1/2) reaktantlara (1) göre kısalırken ürünlerde (2) geçiş haline (TS1/2) göre uzamıştır. O_a–O_b bağının uzaması geçiş hali ve üründe gerçekleşmiştir. Metal ve metan arasındaki mesafe hesaplandığında, reaktant geometrisinde her üç seviyede 2 ila 3 Å civarındadır ve geçiş halinde bu mesafe 2 Å'a kadar kısalmıştır. Metan ve katyonik kısmın etkileşimi hesaplandığında ise her üç seviyede de bu uzaklık 3,5 ila 6,5 Å civarında değişmektedir.

Şekil 4.62.'de Cr(II)LK10 kompleksinin üç farklı seviyede C–H aktivasyon bariyerleri (kkal·mol⁻¹) verilmiştir.



Şekil 4.62. Cr(II)LK10-CH₄ kompleksinin dispersiyon düzeltmeleri eklenmiş serbest enerji profili (kırmızı: UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; mavi: UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol; yeşil: UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol)

UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + sol seviyesindeki hesaplamalar sonucu temel hal septet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey triplet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 34,0 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal kuintet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey triplet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 31,3 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ + D2 + Sol seviyesinde temel hal septet spin yüzeyindedir ve aktif yüzey kuintet spin yüzeyinde olup C–H aktivasyon bariyeri 39,3 kkal·mol⁻¹'dür.

4.1.11. Katyonik ligand-metal komplekslerinde ESP ve C–H aktivasyon bariyerleri korelasyonu

Tez kapsamında metal ve H_c'nin elektrostatik potansiyel yükleri ile C–H aktivasyon bariyerleri (ΔG_{sol} ve DisΔG_{sol}) arasındaki korelasyon (Çizelge 4.51.) incelenmiştir.

Çizelge 4.51. Katyonik Ligand – Fe(II) Kompleksinin (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H_c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol⁻¹)

Ligandlar	(U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ			
	q _{ESP} Fe(II)	q _{ESP} H _c	ΔG _{sol}	DisΔG _{sol}
LK1	-0,58	0,30	47,2	42,4
LK2	-0,14	0,26	48,5	46,8
LK3	0,87	0,16	59,4	63,6
LK4	0,25	0,25	48,9	44,9
LK5	0,45	0,17	54,3	50,6
LK6	0,10	0,20	33,3	39,0
LK7	-0,47	0,31	49,4	49,4
LK8	-0,62	0,29	58,2	60,8
LK9	0,09	0,20	48,5	44,1
LK10	-0,48	0,30	45,3	48,5

H_c üzerindeki elektrostatik potansiyel yükün artmasıyla C–H aktivasyon bariyerinin azaldığı gözlenirse de ligand sistemi içerisinde korelasyon zayıftır. Ligandların yapısal farklılıkları ve metan ve oksijenin metal merkezine göre konumları keskin bir korelasyon beklememizi engeller.

Ayrıca Çizelge 4.51.'de dispersiyon düzeltmelerinin eklendiği C–H aktivasyon bariyerleri de verilmiştir. Grimme dispersiyon düzeltmeleri uzak etkileşimleri dikkate almaktadır ve bariyerlerde yaklaşık 5 kkal·mol⁻¹'lük bir azalma görülmektedir. Dispersiyon düzeltmelerine bağlı olarak meydana gelen enerji değişikliği, incelediğimiz sistemler için uzak mesafe etkileşimlerin de önemli olacağını belirtmektedir.

Çizelge 4.52.'de Ni metali ile oluşturulmuş katyonik ligand komplekslerinin dispersiyonlu ve dispersiyonsuz ΔG değerleri verilmiştir. UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde yapılan hesaplarda ΔG değerlerine eklenen Grimme'in dispersiyon düzeltmesi, C–H aktivasyon bariyerlerinde 5 kkal·mol⁻¹'lük bir azalma sağlar.

Çizelge 4.52. Katyonik Ligand – Ni(II) Kompleksinin (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H_c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol⁻¹)

Ligandlar	(U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ			
	q _{ESP} Ni(II)	q _{ESP} H _c	ΔG _{sol}	DisΔG _{sol}
LK1	0,10	0,11	74,0	73,5
LK2	-0,32	0,35	51,1	47,2
LK3	-0,01	0,26	37,5	36,3
LK4	0,22	0,29	28,3	23,1
LK5	0,02	0,11	46,1	41,7
LK6	0,28	0,17	42,3	38,3
LK7	-0,53	0,29	95,4	99,0
LK8	0,32	0,09	63,1	66,2
LK9	0,08	0,12	72,0	67,8
LK10	-0,51	0,29	73,4	72,6

Bahsi geçen hesaplamalarda metal (Ni) ve H_c elektrostatik potansiyel yükleri ile C–H aktivasyon bariyerleri (ΔG_{sol} ve $Dis\Delta G_{sol}$) verilmiş olup, daha öncede belirtildiği gibi H_c üzerindeki elektrostatik potansiyel yükün artmasıyla C–H aktivasyon bariyerinin azaldığı gözlene de ligand sistemi içerisinde korelasyon zayıftır. Ligandların yapısal farklılıkları ve metan ve oksijenin metal merkezine göre konumları keskin bir korelasyon beklememizi engeller.

Çizelge 4.53.'de Co metali ile oluşturulmuş katyonik ligand komplekslerinin dispersiyonlu ve dispersiyonsuz ΔG_{sol} değerleri verilmiştir. UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde yapılan hesaplarda ΔG_{sol} değerlerine eklenen Grimme'in dispersiyon düzeltmesi, C–H aktivasyon bariyerlerinde 5 kkal·mol⁻¹'lük bir değişiklik (artma-azalma) sağlar.

Çizelge 4.53. Katyonik Ligand – Co(II) Kompleksinin (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H_c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol⁻¹)

Ligandlar	(U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ			
	$q_{ESP}Co(II)$	$q_{ESP}H_c$	ΔG_{sol}	$Dis\Delta G_{sol}$
LK1	-0,79	0,34	58,3	53,5
LK2	-0,85	0,33	64,6	59,7
LK3	-0,05	0,25	41,6	45,2
LK4	0,36	0,22	80,6	84,3
LK5	-0,85	0,38	65,9	61,2
LK6	0,22	0,23	60,3	63,9
LK7	-1,06	0,30	75,2	74,3
LK9	-0,46	0,28	58,8	53,1
LK10	-0,51	0,29	52,1	58,4

Yine Çizelge 4.53.'de UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde hesaplanan H_c elektrostatik potansiyel yükleri ile C–H aktivasyon bariyerleri (ΔG_{sol} ve $Dis\Delta G_{sol}$) verilmiş olup, ligandlar arası bir korelasyona bakıldığında H_c üzerindeki yük arttıkça C–H aktivasyon bariyerinin azaldığı gözlenmiştir. Ligandların yapısal farklılıkları ve metan ve oksijenin metal merkezine göre konumları keskin bir korelasyon beklememizi engeller.

Çizelge 4.54.'de UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde hesaplanan H_c elektrostatik potansiyel yükleri ile C–H aktivasyon bariyerleri (ΔG_{sol} ve $Dis\Delta G_{sol}$) verilmiş olup, ligandların yapısal farklılıkları ve metan ve oksijenin metal merkezine göre konumları keskin bir korelasyon beklememizi engeller.

Çizelge 4.54. Katyonik Ligand – Mn(II) Kompleksinin (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H_c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol⁻¹)

Ligandlar	(U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ			
	q _{ESP} Mn(II)	q _{ESP} H _c	ΔG _{sol}	DisΔG _{sol}
LK1	-0,58	0,36	30,8	30,8
LK2	-0,85	0,33	77,8	80,3
LK3	-0,05	0,25	56,6	50,5
LK4	0,32	0,23	70,4	69,1
LK5	0,68	0,11	29,8	28,1
LK6	0,22	0,23	37,0	34,2
LK7	-0,46	0,29	16,1	16,1
LK9	0,13	0,22	40,9	37,5
LK10	-0,14	0,26	35,8	38,2

Yukarıda bahsi geçen C–H aktivasyon bariyerleri mevcuttur. Bariyerlere Grimme'in dispersiyon düzeltmeleri uygulanmış olup, düzeltme sonucunda bariyerlerde yaklaşık 5 kkal·mol⁻¹'lük bir değişim gözlenmektedir.

Çizelge 4.55.'de UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde metal (Cr) ve H_c elektrostatik potansiyel yükleri ile C–H aktivasyon bariyerleri (ΔG_{sol} ve DisΔG_{sol}) verilmiştir. H_c üzerindeki elektrostatik potansiyel yükün artmasıyla C–H aktivasyon bariyerinin azaldığı gözlenmiştir. Ligand iskeletlerinin yapısal farklılığı düşünüldüğünde metan ve oksijenin metal merkeze göre pozisyonu göz önüne alındığında keskin bir korelasyonun beklenmemesi gerektiği açıktır.

Çizelge 4.55. Katyonik Ligand – Cr(II) Kompleksinin (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H_c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol⁻¹)

Ligandlar	(U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ			
	q _{ESP} Cr(II)	q _{ESP} H _c	ΔG _{sol}	DisΔG _{sol}
LK1	-0,25	0,33	36,3	30,0
LK2	-0,21	0,27	38,3	34,0
LK3	0,05	0,29	41,6	37,7
LK4	0,54	0,20	37,9	34,6
LK5	0,21	0,16	37,0	34,0
LK6	0,75	0,12	46,4	43,5
LK7	-0,08	0,29	33,3	37,2
LK9	0,42	0,30	85,5	78,1
LK10	*	*	79,1	75,0

*:yakınsamadı

Yine Çizelge 4.55.'de verilen bariyerlere (ΔG_{sol}) Grimme'in dispersiyon düzeltmeleri uygulanmış olup, düzeltme sonucunda (DisΔG_{sol}) bariyerlerde yaklaşık 5 kkal·mol⁻¹'lük bir değişim gözlenmektedir.

Çizelge 4.56.'da UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde metal (Fe) ve H_c elektrostatik potansiyel yükleri ile C–H aktivasyon bariyerleri (ΔG_{sol} ve $Dis\Delta G_{sol}$) verilmiştir.

Çizelge 4.56. Katyonik Ligand – Fe(II) Kompleksinin (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H_c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol⁻¹)

Ligandlar	(U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ			
	$q_{ESP}Fe(II)$	$q_{ESP}H_c$	ΔG_{sol}	$Dis\Delta G_{sol}$
LK1	-0,24	0,30	40,7	38,4
LK2	-0,24	0,29	39,9	36,2
LK3	0,17	0,19	26,5	30,1
LK4	0,51	0,23	38,0	34,9
LK5	0,12	0,19	38,1	35,5
LK6	0,10	0,20	37,8	34,1
LK7	-0,47	0,31	43,1	43,1
LK8	-0,29	0,21	30,8	30,6
LK9	0,09	0,20	39,6	36,0
LK10	0,24	0,21	35,6	33,2

Yukarıda verilen elektrostatik potansiyel yüklerde H_c üzerindeki elektrostatik potansiyel yükün artmasıyla C–H aktivasyon bariyerinin azaldığı gözlenmiştir. olsa da ligand sistemi içerisinde korelasyon zayıftır. Ligandların yapısal farklılıkları ve metan ve oksijenin metal merkezine göre konumları keskin bir korelasyon beklememizi engeller.

Bariyerlere (ΔG_{sol}) Grimme'in dispersiyon düzeltmeleri uygulanmış olup, düzeltme sonucunda ($Dis\Delta G_{sol}$) bariyerlerde yaklaşık 3 kkal·mol⁻¹'lük bir değişim gözlenmektedir.

Çizelge 4.57.'de metal (Ni) ile oluşturulmuş katyonik ligand komplekslerinin dispersiyonlu ve dispersiyonsuz ΔG_{sol} değerleri verilmiştir. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde yapılan hesaplarda ΔG_{sol} değerlerine eklenen Grimme'in dispersiyon düzeltmesi, C–H aktivasyon bariyerlerinde yaklaşık 5 kkal·mol⁻¹'lük bir değişim sağlar.

Çizelge 4.57. Katyonik Ligand – Ni(II) Kompleksinin (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H_c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol⁻¹)

Ligandlar	(U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ			
	$q_{ESP}Ni(II)$	$q_{ESP}H_c$	ΔG_{sol}	$Dis\Delta G_{sol}$
LK1	0,10	0,11	38,3	34,4
LK2	-0,48	0,27	37,5	36,5
LK3	-0,01	0,26	33,7	35,3
LK4	0,22	0,29	38,5	43,4
LK5	-0,34	0,31	40,4	35,5
LK6	0,28	0,17	40,1	37,4
LK7	-0,43	0,14	41,9	41,9
LK8	0,32	0,09	45,6	41,1
LK9	0,02	0,20	36,3	33,8
LK10	-0,51	0,29	49,9	38,6

Yine Çizelge 4.57.'de UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde hesaplanan H_c elektrostatik potansiyel yükleri ile C–H aktivasyon bariyerleri (ΔG_{sol} ve $Dis\Delta G_{sol}$) verilmiş olup, ligandlar arası bir korelasyona bakıldığında H_c üzerindeki yük arttıkça bariyerin azaldığı gözlenmiştir. Ligandların yapısal farklılıkları ve metan ve oksijenin metal merkezine göre konumları keskin bir korelasyon beklememizi engeller.

Çizelge 4.58.'de UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde hesaplanan H_c elektrostatik potansiyel yükleri ile C–H aktivasyon bariyerleri (ΔG_{sol} ve $Dis\Delta G_{sol}$) verilmiş olup, ligandlar arası bir korelasyona bakıldığında H_c üzerindeki yük arttıkça bariyerin azaldığı gözlenmiştir.

Çizelge 4.58. Katyonik Ligand – Co(II) Kompleksinin (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H_c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri ($kkal \cdot mol^{-1}$)

Ligandlar	(U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ			
	$q_{ESP}Co(II)$	$q_{ESP}H_c$	ΔG_{sol}	$Dis\Delta G_{sol}$
LK1	-0,73	0,36	47,9	44,2
LK2	-0,78	0,33	49,8	45,8
LK3	-0,48	0,32	42,2	40,4
LK4	0,36	0,22	51,1	46,4
LK5	-0,63	0,34	61,6	57,4
LK6	0,46	0,17	44,0	38,5
LK7	-0,70	0,32	38,4	38,4
LK8	0,55	0,14	66,2	60,7
LK9	-0,62	0,29	47,3	43,1
LK10	-0,21	0,24	42,5	38,2

Grimme'in dispersiyon düzeltmeleri uygulanmış olup, düzeltme sonucunda bariyerlerde yaklaşık $5 kkal \cdot mol^{-1}$ 'lük bir azalma gözlenmektedir.

Çizelge 4.59.'da bahsi geçen bariyerlere Grimme'in dispersiyon düzeltmeleri uygulanmış olup, düzeltme sonucunda bariyerlerde yaklaşık $5 kkal \cdot mol^{-1}$ 'lük bir azalma gözlenmektedir.

Çizelge 4.59. Katyonik Ligand – Mn(II) Kompleksinin (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H_c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri ($kkal \cdot mol^{-1}$)

Ligandlar	(U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ			
	$q_{ESP}Mn(II)$	$q_{ESP}H_c$	ΔG_{sol}	$Dis\Delta G_{sol}$
LK1	0,37	0,26	34,1	31,3
LK2	-0,74	0,36	47,7	47,2
LK3	-0,05	0,25	45,8	41,3
LK4	0,48	0,24	41,7	38,0
LK5	0,23	0,18	53,0	50,9
LK6	0,43	0,17	43,8	40,4
LK7	-0,45	0,30	32,6	32,6
LK8	0,34	0,07	55,7	53,8
LK9	0,13	0,22	31,8	29,2
LK10	0,06	0,22	63,9	64,6

Yine Çizelge 4.59.'da verilen metal ve H_c elektrostatik potansiyel yükleri ve C–H aktivasyon bariyerleri verilmiş olup C–H aktivasyon bariyerleri azaldıkça H_c üzerindeki yükün arttığı gözlenmiştir. Ligandların yapısal farklılıkları ve metan ile oksijenin metal merkezine göre konumları keskin bir korelasyon beklememizi engeller.

Çizelge 4.60.'da bahsi geçen bariyerlere Grimme'in dispersiyon düzeltmeleri uygulanmış olup, düzeltme sonucunda bariyerlerde yaklaşık 5 kkal·mol⁻¹'lük bir azalma gözlenmektedir.

Çizelge 4.60. Katyonik Ligand – Cr(II) Kompleksinin (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H_c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol⁻¹)

Ligandlar	(U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ			
	q _{ESP} Cr(II)	q _{ESP} H _c	ΔG _{sol}	DisΔG _{sol}
LK1	-0,04	0,28	39,1	29,5
LK2	-0,21	0,27	39,6	39,4
LK3	0,05	0,29	40,2	34,8
LK4	0,54	0,20	36,2	33,9
LK5	0,66	0,17	37,1	35,3
LK6	0,71	0,15	29,9	26,1
LK7	-0,08	0,29	36,6	36,6
LK8	0,59	0,14	39,8	36,2
LK9	0,42	0,30	29,8	31,1
LK10	0,51	0,21	35,0	31,3

Yine Çizelge 4.60.'da verilen metal ve H_c elektrostatik potansiyel yükleri ve C–H aktivasyon bariyerleri verilmiş olup C–H aktivasyon bariyeri azaldıkça H_c üzerindeki yükün arttığı gözlenmiştir. Ligandların yapısal farklılıkları ve metan ile oksijenin metal merkezine göre konumları keskin bir korelasyon beklememizi engeller.

Çizelge 4.61. Katyonik Ligand – Fe(II) Kompleksinin (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H_c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol⁻¹)

Ligandlar	(U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ			
	q _{ESP} Fe(II)	q _{ESP} H _c	ΔG _{sol}	DisΔG _{sol}
LK1	-0,73	0,37	72,7	72,8
LK2	-0,90	0,38	98,7	95,8
LK3	0,17	0,19	96,7	96,7
LK4	0,25	0,25	45,3	49,3
LK5	0,12	0,19	69,6	69,6
LK6	0,14	0,17	38,3	47,0
LK7	-0,47	0,31	61,6	61,7
LK8	-0,04	0,15	83,6	91,9
LK9	0,09	0,20	49,9	45,5
LK10	0,48	0,30	54,4	51,6

Çizelge 4.61.'de verilen metal ve H_c elektrostatik potansiyel yükleri ve C–H aktivasyon bariyerleri verilmiş olup bariyer azaldıkça H_c üzerindeki yükün arttığı gözlenmiştir. Ligandların yapısal farklılıkları ve metan ile oksijenin metal merkezine göre konumları keskin bir korelasyon beklememizi engeller.

Çizelge 4.61.'de bahsi geçen bariyerlere Grimme'in dispersiyon düzeltmeleri uygulanmış olup, düzeltme sonucunda bariyerlerde yaklaşık 5 kkal·mol⁻¹'lük bir değişim gözlenmektedir.

Çizelge 4.62.'de UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde katyonik ligand – Ni(II) metal kompleksinin hesaplanan H_c elektrostatik potansiyel yükleri ile C–H aktivasyon bariyerleri (ΔG_{sol} ve $Dis\Delta G_{sol}$) verilmiş olup, ligandlar arası bir korelasyona bakıldığında H_c üzerindeki yük arttıkça C–H aktivasyon bariyerinin azaldığı gözlenmiştir. Ligandların yapısal farklılıkları ve metan ile oksijenin metal merkezine göre konumları keskin bir korelasyon beklememizi engeller.

Çizelge 4.62. Katyonik Ligand – Ni(II) Kompleksinin (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H_c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol⁻¹)

Ligandlar	(U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ			
	$q_{ESP}Ni(II)$	$q_{ESP}H_c$	ΔG_{sol}	$Dis\Delta G_{sol}$
LK1	0,10	0,11	89,3	84,9
LK2	-0,32	0,35	88,2	84,0
LK3	-0,01	0,26	28,1	29,2
LK4	0,22	0,29	82,9	80,0
LK5	0,02	0,11	62,6	58,1
LK6	0,40	0,21	84,2	79,4
LK7	-0,53	0,29	44,6	44,6
LK8	0,32	0,09	84,2	82,0
LK9	0,08	0,12	81,9	78,0
LK10	-0,20	0,33	86,3	81,7

Grimme'in dispersiyon düzeltmeleri uygulanmış olup, düzeltme sonucunda bariyerlerde yaklaşık 5 kkal·mol⁻¹'lük bir azalma gözlenmektedir.

Çizelge 4.63.'te ilgili ligandların bariyerleri verilmiş olup, bariyerlere Grimme'in dispersiyon düzeltmeleri uygulanmıştır. Düzeltme sonucunda bariyerlerde yaklaşık 5 kkal·mol⁻¹'lük bir azalma gözlenmektedir.

Çizelge 4.63. Katyonik Ligand – Co(II) Kompleksinin (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H_c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol⁻¹)

Ligandlar	(U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ			
	q _{ESP} Co(II)	q _{ESP} H _c	ΔG _{sol}	DisΔG _{sol}
LK1	-0,79	0,34	70,1	65,3
LK2	-0,85	0,33	50,6	47,4
LK3	-0,48	0,32	67,3	61,1
LK4	0,36	0,22	67,5	62,3
LK5	-0,85	0,38	74,0	69,8
LK6	0,18	0,20	62,1	56,1
LK7	-0,46	0,29	46,5	46,6
LK10	-0,51	0,29	68,4	64,3

Yine Çizelge 4.63.'te UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde katyonik ligand – Co(II) metal kompleksinin hesaplanan H_c elektrostatik potansiyel yükleri ile C–H aktivasyon bariyerleri (ΔG_{sol} ve DisΔG_{sol}) verilmiş olup, ligandlar arası bir korelasyona bakıldığında H_c üzerindeki yük arttıkça C–H aktivasyon bariyerinin azaldığı gözlenmiştir. Ligandların yapısal farklılıkları ve metan ile oksijenin metal merkezine göre konumları keskin bir korelasyon beklememizi engeller.

Çizelge 4.64.'te ilgili ligandların bariyerleri verilmiş olup, bariyerlere Grimme'in dispersiyon düzeltmeleri uygulanmıştır. Düzeltme sonucunda bariyerlerde yaklaşık 5 kkal·mol⁻¹'lük bir azalma gözlenmektedir.

Çizelge 4.64. Katyonik Ligand – Mn(II) Kompleksinin (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H_c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol⁻¹)

Ligandlar	(U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ			
	q _{ESP} Mn(II)	q _{ESP} H _c	ΔG _{sol}	DisΔG _{sol}
LK1	-0,58	0,36	46,6	42,7
LK3	-0,16	0,30	30,2	26,1
LK4	0,48	0,24	43,8	40,5
LK5	-0,03	0,26	28,9	24,7
LK6	0,43	0,17	35,4	30,3
LK7	-0,45	0,30	57,4	57,4
LK8	0,34	0,07	49,3	47,0
LK9	0,36	0,20	20,9	16,0
LK10	0,06	0,22	77,3	74,5

Yine Çizelge 4.64.'te UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde katyonik ligand – Mn(II) metal kompleksinin hesaplanan H_c elektrostatik potansiyel yükleri ile C–H aktivasyon bariyerleri (ΔG_{sol} ve DisΔG_{sol}) verilmiş olup, ligandlar arası bir korelasyona bakıldığında H_c üzerindeki yük arttıkça C–H aktivasyon bariyerinin azaldığı gözlenmiştir.

Ligandların yapısal farklılıkları ve metan ile oksijenin metal merkezine göre konumları keskin bir korelasyon beklememizi engeller.

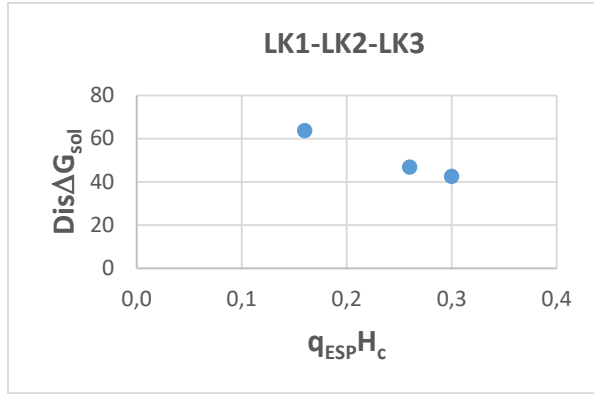
Çizelge 4.65.'te ilgili ligandların bariyerleri verilmiş olup, bariyerlere Grimme'in dispersiyon düzeltmeleri uygulanmıştır. Düzeltme sonucunda bariyerlerde yaklaşık 5 kkal·mol⁻¹'lük bir azalma gözlenmektedir.

Çizelge 4.65. Katyonik Ligand – Cr(II) Kompleksinin (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde Metal ve H_c Elektrostatik Potansiyel Yükleri ve C–H Aktivasyon Bariyerleri (kkal·mol⁻¹)

Ligandlar	(U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ			
	q _{ESP} Cr(II)	q _{ESP} H _c	ΔG _{sol}	DisΔG _{sol}
LK1	-0,04	0,28	40,8	36,6
LK2	-0,21	0,27	39,9	37,2
LK3	0,05	0,29	43,5	38,9
LK4	0,54	0,20	35,8	32,2
LK5	0,21	0,16	40,6	37,6
LK6	0,71	0,15	31,5	35,4
LK7	0,75	0,12	36,6	36,6
LK8	0,59	0,14	41,5	36,4
LK9	0,78	0,04	34,6	31,9
LK10	0,22	0,28	43,0	39,3

Son olarak yine Çizelge 4.65.'te UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde katyonik ligand – Cr(II) metal kompleksinin hesaplanan H_c elektrostatik potansiyel yükleri ile C–H aktivasyon bariyerleri (ΔG_{sol} ve DisΔG_{sol}) verilmiş olup, H_c atomik yük arttıkça C–H aktivasyon bariyerinin azaldığı gözlenmiştir. Fakat ligandlar arası bir korelasyon saptanamamış olup bunun nedeni ise ligandların yapısal farklılıkları ve metan ile oksijenin metal merkezine göre konumlarıdır.

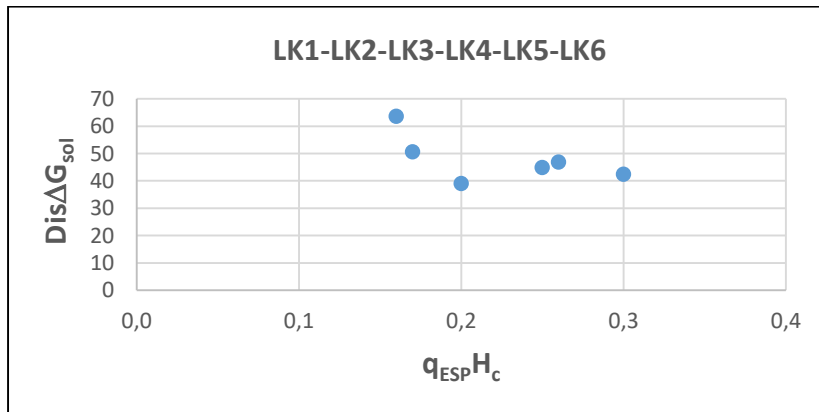
Şekil 4.63.'te H_c atomik yük ile LK1, LK2 ve LK3 ligandlarının C–H aktivasyon bariyerleri verilmiştir.



Şekil 4.63. LK1, LK2 ve LK3 ligandlarının C–H aktivasyon bariyerleri ile H_c atomik yük korelasyonu

Ligandların yapısal farklılıkları sebebiyle C–H aktivasyon bariyerleri ile H_c atomik yükler arasında keskin bir korelasyon beklenmemektedir. Çalışılan ligandlar yapısal benzerliklerine göre sınıflandırıldığında C–H aktivasyon bariyeri ile H_c atomik yükü arasında bir korelasyon olduğu saptanmıştır. Şekil 4.63.'te yapısal olarak benzer olan LK1, LK2 ve LK3 ligandları ele alınmıştır. Ana iskelete bağlı kuyruk kısımlarında iki azot bulunan bu yapıları C–H aktivasyon bariyeri ile H_c atomik yük korelasyonuna sahiptir.

Şekil 4.64.'te H_c atomik yük ile LK1, LK2, LK3, LK4, LK5 ve LK6 ligandlarının C–H aktivasyon bariyerleri verilmiştir.



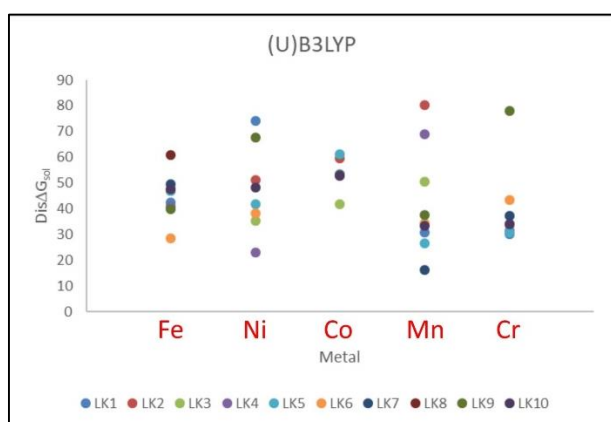
Şekil 4.64. LK1, LK2, LK3, LK4, LK5 ve LK6 ligandlarının C–H aktivasyon bariyerleri ile H_c atomik yük korelasyonu

Ligandların yapısal farklılıkları sebebiyle C–H aktivasyon bariyerleri ile H_c atomik yükler arasında keskin bir korelasyon beklenmemektedir. Çalışılan ligandlar yapısal benzerliklerine göre sınıflandırıldığında C–H aktivasyon bariyeri ile H_c atomik yükü arasında bir korelasyon

olduğu saptanmıştır. Şekil 4.63.'te yapısal olarak benzer olan LK1, LK2, LK3, LK4, LK5 ve LK6 ligandları ele alınmıştır. Ana iskelete bağlı kuyruk kısımlarında azot bulunan bu yapılar C–H aktivasyon bariyeri ile H_c atomik yük korelasyonuna sahiptir.

4.1.12. Metal-C–H aktivasyon bariyerleri korelasyonu

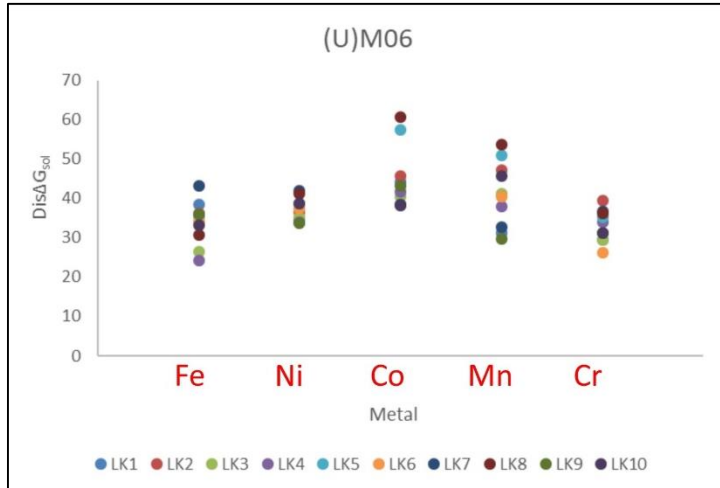
Tüm bu çalışmalar dikkate alınarak metaller ile C–H aktivasyon bariyerleri arasındaki korelasyonu ve üç farklı seviyenin trendleri irdelenmiştir. Şekil 4.65.'te (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ teorik seviyesinde yapılan çalışmalar verilmiştir.



Şekil 4.65. (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde ligandların metal-C–H aktivasyon bariyeri korelasyonu

Şekil 4.65.'te de görüldüğü üzere on farklı ligandın metaller ile oluşturulmuş kompleksleriyle C–H aktivasyon bariyerleri arasındaki korelasyon incelenmiştir. Burada (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ teorik seviyesinde metal kompleksleri ile bir trend yakalandığı dikkatimizi çekmiştir. Grafiğe baktığımızda genelde en düşük C–H aktivasyon bariyerleri Mn(II) metali ile oluşturulmuş komplekste iken Fe(II) metali ile oluşturulmuş komplekste C–H aktivasyon bariyerlerinin birbirlerine yakınlığı dikkat çekmiştir. Yine Co(II) metali ile oluşturulan komplekslere baktığımızda ise diğer metallere göre orta düzeyde C–H aktivasyon bariyerleri hesaplanmıştır.

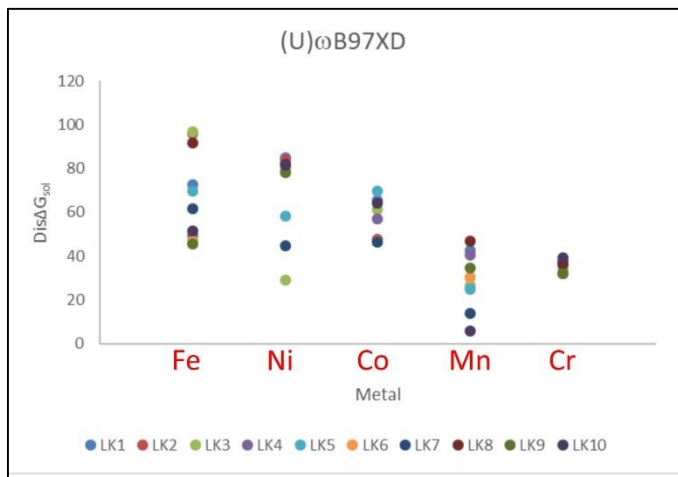
Şekil 4.66.'da (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ teorik seviyesinde metaller ile oluşturulmuş kompleksler ile C–H aktivasyon bariyerleri arasındaki korelasyondan bahsedilmektedir.



Şekil 4.66. (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde ligandların metal-C-H aktivasyon bariyeri korelasyonu

Şekil 4.66.'da da görüldüğü üzere on farklı ligandın metaller ile oluşturulmuş kompleksleriyle C-H aktivasyon bariyerleri arasındaki korelasyon incelenmiştir. Burada (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ teorik seviyesinde metal kompleksleri ile bir trend yakalandığı dikkatimizi çekmiştir. Grafiğe baktığımızda genelde en düşük C-H aktivasyon bariyerleri Fe(II) ve Cr(II) metalleri ile oluşturulmuş kompleksler iken Co(II) metali ile oluşturulan komplekslere baktığımızda ise diğer metallere göre orta düzeyde C-H aktivasyon bariyerleri hesaplanırken diğer yandan da en yüksek bariyerlere yine Co(II) metalinde LK5 ve LK8 ligandlarında rastlanmıştır.

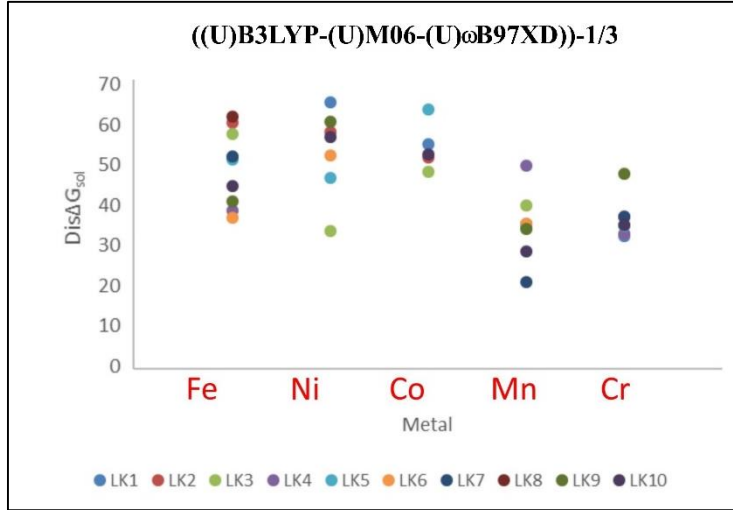
Şekil 4.67.'de (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ teorik seviyesinde metaller ile oluşturulmuş kompleksler ile C-H aktivasyon bariyerleri arasındaki korelasyondan bahsedilmektedir.



Şekil 4.67. (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde ligandların metal-C–H aktivasyon bariyeri korelasyonu

Şekil 4.67.’de de görüldüğü üzere on farklı ligandın metaller ile oluşturulmuş kompleksleriyle C–H aktivasyon bariyerleri arasındaki korelasyon incelenmiştir. Burada (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ teorik seviyesinde metal kompleksleri ile bir trend yakalandığı dikkatimizi çekmiştir. Grafiğe baktığımızda genelde en düşük C–H aktivasyon bariyerleri Mn(II) metali ile oluşturulmuş kompleksler iken Cr(II) metali ile oluşturulan komplekslerde diğer metallere göre orta düzeyde C–H aktivasyon bariyerleri hesaplanmıştır. Ligandlar arası bir tutarlılık mevcuttur.

Şekil 4.68.’de üç farklı teorik seviyede ((U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) metaller ile oluşturulmuş kompleksler ile C–H aktivasyon bariyerleri arasındaki korelasyondan bahsedilmektedir.



Şekil 4.68. (U)B3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, (U)M06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve (U)ωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde ligandların metal-C–H aktivasyon bariyeri korelasyonu

Şekil 4.68.'de çalışılan üç seviyedeki bariyerlerin ortalaması alınmış ve bu ortalamaların metallerle korelasyonu incelenmiştir. Tüm bu işlemler yapılırken en düşük bariyerli spin yüzeylerinin farklı olması göz ardı edilmiş, spinden bağımsız olarak en düşük bariyerler baz alınmıştır. Farklı spin yüzeylerinde de olsa farklı metal merkezli komplekslerin hesaplanan en düşük bariyerleri ile metal merkez arasındaki ilişki incelenmiştir. Bunun sonucunda ise en düşük C–H aktivasyon bariyerleri Mn(II) metali ile oluşturulmuş komplekslerde hesaplanmıştır. Cr(II) metali ile oluşturulmuş komplekslerde diğer komplekslere göre birbirlerine yakın, ortalama C–H aktivasyon bariyerleri hesaplanmıştır.

5. SONUÇ

Metan C–H bağ aktivasyonu, Şekil 4.1.’de gösterildiği gibi, süperokso kompleksten hidroperokso komplekse geçişi kapsar. Bu geçiş molekül içi asit-baz fragmanlarının etkileşimi gibi düşünülür. Daha önce de bahsedildiği gibi asidik ve bazik fragmanların kuvvetleri aktivasyonla doğrudan ilgilidir. Bu basamakta süperokso kompleksindeki O_b, Brønsted bazı olarak davranırsa da metanın proton verme isteği oldukça düşük olduğundan metanı polarize etme düşüncesi ortaya çıkmıştır. Ve bu amaçla tasarlanan non-heme metal merkezli komplekslerin CH₄ ve O₂’i aktive etme tepkimeleri hedeflenmiştir. Bis-2-pkolilamin ana iskeletine eklenen katyonik ligandlar ile metanı polarize etmek ve C–H aktivasyon basamağındaki bariyeri düşürmek amaçlanmıştır. Bu hedefle Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (YFT) ile aktivasyon tepkimesi çalışılmıştır. Tepkimedeki O–O ve C–H aktivasyon basamağının anlaşılması için geçiş metali kompleksleri ile modellenen ligandların reaktant, ürün ve geçiş hali yapılarının yapısal ve elektronik özellikleri, geometrileri, ve elektrostatik potansiyel (ESP) yükleri incelenmiştir.

Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (YFT) kapsamında tasarlanan on ligand metale bağlı elektronik yapı parametrelerinin C–H bağ aktivasyonuna etkisini incelemek amacıyla beş farklı geçiş metali (Cr(II), Mn(II), Fe(II), Co(II) ve Ni(II)) ile kompleksi oluşturularak ve üç farklı seviyede (UB3LYP, UM06 ve UωB97XD) üç farklı yapı (reaktant, ürün ve geçiş hali) optimize edilmiştir. 1 ve 2 nolu yapıların optimize geometrilerinde negatif öz-değere rastlanmamıştır (sanal frekans yok). Geçiş yapıları (TS1/2) için yapılan frekans hesapları sonucunda ise tek negatif eigen-değere rastlanmıştır. Optimize geometriler üzerinden, tek nokta, solvasyon ve dispersiyon enerjileri hesaplanmıştır. Tüm geometriler için mümkün olan spin halleri (S=0, 1, 2, 3, 1/2, 3/2 ve 5/2) hesaplanmıştır.

LK1 ligandı için üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) Fe(II) metali ile oluşturulan kompleks için C–H bağ aktivasyonuna ait bariyerler Grimme’in dispersiyon düzeltmeleri eklendiğinde sırasıyla 42,4; 38,4 ve 72,8 kkal·mol⁻¹’dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde triplet spin yüzeyi geçiş hali için yakınsanabilen tek yapıdır. Diğer spin yüzeyleri yakınsanamamıştır. Ni(II) metali ile oluşturulan kompleks için C–H bağ aktivasyonu basamağına ait dispersiyon düzeltmeli bariyerler sırasıyla; 74,2; 34,4 ve 84,9 kkal·mol⁻¹ . LK1 ile aktivite göstermediği gözlenen Ni(II) metali için verilen C–H bağ aktivasyonuna ait

bariyerler singlet spin yüzeyi olup diğer spin yüzeyleri yakınsamamıştır. Singlet yüzeyi için bariyerler yukarıdaki gibi oldukça yüksek bir aktivasyon enerjisine sahiptir. Co(II) metali ile oluşturulan kompleks için C–H bağ aktivasyonu basamağına ait dispersiyon düzeltmeli bariyerler sırasıyla; 53,5; 44,2 ve 65,3 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. Yine Mn(II) metali için sıralı dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyonuna ait bariyerler, 30,8; 31,3 ve 42,7 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmışken Cr(II) metalinde bu bariyerler sırasıyla, 30,0; 29,5 ve 36,6 kkal·mol⁻¹'dür. Bahsi geçen bariyerler her ne kadar düşük olsalar da oda koşullarında tepkimenin gerçekleşebilmesi için yeterli değildir. Ayrıca metanı polarize etme fikri bu ligand için irdelendiğinde polarize edecek grup yani ana iskelete bağlanmış katyonik kısım metan ile arasındaki mesafe her üç seviyede de 6 Å civarındadır. Bu mesafe iki grubun etkileşiminden bahsedilmesini engeller.

LK2 ligandının Fe(II) ile oluşturulan kompleksinin üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) yapılan hesapları sonucu elde edilen bariyerle dispersiyon düzeltmeleri ile birlikte sırasıyla 46,8; 36,2 ve 95,8 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmış olup UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ teorik seviyesinde geçiş hali için hesaplanabilen tek spin yüzeyi singlettir. Ni(II) metali ile oluşturulan kompleks için bariyerler verilen seviye sırasıyla 51,1; 36,5 ve 84,0 kkal·mol⁻¹'dür ve yine burada da UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde yakınsanabilen tek spin yüzeyi singlettir. Co(II) metali ile oluşturulan kompleksin C–H bağ aktivasyon bariyerleri ise sırasıyla 59,7; 45,8 ve 47,7 kkal·mol⁻¹ iken Mn(II) metali için bu bariyerler 80,3; 47,2 kkal·mol⁻¹'dür. UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde yakınsanabilen tek spin yüzeyi sekstet olup UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde ise geçiş hali hiçbir spin yüzeyinde hesaplanamamıştır. Cr(II) metali ile oluşturulan kompleks için ise bariyerler sırasıyla 34,0; 39,4 ve 37,2 kkal·mol⁻¹'dür. LK2 ligandı için verilen C–H bağ aktivasyon bariyerleri tepkimenin gerçekleşebilmesi için yeterli seviyede değildir. Metan yeterince polarize olmadığından C–H bağ aktivasyonu gerçekleşemez. Ligandtaki katyonik kısım ile metan arasındaki etkileşim 6 Å civarında olduğundan bir etkileşimden basedilemez ve bu durumda metanın da polarize olmayışını açıklar.

LK3 ligandının C–H bağ aktivasyonu analizinde Fe(II) metali ile oluşturduğu kompleksin UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerindeki dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri sırasıyla 47,6; 26,4 ve 96,7 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmış olup UωB97XD/cc-

pVTZ//LANL2DZ seviyesi için yakınsanabilen tek spin yüzeyi triplettir. Ni(II) metali ile oluşturulan kompleksin dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri ise sırasıyla 35,4; 35,3 ve 29,2 kkal·mol⁻¹'dür. Co(II) metali için dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri sırasıyla 41,6; 40,4 ve 61,1 kkal·mol⁻¹ olur iken Mn(II) metali kompleksinde dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri sırasıyla 50,5; 41,3 ve 26,6 kkal·mol⁻¹ olarak saptanmıştır. Cr(II) metali kompleksinde dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyonu bariyerleri 33,8; 29,4 ve 34,2 kkal·mol⁻¹'dür. Bahsi geçen bariyerler C–H bağ aktivasyonu için yeterli değerlere sahip değildir. Bu durumu izah edebilmek için polarizasyon olma fikrini irdelleyerek metanı pozitif polarize edecek kısım, ligandın katyonik halkasıdır ve bu halka ile metan arasındaki mesafe bir etkileşimden bahsetmek için fazlasıyla uzaktır.

LK4 ligandının beş farklı metal ile oluşturulan komplekslerinin C–H bağ aktivasyonu bariyerleri UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde hesaplar yapılmıştır. Fe(II) metali oluşturulan komplekste dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri sırasıyla 44,9; 24,2 ve 49,3 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. Ni (II) metali ile oluşturulan kompleksinde yukarıdaki ilk iki seviye için dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri 23,1; 34,0 kkal·mol⁻¹ şeklindedir. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde geçiş hali hiçbir spin yüzeyinde hesaplanamamıştır. UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesindeki bariyer düşüklüğü irdelenmektedir. Çünkü C–H bağ aktivasyonun gerçekleşmesi için oldukça elverişli bir bariyerdir. Diğer yapısal ve elektronik özellikleride irdelenip bariyerin doğruluğu teyit edilmektedir. Mn(II) metali kompleksinde dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri yukarıda bahsedilen seviyeler için sırasıyla 69,1; 38,0 ve 40,5 kkal·mol⁻¹'dür. Cr(II) metali ile oluşturulan kompleks için dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri sırasıyla 31,4; 33,9 ve 32,2 kkal·mol⁻¹ olduğu bulunmuştur. Co(II) metali ile oluşturulan LK4 kompleksinde dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerler UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyeleri için sırasıyla 41,7 ve 57,2 kkal·mol⁻¹ olarak saptanmıştır. Metan-katyonik kısmın etkileşimine bakıldığında aradaki mesafenin etkileşim için yeterli olmadığı gözlenmiştir. Ni(II)LK4 kompleksinin UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesindeki 17,8 kkal·mol⁻¹'lük bir bariyer irdelendiğinde üründe bu mesafenin 6 Å civarından 4 Å a düştüğü gözlenmiştir. Mesafedeki bu değişim metan ile katyonik kısım arasında bir etkileşim olabileceğini gösterir niteliktedir.

LK5 ligandının beş farklı metal ile oluşturulan kompleksinin C–H bağ aktivasyonu bariyerleri UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde hesaplanmıştır. Bunun sonucu olarak Fe(II) metali ile oluşturulan komplekste dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri sırasıyla 47,0; 35,5 ve 69,6 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesi için geçiş halinde yakınsanan tek spin yüzeyi triplettir. Ni(II) metali ile oluşturulan kompleksin dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri sırasıyla 41,7; 38,7 ve 58,1 kkal·mol⁻¹'dür. Co(II) metali kompleksi için ise bu bariyerlerin 61,2; 57,4 ve 69,8 kkal·mol⁻¹ olduğu saptanmıştır. Mn(II) metali kompleksi için dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri sırasıyla 26,4; 50,9 ve 24,7 kkal·mol⁻¹'dür ve LK5 ligandının son metali (Cr(II)) ile oluşturulan kompleksin dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri 30,9; 35,3 ve 37,6 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. Genel hatlarıyla bakıldığında Mn(II)LK5 kompleksi için bariyerler tepkimenin gerçekleşebileceği yönündedir fakat diğer parametreler incelendiğinde C–H bağının kopmasını kolaylaştıracak pozitif polarizasyon etkisi bulunmamaktadır. Katyonik kısım ile metan arasındaki mesafe 6 Å civarındadır ve bu mesafe bir etkileşim olmadığını göstermektedir. Tabi yine de Mn(II) metalinin yapısal özellikleri araştırılmalı ve C–H aktivasyonu için Mn(II) kompleksinin etkisi irdelenmelidir.

LK6 ligandının üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) beş farklı metallerle oluşturulan komplekslerinin dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri hesaplanmıştır. Fe(II)LK6 kompleksinin dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri sırasıyla 28,6; 34,1 ve 47,0 kkal·mol⁻¹ olarak saptanırken Ni(II)LK6 kompleksi için dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri 38,3; 37,4 ve 79,4 kkal·mol⁻¹'dür. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesi için yakınsanan tek spin yüzeyi singlettir. Co(II)LK6 kompleksi için dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyeleri için sırasıyla 38,4 ve 46,6 kkal·mol⁻¹'dür. UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde geçiş hali hiçbir spin yüzeyinde hesaplanamamıştır. Üç seviye için Mn(II)LK6 kompleksinin dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri 34,2; 40,4 ve 30,3 kkal·mol⁻¹'dür ve son olarak Cr(II)LK6 kompleksi için dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerlerinin 43,5; 26,1 ve 36,6 kkal·mol⁻¹ olduğu saptanmıştır. Cr(II)LK6'da UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde yapılan hesaplar sonucunda hiçbir spin yüzeyinde geçiş hali bulunamamıştır. Pozitif

polarizasyon fikri için irdelenen metan ile katyonik kısım arasındaki mesafe 6 Å civarında olduğundan bir etkileşimden bahsetmek güçtür.

LK7 ligandının üç farklı seviyede beş farklı metalle oluşturulan kompleksleri için dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri şöyledir; Fe(II)LK7 kompleksi için UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde sırasıyla 49,4; 43,1 ve 61,7 kkal·mol⁻¹'dür. Ni(II)LK7 kompleksi için dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyeleri için sırasıyla 41,9 ve 44,6 kkal·mol⁻¹ olarak saptanmıştır. Co(II)LK7 kompleksi için ise dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerler yine iki seviye için sırasıyla 38,4 ve 46,6 kkal·mol⁻¹'dür. Bu iki komplekste de UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde geçiş hali hiçbir spin yüzeyinde hesaplanamamıştır. Mn(II)LK7 kompleksi için üç seviyede dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri sırasıyla 16,1; 32,6 ve 14,0 kkal·mol⁻¹ iken Cr(II)LK7 kompleksi için dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri 37,2; 36,6 ve 36,6 kkal·mol⁻¹ şeklindedir. Mn(II)LK7 kompleksi için bulunan dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyonu bariyerleri tepkimenin gerçekleşebileceği enerjide olsalar dahi diğer parametrelerde tepkimenin gerçekleşmeyeceği gözlenmiştir. Bu parametrelerden biri de metanı polarize ederek H_c göçünü kolaylaştırması planlanan katyonik kısmın her üç yapıda da metan ile etkileşemeyecek bir mesafede (6 Å civarı) konumlanmasıdır.

LK8 ligandı ile beş metali kullanarak oluşturulan komplekslerin C–H bağ aktivasyonu bariyerleri önceki komplekslerde de bahsedilen üç seviye için çalışılmıştır. Sıra yine aynı şekilde olup Fe(II)LK8 kompleksi için elde edilen dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyonu bariyerleri yine sırasıyla 60,8; 30,6 ve 91,9 kkal·mol⁻¹'dür. Bu komplekste UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde yakınsanabilen tek spin yüzeyi singlettir. Ni(II)LK8 kompleksi için UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde hesaplanan dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerler 41,1 ve 82,0 kkal·mol⁻¹'dür. Yine aynı şekilde UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde yakınsanabilen tek spin yüzeyi singlettir. Mn(II)LK8 kompleksi iki seviyede dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri sırasıyla 53,8 ve 47,0 kkal·mol⁻¹'dür. Cr(II)LK8 kompleksi için iki seviyedeki dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri sırasıyla 36,2 ve 36,4 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmış olup Ni(II)LK8, Mn(II)LK8 ve Cr(II)LK8 kompleksleri için UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde geçiş hali

hiçbir spin yüzeyinde hesaplanamamıştır. Son olarak Co(II)LK8 kompleksi için UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyonu bariyeri 60,7 kkal·mol⁻¹ olarak saptanmış olup diğer iki seviyede kompleksin geçiş halleri hiçbir spin yüzeyinde hesaplanamamıştır. C–H bağ aktivasyonu için bariyerler oldukça yüksek olup bunun yanı sıra polarize olma durumu gözönüne getirildiğinde ilgili parametrelerden bu fikrinde çalışmadığını gözlenmiştir. Şöyle ki metan ile metanı polarize edecek olan grup yani kompleksteki katyonik kısım arasında etkileşim olamayacak kadar bir mesafe söz konusudur.

LK9 ligandının beş metal ile komplekslerinin UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerindeki dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyonu bariyerleri hesaplanmıştır. Fe(II)LK9 kompleksi için üç seviyede dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri sırasıyla 39,7; 36,0 ve 45,5 kkal·mol⁻¹'dür. Ni(II)LK9 kompleksi için bu bariyerler yine sırasıyla 67,8; 33,8 ve 78,0 kkal·mol⁻¹ olarak bulunmuştur. Co(II)LK9 kompleksi için UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde yapılan hesaplarda dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri sırasıyla 53,1 ve 43,1 kkal·mol⁻¹ olarak bulunmuş ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesi için kompleksin geçiş hali hiçbir spin yüzeyinde hesaplanamamıştır. Cr(II)LK9 kompleksi için üç seviyede sırasıyla 78,1; 31,1 ve 31,9 kkal·mol⁻¹ dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri elde edilmiş olup Mn(II)LK9 kompleksinde bu bariyerler yine sırasıyla 37,5; 29,6 ve 34,6 kkal·mol⁻¹'dür.

LK10 ligandının beş metal ile kompleksinde üç seviyede C–H bağ aktivasyonu bariyerleri hesaplanmıştır. Bu doğrultuda Fe(II)LK10 kompleksi için dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyelerinde sırası ile 47,7; 33,2 ve 51,6 kkal·mol⁻¹'dür. Ni(II)LK10 kompleksi için ise bu bariyerler 48,1; 38,6 ve 81,7 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde yakınsanan tek spin yüzeyi singlettir. Co(II)LK10 kompleksinin dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri sırasıyla 52,9; 38,2 ve 64,3 kkal·mol⁻¹'dür. Cr(II)LK10 kompleksine ait bariyerler ise sırasıyla 34,0; 31,3 ve 39,3 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. Mn(II)LK10 kompleksi için ise dispersiyon düzeltmeli C–H bağ aktivasyon bariyerleri yine sırasıyla 33,4; 45,8 ve 5,9 kkal·mol⁻¹ olarak hesaplanmıştır. Mn(II)LK10 kompleksinde UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde hesaplanan bariyer oldukça düşük olup, tepkimenin

gerçekleşebileceği düşünülmektedir. Metanın polarizasyonu da dikkate alındığında metan ile metanı polarize edecek grup olan katyonik kısım reaktantta 5 Å civarındadır. Her iki seviyede de geçiş hali ve üründe bu mesafe 3 Å civarına kadar iner. Bu da iki grup arasında bir etkileşimin olabileceğini yani metanın polarize olabileceğini göstermektedir. Fakat böyle bir durumda yine de diğer parametrelerde incelenmeli, hiçbir unsur göz ardı edilmemelidir.

Metanın polarize olma fikrinden bahsetmiştik. Buna istinaden H_c 'nin elektrostatik potansiyel yükleri analiz edilmiştir ve elde edilen C–H bağ aktivasyonu bariyerleri ile arasında bir korelasyon olup olmadığı gözlenmiştir. Tüm bunlar kapsamında üç seviyede (UB3LYP/LANL2DZ, UM06/LANL2DZ ve UωB97XD/LANL2DZ) hesaplar yapılmış olup, genel hatlarıyla H_c üzerindeki elektrostatik potansiyel yükün azalmasıyla C–H aktivasyon bariyerlerinin arttığı gözlenmiştir. Ligand sistemi baz alınarak incelendiğinde ise korelasyon zayıftır. Ligand iskeletlerinin yapısal farklılığı düşünüldüğünde metan ve oksijenin metal merkeze göre pozisyonu göz önüne alındığında keskin bir korelasyon beklenmemelidir.

Ayrıca dispersiyon düzeltmelerinin eklendiği C–H aktivasyon bariyerleri de bulgular kısmında mevcuttur. Grimme dispersiyon düzeltmeleri uzak etkileşimleri dikkate almaktadır ve bariyerlerde yaklaşık 5 kkal·mol⁻¹'lük bir azalma görülmektedir. Dispersiyon düzeltmelerine bağlı olarak meydana gelen enerji değişikliği, incelediğimiz sistemler için uzak etkileşimlerin önemli olabileceğini belirtmektedir.

Metallerle oluşturulmuş komplekslerin üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ ve UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) C–H aktivasyon bariyerleri ile metaller arasındaki korelasyon incelenmiştir. Bu analiz sonucunda UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ teorik seviyesinde yapılan hesaplamalar sonucu en düşük bariyerlere Mn(II) metalinde rastlanmıştır. Ligandlar arasında ise en düşük bariyer Mn(II)LK7 kompleksidir. UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ teorik seviyesinde yapılan hesaplamalar sonucu ise yine bir korelasyon bulunmuştur ve burada da en düşük bariyerler Fe(II) ve Cr(II) metalinde bulunmuştur. Ligandlar arası en düşük bariyer ise Fe(II)LK4 kompleksine aittir. Cr(II) metali komplekslerinde hesaplanan C–H aktivasyon bariyerleri birbirlerine oldukça yakındır. UωB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ teorik seviyesinde yapılan hesaplamalar sonucunda ise Şekil 4.67'ye bakıldığında bir korelasyon mevcuttur. Burada da en düşük bariyer Mn(II) metali kompleksinde hesaplanmış olup ki bu bariyer Mn(II)LK10

kompleksine aittir, Cr(II) metali komplekslerinde C–H aktivasyon bariyerlerinin birbirlerine oldukça yakın oldukları hesaplanmıştır. Son olarak spin yüzeylerinden bağımsız, üç fonksiyonelle elde edilmiş en düşük bariyerlerin ortalaması ile metaller arasındaki korelasyon incelenmiştir. Mn(II) metali ile oluşturulan komplekslerin C–H aktivasyon bariyerlerinin daha düşük olduğu hesaplanmıştır. Tüm bu ligandlar içinde ise en düşük bariyere Mn(II)LK7 kompleksinde rastlanmıştır. C–H aktivasyon bariyerlerinin birbirlerine en yakın olduğu kompleksler Cr(II) metali ile oluşturulan komplekslerdir.

Sonuç olarak yapılan tüm bu çalışmalar doğrultusunda kuyruk kısmı dediğimiz ana iskelete x konumundan (üç dişli azottan oluşan ana iskeletin katyonik kısım ile ortadaki azottan bağlandığı nokta) bağlanmış (Şekil 4.2.) katyonik kısımlar enerjiler üzerinde yine de öngörülemez değişikliklere yol açmaktadır. Bir diğer durum ise metallerin birbirleriyle kıyaslanamaz olmasıdır. Her birinin kimyasal tepkimede etkisi farklıdır. Her ne kadar bunu savunuyor olsak da yapılan çalışmalarda bir trend aramak amaçlı ve öngörümüz olması açısından ya da sonuçları yorumlayabilmek için çalışmalar yapılmış olup metallerin komplekslere katkıları 4.1.12. başlığında irdelenmiştir. UB3LYP fonksiyoneli ile yapılan çalışmalarda en düşük bariyerler Mn(II) metali ile oluşturulan komplekslerde rastlanmıştır. Diğer metaller ile yapılan çalışmalarda ise Şekil 4.65.'te de görüldüğü gibi bariyerler geniş bir yelpazededir M06 fonksiyoneline bakıldığında ise Şekil 4.66.'da görüldüğü üzere beş farklı metalle oluşturulan komplekslerin bariyerlerinin birbirlerine oldukça yakın olduğu saptanmıştır. Tüm bunların yanı sıra fonksiyonellerin çalışma mekanizmaları tam olarak bilinmemektedir. Fonksiyoneller bazen yük ve spine göre öngörülemez hatalar verilebilmektedirler ve bunun bir sonucu olarak hangi teorik seviyenin hangi spin yüzeyindeki bariyerin doğru ya da yanlış olduğu bilinmemektedir.

KAYNAKLAR

1. Yvon-Durocher, G., Allen, A. P., Bastviken, D., Conrad, R., Gudas, C., St-Pierre, A., Thanh-Duc, N. and del Giorgio, P. A. (2014). Methane fluxes show consistent temperature dependence across microbial to ecosystem scales. *Nature*, 507(7493), 488-491.
2. Shu, L., Nesheim, J. C., Kauffmann, K., Münck, E., Lipscomb, J. D. and Que, L. (1997). An Fe₂IVO₂ diamond core structure for the key intermediate Q of methane monooxygenase. *Science*, 275(5299), 515-518.
3. Lee, S.-K., Nesheim, J. C. and Lipscomb, J. D. (1993). Transient intermediates of the methane monooxygenase catalytic cycle. *Journal of Biological Chemistry*, 268(29), 21569-21577.
4. Lipscomb, J. D. (1994). Biochemistry of the soluble methane monooxygenase. *Annual Reviews in Microbiology*, 48(1), 371-399.
5. Arakawa, H., Aresta, M., Armor, J. N., Barteau, M. A., Beckman, E. J., Bell, A. T., Bercaw, J. E., Creutz, C., Dinjus, E., Dixon, D. A., Domen, K., DuBois, D. L., Eckert, J., Fujita, E., Gibson, D. H., Goddard, W. A., Goodman, D. W., Keller, J., Kubas, G. J., Kung, H. H., Lyons, J. E., Manzer, L. E., Marks, T. J., Morokuma, K., Nicholas, K. M., Periana, R., Que, L., Rostrup-Nielsen, J., Sachtler, W. M. H., Schmidt, L. D., Sen, A., Somorjai, G. A., Stair, P. C., Stults, B. R. and Tumas, W. (2001). Catalysis research of relevance to carbon management: Progress, challenges, and opportunities. *Chemical Reviews*, 101(4), 953-996.
6. Labinger, J. A. and Bercaw, J. E. (2002). Understanding and exploiting C-H bond activation. *Nature*, 417(6888), 507-514.
7. Lersch, M. and Tilset, M. (2005). Mechanistic aspects of C-H activation by Pt complexes. *Chemical Reviews*, 105(6), 2471-2526.
8. Olatunji-Ojo, O. A. and Cundari, T. R. (2013). C-H activation by multiply bonded complexes with potentially noninnocent ligands: A computational study. *Inorganic Chemistry*, 52(14), 8106-8113.
9. Tinnermann, H., Wille, C. and Alcarazo, M., (2014). Synthesis, structure, and applications of pyridinophosphines. *Angewandte Chemie International Edition*, 53(33), 8732-8736.
10. Alcarazo, M. (2016). Synthesis, structure, and applications of α -cationic phosphines. *Accounts of Chemical Research*, 49(9), 1797-1805.
11. Carreras, J., Gopakumar, G., Gu, L., Gimeno, A., Linowski, P., Petušková, J., Thiel, W. and Alcarazo, M. (2013). Polycationic ligands in gold catalysis: Synthesis and applications of extremely π -Acidic Catalysts. *Journal of the American Chemical Society*, 135(50), 18815-18823.
12. Alcarazo, M. (2014). α -Cationic phosphines: Synthesis and applications. *Chemistry – A European Journal*, 20(26), 7868-7877.

13. Chen, H., Jia, L., Yao, J., Hu, J., Chen, K., Chen, Z. and Li, H. (2015). The relationships of catalytic activity of metal Schiff base catalysts and the Hammett constants of their anion–cationic substituents on ligand. *Journal of Physical Organic Chemistry*, 28(8), 570-574.
14. Ben-David, H., Iron, M. A. and Neumann, R. (2013). Platinum complexes of cationic ligands for the aerobic oxidation of “inert” perfluoro-substituted alcohols. *Chemical Communications*, 49(17), 1720-1722.
15. Emmert, M. H., Gary, J. B., Villalobos, J. M. and Sanford, M. S. (2010). Platinum and palladium complexes containing cationic ligands as catalysts for arene H/D exchange and oxidation. *Angewandte Chemie International Edition*, 49(34), 5884-5886.
16. Villalobos, J. M., Hickman, A. J. and Sanford, M. S. (2010). Platinum(II) complexes containing quaternized nitrogen ligands: Synthesis, stability, and evaluation as catalysts for methane and benzene H/D exchange. *Organometallics*, 29(1), 257-262.
17. Schlangen, M. and Schwarz, H. (2007). Thermal activation of methane by group 10 metal hydrides MH⁺: The same and not the same. *Angewandte Chemie International Edition*, 46(29), 5614-5617.
18. Dede, Y., Zhang, X., Schlangen, M., Schwarz, H. and Baik, M.-H. (2009). A redox non-innocent ligand controls the life time of a reactive quartet excited state - an MCSCF study of [Ni(H)(OH)](+). *Journal of the American Chemical Society*, 131(35), 12634-12642.
19. Schlangen, M. and Schwarz, H. (2008). Ligand effects on the mechanisms of thermal bond activation in the gas-phase reactions NiX⁺/CH₄→Ni(CH₃)⁺/HX (X=H, CH₃, OH, F). short communication. *Helvetica Chimica Acta*, 91(12), 2203-2210.
20. Wheeler, O. W., Salem, M., Gao, A., Bakker, J. M. and Armentrout, P. B. (2016). Activation of C–H bonds in Pt⁺ + x CH₄ reactions, where x = 1–4: Identification of the platinum dimethyl cation. *The Journal of Physical Chemistry A*, 120(31), 6216-6227.
21. Cox, R. M., Armentrout, P. B. and de Jong, W. A., (2015). Activation of CH₄ by Th⁺ as studied by guided ion beam mass spectrometry and quantum chemistry. *Inorganic Chemistry*, 54(7), 3584-3599.
22. Kumar, N. Y. P., Bechtoldt, A., Raghuvanshi, K. and Ackermann, L. (2016). Ruthenium(II)-Catalyzed decarboxylative C–H Activation: Versatile routes to meta-alkenylated arenes. *Angewandte Chemie International Edition*, 55(24), 6929-6932.
23. Sugita, N., Hayashi, S., Shibata, M., Endo, T., Noji, M., Takatori, K. and Takanami, T. (2016). Regioselective β-silylation of porphyrins via iridium-catalyzed C–H bond activation. *Organic & Biomolecular Chemistry*, 14(43), 10189-10192.
24. Li, B. and Wang, B. (2016). *Ruthenium-Catalyzed Synthesis of Heterocycles via C-H Bond Activation*, in *Transition Metal-Catalyzed Heterocycle Synthesis via C-H Activation*. Darmstadt: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 187-232.
25. Alvarez, S. and Cirera, J. (2006). How high the spin? Allowed and forbidden spin states in transition-metal chemistry. *Angewandte Chemie International Edition*, 45(19), 3012-3020.

26. Chaudhuri, P., Verani, C. N., Bill, E., Bothe, E., Weyhermüller, T. and Wieghardt, K., (2001). Electronic Structure of Bis(o-iminobenzosemiquinonato)metal Complexes (Cu, Ni, Pd). The Art of Establishing Physical Oxidation States in Transition-Metal Complexes Containing Radical Ligands. *Journal of the American Chemical Society*, 123(10), 2213-2223.
27. Schröder, D. and Schwarz, H., (1995). C-H and C-C bond activation by bare transition-metal oxide cations in the gas phase. *Angewandte Chemie International Edition in English*, 34(18), 1973-1995.
28. Arndtsen, B. A., Bergman, R. G., Mobley, T. A. and Peterson, T. H. (1995). Selective intermolecular carbon-hydrogen bond activation by synthetic metal complexes in homogeneous solution. *Accounts of Chemical Research*, 28(3), 154-162.
29. Shu, L., Nesheim, J. C., Kauffmann, K., Munck, E., Lipscomb, J. D. and Que, L. Jr. (1997). An Fe₂IVO₂ diamond core structure for the key intermediate Q of methane monooxygenase. *Science*, 275(5299), 515-8.
30. Lee, S. K., Nesheim, J. C. and Lipscomb, J. D. (1993). Transient intermediates of the methane monooxygenase catalytic cycle. *Journal of Biological Chemistry*, 268(29), 21569-77.
31. Lipscomb, J. D. (1994). Biochemistry of the soluble methane monooxygenase. *Annual Review of Microbiology*, 48(1), 371-399.
32. Schwarz, H., González-Navarrete, P., Li, J., Schlangen, M., Sun, X., Weiske, T. and Zhou, S. (2017). Unexpected mechanistic variants in the thermal gas-phase activation of methane. *Organometallics*, 36(1), 8-17.
33. Horn, R. and Schlögl, R. (2015). Methane activation by heterogeneous catalysis. *Catalysis Letters*, 145(1), 23-39.
34. Sono, M., Roach, M. P., Coulter, E. D. and Dawson, J. H. (1996). Heme-containing oxygenases. *Chemical Reviews*, 96(7), 2841-2888.
35. Dalton, H., (2005). The Leeuwenhoek Lecture 2000 the natural and unnatural history of methane-oxidizing bacteria. *Philosophical transactions of the Royal Society of London. Series B, Biological sciences*, 360(1458), 1207-1222.
36. Khalimonchuk, O. and Rödel, G. (2005). Biogenesis of cytochrome c oxidase. *Mitochondrion*, 5(6), 363-388.
37. Abu-Omar, M. M., Loaiza, A. and Hontzeas, N. (2005). Reaction mechanisms of mononuclear non-heme iron oxygenases. *Chemical Reviews*, 105(6), 2227-2252.
38. Costas, M., Mehn, M. P., Jensen, M. P. and Que, L. (2004). Dioxygen activation at mononuclear nonheme iron active sites: Enzymes, models, and intermediates. *Chemical Reviews*, 104(2), 939-986.
39. Lange, S. J. and Que, L. (1998). Oxygen activating nonheme iron enzymes. *Current opinion in chemical biology*, 2(2), 159-172.

40. Milani, B., Licini, G., Clot, E. and Albrecht, M. (2016). Small molecule activation. *Dalton Transactions*, 45(37), 14419-14420.
41. Annibale, V. T. and Song, D. (2013). Multidentate actor ligands as versatile platforms for small molecule activation and catalysis. *RSC Advances*, 3(29), 11432-11449.
42. Yadav, S., Saha, S. and Sen, S. S. (2016). Compounds with low-valent p-block elements for small molecule activation and catalysis. *ChemCatChem*, 8(3), 486-501.
43. Meyer, F. and Tolman, W. B. (2015). Forums on small-molecule activation: from biological principles to energy applications. *Inorganic Chemistry*, 54(11), 5039-5039.
44. Crabtree, R. H. (2001). Alkane C–H activation and functionalization with homogeneous transition metal catalysts: a century of progress—a new millennium in prospect. *Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions*, 17, 2437-2450.
45. M. Valentine, A. and J. Lippard, S. (1997). Principles of small molecule activation by metalloenzymes as exemplified by the soluble methane monooxygenase from *Methylococcus capsulatus* (Bath). *Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions*, 21, 3925-3932.
46. Power, P. P. (2010). Main-group elements as transition metals. *Nature*, 463 171.
47. Theopold, K. H. (2007). Dioxygen activation by organometallics of early transition metals trans. In Meyer, F. and Limberg, *Organometallic oxidation catalysis Berlin, Heidelberg*: Springer Berlin Heidelberg, 119-217.
48. Berglund, D. and Meek, D. W. (1969). Transition metal complexes of a cationic phosphine ligand. *Inorganic Chemistry*, 8(12), 2602-2607.
49. Mercer, D. D. J. W. and Jenkins, H. A. (2007). Cationic ligands for Ag(I): Organometallic polymers versus unimolecular complexes. *Inorganica Chimica Acta*, 360(9), 3091-3098.
50. Albayer, M. and Dutton, J. L. (2019). Synthesis of cationic gold(III) complexes using iodine(III). *Journal of Coordination Chemistry*, 72(8), 1307-1321.
51. Meyers, R. A. (2002). *Encyclopedia of physical science and technology*. Academic Press: San Diego, 119-217.
52. Born, M. and Oppenheimer, R., (1927). Zur quantentheorie der molekeln. *Annalen der Physik*, 389(20), 457-484.
53. Hehre, W. J., Stewart, R. F. and Pople, J. A., (1969). Self-consistent molecular-orbital methods. I. Use of gaussian expansions of slater-Type atomic orbitals. *The Journal of Chemical Physics*, 51(6), 2657-2664.
54. Frisch, M. J., Pople, J. A. and Binkley, J. S., (1984). Self-consistent molecular orbital methods 25. Supplementary functions for Gaussian basis sets. *The Journal of Chemical Physics*, 80(7), 3265-3269.

55. Dunning, T. H. (1989). Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. I. The atoms boron through neon and hydrogen. *The Journal of Chemical Physics*, 90(2), 1007-1023.
56. Kohn, W., Becke, A. D. and Parr, R. G. (1996). Density functional theory of electronic structure. *The Journal of Physical Chemistry*, 100(31), 12974-12980.
57. Thomas, L. H. (2008). The calculation of atomic fields. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 23(5), 542-548.
58. Kohn, W. and Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 140(4A), A1133-A1138.
59. Perdew, J. P., Chevary, J. A., Vosko, S. H., Jackson, K. A., Pederson, M. R., Singh, D. J. and Fiolhais, C. (1992). Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation. *Physical Review B*, 46(11), 6671-6687.
60. Becke, A. D. (1993). Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. *The Journal of Chemical Physics*, 98(7), 5648-5652.
61. Becke, A. D. (1988). Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior. *Physical Review A*, 38(6), 3098-3100.
62. Lee, C., Yang, W. and Parr, R. G. (1988). Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Physical Review B*, 37(2), 785-789.
63. Hohenberg, P. and Kohn, W. (1964). Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, 136(3B), B864-B871.
64. Hertwig, R. H. and Koch, W. (1997). On the parameterization of the local correlation functional. What is Becke-3-LYP? *Chemical Physics Letters*, 268(5), 345-351.
65. Stephens, P. J., Devlin, F. J., Chabalowski, C. F. and Frisch, M. J. (1994). Ab initio calculation of vibrational absorption and circular dichroism spectra using density functional force fields. *The Journal of Physical Chemistry*, 98(45), 11623-11627.
66. Vosko, S. H., Wilk, L. and Nusair, M. (1980). Accurate spin-dependent electron liquid correlation energies for local spin density calculations: a critical analysis. *Canadian Journal of Physics*, 58(8), 1200-1211.
67. Zhao, Y. and Truhlar, D. G. (2008). The M06 suite of density functionals for main group thermochemistry, thermochemical kinetics, noncovalent interactions, excited states, and transition elements: two new functionals and systematic testing of four M06-class functionals and 12 other functionals. *Theoretical Chemistry Accounts*, 120(1), 215-241.
68. Chai, J.-D. and Head-Gordon, M. (2008). Long-range corrected hybrid density functionals with damped atom-atom dispersion corrections. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 10(44), 6615-6620.

69. Hay, P. J. and Wadt, W. R. (1985). Ab initio effective core potentials for molecular calculations. Potentials for K to Au including the outermost core orbitals. *The Journal of Chemical Physics*, 82(1), 299-310.
70. Kahn, L. R., Hay, P. J. and Cowan, R. D. (1978). Relativistic effects in abinitio effective core potentials for molecular calculations. Applications to the uranium atom. *The Journal of Chemical Physics*, 68(5), 2386-2397.
71. McMurchie, L. E. and Davidson, E. R. (1981). Calculation of integrals over ab initio pseudopotentials. *Journal of Computational Physics*, 44(2), 289-301.
72. Shepard, R., Shavitt, I., Pitzer, R. M., Comeau, D. C., Pepper, M., Lischka, H., Szalay, P. G., Ahlrichs, R., Brown, F. B. and Zhao, J. G. (1988). A progress report on the status of the COLUMBUS MRCI program system. *International Journal of Quantum Chemistry*, 34(22), 149-165.
73. Grimme, S. (2011). Density functional theory with London dispersion corrections. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 1(2), 211-228.
74. Besler, B. H., Merz Jr, K. M. and Kollman, P. A. (1990). Atomic charges derived from semiempirical methods. *Journal of Computational Chemistry*, 11(4), 431-439.
75. Singh, U. C. and Kollman, P. A., (1984). An approach to computing electrostatic charges for molecules. *Journal of Computational Chemistry*, 5(2), 129-145.
76. Grimme, S., Antony, J., Ehrlich, S. and Krieg, H. (2010). A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu. *The Journal of Chemical Physics*, 132(15), 154104.
77. Adamson, A. W. (1963). Advanced inorganic chemistry. *Inorganic Chemistry*, 2(3), 665-665.
78. Frisch, M. J., Trucks, G., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., Cheeseman, J., Scalmani, G., Barone, V., Mennucci, B., Petersson, G. A., Nakatsuji, H., Caricato, M., Li, X., Hratchian, H. P., Izmaylov, A. F., Bloino, J., Zheng, G., Sonnenberg, J., Hada, M. and Fox, D. (2009). *Gaussian 09 Revision A.1*. Gaussian Inc. Wallingford, 32, 5648-5652.



EK-1. LK1 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 1.1. LK1 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-0,005	2,048	2,076	3,787	-0,011	0,032	0,856	0,856	-0,008	-0,001	1,137	1,154
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,013	2,060	2,053	3,815	0,005	0,033	0,869	0,849	-0,011	0,004	1,132	1,157
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-0,010	2,054	2,096	3,797	-0,010	0,034	0,916	0,901	0,012	-0,003	1,077	1,092
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	3,785	3,799	3,825	0,000	-0,792	0,072	0,816	0,000	-1,157	-0,060	1,171
(U)M06/ cc-pVTZ	-0,023	2,139	2,850	3,808	0,003	0,063	0,437	0,825	-0,003	-0,055	0,764	1,160
(U)M06/ LANL2DZ	-0,003	2,276	3,885	3,850	0,002	0,050	0,066	0,879	-0,006	-0,192	-0,189	1,075
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,000	0,979	2,057	3,790	0,000	0,282	0,843	0,832	0,000	0,739	1,153	1,168
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	0,000	0,296	2,036	3,784	0,000	0,684	0,858	0,846	0,000	1,043	1,143	1,157
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,000	*	2,058	3,793	0,000	*	0,919	0,891	0,000	*	1,076	1,110

1 nolu yapı *:yakınsamadı

Çizelge 1.2. LK1 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	1	3	5	1	3	5	1	3	5
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,000	0,000	0,000	0,000	0,342	0,585	0,000	0,595	0,375
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,048	2,251	3,233	0,004	-0,068	0,576	-0,021	0,000	0,388
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,039	1,097	3,214	0,005	0,380	0,600	-0,010	0,564	0,389
(U)M06/LANL2DZ	0,000	1,046	3,238	0,000	0,435	0,549	0,000	0,585	0,395
(U)M06/cc-pVTZ	0,014	1,953	3,246	-0,002	0,031	0,538	-0,008	0,164	0,421
(U)M06/LANL2DZ	0,022	1,883	3,204	-0,001	0,132	0,577	-0,008	0,211	0,428
(U) ω B97XD/LANL2DZ	-1,203	1,080	*	0,541	0,351	*	0,601	0,611	*
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	0,001	1,051	*	0,002	0,371	*	-0,002	0,603	*
(U) ω B97XD/LANL2DZ	-0,054	1,074	*	-0,030	0,419	*	0,030	0,556	*

TS1/2 *:yakınsamadı

EK-1. (devam) LK1 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 1.3. LK1 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,840	1,101	3,233	3,965	-0,515	0,342	0,585	0,650	-0,215	0,595	0,375	0,332
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,048	2,251	3,233	3,981	0,004	-0,068	0,576	0,634	-0,021	0,000	0,388	0,312
(U)B3LYP/ LANL2DZ	*	3,103	3,552	3,950	*	-0,574	0,575	0,649	*	-0,343	0,224	0,310
(U)M06/ LANL2DZ	-0,544	3,467	3,660	4,103	0,296	-0,623	0,514	0,575	0,098	-0,363	0,144	0,181
(U)M06/ cc-pVTZ	0,525	3,429	3,766	4,179	-0,258	-0,615	0,477	0,535	-0,097	-0,361	0,120	0,165
(U)M06/ LANL2DZ	0,451	3,460	3,744	4,115	-0,229	-0,645	0,450	0,508	-0,061	-0,337	0,150	0,126
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,000	3,465	3,479	3,943	0,000	-0,615	0,675	0,683	0,000	-0,371	0,332	0,358
(U)ωB97XD/ cc-pVTZ	0,000	1,562	3,478	3,912	0,000	0,622	0,675	0,681	0,000	0,359	0,367	0,350
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,000	1,577	3,532	3,928	0,000	0,649	0,673	0,689	0,000	0,338	0,299	0,322

2 nolu yapı *:yakınsamadı

EK-1. (devam) LK1 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 1.4. LK1 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Ni}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-0,018	0,926	1,705	1,716	-0,005	0,367	0,844	0,850	0,002	0,641	1,159	1,154
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	*	0,095	1,718	1,671	*	0,274	0,857	0,778	*	0,607	1,152	0,844
(U)B3LYP/ LANL2DZ	*	0,048	1,704	1,765	*	0,763	0,896	0,756	*	1,064	1,106	0,797
(U)M06/ LANL2DZ	0,036	-0,037	1,683	1,702	-0,021	0,858	0,825	0,830	0,018	1,132	1,173	1,167
(U)M06/ cc-pVTZ	0,052	0,006	1,736	1,787	-0,009	0,861	0,829	0,832	0,012	1,128	1,168	1,161
(U)M06/ LANL2DZ	0,041	0,004	1,682	1,696	-0,030	0,941	0,895	0,902	0,040	1,050	1,099	1,093
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,017	0,024	1,734	1,740	-0,006	0,808	0,831	0,837	0,003	1,168	1,172	1,167
(U)ωB97XD/ cc-pVTZ	0,000	0,012	1,736	1,748	0,001	0,808	0,845	0,851	-0,001	1,157	1,162	1,157
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,000	0,023	1,738	1,742	0,000	0,867	0,902	0,908	0,000	1,106	1,100	1,096

1 nolu yapı *:yakınsamadı

Çizelge 1.5. LK1 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Ni}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/LANL2DZ	-1,234	1,211	1,821	1,824	0,590	0,713	0,715	0,729	0,366	0,359	0,357	0,344
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	-1,227	1,201	1,801	1,796	0,589	0,712	0,713	0,725	0,361	0,354	0,352	0,341
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-1,257	1,238	1,783	1,795	0,619	0,723	0,721	0,732	0,343	0,337	0,338	0,329
(U)M06/LANL2DZ	0,000	1,123	1,822	1,826	0,000	0,746	0,743	0,766	0,000	0,334	0,341	0,320
(U)M06/cc-pVTZ	0,000	1,135	1,822	1,843	0,000	0,736	0,736	0,755	0,000	0,333	0,337	0,321
(U)M06/LANL2DZ	0,000	1,145	1,779	1,792	0,000	0,748	0,746	0,764	0,000	0,317	0,324	0,311
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,000	1,365	1,849	1,842	0,000	0,668	0,674	0,678	0,000	0,390	0,393	0,391
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,000	1,352	1,820	1,824	0,000	0,673	0,681	0,685	0,000	0,380	0,382	0,379
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,000	1,387	1,832	1,824	0,000	0,695	0,700	0,703	0,000	0,351	0,355	0,355

2 nolu yapı

EK-1. (devam) LK1 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 1.6. LK1 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Co}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,025	1,069	2,742	0,047	0,857	0,839	0,000	1,140	1,155
(U)B3LYP/cc-pVTZ	*	1,050	*	*	0,869	*	*	1,136	*
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,068	1,067	*	-0,050	0,915	*	0,045	1,082	*
(U)M06/LANL2DZ	-1,062	1,101	2,747	0,828	0,832	0,813	1,127	1,157	1,177
(U)M06/cc-pVTZ	1,054	1,104	2,732	-0,038	0,835	0,823	0,047	1,154	1,175
(U)M06/LANL2DZ	0,132	1,099	2,780	0,349	0,905	0,885	0,548	1,076	1,098
(U)ωB97XD/LANL2DZ	-1,038	1,058	2,794	0,827	0,843	0,826	1,143	1,155	1,179
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,056	1,024	2,766	0,353	0,856	0,842	0,596	1,148	1,160
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,057	1,054	2,780	0,378	0,918	0,910	0,575	1,080	1,090

1 nolu yapı *:yakınsamadı

Çizelge 1.7. LK1 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Co}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,516	2,312	2,887	0,447	0,682	0,683	0,209	0,358	0,369
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,528	2,319	2,950	0,419	0,681	0,675	0,184	0,352	0,358
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,568	2,394	2,872	0,405	0,689	0,692	0,161	0,322	0,341
(U)M06/LANL2DZ	0,928	2,332	2,868	0,375	0,626	0,693	0,127	0,240	0,329
(U)M06/cc-pVTZ	0,881	2,397	2,892	0,362	0,627	0,690	0,121	0,245	0,326
(U)M06/LANL2DZ	1,034	2,405	2,860	0,319	0,580	0,676	0,083	0,195	0,292
(U)ωB97XD/LANL2DZ	-0,680	2,419	2,921	0,670	0,681	0,709	0,330	0,359	0,339
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	1,407	2,424	2,953	-0,637	0,681	0,704	-0,306	0,354	0,335
(U)ωB97XD/LANL2DZ	2,485	2,468	2,905	-0,633	0,698	0,706	-0,334	0,330	0,331

2 nolu yapı

EK-1. (devam) LK1 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 1.8. LK1 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	3,024	3,016	4,824	-0,820	0,033	0,040	-1,134	0,013	0,005
(U)B3LYP/cc-pVTZ	2,998	4,788	4,829	-0,825	-0,823	0,037	-1,124	-1,123	0,012
(U)B3LYP/LANL2DZ	3,023	3,010	3,962	-0,863	0,021	0,319	-1,088	0,043	0,760
(U)M06/LANL2DZ	3,091	4,187	4,811	-0,808	-0,785	0,012	-1,134	-1,145	0,068
(U)M06/cc-pVTZ	3,074	4,823	4,842	-0,812	-0,790	0,004	-1,125	-1,136	0,068
(U)M06/LANL2DZ	3,075	3,844	4,758	-0,859	-0,084	0,014	-1,060	-0,466	0,147
(U) ω B97XD/LANL2DZ	3,007	1,022	3,058	-0,813	0,806	0,825	-1,150	1,154	1,163
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	-0,980	1,010	3,007	0,824	0,816	0,841	1,152	1,142	1,146
(U) ω B97XD/LANL2DZ	1,049	1,042	3,085	-0,020	0,872	0,888	-0,033	1,077	1,057

1 nolu yapı

Çizelge 1.9. LK1 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,215	2,146	4,395	-0,518	0,355	0,534	-0,583	0,592	0,322
(U)B3LYP/cc-pVTZ	2,186	2,212	4,379	-0,493	0,421	0,539	-0,581	0,545	0,347
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,199	2,136	4,363	-0,532	0,409	0,559	-0,550	0,553	0,347
(U)M06/LANL2DZ	2,471	4,470	4,357	-0,586	-0,565	0,510	-0,597	-0,629	0,375
(U)M06/cc-pVTZ	2,311	4,548	4,432	-0,545	-0,575	0,495	-0,577	-0,603	0,392
(U)M06/LANL2DZ	2,425	2,448	4,310	-0,591	0,462	0,551	-0,531	0,454	0,406
(U) ω B97XD/LANL2DZ	2,189	2,112	*	-0,495	0,360	*	-0,693	0,607	*
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	1,010	2,085	*	-0,006	0,380	*	0,052	0,595	*
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,997	2,150	*	-0,006	0,468	*	0,058	0,058	*

TS1/2 *:yakınsamadı

EK-1. (devam) LK1 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 1.10. LK1 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,729	4,279	4,330	-0,428	-0,577	0,678	-0,094	-0,349	0,369
(U)B3LYP/cc-pVTZ	1,575	2,956	4,325	-0,299	0,241	0,675	-0,090	0,169	0,366
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,621	4,277	4,351	-0,344	-0,588	0,695	-0,077	-0,307	0,343
(U)M06/LANL2DZ	2,168	4,323	4,394	-0,454	-0,567	0,694	-0,182	-0,318	0,359
(U)M06/cc-pVTZ	2,042	4,372	4,421	-0,454	-0,580	0,682	-0,164	-0,311	0,361
(U)M06/LANL2DZ	1,915	4,313	4,408	-0,403	-0,566	0,710	-0,109	-0,282	0,336
(U) ω B97XD/LANL2DZ	2,230	4,426	4,407	-0,627	-0,612	0,678	-0,358	-0,369	0,369
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	1,074	2,554	4,348	0,029	0,601	0,676	0,046	0,344	0,367
(U) ω B97XD/LANL2DZ	1,126	2,630	4,430	0,061	0,623	0,696	0,050	0,313	0,345

2 nolu yapı

Çizelge 1.11. LK1 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/LANL2DZ	-1,925	4,009	3,992	4,061	0,761	-0,817	0,020	0,857	1,128	-1,119	0,057	1,142
(U)B3LYP/cc-pVTZ	*	3,990	3,973	4,053	*	-0,820	0,020	0,869	*	-1,103	0,047	1,136
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,169	3,996	3,971	4,056	-0,010	-0,857	0,023	0,923	-0,154	-1,065	0,077	1,078
(U)M06/LANL2DZ	0,000	4,058	4,010	4,124	0,000	-0,794	-0,035	0,832	0,000	-1,103	0,193	1,165
(U)M06/cc-pVTZ	0,000	1,267	4,070	4,174	0,000	0,244	-0,038	0,837	0,000	0,610	0,208	1,160
(U)M06/LANL2DZ	0,000	3,983	3,879	4,103	0,000	-0,821	0,004	0,912	0,000	-1,003	0,292	1,088
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,000	3,999	4,003	4,018	0,000	-0,821	-0,004	0,844	0,000	-1,146	0,023	1,159
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	-0,005	2,036	2,018	3,971	0,002	-0,016	0,830	0,858	0,003	-0,041	1,124	1,151
(U) ω B97XD/LANL2DZ	-0,001	1,039	2,086	4,007	0,000	0,365	0,875	0,926	0,000	0,616	1,033	1,079

1 *:yakınsamadı

EK-1. (devam) LK1 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 1.12. LK1 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-1,925	4,009	3,992	4,061	0,761	-0,817	0,020	0,857	1,128	-1,119	0,057	1,142
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	*	3,990	3,973	4,053	*	-0,820	0,020	0,869	*	-1,103	0,047	1,136
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,169	3,996	3,971	4,056	-0,010	-0,857	0,023	0,923	-0,154	-1,065	0,077	1,078
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	4,058	4,010	4,124	0,000	-0,794	-0,035	0,832	0,000	-1,103	0,193	1,165
(U)M06/ cc-pVTZ	0,000	1,267	4,070	4,174	0,000	0,244	-0,038	0,837	0,000	0,610	0,208	1,160
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	3,983	3,879	4,103	0,000	-0,821	0,004	0,912	0,000	-1,003	0,292	1,088
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,000	3,999	4,003	4,018	0,000	-0,821	-0,004	0,844	0,000	-1,146	0,023	1,159
(U)ωB97XD/ cc-pVTZ	-0,005	2,036	2,018	3,971	0,002	-0,016	0,830	0,858	0,003	-0,041	1,124	1,151
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	-0,001	1,039	2,086	4,007	0,000	0,365	0,875	0,926	0,000	0,616	1,033	1,079

TS1/2 *.yakınsamadı

EK-1. (devam) LK1 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 1.13. LK1 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-0,100	2,909	3,350	4,237	0,029	-0,432	0,234	0,691	0,072	-0,147	0,120	0,343
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	-0,02	2,782	3,297	4,207	0,006	-0,380	0,223	0,691	0,029	-0,106	0,110	0,341
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,002	2,795	3,320	4,175	0,014	-0,352	0,202	0,709	-0,009	-0,082	0,086	0,320
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	2,966	4,059	4,039	0,000	-0,376	-0,015	0,713	0,000	-0,081	0,022	0,325
(U)M06/ cc-pVTZ	0,000	3,014	4,060	4,343	0,000	-0,411	-0,015	0,703	0,000	-0,084	0,025	0,328
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	2,895	4,044	4,270	0,000	-0,327	-0,011	0,725	0,000	-0,044	0,020	0,308
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,000	3,321	3,431	4,191	0,000	-0,596	0,621	0,697	0,000	-0,299	0,388	0,341
(U)ωB97XD/ cc-pVTZ	-0,021	3,166	3,299	4,119	0,002	-0,579	0,622	0,698	0,008	-0,271	0,387	0,340
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	-0,019	3,279	3,407	4,142	0,005	-0,589	0,639	0,714	0,006	-0,256	0,371	0,320

2 nolu yapı

EK-2. LK2 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 2.1. LK2 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,010	0,032	2,076	3,787	0,008	0,817	0,860	0,846	-0,009	1,137	1,134	1,150
(U)B3LYP/ LANL2DZ		2,054	2,077	3,796		0,034	0,918	0,903		-0,007	1,076	1,090
(U)M06/ LANL2DZ	2,043	3,788	3,799	3,822	-0,819	-0,802	0,064	0,823	-1,132	-1,149	-0,052	1,164
(U)M06/ cc-pVTZ	-0,012	2,127	2,128	3,809	-0,009	0,062	0,799	0,831	0,005	-0,050	1,138	1,154
(U)M06/ LANL2DZ	0,016	2,240	2,933	3,845	0,003	0,051	0,517	0,890	-0,027	-0,162	0,751	1,074
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,000	0,983	2,058	3,789	0,000	0,281	0,847	0,836	0,000	0,739	1,150	1,165
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	0,000	0,218	*	3,783	0,000	0,648	*	0,849	0,000	1,118	*	1,154
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	-0,005	1,132	*	3,814	0,026	0,301	*	0,912	-0,009	0,645	*	1,084

1 nolu yapı *:yakınsamadı

Çizelge 2.2. LK2 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	1,101	3,156	*	0,000	0,355	0,594	*	0,000	0,589	0,414	*
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,000	1,101	3,160	*	0,000	0,355	0,581	*	0,000	0,589	0,421	*
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-0,046	1,099	3,150	*	-0,003	0,388	0,607	*	0,008	0,560	0,415	*
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	1,045	3,207	3,994	0,000	0,434	0,552	0,678	0,000	0,583	0,415	0,588
(U)M06/ cc-pVTZ	0,011	1,952	3,209	4,141	-0,002	0,034	0,542	0,638	-0,006	0,155	0,439	0,563
(U)M06/ LANL2DZ	0,019	3,108	3,185	4,067	-0,002	-0,371	0,577	0,669	-0,008	-0,583	0,437	0,528

TS1/2 *:yakınsamadı

EK-2. (devam) LK2 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 2.3. LK2 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	1	5	7	1	5	7	1	5	7
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,168	3,511	4,047	-0,649	0,582	0,721	-0,335	0,238	0,346
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,000	3,608	4,127	-0,004	0,539	0,715	0,000	0,207	0,346
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,000	3,537	4,047	-0,005	0,577	0,725	0,000	0,223	0,346
(U)M06/LANL2DZ	0,493	3,651	4,099	-0,258	0,507	0,566	-0,084	0,139	0,169
(U)M06/cc-pVTZ	0,465	3,740	4,171	-0,224	0,439	0,523	-0,083	0,116	0,152
(U)M06/LANL2DZ	0,406	3,729	4,110	-0,196	0,452	0,508	-0,052	0,106	0,125

2 nolu yapı

Çizelge 2.4. LK2 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Ni}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,018	-0,003	1,698	1,691	0,002	0,884	0,848	0,855	-0,001	1,114	1,155	1,147
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,001	-0,004	1,710	1,715	0,003	0,889	0,861	0,868	-0,002	1,109	1,148	1,141
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,000	-0,004	1,711	1,702	-0,001	0,967	0,915	0,921	0,000	1,032	1,084	1,078
(U)M06/LANL2DZ	-1,634	-0,036	1,676	1,672	0,789	0,861	0,830	0,834	1,143	1,129	1,167	1,162
(U)M06/cc-pVTZ	-0,032	0,006	1,725	1,752	0,019	0,863	0,835	0,839	0,016	1,125	1,163	1,158
(U)M06/LANL2DZ	-0,038	0,005	1,680	1,674	0,015	0,939	0,897	0,900	0,004	1,050	1,097	1,093
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,001	-0,015	1,730	1,719	0,000	0,862	0,835	0,841	0,000	1,131	1,169	1,162
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,000	-0,018	1,731	1,734	0,000	0,867	0,848	0,854	0,000	1,125	1,159	1,153
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,000	-0,001	1,738	1,726	0,000	0,944	0,903	0,907	0,000	1,052	1,099	1,095

1 nolu yapı

EK-2. (devam) LK2 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 2.5. LK2 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Ni}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-1,226	1,203	1,811	1,800	0,593	0,715	0,716	0,728	0,364	0,356	0,354	0,339
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	1,216	1,190	1,790	1,780	-0,592	0,713	0,713	0,724	-0,359	0,352	0,348	0,336
(U)B3LYP/ LANL2DZ	1,249	1,228	1,780	1,775	-0,619	0,724	0,722	0,731	-0,344	0,337	0,338	0,327
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	1,111	1,808	1,798	0,000	0,745	0,742	0,743	0,000	0,333	0,338	0,332
(U)M06/ cc-pVTZ	0,000	1,119	1,803	1,833	0,000	0,736	0,735	0,736	0,000	0,331	0,335	0,330
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	1,134	1,772	1,764	0,000	0,748	0,746	0,745	0,000	0,318	0,325	0,319
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,000	3,461	3,477	3,941	0,000	-0,618	0,677	0,683	0,000	-0,368	0,329	0,356
(U)ωB97XD/ cc-pVTZ	-0,006	3,464	3,501	3,910	0,002	-0,616	0,667	0,680	0,004	-0,364	0,313	0,347
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	-0,451	1,629	3,528	3,928	0,214	0,637	0,674	0,688	0,081	0,347	0,298	0,323

2 nolu yapı

Çizelge 2.6. LK2 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Co}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,018	1,064	2,741	0,048	0,861	0,850	0,001	1,136	1,149
(U)B3LYP/cc-pVTZ	-1,004	1,044	2,755	0,829	0,872	0,858	1,118	1,132	1,144
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,006	1,061	2,791	0,040	0,933	0,917	0,020	1,062	1,076
(U)M06/LANL2DZ	1,026	1,093	2,762	0,050	0,833	0,823	0,009	1,154	1,168
(U)M06/cc-pVTZ	-0,999	1,091	2,726	0,811	0,836	0,833	1,116	1,152	1,166
(U)M06/LANL2DZ	0,146	1,092	2,796	0,332	0,903	0,892	0,551	1,078	1,093
(U)ωB97XD/LANL2DZ	1,026	1,055	2,769	0,039	0,847	0,832	-0,006	1,152	1,167
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,061	1,021	2,789	0,344	0,859	0,843	0,604	1,145	1,164
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,059	1,050	2,786	0,372	0,919	0,909	0,578	1,079	1,090

1 nolu yapı

EK-2. (devam) LK2 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 2.7. LK2 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Co}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,507	2,304	2,880	0,446	0,682	0,682	0,204	0,354	0,365
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,520	2,356	2,865	0,418	0,680	0,681	0,179	0,341	0,358
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,565	2,386	2,872	0,409	0,689	0,691	0,161	0,323	0,338
(U)M06/LANL2DZ	2,116	2,321	2,857	-0,540	0,619	0,686	-0,336	0,232	0,317
(U)M06/cc-pVTZ	2,148	2,367	2,868	-0,551	0,620	0,684	-0,333	0,238	0,316
(U)M06/LANL2DZ	2,141	2,388	2,852	-0,553	0,581	0,670	-0,317	0,195	0,287
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,712	2,416	2,939	0,603	0,684	0,727	0,291	0,356	0,330
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	0,850	2,416	2,876	0,100	0,684	0,723	0,030	0,351	0,329
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,020	2,454	2,923	0,610	0,694	0,729	0,521	0,338	0,317

2 nolu yapı

Çizelge 2.8. LK2 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	3,008	3,016	3,059	-0,825	0,032	0,856	-1,120	0,015	1,142
(U)B3LYP/cc-pVTZ	3,006	2,990	4,811	-0,826	0,031	0,018	-1,121	0,021	-0,002
(U)B3LYP/LANL2DZ	3,010	3,026	3,185	-0,877	0,022	0,899	-1,049	0,028	1,012
(U)M06/LANL2DZ	3,093	4,817	4,810	-0,815	-0,793	0,013	-1,126	-1,138	0,070
(U)M06/cc-pVTZ	3,074	4,823	3,576	-0,818	-0,797	0,595	-1,119	-1,130	0,926
(U)M06/LANL2DZ	3,076	4,802	4,761	-0,860	-0,841	0,015	-1,061	-1,059	0,146
(U) ω B97XD/LANL2DZ	3,007	1,024	3,029	-0,817	0,808	0,842	-1,146	1,152	1,160
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	1,041	*	2,979	0,016	*	0,857	-0,041	*	1,151
(U) ω B97XD/LANL2DZ	3,005	1,059	3,039	-0,877	0,877	0,921	-1,080	1,082	1,069

1 nolu yapı *:yakınsamadı

EK-2. (devam) LK2 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 2.9. LK2 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,726	4,246	4,323	-0,428	-0,565	0,681	-0,088	-0,337	0,365
(U)B3LYP/cc-pVTZ	1,630	2,560	4,314	-0,381	0,463	0,678	-0,063	0,257	0,363
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,642	4,243	4,345	-0,364	-0,570	0,697	-0,046	-0,297	0,342
(U)M06/LANL2DZ	2,136	4,318	4,391	-0,445	-0,568	0,696	-0,175	-0,315	0,355
(U)M06/cc-pVTZ	1,881	4,365	4,414	-0,428	-0,580	0,685	-0,113	-0,308	0,357
(U)M06/LANL2DZ	1,900	4,312	4,406	-0,406	-0,567	0,711	-0,103	-0,282	0,335
(U)ωB97XD/LANL2DZ	2,222	4,415	4,396	-0,620	-0,615	0,680	-0,352	-0,367	0,367
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	1,061	3,295	4,333	0,041	0,103	0,678	0,050	0,155	0,364
(U)ωB97XD/LANL2DZ	1,104	2,612	4,420	0,078	0,628	0,698	0,052	0,317	0,344

2 nolu yapı

Çizelge 2.10. LK2 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/LANL2DZ	-1,197	4,003	3,983	4,061	0,759	-0,816	0,019	0,860	1,121	-1,112	0,068	1,139
(U)B3LYP/cc-pVTZ	*	3,982	3,961	4,053	*	-0,818	0,020	0,873	*	-1,095	0,087	1,132
(U)B3LYP/LANL2DZ	*	1,039	2,863	4,044	*	0,374	0,504	0,940	*	0,592	0,704	1,061
(U)M06/LANL2DZ	0,005	4,057	3,993	4,126	-0,001	-0,796	-0,038	0,834	-0,003	-1,097	0,217	1,163
(U)M06/cc-pVTZ	0,000	4,113	4,054	4,185	0,000	-0,804	-0,039	0,837	0,000	-1,803	0,235	1,158
(U)M06/LANL2DZ	0,000	3,983	3,865	4,104	0,000	-0,821	0,005	0,910	0,000	-1,003	0,309	1,089
(U)ωB97XD/LANL2DZ	-1,963	3,994	2,068	4,018	0,791	-0,825	0,784	0,847	1,158	-1,137	1,141	1,156
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,000	3,945	2,047	3,971	0,000	-0,830	0,803	0,861	0,000	-1,122	0,144	1,148
(U)ωB97XD/LANL2DZ	-0,006	3,970	2,211	4,007	0,002	-0,082	0,797	0,925	0,003	-1,159	0,993	1,079

1 nolu yapı *:yakınsamadı

EK-2. (devam) LK2 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 2.11. LK2 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	1	3	5	1	3	5	1	3	5
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,000	3,196	3,165	0,000	-0,500	0,371	0,000	-0,558	0,594
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,000	1,188	3,161	0,000	0,371	0,387	0,000	0,521	0,585
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,000	3,168	3,151	0,000	-0,515	0,432	0,000	-0,503	0,549
(U)M06/LANL2DZ	0,000	3,377	3,333	0,000	-0,563	0,328	0,000	-0,548	0,602
(U)M06/cc-pVTZ	0,000	1,477	3,403	0,000	0,336	0,338	0,000	0,449	0,592
(U)M06/LANL2DZ	0,000	3,326	3,303	0,000	-0,566	0,402	0,000	-0,482	0,554
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,000	3,159	3,118	0,000	-0,484	0,371	0,000	-0,577	0,611
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	0,000	1,104	3,089	0,000	0,385	0,387	0,000	0,555	0,600
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,000	1,938	3,105	0,000	0,055	0,431	0,000	0,104	0,565

TS1/2

Çizelge 2.12. LK2 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,000	2,839	3,336	4,234	0,000	-0,398	0,233	0,693	0,000	-0,116	0,118	0,340
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,000	2,712	3,286	4,204	0,000	-0,344	0,222	0,693	0,000	-0,078	0,108	0,338
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,000	2,753	3,318	4,173	0,000	-0,334	0,197	0,710	0,000	-0,067	0,086	0,319
(U)M06/LANL2DZ	0,000	3,016	3,498	4,305	0,000	-0,386	0,066	0,712	0,000	-0,087	0,071	0,326
(U)M06/cc-pVTZ	0,000	3,063	3,542	4,344	0,000	-0,418	0,057	0,703	0,000	-0,090	0,064	0,329
(U)M06/LANL2DZ	0,000	3,063	3,470	4,269	0,000	-0,418	0,060	0,724	0,000	-0,090	0,056	0,310
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,000	3,298	3,278	4,194	0,000	-0,588	0,046	0,723	0,000	-0,290	0,048	0,311
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	0,000	3,140	3,185	4,119	0,000	-0,567	0,058	0,724	0,000	-0,258	0,046	0,312
(U) ω B97XD/LANL2DZ	-0,125	3,263	3,263	4,147	0,036	-0,528	0,047	0,724	0,047	-0,255	0,043	0,308

2 nolu yapı

EK-3. LK3 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 3.1. LK3 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-1,137	3,358	3,503	3,912	0,180	-0,608	0,575	0,452	0,116	-0,320	0,228	0,084
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	1,078	3,372	3,383	1,503	-0,168	-0,622	0,692	-0,714	-0,079	-0,321	0,304	-0,044
(U)B3LYP/ LANL2DZ	1,090	3,391	3,437	4,015	0,069	-0,637	0,674	0,340	-0,008	-0,326	0,286	0,054
(U)M06/ LANL2DZ	-0,593	3,269	3,636	0,624	0,334	-0,594	0,492	-0,263	0,100	-0,352	0,126	-0,280
(U)M06/ cc-pVTZ	1,027	3,286	3,754	4,184	-0,295	-0,601	0,427	0,507	-0,131	-0,348	0,107	0,139
(U)M06/ LANL2DZ	0,445	3,294	3,728	4,106	-0,274	-0,612	0,441	0,495	-0,060	-0,333	0,098	0,113
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	1,188	1,199	3,459	3,921	-0,663	0,568	0,673	0,707	-0,379	0,386	0,325	0,342
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	0,120	1,188	3,487	3,883	0,011	0,564	0,660	0,707	0,031	0,367	0,307	0,342
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	1,192	1,235	3,514	3,808	-0,680	0,587	0,667	0,156	-0,345	0,351	0,294	0,014

2 nolu yapı

EK-3. (devam) LK3 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 3.2. LK3 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Ni}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	-0,022	1,618	1,692	0,002	0,884	0,856	0,856	-0,001	1,113	1,138	1,146
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,005	-0,004	1,633	1,710	0,008	0,892	0,867	0,869	-0,005	1,107	1,134	1,140
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	-0,004	1,690	1,704	0,005	0,965	0,917	0,921	-0,002	1,033	1,074	1,078
(U)M06/ LANL2DZ	0,001	-0,042	1,592	1,666	0,010	0,871	0,839	0,835	-0,005	1,125	1,154	1,160
(U)M06/ cc-pVTZ	0,000	-0,011	1,656	1,729	0,001	0,874	0,845	0,840	0,000	1,122	1,153	1,156
(U)M06/ LANL2DZ	-0,001	-0,007	1,630	1,669	-0,005	0,952	0,902	0,900	0,001	1,045	1,089	1,093
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,000	1,679	1,709	1,721	0,000	0,066	0,840	0,843	0,000	-0,017	1,163	1,158
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	0,000	-0,005	1,711	1,733	0,000	0,825	0,853	0,858	0,000	1,129	1,153	1,140
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,000	-0,010	1,722	1,725	0,000	0,406	0,905	0,910	0,001	0,600	1,097	1,092

1 nolu yapı.

EK-3. (devam) LK3 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 3.3. LK3 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Ni}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	1,175	1,186	1,760	1,799	-0,484	0,662	0,343	0,716	-0,317	0,313	0,045	0,350
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	-1,161	1,180	1,806	1,790	0,494	0,665	0,309	0,714	0,313	0,312	0,040	0,344
(U)B3LYP/ LANL2DZ	1,198	1,219	1,775	1,772	-0,514	0,684	0,285	0,722	-0,300	0,309	0,024	0,334
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	1,087	1,791	1,797	0,000	0,748	0,741	0,740	0,000	0,330	0,330	0,334
(U)M06/ cc-pVTZ	-0,052	1,094	1,786	1,813	-0,089	0,738	0,733	0,733	-0,029	0,328	0,333	0,332
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	1,111	1,757	1,762	0,000	0,751	0,745	0,745	0,000	0,317	0,325	0,321
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	3,110	1,351	1,852	1,920	0,411	0,706	0,709	0,710	0,490	0,353	0,356	0,356
(U)ωB97XD/ cc-pVTZ	0,000	0,436	*	*	0,000	0,616	*	*	0,000	0,256	*	*
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,000	1,372	*	1,880	0,000	0,714	*	0,712	0,000	0,339	*	0,346

2 nolu yapı *:yakınsamadı.

Çizelge 3.4. LK3 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Co}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,024	1,067	2,736	0,045	0,865	0,846	0,005	1,132	1,148
(U)B3LYP/cc-pVTZ	1,003	1,046	2,749	0,046	0,877	0,859	0,007	1,120	1,140
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,014	1,064	2,785	0,039	0,936	0,917	0,022	1,060	1,072
(U)M06/LANL2DZ	1,026	1,091	2,723	0,048	0,839	0,817	0,016	1,149	1,171
(U)M06/cc-pVTZ	0,170	1,084	2,690	0,304	0,842	0,829	0,579	1,147	1,166
(U)M06/LANL2DZ	1,024	1,093	2,759	0,039	0,907	0,880	0,029	1,075	1,098
(U)ωB97XD/LANL2DZ	1,026	1,056	2,755	0,036	0,852	0,831	-0,002	1,146	1,166
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,992	1,018	2,751	0,037	0,865	0,845	0,001	1,140	1,155
(U)ωB97XD/LANL2DZ	1,024	1,052	2,787	0,032	0,923	0,903	0,003	1,075	1,092

1 nolu yapı

EK-3. (devam) LK3 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 3.5. LK3 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Co}		ρ_{O_a}		ρ_{O_b}	
	2	4	2	4	2	4
(U)B3LYP/LANL2DZ	-0,188	1,748	0,527	0,597	0,574	0,443
(U)B3LYP/cc-pVTZ	-0,089	2,320	0,501	0,584	0,554	0,352
(U)B3LYP/LANL2DZ	-0,114	1,033	0,533	0,591	0,523	0,443
(U)M06/LANL2DZ	0,992	1,738	0,557	0,717	0,489	0,565
(U)M06/cc-pVTZ	0,964	1,905	0,567	0,663	0,501	0,504
(U)M06/LANL2DZ	1,018	1,029	0,607	0,618	0,441	0,432
(U) ω B97XD/LANL2DZ	-0,120	1,007	0,499	0,555	0,589	0,503
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	-0,060	2,237	0,479	0,581	0,572	0,364
(U) ω B97XD/LANL2DZ	-0,075	2,319	0,511	0,604	0,541	0,322

TS1/2

Çizelge 3.6. LK3 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Co}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,278	*	2,812	0,337	*	0,359	0,182	*	0,027
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,288	*	2,869	0,339	*	0,326	0,168	*	0,024
(U)B3LYP/LANL2DZ	*	*	2,851	*	*	0,295	*	*	0,011
(U)M06/LANL2DZ	1,968	2,314	2,821	-0,453	0,614	0,681	-0,316	0,224	0,359
(U)M06/cc-pVTZ	1,988	2,369	2,862	-0,483	0,613	0,683	-0,312	0,229	0,344
(U)M06/LANL2DZ	1,871	2,389	2,839	0,148	0,572	0,673	-0,039	0,186	0,315
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,739	2,180	2,926	0,607	0,717	0,731	0,307	0,343	0,321
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	1,484	2,199	2,882	-0,001	0,705	0,729	-0,008	0,340	0,319
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,761	2,225	2,592	0,603	0,723	0,499	0,278	0,329	0,140

2 nolu yapı *:yakınsamadı

EK-3. (devam) LK3 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 3.7. LK3 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	3,017	3,010	4,812	-0,823	0,031	0,039	-1,127	0,019	0,011
(U)B3LYP/cc-pVTZ	2,991	2,986	4,821	-0,827	0,031	0,037	-1,117	0,025	0,018
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,999	3,329	3,310	-0,875	-0,030	0,794	-1,049	-0,179	0,943
(U)M06/LANL2DZ	3,068	4,802	4,793	-0,811	-0,778	0,021	-1,126	-1,155	0,054
(U) M06/cc-pVTZ	3,086	3,332	3,517	-0,818	0,063	0,635	-1,104	-0,239	0,961
(U) M06/LANL2DZ	1,027	3,824	4,760	0,030	-0,071	0,020	-0,075	-0,460	0,127
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,972	1,028	4,816	-0,062	0,815	0,032	0,101	1,147	0,000
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,962	1,017	3,017	-0,052	0,823	0,847	0,088	1,134	1,148
(U)ωB97XD/LANL2DZ	-0,211	1,046	3,848	0,407	0,874	0,545	0,779	1,075	0,714

1 nolu yapı.

Çizelge 3.8. LK3 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,003	2,192	4,362	0,102	0,399	0,541	0,139	0,529	0,364
(U)B3LYP/cc-pVTZ	1,095	2,216	4,329	0,004	0,402	0,545	0,051	0,498	0,382
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,500	2,930	4,304	0,003	0,195	0,565	0,541	0,203	0,391
(U)M06/LANL2DZ	2,472	4,419	4,297	-0,557	-0,546	0,518	-0,589	-0,626	0,407
(U)M06/cc-pVTZ	2,322	2,341	4,360	-0,523	0,388	0,500	-0,569	0,501	0,422
(U)M06/LANL2DZ	2,477	4,393	4,270	-0,570	-0,554	0,551	-0,530	-0,553	0,428
(U)ωB97XD/LANL2DZ	2,176	2,126	*	-0,483	0,399	*	-0,593	0,583	*
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,996	2,093	*	-0,004	0,411	*	0,058	0,572	*
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,405	2,123	*	-0,011	0,447	*	0,033	0,542	*

TS1/2 *:yakınsamadı

EK-3. (devam) LK3 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 3.9. LK3 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,208	4,211	4,302	-0,046	-0,468	0,675	-0,012	-0,288	0,363
(U)B3LYP/cc-pVTZ	2,189	4,194	4,296	-0,043	-0,479	0,673	-0,009	-0,276	0,361
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,179	4,186	4,330	-0,025	-0,488	0,693	-0,011	-0,249	0,343
(U)M06/LANL2DZ	2,098	4,281	4,356	-0,416	-0,564	0,726	-0,158	-0,312	0,321
(U)M06/cc-pVTZ	1,961	4,313	4,343	-0,414	-0,577	0,723	-0,317	-0,304	0,324
(U)M06/LANL2DZ	2,301	4,281	4,377	-0,386	-0,563	0,720	-0,119	-0,281	0,323
(U)ωB97XD/LANL2DZ	2,227	4,386	4,367	-0,614	-0,367	0,679	-0,350	-0,612	0,369
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	2,147	2,517	4,299	-0,610	0,596	0,677	-0,329	0,337	0,366
(U)ωB97XD/LANL2DZ	1,093	2,615	4,330	0,082	0,617	0,187	0,056	0,310	0,050

2 nolu yapı.

Çizelge 3.10. LK3 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,917	3,996	3,974	4,058	-0,759	-0,817	0,018	0,862	-1,119	-1,109	0,075	1,137
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,000	3,979	2,891	4,052	0,000	-0,818	0,438	0,875	0,000	-1,092	0,739	1,131
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,009	3,917	3,581	4,041	0,005	-0,845	0,040	0,939	0,001	-1,001	0,184	1,062
(U)M06/LANL2DZ	1,893	4,029	3,960	4,109	-0,780	-0,793	-0,038	0,836	-1,087	-1,094	0,231	1,160
(U)M06/cc-pVTZ	-0,236	4,077	4,011	4,162	0,018	-0,802	-0,038	0,840	0,224	-1,080	0,251	1,155
(U)M06/LANL2DZ	1,927	0,240	3,841	4,090	-0,778	0,784	0,004	0,911	-0,987	0,993	0,321	1,088
(U)ωB97XD/LANL2DZ	1,965	1,163	3,988	4,017	-0,792	0,090	0,013	0,852	-1,155	0,749	0,027	1,151
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,500	1,944	3,937	3,969	0,020	-0,072	0,014	0,866	0,008	0,149	0,038	1,142
(U)ωB97XD/LANL2DZ	-0,069	1,931	3,954	4,008	0,005	-0,046	0,007	0,928	0,076	0,156	0,066	1,077

1 nolu yapı.

EK-3. (devam) LK3 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 3.11. LK3 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	1	3	5	1	3	5	1	3	5
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,000	3,206	3,193	0,000	-0,503	0,391	0,000	-0,550	0,582
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,000	3,189	3,181	0,000	-0,507	0,403	0,000	-0,526	0,573
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,000	3,174	3,176	0,000	-0,519	0,443	0,000	-0,498	0,540
(U)M06/LANL2DZ	0,000	3,427	3,397	0,000	-0,553	0,372	0,000	-0,547	0,582
(U)M06/cc-pVTZ	-0,001	1,427	3,482	0,001	0,373	0,370	0,001	0,473	0,576
(U)M06/LANL2DZ	0,000	3,403	3,405	0,000	-0,567	0,439	0,000	-0,483	0,533
(U) ω B97XD/LANL2DZ	1,001	1,798	3,137	-0,403	0,062	0,400	-0,561	0,208	0,590
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	0,000	1,719	3,103	0,000	0,109	0,410	0,000	0,236	0,581
(U) ω B97XD/LANL2DZ	1,046	1,636	3,130	-0,481	0,174	0,450	-0,533	0,251	0,547

TS1/2

Çizelge 3.10. LK3 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,097	3,046	3,352	4,228	-0,025	-0,410	-0,022	0,694	-0,070	-0,154	0,006	0,339
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,000	2,901	3,223	4,200	0,000	-0,390	-0,024	0,694	0,000	-0,125	0,007	0,337
(U)B3LYP/LANL2DZ	-0,075	2,968	3,232	4,172	0,018	-0,354	-0,018	0,709	0,066	-0,099	0,008	0,320
(U)M06/LANL2DZ	3,001	3,001	3,484	4,284	-0,375	-0,375	0,393	0,728	-0,078	-0,078	0,286	0,307
(U)M06/cc-pVTZ	0,075	3,054	3,478	4,290	-0,024	-0,408	0,384	0,726	-0,057	-0,082	0,275	0,309
(U)M06/LANL2DZ	0,091	2,932	3,473	4,249	-0,083	-0,332	-0,030	0,729	-0,009	-0,048	0,037	0,303
(U) ω B97XD/LANL2DZ	-0,082	3,309	3,183	4,091	0,033	-0,596	-0,048	0,683	0,059	-0,288	0,042	0,336
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	0,024	3,154	3,100	4,017	0,003	-0,576	-0,042	0,680	0,010	-0,260	0,040	0,338
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,000	3,275	3,180	4,061	0,000	-0,592	-0,027	0,700	0,000	-0,256	0,042	0,317

2 nolu yapı.

EK-4. LK4 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 4.1. LK4 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	2,053	2,049	2,069	3,770	-0,849	0,031	0,864	0,848	-1,122	-0,001	1,125	1,147
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,000	2,011	2,053	3,794	0,000	0,033	0,874	0,861	0,000	0,010	1,118	1,138
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,002	2,055	2,076	3,789	0,210	0,032	0,924	0,911	0,020	-0,003	1,066	1,080
(U)M06/ LANL2DZ	2,017	3,745	2,109	3,774	-0,828	-0,806	0,832	0,837	-1,124	-1,144	1,140	1,152
(U)M06/ cc-pVTZ	-0,021	2,079	2,105	3,801	0,002	0,065	0,831	0,845	0,028	-0,044	1,143	1,143
(U)M06/ LANL2DZ	-0,712	3,770	2,162	3,818	0,250	-0,852	0,880	0,908	0,455	-1,073	1,025	1,058
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	2,042	2,037	2,055	3,775	-0,844	0,024	0,873	0,839	-1,134	-0,003	1,125	1,161
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	0,025	1,036	2,032	3,788	0,620	0,375	0,877	0,852	0,302	0,637	1,126	1,150
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,890	2,037	2,047	3,812	-0,354	0,026	0,955	0,918	-0,527	0,000	1,044	1,077

1 nolu yapı.

EK-4. (devam) LK4 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 4.2. LK4 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	1,043	2,002	3,139	4,020	-0,613	0,310	0,693	0,701	-0,291	0,086	0,320	0,371
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,002	2,091	3,184	4,133	0,001	0,246	0,679	0,698	0,000	0,062	0,311	0,366
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,003	2,189	3,247	4,055	-0,001	0,217	0,702	0,707	0,000	0,039	0,336	0,354
(U)M06/ LANL2DZ	-1,116	3,429	3,618	4,048	0,600	0,628	0,512	0,572	0,341	-0,356	0,139	0,168
(U)M06/ cc-pVTZ	-0,050	3,412	3,742	4,158	-0,015	-0,612	0,444	0,531	-0,015	-0,354	0,114	0,152
(U)M06/ LANL2DZ	0,056	3,461	3,716	4,092	-0,045	-0,655	0,440	0,486	-0,049	-0,333	0,099	0,109
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,000	3,457	3,470	4,005	0,000	-0,624	0,679	0,710	0,000	-0,364	0,329	0,355
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	0,000	2,516	3,508	4,083	0,000	-0,061	0,670	0,705	0,000	0,125	0,315	0,356
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,000	3,494	3,531	4,027	0,000	-0,651	0,674	0,711	0,000	-0,340	0,296	0,344

2 nolu yapı.

EK-4. (devam) LK4 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 4.3. LK4 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Ni}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	-0,002	1,680	1,695	-0,008	0,890	0,855	0,858	0,005	1,109	1,149	1,146
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	-0,003	-0,005	1,704	1,719	-0,007	0,894	0,867	0,871	0,005	1,105	1,141	1,139
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	-0,002	1,694	1,705	0,000	0,968	0,930	0,932	0,000	1,030	1,072	1,071
(U)M06/ LANL2DZ	-0,555	-0,044	1,641	1,665	0,230	0,865	0,834	0,834	0,447	1,122	1,163	1,161
(U)M06/ cc-pVTZ	-0,001	0,013	1,720	1,748	0,000	0,866	0,839	0,837	0,001	1,118	1,158	1,156
(U)M06/ LANL2DZ	-0,002	0,010	1,650	1,663	0,000	0,941	0,910	0,911	0,002	1,043	1,086	1,085
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	-0,021	-0,005	1,717	1,724	-0,022	0,877	0,841	0,845	0,008	1,122	1,165	1,161
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	0,000	-0,006	0,450	1,740	0,000	0,882	0,781	0,857	0,000	1,117	1,160	1,151
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,000	-0,005	0,110	1,731	0,000	0,959	0,854	0,917	0,000	1,041	1,089	1,089

1 nolu yapı.

EK-4. (devam) LK4 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 4.4. LK4 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Ni}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	1,187	1,178	1,808	1,802	-0,619	0,714	0,747	0,738	-0,352	0,347	0,327	0,332
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,001	1,177	1,799	1,798	0,000	0,713	0,741	0,736	0,000	0,341	0,325	0,328
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	1,213	1,786	1,812	0,000	0,722	0,736	0,734	0,000	0,326	0,324	0,324
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	1,024	1,742	1,713	0,000	0,723	0,776	0,716	0,000	0,382	0,311	0,385
(U)M06/ cc-pVTZ	0,000	1,046	1,783	1,765	0,000	0,713	0,764	0,712	0,000	0,373	0,312	0,373
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	1,074	1,707	1,710	0,000	0,732	0,758	0,724	0,000	0,343	0,310	0,344
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	-1,393	1,371	1,933	1,848	0,613	0,706	0,697	0,713	0,360	0,353	0,377	0,354
(U)ωB97XD/ cc-pVTZ	0,000	1,380	1,902	1,833	0,000	0,705	0,698	0,714	0,000	0,348	0,371	0,349
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,000	1,398	1,927	1,817	0,000	0,713	0,706	0,714	0,000	0,336	0,358	0,341

2 nolu yapı.

Çizelge 4.5. LK4 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Co}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,020	1,072	2,720	0,052	0,861	0,868	0,001	1,137	1,130
(U)B3LYP/cc-pVTZ	1,007	1,056	2,746	0,051	0,872	0,877	0,005	1,132	1,124
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,213	1,071	2,795	0,035	0,933	0,943	-0,167	1,060	1,057
(U)M06/LANL2DZ	1,023	1,078	2,718	0,061	0,829	0,834	-0,018	1,147	1,158
(U)M06/cc-pVTZ	0,999	1,066	2,740	0,053	0,833	0,844	-0,006	1,145	1,155
(U)M06/LANL2DZ	1,046	1,092	2,775	0,058	0,899	0,910	-0,035	1,061	1,078
(U)ωB97XD/LANL2DZ	-1,044	1,060	2,772	0,836	0,849	0,836	1,137	1,151	1,173
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,056	1,028	2,776	0,352	0,860	0,852	0,594	1,143	1,155
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,083	1,053	2,791	0,384	0,923	0,918	0,560	1,076	1,087

1 nolu yapı.

EK-4. (devam) LK4 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 4.6. LK4 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Co}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,215	2,235	2,904	0,601	0,687	0,704	0,307	0,342	0,355
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,243	*	2,922	0,582	*	0,703	0,285	*	0,347
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,296	*	2,918	0,595	*	0,709	0,276	*	0,329
(U)M06/LANL2DZ	2,182	2,297	2,716	-0,593	0,617	0,682	-0,373	0,227	0,406
(U)M06/cc-pVTZ	2,250	2,190	2,765	-0,619	0,548	0,673	-0,357	0,178	0,404
(U)M06/LANL2DZ	2,212	2,381	2,795	-0,623	0,564	0,690	-0,349	0,181	0,355
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,737	2,416	2,906	0,609	0,687	0,713	0,300	0,352	0,334
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	2,402	2,459	2,880	-0,573	0,687	0,714	-0,321	0,344	0,332
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,765	2,482	2,697	0,599	0,698	0,705	0,261	0,329	0,328

2 nolu yapı *:yakınsamadı.

Çizelge 4.7. LK4 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	3,009	3,010	3,054	-0,826	0,036	0,858	-1,125	0,011	1,142
(U)B3LYP/cc-pVTZ	2,999	3,002	3,062	-0,830	0,035	0,789	-1,115	0,016	1,100
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,984	4,709	3,079	-0,876	-0,854	0,721	-1,041	-1,023	1,126
(U)M06/LANL2DZ	3,003	4,740	3,084	-0,778	-0,782	0,831	-1,140	-1,141	1,163
(U)M06/cc-pVTZ	2,926	4,737	3,198	-0,784	-0,787	0,828	-1,136	-1,131	1,103
(U)M06/LANL2DZ	2,957	4,179	3,270	-0,826	-0,834	0,838	-1,044	-1,045	0,993
(U) ω B97XD/LANL2DZ	2,997	1,028	3,028	-0,821	0,818	0,847	-1,142	1,145	1,156
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	1,403	1,019	2,990	-0,251	0,826	0,861	-0,136	1,133	1,147
(U) ω B97XD/LANL2DZ	1,418	1,055	3,068	-0,235	0,882	0,926	-0,133	1,062	1,056

1 nolu yapı.

EK-4. (devam) LK4 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 4.8. LK4 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,225	4,446	*	-0,543	-0,561	*	-0,571	-0,629	*
(U)B3LYP/cc-pVTZ	2,199	2,336	4,382	-0,510	0,392	0,581	-0,576	0,477	0,353
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,017	4,399	4,343	0,016	-0,562	0,595	0,065	-0,545	0,368
(U)M06/LANL2DZ	2,431	4,075	4,267	-0,587	-0,507	0,532	-0,585	-0,227	0,385
(U)M06/cc-pVTZ	2,307	4,302	4,335	-0,548	-0,529	0,514	-0,564	-0,498	-0,498
(U)M06/LANL2DZ	2,359	4,238	4,237	-0,569	-0,528	0,559	-0,517	-0,456	0,420
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,009	2,115	*	0,364	0,357	*	0,603	0,603	*
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,985	2,115	*	-0,001	0,383	*	0,052	0,596	*
(U)ωB97XD/LANL2DZ	2,117	2,088	*	-0,503	0,434	*	-0,541	0,553	*

TS1/2 *:yakınsamadı.

Çizelge 4.9. LK4 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,794	3,371	4,291	-0,465	0,019	0,709	-0,155	0,024	0,336
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,957	3,376	4,301	0,138	0,012	0,705	0,068	0,022	0,335
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,031	3,412	4,316	0,118	0,026	0,710	0,054	0,021	0,328
(U)M06/LANL2DZ	0,000	4,261	4,334	-0,081	-0,567	0,734	-0,036	-0,316	0,318
(U)M06/cc-pVTZ	2,113	4,297	4,331	-0,470	-0,580	0,727	-0,157	-0,310	0,321
(U)M06/LANL2DZ	2,100	4,248	4,353	-0,413	-0,559	0,726	-0,114	-0,274	0,320
(U)ωB97XD/LANL2DZ	2,217	4,408	4,391	-0,634	-0,621	0,684	-0,353	-0,362	0,362
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	1,071	3,298	4,346	0,058	0,106	0,683	0,043	0,158	0,360
(U)ωB97XD/LANL2DZ	1,117	2,566	4,413	0,064	0,637	0,701	0,052	0,322	0,339

2 nolu yapı.

EK-4. (devam) LK4 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 4.10. LK4 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	1,939	3,989	3,974	4,052	-0,781	-0,821	0,020	0,864	-1,128	-1,109	0,064	1,136
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,000	3,988	3,973	4,058	0,000	-0,823	0,022	0,876	0,000	-1,094	0,079	1,130
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	3,904	3,836	4,032	0,000	-0,847	0,047	0,946	0,000	-0,992	0,191	1,057
(U)M06/ LANL2DZ	1,852	3,983	3,954	4,066	-0,789	-0,793	-0,023	0,838	-1,093	-1,098	0,201	1,161
(U)M06/ cc-pVTZ	-1,814	3,997	3,954	4,069	0,790	-0,789	-0,026	0,844	1,077	-1,087	0,215	1,157
(U)M06/ LANL2DZ	-1,775	3,906	3,774	4,046	0,811	-0,812	0,035	0,920	0,986	-0,988	0,337	1,085
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	-1,980	3,993	3,991	4,015	0,806	-0,834	0,023	0,853	1,158	-1,132	0,009	1,150
(U)ωB97XD/ cc-pVTZ	1,864	1,016	2,035	3,983	-0,799	0,350	0,839	0,866	-1,116	0,640	1,117	1,142
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,114	3,963	2,096	4,002	-0,007	-0,892	0,883	0,934	-0,111	-1,047	1,020	1,072

1 nolu yapı.

Çizelge 4.11. LK4 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS 1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	1	3	5	1	3	5	1	3	5
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,059	3,186	3,154	-0,091	-0,507	0,372	-0,075	-0,554	0,591
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,000	3,184	3,155	0,000	-0,511	0,391	0,000	-0,528	0,580
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,000	1,910	3,135	0,000	0,079	0,441	0,000	0,141	0,543
(U)M06/LANL2DZ	1,087	3,308	3,273	-0,430	-0,547	0,345	-0,530	-0,541	0,600
(U)M06/cc-pVTZ	3,255	3,335	3,291	0,318	-0,559	0,352	0,637	-0,531	0,588
(U)M06/LANL2DZ	0,000	3,247	3,243	0,000	-0,546	0,424	0,000	-0,460	0,547
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,000	1,089	3,111	0,000	0,359	0,373	0,000	0,579	0,607
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,000	1,123	3,086	0,000	0,379	0,392	0,000	0,540	0,595
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,060	1,898	3,096	-0,024	0,073	0,441	-0,042	0,116	0,557

TS1/2

EK-4. (devam) LK4 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 4.12. LK4 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	3,179	3,338	4,143	0,000	-0,566	0,632	0,647	0,000	-0,284	0,379	0,377
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,000	3,100	3,308	4,148	0,000	-0,542	0,373	0,645	0,000	-0,251	0,631	0,372
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	3,135	3,318	4,071	0,000	-0,556	0,646	0,673	0,000	-0,252	0,366	0,352
(U)M06/ LANL2DZ	-0,015	2,806	3,409	4,240	0,055	-0,297	0,570	0,736	-0,015	-0,088	0,412	0,304
(U)M06/ cc-pVTZ	-0,043	2,834	3,369	4,232	0,019	-0,345	0,562	0,729	0,053	-0,089	0,405	0,307
(U)M06/ LANL2DZ	-0,005	2,721	3,382	4,210	0,047	-0,232	0,609	0,734	-0,020	-0,040	0,379	0,301
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,000	3,304	3,366	3,384	0,000	-0,615	0,629	0,641	0,000	-0,316	0,384	0,369
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	0,000	1,927	3,256	3,282	0,000	0,194	0,630	0,642	0,000	0,113	0,380	0,365
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,000	3,273	3,337	3,348	0,000	-0,619	0,647	0,653	0,000	-0,294	0,367	0,356

2 nolu yapı.

EK-5. LK5 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 5.1. LK5 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	2,015	3,715	2,143	3,743	-0,806	-0,814	0,779	0,850	-1,148	-1,138	1,090	1,149
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,000	2,006	2,879	3,373	0,000	0,000	0,250	0,863	0,000	-0,014	0,274	1,138
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-0,089	2,045	2,169	3,765	0,015	-0,020	0,802	0,910	0,024	-0,014	1,051	1,086
(U)M06/ LANL2DZ	2,067	3,790	2,076	3,802	-0,870	-0,850	0,863	0,851	-1,105	-1,118	1,129	1,142
(U)M06/ cc-pVTZ	0,062	1,044	2,082	3,805	-0,043	0,373	0,865	0,858	-0,001	0,621	1,127	1,137
(U)M06/ LANL2DZ	-0,108	2,372	2,079	3,820	0,012	-0,075	0,938	0,928	0,068	-0,236	1,044	1,055
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,011	0,004	2,970	3,755	0,013	0,871	0,288	0,838	0,008	1,124	0,732	1,166
(U)ωB97XD/ cc-pVTZ	-0,009	1,124	2,844	3,766	0,022	0,854	1,124	0,852	-0,001	0,645	1,024	1,152
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	-0,013	1,032	1,458	3,815	0,019	1,465	1,022	0,916	-0,002	0,456	1,126	1,083

1 nolu yapı.

Çizelge 5.2. LK5 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	1	3	5	1	3	5	1	3	5
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,000	1,107	3,099	0,000	0,351	0,586	0,000	0,590	0,400
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,045	1,095	3,092	0,002	0,371	0,579	-0,016	0,579	0,415
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,015	1,107	3,101	0,002	0,388	0,596	0,014	0,558	0,401
(U)M06/LANL2DZ	1,192	1,057	3,185	-0,526	0,453	0,573	-0,609	0,554	0,355
(U)M06/cc-pVTZ	-0,002	3,269	3,196	0,013	-0,473	0,567	-0,019	-0,596	0,378
(U)M06/LANL2DZ	0,012	2,064	3,164	-0,007	0,053	0,597	-0,005	0,155	0,372
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,000	1,089	*	0,000	0,363	*	0,000	0,604	*
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,000	1,055	*	0,000	0,381	*	0,000	0,596	*
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,000	1,134	*	0,000	0,424	*	0,000	0,548	*

TS1/2 *:yakınsamadı.

EK-5. (devam) LK5 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 5.3. LK5 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,863	2,323	3,511	4,030	-0,521	0,115	0,590	0,716	-0,218	0,027	0,246	0,359
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,083	2,369	3,601	4,148	-0,060	0,079	0,550	0,709	-0,023	0,023	0,216	0,353
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,082	2,375	3,633	4,068	-0,063	0,102	0,518	0,716	-0,022	0,020	0,174	0,340
(U)M06/ LANL2DZ	0,820	3,181	3,684	4,114	-0,479	-0,582	0,417	0,747	-0,169	-0,330	0,137	0,335
(U)M06/ cc-pVTZ	-0,912	3,187	3,845	4,328	0,467	-0,588	0,331	0,733	0,193	-0,235	0,104	0,334
(U)M06/ LANL2DZ	-0,720	3,188	3,766	4,138	0,422	-0,582	0,373	0,740	0,124	-0,298	0,101	0,330
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,000	2,087	3,524	4,037	0,000	0,291	0,673	0,710	0,000	0,086	0,340	0,358
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	0,000	2,167	3,550	4,123	0,000	0,210	0,664	0,710	0,000	0,056	0,326	0,354
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,000	2,282	3,580	4,060	0,000	0,148	0,680	0,713	0,000	0,034	0,300	0,345

2 nolu yapı.

EK-5. (devam) LK5 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 5.4. LK5 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Ni}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-0,022	-0,030	1,697	1,707	0,001	0,886	0,846	0,851	-0,001	1,112	1,157	1,152
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,000	-0,008	1,708	1,725	0,000	0,893	0,859	0,865	0,000	1,107	1,150	1,145
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	-0,005	1,703	1,710	0,005	0,969	0,916	0,922	-0,001	1,030	1,083	1,079
(U)M06/ LANL2DZ	-1,642	-0,045	1,667	1,693	0,820	0,887	0,847	0,831	1,126	1,108	1,149	1,166
(U)M06/ cc-pVTZ	-0,021	0,007	1,725	1,782	-0,005	0,886	0,851	0,831	0,014	1,105	1,146	1,160
(U)M06/ LANL2DZ	-0,043	-0,002	1,666	1,686	0,006	0,957	0,921	0,903	0,025	1,038	1,074	1,092
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	-0,002	0,223	1,718	1,732	-0,050	0,831	0,850	0,851	0,006	1,141	1,152	1,152
(U)ωB97XD/ cc-pVTZ	0,000	-0,015	1,720	1,711	0,000	0,846	0,864	0,865	0,000	1,140	1,143	1,138
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,000	0,013	1,731	1,744	0,000	0,904	0,930	0,928	0,000	1,081	1,072	1,074

1 nolu yapı.

EK-5. (devam) LK5 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 5.5. LK5 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Ni}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-1,227	1,210	1,817	1,817	0,589	0,714	0,727	0,729	0,364	0,357	0,345	0,342
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,059	1,197	1,781	1,789	0,044	0,713	0,722	0,725	0,009	0,352	0,342	0,339
(U)B3LYP/ LANL2DZ	1,248	1,235	1,789	1,787	-0,617	0,722	0,729	0,731	-0,342	0,336	0,330	0,328
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	1,070	1,752	1,821	0,000	0,762	0,744	0,774	0,000	0,313	0,327	0,314
(U)M06/ cc-pVTZ	0,000	1,124	1,844	1,832	0,000	0,755	0,737	0,761	0,000	0,314	0,326	0,315
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	1,104	1,762	1,787	0,000	0,758	0,744	0,760	0,000	0,303	0,317	0,312
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,000	1,375	1,885	1,881	0,000	0,718	0,735	0,734	0,000	0,343	0,333	0,333
(U)ωB97XD/ cc-pVTZ	0,000	0,625	1,837	1,825	0,000	0,719	0,735	0,735	0,000	0,339	0,331	0,330
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,000	1,392	1,867	1,862	0,000	0,726	0,731	0,733	0,000	0,327	0,325	0,324

2 nolu yapı.

Çizelge 5.6. LK5 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Co}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,024	1,068	2,711	0,045	0,859	0,889	0,001	1,138	1,111
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,069	1,047	2,705	0,355	0,871	0,896	0,576	1,134	1,107
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,037	1,064	2,754	0,374	0,935	0,972	0,571	1,060	1,026
(U)M06/LANL2DZ	1,031	1,098	2,744	0,049	0,849	0,868	0,012	1,142	1,130
(U)M06/cc-pVTZ	1,017	1,098	2,726	-0,045	0,849	0,875	0,064	1,139	1,126
(U)M06/LANL2DZ	0,149	1,093	2,771	0,331	0,923	0,948	0,550	1,063	1,048
(U)ωB97XD/LANL2DZ	-1,039	1,059	2,741	0,830	0,859	0,872	1,141	1,139	1,130
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,056	1,022	2,738	0,349	0,869	0,882	0,602	1,133	1,125
(U)ωB97XD/LANL2DZ	1,029	1,050	2,776	0,029	0,935	0,953	0,001	1,063	1,048

1 nolu yapı.

EK-5. (devam) LK5 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 5.7. LK5 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Co}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,518	2,311	2,915	0,443	0,682	0,697	0,204	0,353	0,352
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,530	2,316	2,866	0,414	0,681	0,689	0,179	0,348	0,356
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,568	2,387	2,897	0,395	0,689	0,701	0,153	0,321	0,321
(U)M06/LANL2DZ	1,921	2,060	2,928	-0,542	0,710	0,728	-0,330	0,293	0,346
(U)M06/cc-pVTZ	1,948	2,063	3,053	-0,551	0,707	0,728	-0,324	0,301	0,334
(U)M06/LANL2DZ	1,921	2,141	2,989	-0,538	0,675	0,727	-0,297	0,265	0,318
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,492	2,438	2,938	0,639	0,718	0,700	0,339	0,330	0,356
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	-0,035	2,463	2,931	0,640	0,712	0,704	0,332	0,326	0,349
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,008	2,486	2,940	0,654	0,723	0,710	0,330	0,315	0,334

2 nolu yapı.

Çizelge 5.8. LK5 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	3,037	3,036	4,796	-0,848	0,022	0,023	-1,125	0,000	0,025
(U)B3LYP/cc-pVTZ	3,013	4,784	4,805	-0,852	-0,850	0,024	-1,117	-1,111	0,029
(U)B3LYP/LANL2DZ	3,021	3,092	3,724	-0,909	-0,024	0,602	-1,052	-0,007	0,765
(U)M06/LANL2DZ	3,108	4,807	4,796	-0,832	-0,814	0,014	-1,131	-1,126	0,058
(U)M06/cc-pVTZ	3,050	4,833	4,827	-0,832	-0,820	0,010	-1,125	-1,120	0,054
(U)M06/LANL2DZ	3,096	4,796	4,762	-0,887	-0,866	0,012	-1,062	-1,044	0,126
(U) ω B97XD/LANL2DZ	-1,003	4,807	4,800	0,841	-0,813	0,023	1,148	-1,154	0,010
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	0,983	0,988	2,981	0,031	0,827	0,833	-0,018	1,144	1,137
(U) ω B97XD/LANL2DZ	1,020	0,980	3,036	0,012	0,896	0,884	-0,026	1,089	1,046

1 nolu yapı.

EK-5. (devam) LK5 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 5.9. LK5 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,215	2,178	4,366	-0,513	0,393	0,559	-0,581	0,540	0,294
(U)B3LYP/cc-pVTZ	2,186	2,199	4,341	-0,493	0,400	0,560	-0,576	0,510	0,322
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,201	2,248	4,323	-0,510	0,439	0,589	-0,517	0,450	0,343
(U)M06/LANL2DZ	0,968	4,471	4,360	-0,289	-0,655	0,550	0,026	-0,545	0,324
(U)M06/cc-pVTZ	2,617	2,613	4,397	-0,433	0,650	0,541	-0,612	0,279	0,340
(U)M06/LANL2DZ	2,544	2,722	4,323	-0,406	0,639	0,584	-0,559	0,254	0,359
(U)ωB97XD/LANL2DZ	2,189	2,114	*	-0,490	0,375	*	-0,600	0,597	*
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,997	2,131	*	0,002	0,420	*	0,052	0,540	*
(U)ωB97XD/LANL2DZ	1,005	2,104	*	0,000	0,433	*	0,050	0,551	*

TS1/2 *:yakınsamadı.

Çizelge 5.10. LK5 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,785	4,268	4,323	-0,463	-0,575	0,680	-0,167	-0,345	0,367
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	1,002	4,262	4,314	-0,145	-0,576	0,677	0,010	-0,332	0,364
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,054	4,265	4,343	0,042	-0,584	0,696	1,050	-0,304	0,343
(U)M06/LANL2DZ	2,230	4,322	4,392	-0,479	-0,570	0,696	-0,186	-0,316	0,356
(U)M06/cc-pVTZ	2,146	4,366	4,418	-0,490	-0,583	0,683	-0,167	-0,309	0,359
(U)M06/LANL2DZ	2,048	4,313	4,408	-0,367	-0,567	0,710	-0,165	-0,279	0,335
(U)ωB97XD/LANL2DZ	*	4,417	4,398	*	-0,613	0,679	*	-0,368	0,368
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	*	2,537	4,335	*	0,601	0,677	*	0,343	0,366
(U)ωB97XD/LANL2DZ	*	2,624	4,421	*	0,624	0,697	*	0,313	0,345

2 nolu yapı *:yakınsamadı.

EK-5. (devam) LK5 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 5.11. LK5 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/LANL2DZ	-1,925	3,956	4,003	4,050	0,760	-0,773	0,009	0,865	1,125	-1,127	0,040	1,134
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,000	3,940	3,983	4,039	0,000	-0,779	0,011	0,877	0,000	-1,104	0,050	1,127
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,000	3,862	3,898	4,028	0,000	-0,812	0,025	0,948	0,000	-1,000	0,129	1,053
(U)M06/LANL2DZ	1,962	4,062	4,064	4,116	-0,820	-0,818	-0,008	0,842	-1,114	-1,105	0,085	1,155
(U)M06/cc-pVTZ	1,968	4,099	4,115	4,154	-0,820	-0,822	-0,010	0,846	-1,103	-1,095	0,088	1,149
(U)M06/LANL2DZ	0,846	3,991	3,961	4,089	-0,292	-0,845	0,007	0,923	-0,499	-1,013	0,173	1,078
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,033	3,986	2,022	4,009	-0,008	-0,827	0,832	0,853	-0,026	-1,138	1,140	1,150
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	0,048	0,031	2,020	3,960	-0,004	0,830	0,839	0,865	-0,042	1,134	1,122	1,141
(U) ω B97XD/LANL2DZ	-0,009	1,066	2,910	3,995	0,007	0,348	0,467	0,936	-0,003	0,595	0,669	1,069

1nolu yapı.

Çizelge 5.12. LK5 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	1	3	5	1	3	5	1	3	5
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,000	1,709	3,167	0,000	0,155	0,369	0,000	0,218	0,596
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,000	1,623	3,162	0,000	0,169	0,386	0,000	0,252	0,586
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,000	3,032	3,152	0,000	-0,406	0,434	0,000	-0,438	0,549
(U)M06/LANL2DZ	1,024	3,374	3,338	-0,444	-0,560	0,345	-0,535	-0,549	0,571
(U)M06/cc-pVTZ	-1,087	3,422	3,372	0,448	-0,564	0,360	0,523	-0,539	0,563
(U)M06/LANL2DZ	0,000	3,316	3,318	0,000	-0,563	0,414	0,000	-0,476	0,529
(U) ω B97XD/LANL2DZ	1,062	3,162	3,122	-0,436	-0,485	0,369	-0,597	-0,577	0,612
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	0,000	1,107	3,088	0,000	0,383	0,387	0,000	0,556	0,600
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,000	1,078	3,107	0,000	0,424	0,432	0,000	0,525	0,564

TS1/2

EK-5. (devam) LK5 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 5.13. LK5 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	2,816	3,339	4,238	0,000	-0,384	-0,384	0,692	0,000	-0,104	0,112	0,342
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,000	2,689	3,286	4,206	0,000	-0,330	0,208	0,693	0,000	-0,068	0,103	0,340
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	2,732	3,310	4,176	0,000	-0,312	0,183	0,710	0,000	-0,052	0,080	0,319
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	3,081	3,522	4,100	0,000	-0,407	0,646	0,647	0,000	-0,181	0,358	0,289
(U)M06/ cc-pVTZ	0,000	3,115	3,475	4,145	0,000	-0,453	0,640	0,742	0,000	-0,179	0,360	0,300
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	2,999	3,502	3,900	0,000	-0,354	0,655	0,540	0,000	-0,122	0,351	0,189
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,000	3,272	3,355	4,161	0,000	-0,609	0,623	0,704	0,000	-0,352	0,386	0,328
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	0,000	1,837	3,242	4,093	0,000	0,259	0,625	0,704	0,000	0,102	0,382	0,329
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	-0,002	1,988	3,333	4,100	0,000	0,216	0,640	0,712	0,000	0,086	0,368	0,318

2 nolu yapı.

EK-6. LK6 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları.

Çizelge 6.1. LK6 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	2,032	0,040	2,193	3,721	-0,802	0,803	0,765	0,844	-1,145	1,107	1,038	1,148
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,000	2,122	2,541	3,768	0,000	0,001	0,597	0,858	-0,001	-0,132	1,012	1,136
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,041	2,201	2,227	3,742	-0,034	-0,013	0,786	0,900	-0,002	-0,180	0,993	1,085
(U)M06/ LANL2DZ	2,058	3,760	3,727	3,769	-0,812	-0,851	0,088	0,892	-1,128	-1,109	-0,071	1,098
(U)M06/ cc-pVTZ	-0,025	2,079	2,156	3,789	0,019	0,040	0,754	0,898	0,038	-0,013	1,084	1,093
(U)M06/ LANL2DZ	2,033	3,774	3,921	3,795	-0,857	-0,905	0,046	0,951	-1,058	-1,047	-0,318	1,044
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	-0,015	3,726	2,069	3,765	0,024	-0,837	0,857	0,841	-0,001	-1,132	1,141	1,157
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	1,985	2,763	2,028	3,795	-0,822	-0,272	0,870	0,850	-1,116	-0,501	1,132	1,155
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,028	2,009	2,067	3,797	-0,022	-0,010	0,932	0,916	-0,011	0,001	1,063	1,075

1 nolu yapı.

EK-6. (devam) LK6 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 6.2. LK6 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	1,065	2,908	3,943	0,000	0,439	0,645	0,634	0,000	0,530	0,484	0,617
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,019	1,058	2,943	4,115	0,013	0,245	0,625	0,616	-0,021	0,645	0,477	0,588
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,032	1,073	2,962	3,964	0,030	0,474	0,631	0,626	-0,032	0,494	0,455	0,577
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	1,037	3,015	3,976	0,000	0,464	0,607	0,686	0,000	0,562	0,521	0,567
(U)M06/ cc-pVTZ	0,008	3,060	3,025	4,172	0,000	-0,341	0,587	0,648	-0,004	-0,577	0,527	0,546
(U)M06/ LANL2DZ	0,012	3,067	3,047	4,064	-0,001	-0,386	0,598	0,669	-0,006	-0,534	0,502	0,503
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	-1,199	1,084	2,937	*	0,570	0,367	0,645	*	0,575	0,590	0,534	*
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	0,000	1,245	2,915	*	0,000	0,389	0,620	*	0,000	0,487	0,533	*
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	-0,059	1,062	3,143	*	-0,019	0,445	0,589	*	0,022	0,537	0,427	*

TS1/2 *:yakınsamadı.

EK-6. (devam) LK6 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 6.3. LK6 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	1,016	2,000	3,074	4,024	-0,610	0,311	0,698	0,718	-0,281	0,079	0,313	0,343
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,003	2,081	3,127	4,178	-0,006	0,249	0,685	0,713	-0,004	0,058	0,306	0,342
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-0,002	2,247	3,162	4,053	-0,007	0,180	0,709	0,719	-0,003	0,048	0,336	0,331
(U)M06/ LANL2DZ	0,767	3,076	3,630	4,114	-0,387	-0,572	0,508	0,751	-0,129	-0,326	0,128	0,327
(U)M06/ cc-pVTZ	-0,756	3,100	3,756	4,330	0,377	-0,580	0,435	0,737	0,130	-0,328	0,106	0,326
(U)M06/ LANL2DZ	-0,609	3,070	3,720	4,131	0,310	-0,562	0,432	0,744	0,076	-0,289	0,090	0,322
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	-0,001	1,362	3,538	4,038	0,000	0,620	0,652	0,712	0,000	0,305	0,304	0,353
(U)ωB97XD/ cc-pVTZ	0,000	1,322	4,050	4,159	0,000	0,602	-0,047	0,711	0,000	0,280	-0,060	0,349
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,000	1,489	3,621	4,062	0,000	0,599	0,620	0,716	0,000	0,257	0,252	0,340

2 nolu yapı.

EK-6. (devam) LK6 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 6.4. LK6 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Ni}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,021	-0,029	1,675	1,688	-0,002	0,890	0,856	0,862	0,009	1,108	1,147	1,142
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	-0,013	-0,006	1,696	1,712	-0,002	0,896	0,868	0,874	-0,012	1,103	1,140	1,135
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-0,042	-0,003	1,682	1,691	0,012	0,971	0,925	0,933	-0,023	1,028	1,074	1,069
(U)M06/ LANL2DZ	-0,026	-0,038	1,659	1,555	0,021	0,875	0,838	0,892	-0,029	1,121	1,163	1,104
(U)M06/ cc-pVTZ	-0,028	-0,007	1,725	1,621	0,012	0,876	0,836	0,893	-0,022	1,119	1,158	1,105
(U)M06/ LANL2DZ	-0,013	-0,005	1,666	1,584	0,026	0,956	0,911	0,969	-0,066	1,040	1,084	1,027
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,000	0,043	1,703	1,706	0,000	0,794	0,841	0,837	0,000	1,170	1,162	1,167
(U)ωB97XD/ cc-pVTZ	0,000	0,041	1,600	1,718	0,000	0,803	0,874	0,849	0,000	1,158	1,126	1,155
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	-0,221	0,070	1,518	1,713	-0,091	0,851	0,879	0,913	0,294	1,107	1,254	1,089

1 nolu yapı.

EK-6. (devam) LK6 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 6.5. LK6 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Ni}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,096	1,093	1,781	1,772	-0,643	0,717	0,738	0,738	-0,337	0,336	0,328	0,328
(U)B3LYP/cc-pVTZ	1,067	1,066	1,768	1,762	-0,641	0,716	0,733	0,732	-0,332	0,332	0,326	0,325
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,041	1,134	1,761	1,754	-0,579	0,723	0,729	0,729	-0,326	0,318	0,321	0,320
(U)M06/LANL2DZ	0,927	0,954	1,739	1,760	-0,689	0,760	0,704	0,771	-0,304	0,302	0,379	0,307
(U)M06/cc-pVTZ	-0,934	0,960	1,801	1,793	0,682	0,754	0,700	0,758	0,304	0,304	0,369	0,308
(U)M06/LANL2DZ	0,000	0,998	1,717	1,731	0,000	0,755	0,723	0,759	0,000	0,294	0,336	0,301
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,000	1,370	1,801	1,784	0,000	0,715	0,717	0,741	0,000	0,331	0,335	0,309
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	0,000	0,634	1,745	1,745	0,000	0,723	0,702	0,765	0,000	0,325	0,361	0,318
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,000	0,545	1,704	1,725	0,000	0,727	0,742	0,736	0,000	0,316	0,345	0,312

2 nolu yapı.

Çizelge 6.6. LK6 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Co}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	-1,053	1,119	2,679	0,849	0,793	0,896	1,116	1,140	1,102
(U)B3LYP/cc-pVTZ	-1,046	1,125	2,713	0,852	0,801	0,900	1,111	1,126	1,099
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,081	1,179	2,744	-0,036	0,834	0,978	0,025	1,040	1,021
(U)M06/LANL2DZ	1,216	1,125	2,768	0,030	0,775	0,841	-0,207	1,135	1,152
(U)M06/cc-pVTZ	1,161	1,080	2,738	0,030	0,789	0,850	-0,184	1,133	1,148
(U)M06/LANL2DZ	2,398	1,201	2,781	-0,612	0,811	0,915	-0,934	1,028	1,075
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,531	1,070	2,755	0,251	0,855	0,839	0,242	1,145	1,168
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	0,189	1,059	2,750	0,198	0,864	0,854	0,630	1,129	1,153
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,213	1,064	2,768	0,218	0,929	0,918	0,628	1,069	1,086

1 nolu yapı.

EK-6. (devam) LK6 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 6.7. LK6 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Co}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,457	2,091	2,877	0,497	0,719	0,720	0,230	0,325	0,334
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,527	2,064	2,931	0,453	0,716	0,719	0,197	0,323	0,332
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,674	2,111	2,889	0,413	0,717	0,721	0,156	0,315	0,322
(U)M06/LANL2DZ	1,880	2,296	2,709	-0,555	0,619	0,687	-0,336	0,216	0,392
(U)M06/cc-pVTZ	1,062	2,352	2,795	0,219	0,617	0,675	0,057	0,221	0,387
(U)M06/LANL2DZ	1,865	2,377	2,808	-0,549	0,557	0,666	-0,304	0,168	0,315
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,454	2,374	2,873	0,618	0,692	0,710	0,323	0,343	0,333
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,299	2,360	2,854	0,609	0,692	0,712	0,307	0,338	0,329
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,494	2,429	2,863	0,618	0,701	0,708	0,299	0,325	0,321

2 nolu yapı.

Çizelge 6.8. LK6 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	3,024	4,774	4,726	-0,831	-0,821	0,029	-1,119	-1,115	0,099
(U)B3LYP/cc-pVTZ	3,013	3,219	4,754	-0,834	-0,046	0,028	-1,110	-0,144	0,107
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,988	3,718	4,673	-0,877	-0,110	0,066	-1,030	-0,383	0,196
(U)M06/LANL2DZ	-0,950	4,756	4,539	0,822	-0,787	0,010	1,110	-1,127	0,344
(U)M06/cc-pVTZ	1,235	4,781	4,600	-0,025	-0,794	0,004	-0,190	-1,121	0,342
(U)M06/LANL2DZ	3,027	4,711	4,434	-0,860	-0,818	0,104	-1,033	-1,023	0,443
(U)ωB97XD/LANL2DZ	3,014	3,645	4,645	-0,827	-0,812	0,019	-1,137	-1,128	0,265
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,583	4,645	4,600	-0,055	-0,798	0,015	0,135	-1,123	0,386
(U)ωB97XD/LANL2DZ	3,001	3,987	4,345	-0,887	-0,845	0,101	-1,062	-1,103	0,412

1 nolu yapı.

EK-6. (devam) LK6 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 6.9. LK6 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,284	4,309	4,215	-0,473	-0,611	0,563	-0,639	-0,534	0,372
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,933	2,353	4,198	0,002	0,566	0,562	0,060	0,382	0,395
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,126	2,381	4,184	-0,468	0,587	0,587	-0,567	0,363	0,403
(U)M06/LANL2DZ	2,329	4,347	4,205	-0,595	-0,520	0,553	-0,539	-0,612	0,455
(U)M06/cc-pVTZ	2,232	2,821	4,260	-0,557	0,149	0,530	-0,551	0,330	0,463
(U)M06/LANL2DZ	2,302	4,302	4,190	-0,570	-0,528	0,571	-0,497	-0,529	0,467
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,940	2,105	4,187	-0,008	0,370	0,539	0,086	0,595	0,435
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,149	4,030	4,006	0,313	-0,388	0,501	0,543	-0,546	0,506
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,897	2,126	4,145	0,031	0,485	0,563	0,086	0,482	0,473

TS1/2

Çizelge 6.10. LK6 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,839	3,331	4,216	-0,515	0,048	0,715	-0,162	0,064	0,328
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,828	3,350	4,224	0,327	0,026	0,711	0,102	0,058	0,328
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,952	3,402	4,232	0,287	0,036	0,714	0,073	0,055	0,323
(U)M06/LANL2DZ	2,147	4,251	4,302	-0,446	-0,577	0,734	-0,144	-0,316	0,319
(U)M06/cc-pVTZ	2,086	4,291	4,294	-0,457	-0,590	0,728	-0,131	-0,312	0,323
(U)M06/LANL2DZ	2,041	4,231	4,304	-0,390	-0,569	0,726	-0,097	-0,275	0,320
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,001	4,321	4,313	0,636	-0,620	0,686	0,366	-0,358	0,361
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	1,167	4,261	4,246	0,029	-0,617	0,684	0,069	-0,353	0,359
(U)ωB97XD/LANL2DZ	1,191	2,436	4,322	0,100	0,635	0,7003	0,054	0,324	0,338

2 nolu yapı.

EK-6. (devam) LK6 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 6.11. LK6 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	1,920	3,933	3,945	4,068	-0,770	-0,753	0,014	0,871	-1,111	-1,105	0,119	1,129
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	-1,906	3,916	3,935	4,072	0,771	-0,758	0,020	0,882	1,084	-1,079	0,137	1,123
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,152	3,820	3,750	4,045	0,752	-0,781	0,069	0,951	1,056	-0,963	0,278	1,051
(U)M06/ LANL2DZ	-1,875	4,004	3,928	4,105	0,788	-0,788	-0,035	0,844	1,085	-1,088	0,268	1,155
(U)M06/ cc-pVTZ	-0,098	4,018	3,947	4,117	0,051	-0,789	-0,031	0,849	0,024	-1,078	0,285	1,151
(U)M06/ LANL2DZ	-1,766	1,645	3,703	4,077	0,801	0,030	0,061	0,924	0,958	0,339	0,417	1,080
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	1,986	4,002	2,114	4,029	-0,810	-0,837	0,792	0,860	-1,152	-1,124	1,100	1,143
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	0,146	0,022	4,005	3,987	0,710	0,841	-0,012	0,872	1,065	1,124	0,290	1,136
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,014	1,024	1,896	4,014	-0,002	0,389	0,098	0,940	-0,012	0,599	0,349	1,065

1 nolu yapı.

Çizelge 6.12. LK6 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	1	3	5	1	3	5	1	3	5
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,000	3,160	3,155	0,000	-0,501	0,441	0,000	-0,523	0,552
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,000	1,396	3,152	0,000	0,458	0,444	0,000	0,342	0,550
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,000	1,083	3,142	0,000	0,466	0,482	0,000	0,458	0,521
(U)M06/LANL2DZ	0,000	3,301	3,273	0,000	-0,566	0,368	0,000	-0,513	0,580
(U)M06/cc-pVTZ	-0,002	3,317	3,290	0,001	-0,573	0,377	0,001	-0,504	0,568
(U)M06/LANL2DZ	0,000	3,230	3,240	0,000	-0,560	0,447	0,000	-0,431	0,528
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,000	1,780	3,106	0,000	0,073	0,393	0,000	0,211	0,592
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	0,000	2,930	3,082	0,000	-0,405	0,411	0,000	-0,483	0,579
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,000	2,938	3,090	0,000	-0,423	0,458	0,000	-0,446	0,543

TS1/2

EK-6. (devam) LK6 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 6.13. LK6 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	2,999	3,314	4,221	0,000	-0,489	0,626	0,715	0,000	-0,201	0,367	0,315
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,000	2,886	3,280	4,205	0,000	-0,446	0,626	0,714	0,000	-0,163	0,362	0,316
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	2,910	3,305	4,162	0,000	-0,436	0,636	0,720	0,000	-0,144	0,345	0,308
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	3,974	3,492	4,267	0,000	-0,378	0,656	0,735	0,000	-0,082	0,356	0,303
(U)M06/ cc-pVTZ	0,000	2,997	3,437	4,259	0,000	-0,409	0,646	0,730	0,000	-0,085	0,357	0,307
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	2,897	3,472	4,224	0,000	-0,324	0,667	0,735	0,000	-0,047	0,346	0,299
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	-0,060	3,171	3,206	4,183	0,032	-0,593	0,577	0,726	0,042	-0,353	0,422	0,309
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	0,000	1,809	3,133	4,119	0,000	0,202	0,587	0,725	0,000	0,127	0,412	0,310
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,000	3,130	3,182	4,136	0,000	-0,598	0,615	0,729	0,000	-0,303	0,388	0,303

2 nolu yapı.

EK-7. LK7 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 7.1. LK7 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-2,060	2,045	2,081	3,766	0,862	0,031	0,889	0,857	1,114	0,006	1,107	1,138
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	-0,005	2,028	2,062	3,779	0,001	0,032	0,893	0,871	0,005	0,007	1,107	1,130
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-0,002	2,050	2,078	3,777	-0,001	0,031	0,951	0,911	0,003	0,005	1,048	1,082
(U)M06/ LANL2DZ	-2,020	3,755	2,070	3,796	0,822	-0,805	0,862	0,829	1,122	-1,144	1,105	1,155
(U)M06/ cc-pVTZ	-0,007	2,119	2,056	3,790	0,004	0,056	0,852	0,836	0,035	-0,053	1,098	1,145
(U)M06/ LANL2DZ	-0,036	3,774	2,045	3,834	0,003	-0,864	0,769	0,887	0,029	-1,081	1,065	1,062
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,013	2,030	2,034	3,765	0,000	0,027	0,858	0,843	-0,009	0,001	1,140	1,156
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	0,000	1,402	2,024	3,763	0,000	0,290	0,873	0,856	0,000	0,342	1,129	1,146
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,345	2,832	2,067	3,794	0,013	-0,248	0,930	0,914	-0,355	-0,497	1,065	1,081

1 nolu yapı.

Çizelge 7.2. LK7 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	1	3	5	1	3	5	1	3	5
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,000	1,117	2,957	0,000	0,377	0,644	0,000	0,569	0,502
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,057	3,002	2,989	-0,004	-0,330	0,618	-0,019	-0,569	0,489
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,051	1,115	2,985	-0,002	0,405	0,644	-0,013	0,541	0,479
(U)M06/LANL2DZ	0,000	1,775	3,037	0,000	0,170	0,589	0,000	0,255	0,498
(U)M06/cc-pVTZ	0,020	1,840	3,001	-0,005	0,134	0,574	-0,009	0,185	0,508
(U)M06/LANL2DZ	0,029	3,005	3,066	-0,005	-0,324	0,596	-0,009	-0,538	0,486
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,000	1,076	2,952	0,000	0,388	0,628	0,000	0,587	0,522
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	0,000	1,036	3,065	0,000	0,458	0,584	0,000	0,558	0,459
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,000	1,075	3,159	0,000	0,437	0,587	0,000	0,540	0,414

TS1/2

EK-7. (devam) LK7 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 7.3. LK7 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,838	3,323	3,485	3,964	-0,507	-0,659	0,579	0,626	-0,192	-0,324	0,221	0,287
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,102	3,327	3,579	3,997	-0,069	-0,657	0,534	0,600	-0,024	-0,321	0,191	0,261
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,104	3,349	3,610	4,033	-0,074	-0,663	0,507	0,561	-0,024	-0,323	0,158	0,207
(U)M06/ LANL2DZ	0,355	3,422	3,649	4,105	-0,177	-0,634	0,501	0,547	-0,048	-0,355	0,130	0,149
(U)M06/ cc-pVTZ	-0,329	3,344	3,719	4,163	0,156	-0,626	0,432	0,500	0,048	-0,354	0,108	0,131
(U)M06/ LANL2DZ	-0,299	3,448	3,731	4,122	0,135	-0,657	0,446	0,487	0,028	-0,335	0,099	0,107
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	-1,158	*	3,429	3,917	0,665	*	0,681	0,684	0,374	*	0,320	0,339

2 nolu yapı *:yakınsamadı

Çizelge 7.4. LK7 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Ni}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	-0,004	1,667	1,680	0,000	0,894	0,862	0,867	0,000	1,105	1,139	1,136
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,000	-0,006	1,680	1,698	0,000	0,898	0,875	0,880	0,000	1,102	1,134	1,130
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	-0,004	1,686	1,698	0,000	0,970	0,926	0,932	0,000	1,029	1,073	1,069
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	-0,005	1,632	1,642	-0,008	0,880	0,839	0,843	-0,004	1,117	1,156	1,152
(U)M06/ cc-pVTZ	0,001	-0,010	1,685	1,723	-0,001	0,880	0,844	0,846	0,000	1,117	1,153	1,149
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	-0,006	1,644	1,653	-0,001	0,957	0,904	0,908	0,000	1,041	1,090	1,086
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,000	-0,026	1,691	1,702	0,000	0,873	0,868	0,849	0,000	1,121	1,128	1,154
(U)ωB97XD/ cc-pVTZ	0,000	-0,005	1,713	*	0,000	0,883	0,873	*	0,000	1,114	1,131	*
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,000	-0,002	1,724	*	0,000	0,951	0,934	*	0,000	1,045	1,067	*

1 nolu yapı *:yakınsamadı.

EK-7. (devam) LK7 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 7.5. LK7 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Ni}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/LA NL2DZ	1,184	1,171	1,772	1,845	-0,596	0,718	0,716	0,875	-0,354	0,348	0,345	0,542
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	-1,167	1,149	1,750	1,645	0,595	0,717	0,715	0,689	0,349	0,344	0,340	0,320
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-1,206	1,196	1,751	1,712	0,617	0,725	0,722	0,652	0,337	0,332	0,331	0,320
(U)M06/LANL 2DZ	-1,067	0,999	1,774	1,760	0,605	0,729	0,755	0,763	0,335	0,373	0,316	0,308
(U)M06/cc- pVTZ	1,063	1,014	1,855	1,774	-0,604	0,716	0,736	0,754	-0,333	0,365	0,322	0,308
(U)M06/LANL 2DZ	1,087	1,044	1,810	1,744	-0,619	0,739	0,742	0,757	-0,321	0,340	0,315	0,307
(U)ωB97XD/L ANL2DZ	0,000	1,337	1,955	1,955	0,000	0,711	0,688	0,691	0,000	0,346	0,391	0,390
(U)ωB97XD/cc -pVTZ	0,000	1,314	1,405	1,356	0,000	0,710	0,680	0,679	0,000	0,342	0,343	0,336
(U)ωB97XD/L ANL2DZ	0,000	1,356	1,972	1,845	0,000	0,718	0,706	0,612	0,000	0,333	0,359	0,302

2 nolu yapı.

Çizelge 7.6. LK7 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Co}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,016	1,055	2,732	0,042	0,885	0,863	0,010	1,114	1,133
(U)B3LYP/cc-pVTZ	1,001	1,043	2,742	0,043	0,892	0,875	0,012	1,112	1,128
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,003	1,054	2,780	0,036	0,960	0,933	0,034	1,040	1,061
(U)M06/LANL2DZ	-1,028	1,078	2,720	0,837	0,851	0,829	1,109	1,138	1,158
(U)M06/cc-pVTZ	0,145	1,065	2,676	0,312	0,852	0,837	0,565	1,136	1,157
(U)M06/LANL2DZ	1,021	1,084	2,757	0,027	0,914	0,890	0,037	1,068	1,089
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,121	1,048	2,740	0,250	0,860	0,840	0,642	1,139	1,157
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,147	1,052	2,736	0,245	0,869	0,853	0,614	1,126	1,148
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,161	1,048	2,760	0,258	0,929	0,913	0,605	1,070	1,086

1 nolu yapı.

EK-7. (devam) LK7 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 7.7. LK7 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Co}		ρ_{O_a}		ρ_{O_b}	
	2	4	2	4	2	4
(U)B3LYP/LANL2DZ	-0,054	2,002	0,494	0,662	0,531	0,433
(U)B3LYP/cc-pVTZ	-0,033	2,019	0,493	0,647	0,512	0,421
(U)B3LYP/LANL2DZ	-0,008	2,068	0,503	0,668	0,475	0,381
(U)M06/LANL2DZ	2,328	1,701	-0,501	0,721	-0,650	0,558
(U)M06/cc-pVTZ	2,338	1,808	-0,497	0,677	-0,625	0,514
(U)M06/LANL2DZ	2,341	1,866	-0,519	0,688	-0,583	0,473
(U) ω B97XD/LANL2DZ	-0,121	2,663	0,514	0,565	0,578	0,542
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	1,952	2,058	-0,300	0,634	-0,587	0,276
(U) ω B97XD/LANL2DZ	-0,077	2,707	0,527	0,598	0,531	0,479

TS1/2

Çizelge 7.8. LK7 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Co}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,418	2,261	2,853	0,436	0,689	0,688	0,186	0,342	0,346
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,448	2,295	2,833	0,409	0,688	0,688	0,164	0,344	0,341
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,440	2,333	2,855	0,398	0,694	0,691	0,147	0,318	0,320
(U)M06/LANL2DZ	2,098	2,307	2,865	-0,547	0,613	0,658	-0,327	0,216	0,272
(U)M06/cc-pVTZ	0,262	2,341	2,863	0,608	0,613	0,661	0,300	0,222	0,278
(U)M06/LANL2DZ	0,265	2,387	2,874	0,595	0,569	0,623	0,276	0,179	0,230
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,736	2,375	2,881	0,618	0,691	0,694	0,282	0,348	0,351
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	1,012	2,349	2,830	-0,094	0,691	0,695	-0,026	0,344	0,348
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,771	2,407	2,955	0,616	0,701	0,699	0,256	0,332	0,336

2 nolu yapı.

EK-7. (devam) LK7 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 7.9. LK7 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	3,023	3,009	3,060	-0,836	0,028	0,869	-1,115	0,029	1,130
(U)B3LYP/cc-pVTZ	2,999	2,988	4,749	-0,839	0,028	0,032	-1,106	0,034	0,046
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,999	3,348	3,864	-0,882	-0,043	0,562	-1,036	-0,182	0,683
(U)M06/LANL2DZ	3,068	4,792	4,772	-0,819	-0,799	0,006	-1,113	-1,129	0,089
(U)M06/cc-pVTZ	3,102	3,421	4,801	-0,825	0,042	-0,002	-1,094	-0,289	0,085
(U)M06/LANL2DZ	1,098	4,775	4,706	0,016	-0,839	0,024	-0,142	-1,056	0,180
(U) ω B97XD/LANL2DZ	3,004	1,079	3,036	-0,830	0,809	0,856	-1,133	1,133	1,140
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	2,869	2,956	2,976	-0,802	-0,042	0,864	-1,056	0,066	1,145
(U) ω B97XD/LANL2DZ	3,014	2,020	3,071	-0,894	0,394	0,923	-1,064	0,657	1,057

1 nolu yapı.

Çizelge 7.10. LK7 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,207	2,205	4,213	-0,533	0,404	0,554	-0,544	0,508	0,416
(U)B3LYP/cc-pVTZ	2,177	4,042	4,190	-0,508	-0,367	0,555	-0,555	-0,544	0,436
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,171	2,852	4,191	-0,522	0,163	0,574	-0,524	0,194	0,435
(U)M06/LANL2DZ	2,435	4,372	4,237	-0,582	-0,534	0,535	-0,562	-0,616	0,437
(U)M06/cc-pVTZ	2,296	2,319	4,277	-0,546	0,384	0,517	-0,544	0,520	0,448
(U)M06/LANL2DZ	2,400	2,792	4,219	-0,588	0,266	0,566	-0,503	0,341	0,450
(U) ω B97XD/LANL2DZ	2,164	4,378	4,201	-0,495	-0,543	0,532	-0,580	-0,643	0,420
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	0,021	2,189	4,068	0,473	0,395	0,549	0,536	0,525	0,477
(U) ω B97XD/LANL2DZ	2,146	2,148	4,155	-0,524	0,503	0,567	-0,528	0,489	0,454

TS1/2

EK-7. (devam) LK7 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 7.11. LK7 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,634	4,207	4,274	-0,379	-0,573	0,687	-0,089	-0,327	0,358
(U)B3LYP/cc-pVTZ	1,282	4,203	4,265	-0,062	-0,572	0,684	-0,035	-0,314	0,356
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,512	4,203	4,293	-0,308	-0,576	0,701	-0,042	-0,289	0,337
(U)M06/LANL2DZ	*	4,254	4,327	*	-0,567	0,701	*	-0,301	0,349
(U)M06/cc-pVTZ	*	4,266	4,317	*	-0,578	0,691	*	-0,294	0,352
(U)M06/LANL2DZ	*	4,252	4,343	*	-0,564	0,713	*	-0,271	0,331
(U)ωB97XD/LANL2DZ	2,166	4,335	4,321	-0,619	-0,621	0,686	-0,327	-0,359	0,361
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,928	2,402	4,238	0,135	0,613	0,684	0,069	0,342	0,359
(U)ωB97XD/LANL2DZ	1,068	2,501	4,340	0,093	0,635	0,702	0,061	0,323	0,341

2 nolu yapı *: yakınsamadı

Çizelge 7.12. LK7 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/LANL2DZ	-1,869	3,976	3,823	4,062	0,756	-0,813	-0,019	0,873	1,079	-1,085	0,378	1,127
(U)B3LYP/cc-pVTZ	1,265	3,957	3,765	4,058	-0,645	-0,812	-0,021	0,884	1,081	-1,067	0,123	1,122
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,086	3,870	3,546	4,043	-0,016	-0,829	0,096	0,948	-0,026	-0,966	0,562	1,053
(U)M06/LANL2DZ	-1,849	0,217	3,830	4,106	0,771	0,742	-0,029	0,846	1,061	1,068	0,386	1,152
(U)M06/cc-pVTZ	1,830	4,006	3,845	4,127	-0,765	-0,774	-0,021	0,850	-1,038	-1,045	0,416	1,148
(U)M06/LANL2DZ	0,053	0,355	3,677	4,081	-0,011	0,734	0,057	0,920	-0,036	0,943	0,474	1,081
(U)ωB97XD/LANL2DZ	-1,974	0,024	3,979	4,016	0,799	0,805	0,009	0,860	1,148	1,143	0,040	1,143
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	-0,002	0,043	3,925	3,966	0,007	0,810	0,010	0,872	-0,005	1,125	0,052	1,137
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,060	3,930	2,917	4,006	-0,002	-0,863	0,479	0,936	-0,064	-1,035	0,675	1,069

1 nolu yapı.

EK-7. (devam) LK7 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 7.12. LK7 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	1	3	5	1	3	5	1	3	5
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,053	3,191	3,162	-0,458	-0,516	0,401	-0,549	-0,534	0,571
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,000	3,182	3,162	0,000	-0,520	0,414	0,000	-0,509	0,561
(U)B3LYP/LANL2DZ	-0,961	3,162	3,147	0,456	-0,536	0,455	0,453	-0,480	0,529
(U)M06/LANL2DZ	0,000	3,351	3,326	0,000	-0,569	0,374	0,000	-0,515	0,573
(U)M06/cc-pVTZ	0,002	3,380	*	0,000	-0,574	*	-0,001	-0,507	*
(U)M06/LANL2DZ	0,000	3,301	3,300	0,000	-0,578	0,436	0,000	-0,449	0,528
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,000	0,998	3,109	0,000	0,444	0,401	0,000	0,579	0,589
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,000	1,107	3,084	0,000	0,414	0,413	0,000	0,517	0,578
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,058	1,943	3,099	0,000	0,079	0,452	-0,035	0,094	0,547

TS1/2 *: yakınsamadi

Çizelge 7.13. LK7 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,000	2,648	3,268	4,216	0,000	-0,287	0,131	0,701	0,000	-0,024	0,080	0,332
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,000	2,528	3,232	4,192	0,000	-0,241	0,133	0,701	0,000	-0,002	0,077	0,331
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,000	2,572	3,252	4,163	0,000	-0,220	0,108	0,715	0,000	0,009	0,061	0,314
(U)M06/LANL2DZ	0,000	2,835	3,428	4,267	0,000	-0,312	0,028	0,739	0,000	-0,086	0,057	0,297
(U)M06/cc-pVTZ	0,000	2,856	3,455	4,264	0,000	-0,360	0,019	0,738	0,000	-0,088	0,053	0,301
(U)M06/LANL2DZ	0,000	2,764	3,402	4,238	0,000	-0,260	0,021	0,737	0,000	-0,039	0,048	0,297
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,000	3,266	3,225	4,172	0,000	-0,601	0,028	0,708	0,000	-0,295	0,044	0,330
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,000	3,115	3,152	4,094	0,000	-0,582	0,038	0,708	0,000	-0,271	0,044	0,330
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,032	3,241	3,217	4,134	0,008	-0,605	0,028	0,721	-0,022	-0,277	0,041	0,313

2 nolu yapı.

EK-8. LK8 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 8.1. LK8 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	2,063	2,065	3,743	0,000	0,026	0,882	0,894	0,000	0,010	1,116	1,106
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	-0,013	2,010	2,039	3,748	-0,002	0,030	0,890	0,901	0,001	0,009	1,113	1,104
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-0,007	2,062	2,069	3,789	0,000	0,027	0,959	0,974	-0,007	0,005	1,039	1,025
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	3,777	3,796	3,848	0,000	-0,869	0,053	0,816	0,000	-1,102	-0,033	1,171
(U)M06/ cc-pVTZ	-0,019	2,573	3,771	3,781	0,000	-0,184	0,061	0,835	0,003	-0,368	-0,059	1,155
(U)M06/ LANL2DZ	-0,012	3,804	2,260	3,884	0,001	-0,920	0,802	0,881	-0,004	-1,051	1,009	1,085
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,000	2,006	2,052	3,759	0,000	0,035	0,853	0,873	0,000	-0,006	1,144	1,126
(U)ωB97XD/ cc-pVTZ	0,000	1,998	*	3,760	0,000	0,033	*	0,883	0,000	0,012	*	1,125
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,000	1,042	2,052	3,789	0,000	0,368	0,926	0,950	0,000	0,621	1,071	1,050

1 nolu yapı *: yakınsamadı

Çizelge 8.2. LK8 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	1	3	5	1	3	5	1	3	5
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,000	1,093	3,167	0,000	0,436	0,592	0,000	0,568	0,405
(U)B3LYP/cc-pVTZ	-0,039	1,126	3,157	0,009	0,389	0,581	0,007	0,567	0,413
(U)B3LYP/LANL2DZ	-0,028	1,187	3,166	0,013	0,455	0,607	-0,006	0,499	0,416
(U)M06/LANL2DZ	0,000	3,642	3,298	0,000	-0,693	0,576	0,000	-0,557	0,299
(U)M06/cc-pVTZ	-0,018	3,611	3,293	0,006	-0,682	0,568	0,006	-0,541	0,322
(U)M06/LANL2DZ	-0,020	3,664	3,279	0,002	-0,673	0,607	-0,001	-0,498	0,324
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,000	1,085	*	0,000	0,399	*	0,000	0,592	*
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,000	*	*	0,000	*	*	0,000	*	*
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,000	1,097	*	0,000	0,453	*	0,000	0,535	*

TS1/2 *: yakınsamadı

EK-8. (devam) LK8 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 8.3. LK8 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-0,837	2,054	3,551	4,050	0,528	0,209	0,596	0,720	0,230	0,075	0,265	0,344
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	-0,013	2,133	3,640	4,111	0,009	0,156	0,557	0,714	0,013	0,054	0,234	0,344
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-0,018	2,184	3,680	4,079	0,017	0,130	0,524	0,722	0,012	0,039	0,189	0,331
(U)M06/ LANL2DZ	0,714	3,282	3,704	4,156	-0,346	-0,630	0,450	0,743	-0,121	-0,335	0,139	0,328
(U)M06/ cc-pVTZ	-0,713	3,279	3,821	4,315	0,344	-0,631	0,379	0,732	0,124	-0,332	0,111	0,327
(U)M06/ LANL2DZ	-0,616	3,301	3,800	4,182	0,300	-0,642	0,389	0,739	0,086	-0,319	0,100	0,326
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,000	2,136	3,517	4,019	0,000	0,253	0,682	0,718	0,000	0,072	0,333	0,339
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	0,000	2,207	*	4,026	0,000	0,186	*	0,714	0,000	0,048	*	0,341
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	-0,002	2,293	3,564	4,019	-0,005	0,140	0,684	0,721	-0,001	0,033	0,305	0,328

2 nolu yapı *: yakınsamadı

EK-8. (devam) LK8 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 8.4. LK8 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Ni}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,028	*	1,601	1,614	-0,008	*	0,836	0,838	-0,032	*	1,163	1,160
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	*	*	1,643	1,658	*	*	0,850	0,851	*	*	1,151	1,148
(U)B3LYP/ LANL2DZ	*	*	1,619	1,628	*	*	0,903	0,903	*	*	1,095	1,092
(U)M06/ LANL2DZ	-0,003	-0,057	1,635	1,654	-0,014	0,882	0,858	0,866	0,008	1,117	1,138	1,129
(U)M06/ cc-pVTZ	0,011	-0,009	1,680	1,707	0,013	0,882	0,864	0,871	-0,007	1,115	1,136	1,126
(U)M06/ LANL2DZ	0,002	-0,008	1,644	1,661	0,008	0,960	0,929	0,931	-0,002	1,039	1,066	1,064
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,680	0,868	1,708	1,713	-0,244	0,342	0,842	0,848	-0,518	0,699	1,160	1,157
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	0,001	0,063	1,729	1,721	0,001	0,740	0,853	0,861	-0,002	1,084	1,138	1,147
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,138	0,073	1,716	1,719	-0,071	0,773	0,908	0,915	-0,169	1,035	1,093	1,088

1 nolu yapı *: yakınsamadı

EK-8. (devam) LK8 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 8.5. LK8 ligandının Ni(II) metali ile oluşturturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Ni}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	2,992	3,023	*	0,000	-0,665	0,627	*	0,000	-0,341	0,321	*
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,000	1,060	1,922	*	0,000	0,695	0,706	*	0,000	0,376	0,392	*
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	1,132	1,808	*	0,000	0,701	0,710	*	0,000	0,354	0,371	*
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	1,050	1,814	1,800	0,000	0,718	0,758	0,721	0,000	0,376	0,317	0,364
(U)M06/ cc-pVTZ	0,000	1,058	1,805	1,803	0,000	0,710	0,750	0,720	0,000	0,368	0,316	0,353
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	1,094	1,793	1,785	0,000	0,732	0,755	0,730	0,000	0,340	0,313	0,337
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,000	1,378	1,860	1,844	0,000	0,727	0,729	0,730	0,000	0,332	0,336	0,335
(U)ωB97XD/ cc-pVTZ	0,000	0,682	1,798	1,794	0,000	0,735	0,727	0,728	0,000	0,330	0,335	0,333
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,000	0,667	1,843	1,828	0,000	0,742	0,733	0,734	0,000	0,319	0,327	0,326

2 nolu yapı *: yakınsamadı

Çizelge 8.6. LK8 ligandının Co(II) metali ile oluşturturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Co}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,062	1,101	2,667	0,068	0,779	0,828	-0,049	1,149	1,168
(U)B3LYP/cc-pVTZ	1,058	1,106	2,612	0,053	0,786	0,815	-0,052	1,134	1,102
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,105	1,134	2,703	0,051	0,829	0,899	-0,093	1,073	1,092
(U)M06/LANL2DZ	2,705	1,126	2,695	-0,885	0,789	0,895	-1,092	1,089	1,100
(U)M06/cc-pVTZ	0,922	1,098	2,666	0,016	0,748	0,901	0,023	1,046	1,097
(U)M06/LANL2DZ	0,956	2,645	2,742	0,004	0,298	0,958	0,023	-0,645	1,038
(U)ωB97XD/LANL2DZ	-1,013	2,790	2,768	0,838	0,325	0,844	1,132	-0,544	1,156
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,056	1,058	2,754	0,355	0,753	0,857	0,593	1,157	1,147
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,060	1,101	2,780	0,380	0,791	0,920	0,572	1,116	1,081

1 nolu yapı.

EK-8. (devam) LK8 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 8.7. LK8 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Co}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,139	3,961	4,182	-0,699	-0,652	0,442	-0,345	-0,345	0,154
(U)B3LYP/cc-pVTZ	1,569	2,067	2,981	0,023	0,685	0,594	0,120	0,365	0,347
(U)B3LYP/LANL2DZ	*	2,131	2,863	0,263	0,699	0,563	0,021	0,339	0,280
(U)M06/LANL2DZ	1,049	2,327	2,992	0,303	0,631	0,737	0,088	0,242	0,318
(U)M06/cc-pVTZ	1,073	2,361	2,990	0,269	0,637	0,737	0,074	0,246	0,314
(U)M06/LANL2DZ	1,110	2,391	2,990	0,255	0,597	0,736	0,058	0,206	0,309
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,717	2,449	2,943	0,595	0,720	0,729	0,297	0,322	0,323
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	-0,113	2,477	2,892	0,581	0,718	0,728	0,277	0,319	0,322
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,738	2,476	2,932	0,589	0,726	0,730	0,268	0,310	0,313

2 nolu yapı *: yakınsamadi

Çizelge 8.8. LK8 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,916	4,765	4,771	-0,769	-0,781	0,020	-1,129	-1,145	0,045
(U)B3LYP/cc-pVTZ	1,235	0,759	4,784	-0,003	-0,005	0,022	-0,228	-0,077	0,051
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,479	4,773	4,765	-0,077	-0,839	0,029	-0,376	-1,058	0,088
(U)M06/LANL2DZ	3,103	4,831	4,811	-0,840	-0,836	0,011	-1,120	-1,115	0,054
(U)M06/cc-pVTZ	3,044	4,852	4,845	-0,839	-0,840	0,007	-1,114	-1,110	0,051
(U)M06/LANL2DZ	3,100	4,838	4,800	-0,886	-0,885	0,009	-1,061	-1,049	0,098
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,967	1,066	4,815	-0,061	0,803	0,019	0,106	1,139	0,010
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	-0,315	1,972	4,774	0,436	0,363	0,019	0,848	0,688	0,013
(U)ωB97XD/LANL2DZ	-0,088	2,053	3,002	0,315	0,388	0,909	0,733	0,639	1,068

1 nolu yapı.

EK-8. (devam) LK8 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 8.9. LK8 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,088	2,081	3,845	-0,464	0,426	0,593	-0,371	0,358	0,321
(U)B3LYP/cc-pVTZ	2,541		3,888	-0,523	-0,598	0,568	-0,345	0,402	0,317
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,421	2,244	3,868	-0,564	0,394	0,600	0,365	0,268	0,300
(U)M06/LANL2DZ	2,487	4,511	4,403	-0,570	-0,672	0,557	-0,588	-0,540	0,295
(U)M06/cc-pVTZ	2,341	4,588	4,447	-0,539	-0,674	0,548	-0,568	-0,523	0,311
(U)M06/LANL2DZ	2,463	2,832	4,378	-0,585	0,652	0,594	-0,530	0,220	0,325
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,933	2,120	4,433	-0,003	0,397	0,524	0,091	0,585	0,281
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	1,997	2,100	4,289	-0,384	0,411	0,451	-0,565	0,568	0,336
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,916	2,120	4,381	0,022	0,452	0,566	0,082	0,533	0,335

TS1/2

Çizelge 8.10. LK8 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,668	3,244	4,109	-0,404	-0,090	0,661	-1,225	-0,006	0,376
(U)B3LYP/cc-pVTZ		3,065	4,084	-0,415	0,044	0,659	-1,002	0,029	0,399
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,115	3,051	4,082	-0,051	0,056	0,680	0,994	0,034	0,376
(U)M06/LANL2DZ	2,253	4,310	4,415	-0,469	-0,568	0,739	-0,178	-0,288	0,308
(U)M06/cc-pVTZ	2,202	4,357	4,425	-0,479	-0,579	0,731	-0,165	-0,281	0,310
(U)M06/LANL2DZ	2,172	4,304	4,434	-0,428	-0,558	0,737	-0,139	-0,258	0,305
(U)ωB97XD/LANL2DZ	2,315	4,469	4,436	-0,612	-0,641	0,709	-0,341	-0,345	0,334
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	2,211	2,508	4,381	-0,606	0,652	0,705	-0,318	0,340	0,334
(U)ωB97XD/LANL2DZ	1,167	2,656	4,465	0,090	0,657	0,717	0,051	0,321	0,321

2 nolu yapı.

EK-8. (devam) LK8 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 8.11. LK8 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-1,798	3,872	3,956	4,042	0,687	-0,726	-0,200	0,804	1,073	-1,102	0,102	1,179
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	-1,725	3,865	3,754	4,064	0,704	-0,734	-0,105	0,817	1,004	-1,075	0,156	1,171
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-0,007	3,809	3,817	4,027	-0,011	-0,771	-0,114	0,880	0,001	-0,991	0,282	1,113
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	3,980	3,948	4,120	0,000	-0,757	-0,037	0,846	0,000	-1,100	0,295	1,150
(U)M06/ cc-pVTZ	0,000	4,014	4,019	-2,098	0,000	-0,767	-0,037	0,849	0,000	-1,089	0,321	1,131
(U)M06/ LANL2DZ	0,001	3,920	3,816	4,102	0,000	-0,795	0,024	0,922	-0,001	-1,001	0,383	1,076
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,058	1,173	3,988	4,001	-0,036	0,082	0,011	0,856	-0,012	0,747	0,029	1,147
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	0,000	1,926	3,934	3,949	0,000	-0,066	0,011	0,868	0,000	0,163	0,041	1,138
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,000	1,135	3,958	3,992	0,000	0,166	0,007	0,934	0,000	0,706	0,064	1,070

1 nolu yapı.

EK-8. (devam) LK8 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 8.12. LK8 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	3,032	3,013	3,412	0,000	-0,473	0,420	0,522	0,000	-0,323	0,368	0,480
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,000	3,024	3,057	3,201	0,000	-0,476	0,411	0,479	0,000	-0,301	0,360	0,421
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	1,153	3,015	3,050	0,000	0,384	0,434	0,435	0,000	0,305	0,341	0,342
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	3,414	3,369	*	0,000	-0,556	0,342	*	0,000	-0,549	0,595	*
(U)M06/ cc-pVTZ	0,000	3,508	3,465	*	0,000	-0,563	0,346	*	0,000	-0,539	0,586	*
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	3,380	3,346	*	0,000	-0,570	0,408	*	0,000	-0,486	0,548	*
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,000	1,818	3,129	3,983	0,000	0,056	0,386	0,545	0,000	0,197	0,601	0,500
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	0,000	1,772	3,094	3,936	0,000	0,087	0,399	0,547	0,000	0,207	0,591	0,497
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	-0,043	1,713	3,119	3,961	-0,035	0,141	0,439	0,581	-0,024	0,215	0,557	0,457

TS1/2 *: yakınsamadı

EK-8. (devam) LK8 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 8.13. LK8 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-0,171	2,167	3,044	*	-0,021	-0,194	0,573	*	0,171	0,111	0,433	*
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	*	2,156	3,111	*	*	-0,141	0,536	*	*	0,105	0,443	*
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-0,004	2,180	3,108	*	-0,008	-0,141	0,562	*	-0,016	0,107	0,146	*
(U)M06/ LANL2DZ	0,193	3,053	3,514	4,284	-0,122	-0,423	0,593	0,722	-0,052	-0,124	0,382	0,309
(U)M06/ cc-pVTZ	-0,064	3,063	3,496	4,330	-0,018	-0,426	0,591	0,712	0,037	-0,108	0,376	0,312
(U)M06/ LANL2DZ	0,235	3,001	3,529	4,243	-0,044	-0,385	0,618	0,725	-0,090	-0,092	0,359	0,303
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,000	3,239	3,422	4,151	0,000	-0,572	0,619	0,701	0,000	-0,272	0,379	0,331
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	0,000	3,071	3,289	4,072	0,000	-0,543	0,622	0,701	0,000	-0,231	0,373	0,330
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,063	3,218	3,412	4,103	-0,072	-0,566	0,631	0,711	-0,004	-0,243	0,366	0,318

2 *: yakınsamadı

EK-9. LK9 ligandının 4 farklı metal (Fe(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 9.1. LK9 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	2,022	2,020	2,062	3,768	-0,854	0,041	0,879	0,874	-1,092	0,016	1,110	1,119
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,007	2,006	2,052	3,784	0,001	0,042	0,893	0,887	-0,003	0,017	1,108	1,110
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-0,005	2,022	2,072	3,775	-0,001	0,043	0,922	0,919	0,000	0,015	1,070	1,073
(U)M06/ LANL2DZ	-0,026	3,764	2,143	3,801	-0,014	-0,835	0,820	0,841	0,035	-1,116	1,124	1,134
(U)M06/ cc-pVTZ	-1,500	2,068	2,148	3,811	0,553	0,047	0,827	0,848	0,915	-0,046	1,113	1,119
(U)M06/ LANL2DZ	0,023	2,301	2,310	3,824	0,014	0,034	0,858	0,888	-0,028	-0,200	1,005	1,064
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,014	2,019	2,051	3,769	-0,001	0,027	0,876	0,866	-0,012	0,009	1,123	1,134
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	-0,001	0,027	2,012	3,785	0,000	0,855	0,890	0,874	0,001	1,112	1,116	1,134
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	-0,003	2,022	2,052	3,790	-0,002	0,026	0,932	0,924	0,005	0,012	1,067	1,073

1 nolu yapı.

Çizelge 9.2. LK9 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	1	3	5	1	3	5	1	3	5
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,000	1,090	3,022	0,000	0,426	0,620	0,000	0,549	0,469
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,042	1,090	3,029	-0,012	0,435	0,604	0,002	0,536	0,469
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,040	1,095	3,029	-0,011	0,447	0,627	0,008	0,523	0,457
(U)M06/LANL2DZ	1,118	1,814	3,081	-0,499	0,141	0,572	-0,562	0,220	0,476
(U)M06/cc-pVTZ	0,000	1,156	3,056	0,000	0,421	0,565	0,000	0,496	0,494
(U)M06/LANL2DZ	0,011	1,821	3,080	0,001	0,195	0,592	0,003	0,187	0,470
(U) ω B97XD/LANL2DZ	1,127	1,058	3,030	-0,500	0,426	0,602	-0,563	0,569	0,485
(U) ω B97XD/cc-pVTZ	1,090	1,101	2,957	-0,492	0,429	0,594	-0,550	0,551	0,506
(U) ω B97XD/LANL2DZ	0,062	1,082	3,043	0,008	0,478	0,611	-0,010	0,525	0,473

TS1/2

EK-9. (devam) LK9 ligandının 4 farklı metal (Fe(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 9.3. LK9 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,799	2,016	3,558	3,998	-0,496	0,149	0,534	0,596	-0,171	0,042	0,178	0,247
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	-0,111	2,178	3,671	4,051	0,060	0,067	0,475	0,556	0,026	0,040	0,146	0,213
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-0,111	2,217	3,599	4,023	0,058	0,073	0,509	0,569	0,026	0,040	0,152	0,206
(U)M06/ LANL2DZ	-0,359	3,168	3,682	4,103	0,157	-0,539	0,473	0,527	0,040	-0,281	0,118	0,135
(U)M06/ cc-pVTZ	-0,337	3,140	3,764	4,178	0,140	-0,542	0,396	0,471	0,042	-0,268	0,093	0,112
(U)M06/ LANL2DZ	-0,337	3,181	3,709	4,112	0,139	-0,539	0,451	0,494	0,031	-0,275	0,103	0,112
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,000	1,180	3,318	3,939	0,000	0,593	0,685	0,693	0,000	0,345	0,367	0,326
(U)ωB97XD/ cc-pVTZ	0,000	*	3,263	3,917	0,000	*	0,688	0,684	0,000	*	0,355	0,315
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	-0,002	*	3,354	3,930	0,001	*	0,694	0,697	0,003	*	0,343	0,316

2 nolu yapı *: yakınsamadı

Çizelge 9.4. LK9 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Co}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	-1,012	1,123	2,690	0,816	0,798	0,839	1,131	1,114	1,154
(U)B3LYP/cc-pVTZ	1,051	1,126	2,729	0,027	0,745	0,852	-0,031	1,102	1,138
(U)B3LYP/LANL2DZ	-0,997	1,129	2,714	0,838	0,823	0,891	1,103	1,082	1,102
(U)M06/LANL2DZ	0,971	1,076	2,686	0,043	0,858	0,858	0,053	1,127	1,135
(U)M06/cc-pVTZ	0,172	1,064	2,717	0,284	0,864	0,865	0,572	1,125	1,130
(U)M06/LANL2DZ	0,965	1,082	2,758	0,043	0,910	0,913	0,070	1,071	1,080
(U)ωB97XD/LANL2DZ	-1,022	2,026	2,738	0,860	0,293	0,866	1,110	0,674	1,135
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,059	1,091	2,751	0,357	0,775	0,881	0,587	1,113	1,125
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,049	1,118	2,770	0,371	0,804	0,923	0,579	1,089	1,078

1 nolu yapı.

EK-9. (devam) LK9 ligandının 4 farklı metal (Fe(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 9.5. LK9 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Co}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)M06/LANL2DZ	0,598	2,356	*	0,447	0,589	*	0,183	0,194	*
(U)M06/cc-pVTZ	0,404	2,376	*	0,465	0,586	*	0,179	0,195	*
(U)M06/LANL2DZ	0,729	2,380	*	0,400	0,576	*	0,143	0,180	*
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,345	2,402	2,900	0,555	0,700	0,309	0,229	0,330	0,734
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,239	2,387	2,852	0,534	0,699	0,731	0,205	0,322	0,306
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,344	2,422	2,887	0,557	0,705	0,730	0,228	0,322	0,314

TS1/2

Çizelge 9.6. LK9 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,951	4,802	4,781	-0,786	-0,843	0,024	-1,104	-1,102	0,053
(U)B3LYP/cc-pVTZ	2,933	3,012	4,784	-0,791	0,010	0,025	-1,082	0,032	0,066
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,916	4,805	4,767	-0,820	-0,884	0,034	-1,029	-1,039	0,093
(U)M06/LANL2DZ	3,046	4,767	4,715	-0,822	-0,811	-0,007	-1,088	-1,098	0,166
(U)M06/cc-pVTZ	3,023	4,787	4,761	-0,827	-0,817	-0,015	-1,076	-1,089	0,166
(U)M06/LANL2DZ	3,034	3,854	4,662	-0,851	-0,099	0,023	-1,039	-0,468	0,223
(U)ωB97XD/LANL2DZ	2,999	2,991	4,799	-0,847	0,015	0,020	-1,112	0,031	0,016
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	1,050	1,966	3,003	-0,013	0,405	0,873	-0,040	0,667	1,133
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,054	1,060	3,028	0,346	0,886	0,908	0,578	1,072	1,077

1 nolu yapı.

EK-9. (devam) LK9 ligandının 4 farklı metal (Fe(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 9.7. LK9 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,161	2,207	4,205	-0,495	0,406	0,554	-0,552	0,499	0,410
(U)B3LYP/cc-pVTZ	2,149	2,286	4,177	-0,502	0,399	0,559	-0,533	0,441	0,434
(U)B3LYP/LANL2DZ	2,154	2,283	4,188	-0,517	0,422	0,579	-0,516	0,422	0,419
(U)M06/LANL2DZ	2,372	4,360	4,245	-0,551	-0,557	0,532	-0,554	-0,590	0,426
(U)M06/cc-pVTZ	2,270	2,300	4,287	-0,530	0,454	0,524	-0,532	0,495	0,444
(U)M06/LANL2DZ	2,358	2,418	4,226	-0,568	0,507	0,566	-0,510	0,426	0,432
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,023	2,090	4,198	0,408	0,431	0,535	0,557	0,560	0,418
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,980	2,097	4,077	0,011	0,452	0,552	0,051	0,522	0,470
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,990	2,094	4,168	0,012	0,469	0,567	0,045	0,519	0,435

TS1/2

Çizelge 9.8. LK9 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)B3LYP/LANL2DZ	4,205	1,598	3,891	0,554	-0,318	-0,389	0,410	-0,081	-0,170
(U)B3LYP/cc-pVTZ	1,492	3,831	4,274	-0,261	-0,355	0,726	-0,053	-0,138	0,309
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,540	3,872	4,294	-0,218	-0,371	0,720	-0,069	-0,148	0,316
(U)M06/LANL2DZ	1,931	4,094	4,336	-0,382	-0,460	0,728	-0,119	-0,211	0,309
(U)M06/cc-pVTZ	2,041	4,100	4,326	-0,455	-0,465	0,724	-0,201	-0,193	0,310
(U)M06/LANL2DZ	1,915	4,088	4,344	-0,373	-0,447	0,724	-0,107	-0,196	0,312
(U)ωB97XD/LANL2DZ	2,075	4,322	4,338	-0,575	-0,634	0,699	-0,268	-0,332	0,342
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	1,938	4,249	4,261	-0,532	-0,631	0,699	-0,208	-0,324	0,340
(U)ωB97XD/LANL2DZ	2,314	2,351	4,352	-0,685	0,649	0,707	-0,334	0,323	0,332

2

EK-9. (devam) LK9 ligandının 4 farklı metal (Fe(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 9.9. LK9 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	1	3	7	1	3	7	1	3	7
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,702	*	4,050	-0,666	*	0,889	-0,995	*	1,112
(U)B3LYP/cc-pVTZ	0,000	*	4,049	0,000	*	0,902	0,000	*	1,106
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,000	*	4,038	0,000	*	0,952	0,000	*	1,050
(U)M06/LANL2DZ	-1,708	3,877	4,095	0,694	-0,720	0,865	0,979	-0,994	1,136
(U)M06/cc-pVTZ	1,731	3,903	4,133	-0,653	-0,714	0,872	-0,951	-0,959	1,131
(U)M06/LANL2DZ	-0,079	3,810	4,083	0,066	-0,723	0,924	0,024	-0,916	1,079
(U)ωB97XD/LANL2DZ	-0,004	3,952	4,013	0,000	-0,832	0,878	0,021	-1,090	1,126
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,000	3,900	3,973	0,000	-0,832	0,893	0,000	-1,064	1,118
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,000	3,919	4,005	-0,010	-0,860	0,940	-0,009	-1,027	1,065

1 nou yapı *: yakınsamadı

Çizelge 9.10. LK9 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	1	3	5	1	3	5	1	3	5
(U)B3LYP/LANL2DZ	1,007	3,155	3,297	-0,442	-0,512	0,374	-0,513	-0,519	0,531
(U)B3LYP/cc-pVTZ	1,002	3,153	3,255	-0,420	-0,521	0,391	-0,501	-0,494	0,543
(U)B3LYP/LANL2DZ	0,007	3,144	3,287	-0,004	-0,533	0,413	-0,004	-0,481	0,508
(U)M06/LANL2DZ	0,000	3,294	3,280	0,000	-0,551	0,395	0,000	-0,501	0,565
(U)M06/cc-pVTZ	0,000	3,356	3,334	0,000	-0,566	0,402	0,000	-0,490	0,554
(U)M06/LANL2DZ	0,000	3,273	3,270	0,000	-0,568	0,437	0,000	-0,453	0,530
(U)ωB97XD/LANL2DZ	1,049	1,773	3,093	-0,461	0,081	0,425	-0,557	0,201	0,573
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	*	1,372	3,075	*	0,264	0,436	*	0,404	0,562
(U)ωB97XD/LANL2DZ	-0,019	1,679	3,092	0,004	0,154	0,459	0,005	0,220	0,541

TS1/2 *: yakınsamadı

EK-9. (devam) LK9 ligandının 4 farklı metal (Fe(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 9.11. LK9 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	3,048	3,181	4,194	0,000	-0,553	0,589	0,727	0,000	-0,288	0,396	0,302
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,000	2,987	3,173	4,171	0,000	-0,527	0,596	0,727	0,000	-0,246	0,389	0,302
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	3,037	3,189	4,169	0,000	-0,554	0,605	0,724	0,000	-0,261	0,380	0,304
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	2,879	3,339	4,250	0,000	-0,364	0,586	0,732	0,000	-0,125	0,397	0,303
(U)M06/ cc-pVTZ	0,000	2,929	3,353	4,275	0,000	-0,407	0,581	0,726	0,000	-0,122	0,394	0,305
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	2,835	3,349	4,233	0,000	-0,331	0,603	0,734	0,000	-0,089	0,380	0,300
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,043	2,734	3,166	3,171	-0,014	-0,272	0,601	0,607	-0,043	-0,020	0,403	0,396
(U)ωB97XD/ cc-pVTZ	-0,012	2,608	3,112	3,120	-0,006	-0,236	0,607	0,613	-0,017	-0,005	0,395	0,389
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	-0,040	2,717	3,178	3,181	0,010	-0,239	0,617	0,622	0,040	-0,007	0,386	0,380

2 nolu yapı.

EK-10. LK10 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 10.1. LK10 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	2,043	2,043	2,080	3,736	-0,862	0,036	0,887	0,891	-1,095	0,009	1,109	1,105
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,000	2,027	2,057	3,749	0,000	0,037	0,899	0,903	0,000	0,007	1,105	1,101
(U)B3LYP/ LANL2DZ	*	2,046	2,057	3,749	*	0,039	0,899	0,903	*	0,004	1,105	1,101
(U)M06/ LANL2DZ	-2,031	3,741	2,093	3,754	0,867	-0,871	0,855	0,865	1,081	-1,094	1,106	1,120
(U)M06/ cc-pVTZ	0,000	2,037	0,384	3,772	0,000	0,026	-0,046	0,872	0,000	0,000	0,095	1,112
(U)M06/ LANL2DZ	-2,018	3,762	2,154	3,788	0,903	-0,901	0,888	0,915	1,032	-1,050	1,012	1,061
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	-0,003	3,737	2,056	3,749	-0,016	-0,874	0,880	0,884	0,009	-1,102	1,119	1,116
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	0,000	1,997	2,000	3,748	0,000	0,032	0,893	0,896	0,000	0,001	1,111	1,109
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,050	1,078	2,055	3,784	-0,051	0,428	0,940	0,945	0,005	0,594	1,059	1,053

1 nolu yapı *: yakınsamadı

EK-10. (devam) LK10 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 10.2. LK10 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,000	1,114	2,949	3,709	0,000	0,403	0,659	0,559	0,000	0,550	0,491	0,496
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	0,036	1,103	2,977	4,064	-0,002	0,418	0,632	0,676	-0,004	0,539	0,482	0,509
(U)B3LYP/ LANL2DZ	0,024	1,112	2,979	3,988	0,002	0,425	0,655	0,686	0,004	0,528	0,471	0,499
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	3,195	4,020	3,976	0,000	-0,454	-0,351	0,694	0,000	-0,615	-0,461	0,544
(U)M06/ cc-pVTZ	0,000	1,224	3,236	4,146	0,000	0,330	0,648	0,660	0,000	0,535	0,394	0,522
(U)M06/ LANL2DZ	0,034	3,194	3,329	4,408	-0,006	-0,474	0,663	0,685	-0,014	-0,559	0,364	0,502
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,000	1,082	2,957	*	0,000	0,410	0,644	*	0,000	0,565	0,508	*
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	0,000	1,053	2,916	*	0,000	0,424	0,622	*	0,000	0,561	0,513	*
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,033	2,224	3,025	*	0,005	-0,025	0,627	*	-0,010	0,007	0,481	*

TS1/2 *: yakınsamadı

EK-10. (devam) LK10 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 10.3. LK10 ligandının Fe(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Fe}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-0,639	2,161	3,507	4,003	0,415	0,270	0,554	0,722	0,124	0,050	0,181	0,322
(U)B3LYP/ cc-pVTZ	-0,021	2,229	3,620	4,147	0,015	0,216	0,499	0,719	0,004	0,036	0,150	0,331
(U)B3LYP/ LANL2DZ	-0,017	2,255	3,605	4,051	0,014	0,218	0,496	0,724	0,003	0,029	0,135	0,331
(U)M06/ LANL2DZ	0,383	2,388	3,652	4,063	-0,219	0,166	0,493	0,541	-0,050	0,034	0,115	0,152
(U)M06/ cc-pVTZ	0,001	2,385	3,773	4,175	0,000	0,125	0,419	0,489	0,000	0,023	0,093	0,131
(U)M06/ LANL2DZ	0,141	2,459	3,179	4,106	-0,060	0,137	0,447	0,503	-0,001	0,023	0,093	0,120
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	1,296	1,137	3,440	3,999	-0,615	0,586	0,683	0,725	-0,257	0,374	0,294	0,333
(U)ωB97XD/ cc-pVTZ	0,002	1,138	3,461	4,100	0,000	0,607	0,663	0,721	0,000	0,332	0,274	0,333
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,045	1,166	3,490	4,031	0,011	0,601	0,673	0,725	0,002	0,350	0,277	0,332

2 nolu yapı.

Çizelge 10.4. LK10 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Ni}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)M06/ LANL2DZ	0,013	0,005	1,524	*	0,001	0,919	0,870	*	-0,014	1,073	1,125	*
(U)M06/ cc-pVTZ	0,000	0,005	*	*	0,000	0,918	*	*	0,000	1,071	*	*
(U)M06/ LANL2DZ	-0,020	0,005	*	*	-0,003	0,961	*	*	0,025	1,029	*	*
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	-0,001	-0,065	1,664	1,670	0,000	0,894	0,875	0,885	0,000	1,095	1,127	1,115
(U)ωB97XD/ cc-pVTZ	0,000	-0,053	1,669	1,670	0,000	0,897	0,887	0,896	0,000	1,089	1,120	1,110
(U)ωB97XD/ LANL2DZ	0,002	0,007	1,694	1,689	0,000	0,951	0,927	0,938	0,000	1,040	1,075	1,063

1 nolu yapı *: yakınsamadı

EK-10. (devam) LK10 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 10.5. LK10 ligandının Ni(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Ni}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)M06/LANL2DZ	1,065	1,005	1,703	1,754	-0,613	0,745	0,735	0,743	-0,319	0,356	0,349	0,350
(U)M06/cc-pVTZ	0,000	1,030	1,741	1,819	0,000	0,732	0,726	0,734	0,000	0,346	0,340	0,338
(U)M06/LANL2DZ	1,085	1,046	1,709	1,721	-0,618	0,748	0,373	0,740	-0,316	0,336	0,334	0,331
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,000	1,294	1,803	1,849	0,000	0,703	0,726	0,728	0,000	0,361	0,326	0,332
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,000	1,245	1,800	1,817	0,000	0,706	0,725	0,717	0,000	0,352	0,321	0,329
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,000	1,328	1,805	1,821	0,000	0,713	0,726	0,719	0,000	0,343	0,325	0,328

2 nolu yapı.

Çizelge 10.6. LK10 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Co}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)M06/LANL2DZ	1,008	1,095	2,731	0,046	0,861	0,852	0,035	1,127	1,139
(U)M06/cc-pVTZ	*	1,091	2,761	*	0,864	0,864	*	1,125	1,131
(U)M06/LANL2DZ	*	1,098	2,770	*	0,916	0,907	*	1,065	1,081
(U)ωB97XD/LANL2DZ	1,024	1,058	2,675	0,036	0,875	0,905	0,003	1,125	1,096
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,063	1,052	2,676	0,349	0,884	0,911	0,597	1,108	1,092
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,064	1,056	2,724	0,371	0,932	0,962	0,577	1,068	1,040

1 nolu yapı *: yakınsamadı

Çizelge 10.7. LK10 ligandının Co(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Co}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)M06/LANL2DZ	0,998	2,192	2,859	0,311	0,604	0,640	0,091	0,156	0,253
(U)M06/cc-pVTZ	1,041	2,255	2,900	0,268	0,602	0,643	0,071	0,170	0,256
(U)M06/LANL2DZ	1,088	2,270	2,879	0,274	0,565	0,624	0,069	0,140	0,229
(U)ωB97XD/LANL2DZ	2,389	2,344	2,879	-0,644	0,677	0,714	-0,342	0,363	0,333
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	1,512	2,303	2,875	0,049	0,682	0,715	0,058	0,354	0,325
(U)ωB97XD/LANL2DZ	-0,070	2,358	2,894	0,683	0,704	0,719	0,339	0,342	0,324

2 nolu yapı.

EK-10. (devam) LK10 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 10.8. LK10 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)M06/LANL2DZ	3,041	4,696	4,449	-0,831	-0,824	0,028	-1,085	-1,093	0,407
(U)M06/cc-pVTZ	3,027	3,336	4,308	-0,834	0,033	0,039	-1,079	-0,298	0,646
(U)M06/LANL2DZ	3,021	4,447	4,393	-0,860	-0,271	0,115	-1,029	-0,555	0,482
(U)ωB97XD/LANL2DZ	2,995	2,989	3,015	-0,858	0,017	0,883	-1,106	0,022	1,120
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,057	2,427	2,972	0,335	0,274	0,896	0,598	0,358	1,113
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,064	1,060	3,056	0,367	0,901	0,946	0,575	1,049	1,046

1 nolu yapı.

Çizelge 10.9. LK10 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)M06/LANL2DZ	2,395	4,348	4,191	-0,600	-0,632	0,564	-0,531	-0,516	0,444
(U)M06/cc-pVTZ	*	4,411	4,235	*	-0,631	0,549	*	-0,500	0,456
(U)M06/LANL2DZ	*	2,592	4,191	*	0,586	0,581	*	0,360	0,446
(U)ωB97XD/LANL2DZ	2,170	4,049	4,201	-0,540	-0,548	0,567	-0,530	-0,229	0,370
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,991	2,876	4,077	0,015	0,050	0,577	0,035	0,224	0,426
(U)ωB97XD/LANL2DZ	2,155	2,101	4,172	-0,556	0,549	0,589	-0,495	0,458	0,404

TS1/2 *: yakınsamadı

Çizelge 10.10. LK10 ligandının Mn(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Mn}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	2	4	6	2	4	6	2	4	6
(U)M06/LANL2DZ	2,037	4,159	4,285	-0,378	-0,528	0,748	-0,105	-0,263	0,301
(U)M06/cc-pVTZ	2,060	4,188	4,284	-0,342	-0,538	0,742	-0,143	-0,253	0,305
(U)M06/LANL2DZ	4,191	1,871	4,161	0,581	-0,282	-0,518	0,446	-0,040	-0,243
(U)ωB97XD/LANL2DZ	1,624	3,491	4,307	-0,329	0,039	0,740	-0,053	0,051	0,301
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	1,557	3,470	4,233	-0,248	0,032	0,736	-0,074	0,046	0,302
(U)ωB97XD/LANL2DZ	1,695	3,544	4,331	-0,286	0,027	0,730	-0,090	0,047	0,309

2 nolu yapı.

EK-10. (devam) LK10 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 10.11. LK10 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste 1 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)M06/LANL2DZ	0,000	3,944	3,346	4,085	0,000	- 0,767	0,329	0,873	0,000	- 1,025	0,496	1,130
(U)M06/cc-pVTZ	0,000	3,977	*	4,109	0,000	- 0,766	*	0,880	0,000	- 1,008	*	1,126
(U)M06/LANL2DZ	0,000	0,369	*	4,066	0,000	0,730	*	0,936	0,000	0,927	*	1,070
(U)ωB97XD/LANL2DZ	- 1,963	3,937	3,924	4,010	0,825	- 0,794	- 0,003	0,886	1,118	- 1,119	0,107	1,119
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	0,085	2,331	3,866	3,969	- 0,006	0,010	0,001	0,897	- 0,074	- 0,348	0,134	1,112
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,000	0,123	2,328	4,001	0,000	0,833	0,776	0,951	0,000	1,024	0,907	1,056

1 nolu yapı *: yakınsamadı.

Çizelge 10.12. LK10 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste TS1/2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}			ρ_{O_a}			ρ_{O_b}		
	1	3	5	1	3	5	1	3	5
(U)M06/LANL2DZ	0,000	3,400	3,359	0,000	-0,617	0,463	0,000	-0,472	0,495
(U)M06/cc-pVTZ	0,000	3,461	3,393	0,000	-0,621	0,468	0,000	-0,466	0,493
(U)M06/LANL2DZ	0,000	3,375	3,348	0,000	-0,623	0,498	0,000	-0,434	0,467
(U)ωB97XD/LANL2DZ	-1,060	1,057	3,126	0,506	0,456	0,464	0,523	0,516	0,525
(U)ωB97XD/cc-pVTZ	-0,008	1,957	3,094	-0,029	0,037	0,472	0,034	0,090	0,520
(U)ωB97XD/LANL2DZ	0,000	1,070	3,117	0,000	0,532	0,495	0,000	0,436	0,496

TS1/2

EK-10. (devam) LK10 ligandının beş farklı metal (Fe(II), Ni(II), Co(II), Mn(II), Cr(II)) ile oluşturduğu kompleksinde 1, TS1/2 ve 2 nolu yapılarının üç farklı seviyede Mulliken spin yoğunlukları

Çizelge 10.13. LK10 ligandının Cr(II) metali ile oluşturduğu komplekste 2 nolu yapının Mulliken spin yoğunluğu.

Seviye	ρ_{Cr}				ρ_{O_a}				ρ_{O_b}			
	1	3	5	7	1	3	5	7	1	3	5	7
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	2,809	3,369	4,240	0,000	-0,271	0,003	0,733	0,000	-0,018	0,051	0,305
(U)M06/ cc-pVTZ	0,000	2,803	3,427	4,259	0,000	-0,273	-0,003	0,726	0,000	-0,013	0,049	0,308
(U)M06/ LANL2DZ	0,000	2,781	3,359	4,218	0,000	-0,246	0,002	0,736	0,000	-0,005	0,046	0,299
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,000	2,603	3,181	4,163	0,000	-0,214	0,619	0,738	0,000	0,008	0,380	0,295
(U) ω B97XD/ cc-pVTZ	0,000	2,442	3,119	4,102	0,000	-0,167	0,623	0,738	0,000	0,019	0,374	0,296
(U) ω B97XD/ LANL2DZ	0,000	2,580	3,179	4,135	0,000	-0,183	0,634	0,733	0,000	0,018	0,364	0,298

2 nolu yapı.

EK-11. Katyonik Ligand – Metal Komplekslerinin 1 ve 2 numaralı yapılarının üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ, UøB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) Rölatif Enerjileri (kkal·mol⁻¹)

Çizelge 11.1. Katyonik Ligand – Metal Komplekslerinin 1 ve 2 numaralı yapılarının UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde rölatif enerjileri (kkal·mol⁻¹).

	Yapı	2S+1	LK1	LK2	LK3	LK4	LK5	LK6	LK7	LK8	LK9	LK10
Fe(II)	1	1	17,9	32,3	87,6	33,0	53,6	33,6	30,2	36,8	65,8	29,0
		3	12,2	26,4	7,8	24,5	32,6	23,0	20,2	6,8	18,8	20,5
		5	0,0	18,3	0,0	13,1	16,8	13,7	9,7	25,1	9,8	12,5
		7	28,5	0,0	2,2	0,0	0,0	0,00	0,0	0,0	0,0	0,0
	2	1	18,4	50,0	16,4	36,5	37,3	34,6	32,0	25,7	18,8	27,8
		3	1,4	13,4	3,0	12,6	25,0	12,0	17,2	63,3	12,0	21,2
		5	4,4	10,6	4,3	14,6	14,6	16,1	10,9	54,7	11,3	12,4
		7	13,6	23,6	30,4	21,5	22,5	19,3	29,7	99,1	22,5	31,2
Ni(II)	1	1	41,0	11,8	9,3	10,5	35,7	9,6	39,2	0,0	11,9	10,7
		3	9,1	0,5	0,2	1,0	2,5	0,0	0,0	59,6	0,0	0,0
		5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	3,7	1,8	0,0	25,9	5,5
		7	81,1	59,3	50,4	82,9	80,9	85,6	84,0	63,8	6,4	79,6
	2	1	9,4	10,1	10,7	33,5	35,3	17,3	13,8	86,6	25,7	12,0
		3	8,2	8,9	9,5	9,8	8,5	16,5	12,6	90,2	28,7	11,0
		5	29,0	29,6	16,5	30,4	29,0	34,3	33,3	90,3	85,4	31,0
		7	110,9	89,8	81,0	121,7	110,8	115,7	12,7	72,4	54,4	115,0
Co(II)	1	2	16,4	3,2	12,6	14,1	25,7	6,6	10,7	9,2	13,4	16,1
		4	4,7	3,5	3,5	5,4	4,7	7,8	0,0	0,0	3,9	7,3
		6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,5	12,2	0,0	0,0
	2	2	18,3	17,1	18,2	10,2	18,5	12,9	18,3	56,9	82,4	15,8
		4	11,5	15,7	10,7	42,1	12,7	21,8	17,7	77,0	52,1	18,2
		6	37,5	30,4	15,6	26,4	33,4	29,2	33,7	63,0	21,7	37,7
Mn(II)	1	2	18,7	8,9	17,6	0,0	21,9	18,2	5,0	55,0	23,9	25,0
		4	0,0	17,4	27,8	10,4	2,5	31,0	15,1	0,0	85,9	0,0
		6	0,0	0,0	0,0	12,0	0,0	0,0	0,0	11,3	75,4	31,5
	2	2	30,5	19,4	26,9	8,8	21,1	22,0	16,3	85,5	63,3	31,5
		4	26,3	11,1	3,0	18,0	6,8	0,3	6,6	49,3	41,0	13,2
		6	4,7	6,4	3,7	12,0	7,4	8,8	5,8	47,4	22,2	12,0
Cr(II)	1	1	88,1	14,8	93,2	95,5	92,8	29,4	0,0	37,7	32,6	82,3
		3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	45,7	0,0	0,0	0,0
		5	10,2	10,2	32,9	10,4	12,6	12,2	1,1	29,9	13,5	3,1
		7	1,2	1,2	1,2	1,5	3,1	3,1	21,0	7,8	81,6	17,6
	2	1	19,0	75,8	40,3	34,3	30,4	27,4	35,6	42,7	52,1	45,0
		3	4,8	56,7	5,3	3,1	4,7	2,6	4,4	30,7	13,5	15,2
		5	18,0	38,8	2,9	10,9	19,1	11,9	18,1	41,5	81,6	26,5
		7	33,2	87,8	33,9	34,1	34,5	38,0	35,7	36,8	25,1	55,6

EK-11. (devam) Katyonik Ligand – Metal Komplekslerinin 1 ve 2 numaralı yapılarının üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ, UøB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) Rölatif Enerjileri (kkal·mol⁻¹)

Çizelge 11.2. Katyonik Ligand – Metal Komplekslerinin 1 ve 2 numaralı yapılarının UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde rölatif enerjileri (kkal·mol⁻¹).

	Yapı	2S+1	LK1	LK2	LK3	LK4	LK5	LK6	LK7	LK8	LK9	LK10
Fe(II)	1	1	47,1	46,1	45,2	46,0	56,5	47,5	45,5	42,9	21,5	70,3
		3	43,8	41,1	41,7	43,4	75,3	44,6	38,4	131,3	40,3	38,0
		5	27,7	30,0	8,0	21,8	19,5	20,2	27,7	14,1	21,7	16,2
		7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
	2	1	35,6	32,4	27,9	48,4	27,6	9,4	33,3	33,2	31,1	26,5
		3	12,3	10,5	10,7	12,0	14,3	11,9	14,0	25,8	14,7	9,5
		5	-0,4	-1,8	-2,6	-1,5	-0,2	-0,2	0,0	4,1	0,7	2,0
Ni(II)	1	1	20,3	25,4	14,8	27,0	27,6	19,2	15,5	3,9	36,1	40,2
		3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	2,0	0,0	3,4
		5	4,1	4,4	6,1	5,7	6,1	17,6	4,7	0,0	44,1	0,0
		7	84,8	64,4	52,2	87,9	84,9	94,4	85,9	65,6	26,1	86,7
	2	1	14,7	13,9	14,8	17,2	9,7	20,8	11,6	11,9	33,4	39,9
		3	2,7	4,0	5,1	13,5	9,3	19,2	16,5	9,4	15,0	19,2
		5	31,8	33,0	34,9	35,6	25,9	49,0	41,9	31,7	38,4	44,9
Co(II)	1	7	112,7	93,3	81,6	151,7	107,3	54,7	117,1	104,9	122,3	129,8
		2	15,6	0,0	25,3	10,5	18,0	13,2	28,9	33,3	20,1	1,0
		4	0,0	3,6	0,0	0,0	3,1	0,0	0,0	31,7	0,0	0,0
		6	0,5	4,3	0,4	0,7	0,0	5,3	3,1	0,0	0,1	3,7
	2	2	10,3	11,8	8,1	14,0	7,8	21,6	23,6	17,1	16,1	3,0
		4	2,5	7,8	2,1	26,5	9,2	3,1	8,7	13,5	9,4	12,1
		6	28,7	34,0	40,4	38,1	23,5	38,2	31,9	31,1	8,6	33,7
Mn(II)	1	2	34,5	97,2	52,3	38,8	41,9	72,8	23,3	43,9	33,1	7,4
		4	0,0	0,0	10,8	0,0	0,0	0,0	38,8	0,0	0,0	24,7
		6	16,1	50,4	0,0	46,4	15,7	9,7	0,0	15,4	15,8	0,0
	2	2	50,0	56,0	1,9	44,8	47,7	36,5	2,7	58,0	50,3	17,8
		4	9,3	11,4	-37,0	13,3	15,0	5,7	-4,1	20,6	12,5	-10,7
		6	11,4	13,4	-32,9	16,8	17,0	8,2	2,0	22,5	17,0	-7,4
Cr(II)	1	1	82,7	69,4	65,2	42,1	42,9	107,4	41,8	56,9	43,0	54,3
		3	29,3	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8,5	0,0
		5	35,6	16,4	15,1	15,0	15,8	11,7	14,4	15,2	0,0	7,0
		7	82,7	8,4	7,3	5,8	4,6	4,3	5,3	57,4	8,4	6,3
	2	1	36,4	45,8	34,8	25,4	39,57	32,4	44,2	30,3	43,6	40,5
		3	2,9	12,2	7,7	17,5	9,9	-0,2	18,9	7,1	15,2	0,7
		5	-33,2	21,5	18,0	29,8	13,8	16,0	20,7	26,5	24,5	22,3
		7	29,8	38,9	38,9	37,1	12,8	35,3	40,1	37,5	45,0	42,5

UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ

EK-11. (devam) Katyonik Ligand – Metal Komplekslerinin 1 ve 2 numaralı yapılarının üç farklı seviyede (UB3LYP/cc-pVTZ//LANL2DZ, UM06/cc-pVTZ//LANL2DZ, UøB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ) Rölatif Enerjileri (kkal·mol⁻¹)

Çizelge 11.3. Katyonik Ligand – Metal Komplekslerinin 1 ve 2 numaralı yapılarının UøB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ seviyesinde rölatif enerjileri (kkal·mol⁻¹).

	Yapı	2S+1	LK1	LK2	LK3	LK4	LK5	LK6	LK7	LK8	LK9	LK10
Fe(II)	1	1	51,3	50,6	41,5	*	43,0	4,9	55,7	50,1	46,2	59,9
		3	42,4	47,5	*	65,2	*	41,3	55,3	29,1	14,0	29,6
		5	22,9	*	*	18,5	*	3,9	19,5	*	6,1	12,1
		7	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
	2	1	17,9	14,7	68,2	37,9	38,9	19,7	*	39,8	38,1	50,8
		3	24,3	-7,9	29,8	64,7	19,0	24,8	*	25,2	*	43,8
		5	3,9	-8,8	7,3	17,9	18,5	25,3	14,1	*	24,5	20,1
		7	10,7	8,8	27,6	25,6	24,7	14,4	33,2	25,2	29,8	27,4
Ni(II)	1	1	41,3	43,6	37,9	40,6	42,9	28,7	37,9	49,4	40,3	38,9
		3	8,4	1,0	4,4	0,0	6,2	0,0	0,2	6,0	0,0	0,2
		5	0,0	0,0	0,0	*	0,0	0,7	0,0	0,0	*	0,0
		7	82,6	61,7	75,7	114,2	90,1	119,7		71,8	*	80,8
	2	1	33,3	33,0	32,6	63,0	27,4	26,1	27,8	23,9	59,7	36,2
		3	20,8	13,2	46,2	13,0	20,7	23,0	10,1	13,0	13,7	24,0
		5	40,2	33,1	*	34,1	33,5	28,7	78,4	21,6	*	33,8
		7	124,3	*	*	117,2	117,3	*	*	105,7	178,0	161,3
Co(II)	1	2	52,3	44,8	*	48,6	55,4	30,1	21,5	50,0	44,2	46,0
		4	4,3	0,0	4,0	3,0	9,4	6,2	7,8	27,1	17,8	14,4
		6	0,0	7,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
	2	2	35,7	*	36,6	27,4	21,8	12,2	36,5	32,0	21,8	66,6
		4	14,2	11,1	20,7	20,3	21,4	15,5	13,2	18,4	20,2	30,9
		6	43,7	27,5	32,2	34,8	29,8	35,9	34,0	27,9	35,3	34,6
Mn(II)	1	2	13,6	64,3	29,1	79,7	26,2	40,3	62,1	51,4	19,8	54,3
		4	12,6	*	4,1	17,2	19,6	60,2	13,8	61,2	38,0	69,5
		6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
	2	2	38,2	40,5	4,4	46,8	*	63,1	26,9	36,9	7,3	14,1
		4	22,2	34,3	14,0	37,3	22,7	4,0	26,6	44,5	-14,2	-9,3
		6	-16,6	-11,0	-25,4	-10,0	-15,8	4,3	-11,2	11,7	-13,9	-3,8
Cr(II)	1	1	60,0	101,6	*	*	47,0	*	109,3	70,5	70,5	45,2
		3	37,5	0,0	46,4	68,9	36,4	36,8	34,7	46,1	0,0	44,1
		5	27,2	35,2	10,2	26,8	28,1	*	9,8	10,4	11,2	11,0
		7	0,0	*	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	1,1	0,0
	2	1	27,8	44,5	23,4	37,9	40,2	44,1	34,4	39,4	19,6	38,8
		3	11,8	12,5	11,0	26,8	53,1	43,0	3,4	9,2	5,3	2,4
		5	18,7	22,9	19,5	11,9	10,9	29,6	16,9	16,3	19,3	24,6
		7	34,0	36,2	45,6	96,1	35,1	36,8	35,5	35,8	105,3	39,1

UøB97XD/cc-pVTZ//LANL2DZ *: yakınsamadı

EK-12. Kartezyen koordinatlar

Fe(II)LK1 ⁷1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-1.718112000	0.027184000	0.980573000
C	-1.934455000	1.382106000	0.547436000
C	-1.626803000	-0.102352000	2.505736000
C	1.322043000	0.801504000	4.788665000
C	0.003086000	0.705332000	4.293056000
C	2.390920000	0.338140000	3.996159000
C	2.112716000	-0.202270000	2.735898000
N	0.830356000	-0.299808000	2.257926000
C	-0.219080000	0.144901000	3.030940000
C	-2.661539000	-0.971847000	0.299416000
C	-2.127538000	-1.463223000	-1.039275000
N	-0.766991000	-1.646976000	-1.147641000
C	-0.246230000	-2.193265000	-2.293473000
C	-1.060946000	-2.574990000	-3.364985000
C	-2.987044000	-1.815499000	-2.085033000
C	-2.453050000	-2.382765000	-3.262995000
H	-1.932398000	-1.125149000	2.759262000
H	-2.323975000	0.573323000	3.008500000
H	1.508551000	1.227463000	5.770334000
H	-0.831626000	1.051296000	4.895399000
H	3.416565000	0.393036000	4.345491000
H	2.912196000	-0.564650000	2.099542000
H	-3.659186000	-0.547828000	0.156805000
H	-2.769762000	-1.825778000	0.979677000
H	0.828883000	-2.324988000	-2.340495000
H	-0.615710000	-3.011222000	-4.252932000
H	-4.058769000	-1.669006000	-1.988797000
H	-3.109747000	-2.668125000	-4.079823000
Fe	0.294390000	-1.089362000	0.477348000
O	-0.131206000	-3.222494000	1.533364000
O	-0.039690000	-4.407243000	1.961654000
C	2.839020000	-1.930367000	-0.383989000
H	2.112447000	-2.543799000	0.180676000
H	2.512979000	-0.903071000	-0.622053000
H	3.757667000	-1.873065000	0.206033000
N	-1.059193000	2.156962000	-0.169542000
N	-3.054506000	2.144355000	0.774759000
C	-1.633360000	3.410789000	-0.393104000
C	-2.876023000	3.401602000	0.195312000
C	0.287720000	1.787402000	-0.658914000
C	-4.307333000	1.792570000	1.505207000
H	-1.131212000	4.194752000	-0.938600000
H	-3.627329000	4.175283000	0.244093000
H	0.223041000	0.956478000	-1.369580000
H	0.710458000	2.639551000	-1.195687000
H	0.955076000	1.570469000	0.182085000
H	-4.436547000	2.478266000	2.347561000
H	-5.159067000	1.895831000	0.826813000
H	-4.274788000	0.770321000	1.880694000
H	3.055903000	-2.448077000	-1.322237000

Fe(II)LK1 ⁵TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-1.595225000	0.010883000	0.917639000
C	-1.905570000	1.373414000	0.548650000
C	-1.461304000	-0.167128000	2.447839000
C	1.553887000	0.861565000	4.590741000
C	0.214765000	0.669448000	4.184248000
C	2.597327000	0.546167000	3.697455000
C	2.277382000	0.036496000	2.433921000
N	0.978586000	-0.167874000	2.049162000
C	-0.050397000	0.149001000	2.914577000

C	-2.529551000	-1.009821000	0.227970000
C	-2.003875000	-1.391878000	-1.145434000
N	-0.631706000	-1.434166000	-1.298676000
C	-0.093764000	-1.826194000	-2.496054000
C	-0.900560000	-2.206230000	-3.574573000
C	-2.854263000	-1.753718000	-2.193895000
C	-2.301353000	-2.178442000	-3.422389000
H	-1.701500000	-1.212860000	2.672854000
H	-2.178077000	0.459088000	2.983865000
H	1.775165000	1.252278000	5.579954000
H	-0.600870000	0.913277000	4.858545000
H	3.637364000	0.687306000	3.972601000
H	3.058800000	-0.211779000	1.725891000
H	-3.546172000	-0.619708000	0.140655000
H	-2.569203000	-1.897274000	0.870570000
H	0.985770000	-1.835752000	-2.585807000
H	-0.440376000	-2.519153000	-4.506034000
H	-3.931840000	-1.720280000	-2.062930000
H	-2.950266000	-2.475603000	-4.241389000
Fe	0.322184000	-0.980202000	0.371606000
O	-0.318322000	-2.758226000	1.356940000
O	0.701853000	-3.626960000	1.194739000
C	2.290929000	-2.028711000	-0.183516000
H	1.493121000	-2.914793000	0.541844000
H	2.365763000	-2.726259000	-1.026999000
H	2.369080000	-1.008564000	-0.597246000
N	-1.106572000	2.230241000	-0.163346000
N	-3.062560000	2.049640000	0.848212000
C	-1.767752000	3.452050000	-0.312128000
C	-2.984757000	3.338342000	0.317568000
C	0.244186000	1.974425000	-0.716116000
C	-4.266523000	1.594563000	1.607287000
H	-1.336385000	4.288666000	-0.839829000
H	-3.781028000	4.059424000	0.426051000
H	0.596627000	2.884696000	-1.206115000
H	0.950440000	1.744246000	0.088016000
H	0.205546000	1.187818000	-1.476177000
H	-4.403557000	2.239399000	2.480145000
H	-5.146511000	1.674344000	0.962607000
H	-4.163903000	0.562507000	1.940976000
H	3.123208000	-2.153237000	0.520788000

Fe(II)LK1 ³2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-1.619816000	0.049752000	0.898219000
C	-1.995122000	1.393695000	0.528590000
C	-1.438352000	-0.095288000	2.421244000
C	1.605832000	0.658935000	4.618227000
C	0.272775000	0.624402000	4.157536000
C	2.632151000	0.185419000	3.778834000
C	2.301995000	-0.284085000	2.501697000
N	1.010748000	-0.302522000	2.051114000
C	-0.003874000	0.128156000	2.878210000
C	-2.542735000	-1.002600000	0.255051000
C	-2.051375000	-1.464267000	-1.108789000
N	-0.691414000	-1.606528000	-1.281236000
C	-0.213602000	-2.178455000	-2.427035000
C	-1.067703000	-2.608640000	-3.450207000
C	-2.949051000	-1.863400000	-2.105670000
C	-2.456936000	-2.440647000	-3.295425000
H	-1.742398000	-1.116075000	2.685584000
H	-2.097287000	0.587323000	2.963508000
H	1.834095000	1.038762000	5.609785000
H	-0.534964000	0.964942000	4.798717000
H	3.667905000	0.178949000	4.101545000
H	3.072977000	-0.652429000	1.836049000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	-3.566891000	-0.633187000	0.164866000
H	-2.569455000	-1.863002000	0.935488000
H	0.859047000	-2.294821000	-2.522780000
H	-0.649659000	-3.060796000	-4.343435000
H	-4.018525000	-1.745544000	-1.958171000
H	-3.142116000	-2.756373000	-4.076723000
Fe	0.340878000	-0.972575000	0.298916000
O	0.265061000	-2.878539000	1.272260000
O	-0.271023000	-3.992640000	0.663484000
C	2.081159000	-0.723475000	-0.678513000
H	0.204465000	-4.791083000	1.043330000
H	1.856895000	-0.511226000	-1.725233000
H	2.628632000	0.090902000	-0.201646000
N	-1.249334000	2.288607000	-0.189531000
N	-3.178390000	2.017908000	0.848165000
C	-1.965762000	3.479274000	-0.326082000
C	-3.167375000	3.309773000	0.320006000
C	0.103264000	2.090392000	-0.756695000
C	-4.351121000	1.501560000	1.612988000
H	-1.578292000	4.335171000	-0.856621000
H	-3.993956000	3.993328000	0.441437000
H	0.407418000	3.010974000	-1.258734000
H	0.824175000	1.888207000	0.039634000
H	0.087691000	1.290579000	-1.501427000
H	-4.586762000	2.203808000	2.417373000
H	-5.214165000	1.422488000	0.945123000
H	-4.144671000	0.525443000	2.050726000
H	2.551006000	-1.703028000	-0.527714000

Ni(II)LK1⁵¹

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-1.689354000	0.000006000	0.983847000
C	-1.878331000	1.366699000	0.550448000
C	-1.618565000	-0.125574000	2.517943000
C	1.364496000	0.720172000	4.776821000
C	0.035845000	0.633142000	4.307774000
C	2.415368000	0.287974000	3.945393000
C	2.112001000	-0.215518000	2.673346000
N	0.823638000	-0.305317000	2.224430000
C	-0.207322000	0.110449000	3.033026000
C	-2.667113000	-0.972898000	0.296333000
C	-2.131671000	-1.446610000	-1.045755000
N	-0.768857000	-1.591807000	-1.151689000
C	-0.232701000	-2.110098000	-2.297717000
C	-1.037473000	-2.505370000	-3.374676000
C	-2.984155000	-1.812777000	-2.093022000
C	-2.433846000	-2.355210000	-3.274390000
H	-1.939550000	-1.143806000	2.768513000
H	-2.313225000	0.562635000	3.005334000
H	1.571676000	1.115643000	5.766913000
H	-0.788101000	0.956055000	4.937199000
H	3.448835000	0.337398000	4.271782000
H	2.898352000	-0.552444000	2.009637000
H	-3.652144000	-0.518381000	0.165281000
H	-2.789727000	-1.829683000	0.969633000
H	0.844261000	-2.210663000	-2.345887000
H	-0.577912000	-2.920373000	-4.265517000
H	-4.059371000	-1.695522000	-1.995037000
H	-3.080917000	-2.652749000	-4.094377000
Ni	0.182279000	-1.007827000	0.485214000
O	-0.345824000	-3.076228000	1.523400000
O	-0.168825000	-4.265077000	1.910569000
C	2.660366000	-1.892667000	-0.347519000
H	1.904879000	-2.463770000	0.224332000
H	2.857010000	-2.436164000	-1.275129000
H	2.376116000	-0.857282000	-0.601172000
N	-0.991871000	2.124530000	-0.168874000
N	-2.983546000	2.145957000	0.785685000

C	-1.544552000	3.388955000	-0.387479000
C	-2.784181000	3.400938000	0.207165000
C	0.341940000	1.727941000	-0.674497000
C	-4.241597000	1.822816000	1.523429000
H	-1.030818000	4.164410000	-0.934593000
H	-3.521078000	4.188132000	0.262037000
H	0.813464000	2.597321000	-1.138836000
H	0.990487000	1.424096000	0.155448000
H	0.247268000	0.956869000	-1.446108000
H	-4.338287000	2.496293000	2.379981000
H	-5.094348000	1.970022000	0.854620000
H	-4.244090000	0.792626000	1.877745000
H	3.577251000	-1.865667000	0.246745000

Ni(II)LK1¹TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-1.689664000	-0.056821000	1.009522000
C	-1.855179000	1.310289000	0.538142000
C	-1.671152000	-0.134601000	2.554393000
C	1.359043000	0.692532000	4.757535000
C	0.019013000	0.598845000	4.327167000
C	2.387339000	0.277407000	3.889583000
C	2.052225000	-0.236774000	2.629904000
N	0.750533000	-0.350227000	2.228903000
C	-0.260444000	0.070890000	3.062181000
C	-2.700648000	-1.019200000	0.339794000
C	-2.163836000	-1.456033000	-1.004590000
N	-0.794155000	-1.551526000	-1.102174000
C	-0.228278000	-1.966701000	-2.272326000
C	-1.010918000	-2.324800000	-3.379525000
C	-2.992154000	-1.797087000	-2.077950000
C	-2.412970000	-2.253136000	-3.281428000
H	-2.035322000	-1.129881000	2.831335000
H	-2.343132000	0.604543000	2.995422000
H	1.593518000	1.086189000	5.742311000
H	-0.789436000	0.922921000	4.975935000
H	3.431468000	0.347427000	4.176698000
H	2.827734000	-0.551136000	1.943849000
H	-3.680148000	-0.549466000	0.226942000
H	-2.815519000	-1.879903000	1.007107000
H	0.850936000	-2.014708000	-2.332529000
H	-0.524225000	-2.656308000	-4.290913000
H	-4.071367000	-1.721405000	-1.982606000
H	-3.041052000	-2.538187000	-4.120468000
Ni	0.079421000	-1.080657000	0.566719000
O	-0.606393000	-2.780894000	1.452054000
O	0.501278000	-3.264151000	2.006492000
C	1.898647000	-2.157225000	0.059677000
H	1.288708000	-2.861537000	1.089010000
H	1.787637000	-2.934499000	-0.701431000
H	2.101899000	-1.203466000	-0.448055000
N	-0.962555000	2.056747000	-0.185528000
N	-2.965166000	2.092545000	0.750652000
C	-1.517838000	3.315139000	-0.431765000
C	-2.762176000	3.336462000	0.150778000
C	0.373728000	1.675527000	-0.704043000
C	-4.232310000	1.797010000	1.488050000
H	-0.999726000	4.080718000	-0.988802000
H	-3.499854000	4.124149000	0.186931000
H	0.932688000	2.589287000	-0.919683000
H	0.935837000	1.127756000	0.058265000
H	0.276460000	1.098707000	-1.627218000
H	-4.329371000	2.494599000	2.325122000
H	-5.078046000	1.934675000	0.808347000
H	-4.249824000	0.777734000	1.871095000
H	2.808367000	-2.322122000	0.666782000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

Ni(II)LK1 ³2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-1.660482000	-0.083519000	0.912027000
C	-2.000958000	1.278848000	0.585323000
C	-1.451940000	-0.287264000	2.419401000
C	1.582852000	0.936259000	4.427508000
C	0.244556000	0.662907000	4.073547000
C	2.604734000	0.648310000	3.504145000
C	2.264577000	0.085819000	2.265871000
N	0.970402000	-0.196127000	1.932509000
C	-0.038084000	0.095737000	2.825484000
C	-2.575053000	-1.102056000	0.216645000
C	-2.087775000	-1.388937000	-1.194371000
N	-0.723767000	-1.425400000	-1.390319000
C	-0.231141000	-1.726665000	-2.628329000
C	-1.073706000	-2.019315000	-3.709687000
C	-2.974604000	-1.667242000	-2.240778000
C	-2.467072000	-1.996843000	-3.515472000
H	-1.631113000	-1.348384000	2.627901000
H	-2.172232000	0.284851000	3.009785000
H	1.818179000	1.367599000	5.396031000
H	-0.560713000	0.883456000	4.768005000
H	3.645845000	0.851106000	3.732286000
H	3.036127000	-0.138474000	1.539821000
H	-3.613087000	-0.761805000	0.186016000
H	-2.550663000	-2.018790000	0.816916000
H	0.843857000	-1.732438000	-2.759323000
H	-0.641672000	-2.258371000	-4.675742000
H	-4.046677000	-1.637909000	-2.070160000
H	-3.143214000	-2.223564000	-4.334554000
Ni	0.258730000	-0.987780000	0.269244000
O	-0.274254000	-2.874565000	1.197861000
O	0.733224000	-3.796087000	1.322925000
C	2.042625000	-1.709911000	-0.373308000
H	0.341739000	-4.618129000	1.747227000
H	1.779035000	-2.564108000	-0.994842000
H	2.455196000	-0.846998000	-0.906105000
N	-1.237947000	2.174519000	-0.117855000
N	-3.163753000	1.923862000	0.933089000
C	-1.925417000	3.387212000	-0.210487000
C	-3.124275000	3.229968000	0.443442000
C	0.113434000	1.977657000	-0.693319000
C	-4.340344000	1.414675000	1.696891000
H	-1.522004000	4.248346000	-0.720276000
H	-3.932229000	3.930328000	0.591866000
H	0.328307000	2.812459000	-1.363984000
H	0.869830000	1.969105000	0.096088000
H	0.140672000	1.064367000	-1.294836000
H	-4.503496000	2.054239000	2.568940000
H	-5.227461000	1.449388000	1.057817000
H	-4.184075000	0.390728000	2.034559000
H	2.561330000	-1.993543000	0.540612000

Co(II)LK1 ⁶1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-1.683453000	0.006299000	0.979920000
C	-1.895817000	1.369053000	0.557045000
C	-1.587646000	-0.128284000	2.506945000
C	1.402997000	0.812808000	4.722667000
C	0.072051000	0.687698000	4.266147000
C	2.458399000	0.381763000	3.894366000
C	2.155622000	-0.161299000	2.640543000
N	0.862828000	-0.296752000	2.204288000
C	-0.172518000	0.125294000	3.009657000
C	-2.640533000	-0.976271000	0.288261000

C	-2.103144000	-1.426887000	-1.062892000
N	-0.738118000	-1.575097000	-1.171563000
C	-0.201629000	-2.048628000	-2.341000000
C	-1.005106000	-2.404711000	-3.430452000
C	-2.953109000	-1.754451000	-2.123636000
C	-2.402332000	-2.257873000	-3.323063000
H	-1.893344000	-1.150772000	2.760377000
H	-2.280380000	0.548042000	3.013953000
H	1.609001000	1.239986000	5.699927000
H	-0.752180000	1.015899000	4.892384000
H	3.492665000	0.463836000	4.211457000
H	2.943451000	-0.498732000	1.977803000
H	-3.636080000	-0.543895000	0.159924000
H	-2.748567000	-1.843265000	0.951312000
H	0.876187000	-2.146054000	-2.392394000
H	-0.546884000	-2.786804000	-4.336562000
H	-4.028035000	-1.635673000	-2.025033000
H	-3.049767000	-2.525278000	-4.153272000
Co	0.241944000	-1.118270000	0.499723000
O	-0.517592000	-3.165440000	1.633087000
O	-0.362952000	-4.355801000	2.027979000
C	2.665286000	-2.128748000	-0.260350000
H	1.904930000	-2.674994000	0.329142000
H	2.842832000	-2.693925000	-1.178682000
H	2.402754000	-1.089841000	-0.532407000
N	-1.032646000	2.156510000	-0.160630000
N	-3.019375000	2.121548000	0.804125000
C	-1.619098000	3.407974000	-0.365037000
C	-2.855377000	3.385208000	0.235640000
C	0.312671000	1.813844000	-0.680291000
C	-4.263506000	1.759715000	1.545545000
H	-1.127510000	4.200375000	-0.907867000
H	-3.610832000	4.153646000	0.300695000
H	0.746317000	2.709145000	-1.130669000
H	0.971513000	1.508682000	0.138246000
H	0.240210000	1.049559000	-1.459688000
H	-4.381113000	2.433116000	2.399490000
H	-5.123213000	1.874820000	0.879238000
H	-4.229843000	0.732031000	1.905404000
H	3.586221000	-2.107506000	0.327952000

Co(II)LK1 ²TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-1.560734000	-0.076707000	0.943244000
C	-1.754227000	1.295060000	0.501088000
C	-1.520072000	-0.187252000	2.485451000
C	1.484400000	0.720154000	4.688559000
C	0.147122000	0.578953000	4.260656000
C	2.525520000	0.372120000	3.806163000
C	2.207305000	-0.120510000	2.534469000
N	0.909616000	-0.276154000	2.129531000
C	-0.114549000	0.074399000	2.983506000
C	-2.566063000	-1.040371000	0.268078000
C	-2.037267000	-1.457062000	-1.087454000
N	-0.665988000	-1.505720000	-1.214927000
C	-0.115848000	-1.916195000	-2.397390000
C	-0.911384000	-2.310764000	-3.481121000
C	-2.878603000	-1.833499000	-2.138534000
C	-2.313040000	-2.281426000	-3.351236000
H	-1.829739000	-1.206209000	2.741974000
H	-2.224852000	0.504362000	2.951512000
H	1.706139000	1.096196000	5.683161000
H	-0.671250000	0.846740000	4.922449000
H	3.566729000	0.476021000	4.093365000
H	2.992838000	-0.385819000	1.839813000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	-3.551714000	-0.580128000	0.170319000
H	-2.664633000	-1.912583000	0.923148000
H	0.962250000	-1.927842000	-2.481985000
H	-0.436442000	-2.636702000	-4.400677000
H	-3.957258000	-1.794470000	-2.018163000
H	-2.950929000	-2.593709000	-4.173014000
Co	0.242189000	-1.005578000	0.445675000
O	-0.398292000	-2.582267000	1.313535000
O	0.646140000	-3.446408000	1.389638000
C	2.126334000	-1.876586000	-0.139184000
H	1.429146000	-2.754610000	0.685197000
H	2.153125000	-2.608833000	-0.955730000
H	2.333968000	-0.901666000	-0.599624000
N	-0.873541000	2.047014000	-0.230598000
N	-2.858675000	2.073518000	0.738261000
C	-1.429673000	3.309089000	-0.457005000
C	-2.664493000	3.324027000	0.146475000
C	0.445469000	1.645848000	-0.768542000
C	-4.113647000	1.766108000	1.491809000
H	-0.920923000	4.080049000	-1.015517000
H	-3.401578000	4.111241000	0.201968000
H	1.013042000	2.546262000	-1.018305000
H	1.031698000	1.129846000	0.004483000
H	0.329167000	1.049143000	-1.676676000
H	-4.186537000	2.434657000	2.354660000
H	-4.970738000	1.935744000	0.834036000
H	-4.133875000	0.733202000	1.836803000
H	2.984226000	-2.043085000	0.532875000

Co(II)LK1 ⁴²

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-1.653788000	-0.091795000	0.940843000
C	-2.003142000	1.264261000	0.605571000
C	-1.438485000	-0.288618000	2.443371000
C	1.579830000	1.032522000	4.419043000
C	0.246544000	0.717117000	4.079410000
C	2.605307000	0.761042000	3.492704000
C	2.273234000	0.171069000	2.267028000
N	0.982510000	-0.156301000	1.948428000
C	-0.029248000	0.122554000	2.843405000
C	-2.547200000	-1.113758000	0.234178000
C	-2.047013000	-1.381568000	-1.177568000
N	-0.680631000	-1.413546000	-1.359424000
C	-0.171266000	-1.682325000	-2.600745000
C	-1.000395000	-1.949467000	-3.697789000
C	-2.920729000	-1.633012000	-2.240848000
C	-2.396609000	-1.931476000	-3.517515000
H	-1.598772000	-1.350830000	2.661816000
H	-2.163192000	0.274138000	3.037567000
H	1.809319000	1.485169000	5.379340000
H	-0.559186000	0.928402000	4.776085000
H	3.641195000	0.997574000	3.711983000
H	3.043782000	-0.046532000	1.537191000
H	-3.590481000	-0.788395000	0.196108000
H	-2.518061000	-2.035191000	0.827780000
H	0.906426000	-1.689415000	-2.712818000
H	-0.558803000	-2.167332000	-4.664536000
H	-3.994996000	-1.605919000	-2.084204000
H	-3.063255000	-2.137980000	-4.349780000
Co	0.337672000	-1.107371000	0.320097000
O	-0.270902000	-2.922376000	1.432786000
O	0.142395000	-4.091450000	0.838959000
C	2.143538000	-1.869979000	-0.282708000
H	-0.076140000	-4.843514000	1.467517000
H	1.848665000	-2.747209000	-0.862091000
H	2.587927000	-1.050655000	-0.856560000
N	-1.264861000	2.158577000	-0.126045000
N	-3.167403000	1.902755000	0.965570000

C	-1.969924000	3.360561000	-0.225251000
C	-3.153644000	3.200721000	0.454935000
C	0.061569000	1.962794000	-0.759421000
C	-4.315666000	1.394844000	1.770982000
H	-1.587388000	4.217431000	-0.757613000
H	-3.964732000	3.895498000	0.611744000
H	0.425131000	2.934096000	-1.100739000
H	0.776434000	1.578238000	-0.028419000
H	-0.021492000	1.302415000	-1.626201000
H	-4.410718000	1.993339000	2.681734000
H	-5.233713000	1.490209000	1.184323000
H	-4.178980000	0.349066000	2.044195000
H	2.655387000	-2.120327000	0.647802000

Mn(II)LK1 ⁶¹

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-1.701692000	0.066707000	0.961522000
C	-1.910384000	1.424871000	0.545052000
C	-1.605331000	-0.081869000	2.485673000
C	1.319589000	0.842436000	4.790655000
C	0.010457000	0.758422000	4.268276000
C	2.392684000	0.320795000	4.042338000
C	2.126630000	-0.262583000	2.797887000
N	0.854882000	-0.348311000	2.292218000
C	-0.198661000	0.153098000	3.023836000
C	-2.652394000	-0.921649000	0.272825000
C	-2.137766000	-1.410195000	-1.076301000
N	-0.791497000	-1.678876000	-1.185463000
C	-0.307380000	-2.232209000	-2.343067000
C	-1.141158000	-2.536354000	-3.425680000
C	-3.015509000	-1.681466000	-2.132082000
C	-2.517332000	-2.255164000	-3.322210000
H	-1.918009000	-1.105973000	2.727769000
H	-2.299942000	0.589258000	2.997831000
H	1.494882000	1.302381000	5.758892000
H	-0.828258000	1.147712000	4.837690000
H	3.411546000	0.363093000	4.412663000
H	2.932217000	-0.670820000	2.196928000
H	-3.648526000	-0.491055000	0.140186000
H	-2.765307000	-1.780453000	0.947235000
H	0.757178000	-2.434665000	-2.393255000
H	-0.722290000	-2.981438000	-4.322030000
H	-4.075621000	-1.467609000	-2.033730000
H	-3.189047000	-2.478200000	-4.146099000
Mn	0.339061000	-1.198063000	0.478276000
O	-0.273286000	-3.240512000	1.544205000
O	0.228692000	-4.378979000	1.776578000
C	2.904093000	-1.899852000	-0.457861000
H	2.292981000	-2.603708000	0.135816000
H	3.102776000	-2.358434000	-1.429913000
H	2.455030000	-0.902657000	-0.632276000
N	-1.031816000	2.200516000	-0.166432000
N	-3.023481000	2.194509000	0.784538000
C	-1.595513000	3.461613000	-0.374168000
C	-2.836273000	3.456539000	0.218505000
C	0.309748000	1.821983000	-0.662331000
C	-4.276181000	1.843594000	1.514722000
H	-1.088573000	4.247125000	-0.912852000
H	-3.580817000	4.235910000	0.278234000
H	0.729207000	2.666079000	-1.213859000
H	0.981873000	1.610677000	0.176131000
H	0.234816000	0.981173000	-1.360045000
H	-4.397915000	2.519896000	2.365741000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	-5.129592000	1.960888000	0.840738000
H	-4.249606000	0.816672000	1.877762000
H	3.852459000	-1.753779000	0.065924000

Mn(II)LK1 ⁶TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-1.647872000	0.057065000	0.944869000
C	-1.908581000	1.419177000	0.547235000
C	-1.547428000	-0.102470000	2.478978000
C	1.419993000	0.858735000	4.717310000
C	0.093818000	0.722156000	4.251415000
C	2.485984000	0.454822000	3.889407000
C	2.199008000	-0.080694000	2.628565000
N	0.910716000	-0.224628000	2.184407000
C	-0.140221000	0.172693000	2.987108000
C	-2.598324000	-0.949668000	0.257541000
C	-2.075319000	-1.386833000	-1.102474000
N	-0.708376000	-1.527336000	-1.239123000
C	-0.186728000	-2.000161000	-2.414653000
C	-1.006554000	-2.358039000	-3.491167000
C	-2.936794000	-1.722333000	-2.151469000
C	-2.402618000	-2.222915000	-3.359197000
H	-1.825835000	-1.137067000	2.713355000
H	-2.256165000	0.551650000	2.991812000
H	1.614297000	1.272641000	5.702649000
H	-0.738551000	1.029440000	4.877656000
H	3.517708000	0.547961000	4.212029000
H	2.998807000	-0.397555000	1.969084000
H	-3.601987000	-0.532776000	0.147330000
H	-2.674818000	-1.822146000	0.917647000
H	0.890822000	-2.091805000	-2.488109000
H	-0.559817000	-2.735822000	-4.404944000
H	-4.010961000	-1.612640000	-2.034691000
H	-3.062441000	-2.498709000	-4.176882000
Mn	0.301840000	-1.048849000	0.443386000
O	-0.477606000	-2.837673000	1.494369000
O	0.533324000	-3.718465000	1.349481000
C	2.263583000	-2.260575000	-0.027857000
H	1.363313000	-3.063255000	0.705862000
H	2.315918000	-2.999429000	-0.837741000
H	2.440404000	-1.269236000	-0.479672000
N	-1.068360000	2.235590000	-0.165404000
N	-3.046976000	2.140519000	0.811900000
C	-1.684204000	3.476071000	-0.349354000
C	-2.915697000	3.415535000	0.259213000
C	0.281218000	1.922040000	-0.689116000
C	-4.278675000	1.739752000	1.555955000
H	-1.215169000	4.287443000	-0.884319000
H	-3.688672000	4.165092000	0.339188000
H	0.678830000	2.812552000	-1.180719000
H	0.963204000	1.674367000	0.131373000
H	0.227038000	1.130214000	-1.443433000
H	-4.408989000	2.402700000	2.416228000
H	-5.144068000	1.839061000	0.894504000
H	-4.217093000	0.710221000	1.906939000
H	3.057140000	-2.423165000	0.712780000

Mn(II)LK1 ⁴2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-1.637519000	-0.052674000	0.926106000
C	-1.999459000	1.299104000	0.587459000
C	-1.431981000	-0.248087000	2.437506000
C	1.538267000	1.036530000	4.502423000
C	0.210813000	0.758345000	4.109900000

C	2.592305000	0.717967000	3.625663000
C	2.293925000	0.125961000	2.391631000
N	1.007909000	-0.156870000	2.017004000
C	-0.030876000	0.159668000	2.869195000
C	-2.539418000	-1.094610000	0.244376000
C	-2.074616000	-1.396920000	-1.172910000
N	-0.712770000	-1.470863000	-1.387064000
C	-0.246704000	-1.810355000	-2.628598000
C	-1.112161000	-2.099677000	-3.691549000
C	-2.982851000	-1.668004000	-2.201404000
C	-2.501602000	-2.032360000	-3.477845000
H	-1.591376000	-1.313220000	2.647935000
H	-2.169546000	0.308674000	3.020790000
H	1.741013000	1.492963000	5.466918000
H	-0.615640000	0.997205000	4.772616000
H	3.625463000	0.919993000	3.888073000
H	3.086878000	-0.124416000	1.697489000
H	-3.584028000	-0.774143000	0.225316000
H	-2.491412000	-2.005507000	0.853848000
H	0.826628000	-1.850099000	-2.769650000
H	-0.702239000	-2.371157000	-4.658672000
H	-4.051535000	-1.610302000	-2.017419000
H	-3.195709000	-2.253868000	-4.283327000
Mn	0.379510000	-1.082659000	0.302891000
O	0.010072000	-2.969505000	1.400397000
O	-0.123079000	-4.146429000	0.698907000
C	2.217425000	-1.645074000	-0.411662000
H	0.226916000	-4.882907000	1.285016000
H	2.033682000	-2.507676000	-1.058045000
H	2.620471000	-0.779644000	-0.950905000
N	-1.250709000	2.190924000	-0.135626000
N	-3.166887000	1.937915000	0.932107000
C	-1.951598000	3.393907000	-0.245725000
C	-3.144553000	3.235503000	0.419291000
C	0.090000000	1.983308000	-0.731789000
C	-4.329234000	1.432375000	1.719451000
H	-1.561391000	4.250064000	-0.773780000
H	-3.957915000	3.930578000	0.562864000
H	0.388364000	2.902053000	-1.240688000
H	0.828086000	1.780691000	0.049523000
H	0.055697000	1.185158000	-1.478701000
H	-4.464026000	2.061392000	2.604076000
H	-5.231091000	1.485968000	1.102892000
H	-4.177672000	0.401348000	2.037249000
H	2.812215000	-1.923047000	0.462489000

Cr(II)LK1 ⁷1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-1.604407000	0.005592000	0.942230000
C	-1.850581000	1.373992000	0.534679000
C	-1.544124000	-0.134041000	2.486623000
C	1.365917000	0.830620000	4.791873000
C	0.049518000	0.703640000	4.296410000
C	2.444901000	0.408753000	3.991561000
C	2.180358000	-0.123896000	2.722877000
N	0.904980000	-0.255901000	2.245277000
C	-0.152782000	0.151481000	3.027341000
C	-2.594098000	-0.982233000	0.268962000
C	-2.107615000	-1.425349000	-1.100944000
N	-0.747732000	-1.586577000	-1.246185000
C	-0.254490000	-2.083405000	-2.421901000
C	-1.093987000	-2.442030000	-3.484857000
C	-2.994438000	-1.752711000	-2.131767000
C	-2.484654000	-2.274379000	-3.341076000
H	-1.824921000	-1.169025000	2.716491000
H	-2.274108000	0.517703000	2.971336000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	1.541966000	1.248949000	5.778586000
H	-0.794527000	1.018286000	4.902960000
H	3.469280000	0.488949000	4.339715000
H	2.991142000	-0.451457000	2.081902000
H	-3.592638000	-0.547342000	0.188706000
H	-2.667466000	-1.851444000	0.933808000
H	0.820595000	-2.196215000	-2.505678000
H	-0.666464000	-2.841957000	-4.398244000
H	-4.064785000	-1.623053000	-2.001805000
H	-3.158752000	-2.542619000	-4.149296000
Cr	0.296328000	-1.006814000	0.428876000
O	-0.384436000	-3.329922000	1.660050000
O	-0.353803000	-4.512050000	2.107282000
C	2.600767000	-2.107112000	-0.247491000
H	1.818216000	-2.665655000	0.300319000
H	2.805419000	-2.656331000	-1.169862000
H	2.376091000	-1.057812000	-0.524857000
N	-1.002967000	2.183359000	-0.177031000
N	-2.985542000	2.103805000	0.793989000
C	-1.610318000	3.427257000	-0.365824000
C	-2.843509000	3.376577000	0.238348000
C	0.348713000	1.869574000	-0.697966000
C	-4.228297000	1.724863000	1.532157000
H	-1.133565000	4.233712000	-0.901255000
H	-3.612092000	4.130987000	0.313912000
H	0.737191000	2.754930000	-1.205862000
H	1.033868000	1.640326000	0.124820000
H	0.298082000	1.064866000	-1.438688000
H	-4.357633000	2.400426000	2.382677000
H	-5.086245000	1.826824000	0.861376000
H	-4.184373000	0.699941000	1.897361000
H	3.498198000	-2.104482000	0.375836000

Cr(II)LK1 ⁵TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-1.672008000	-0.048474000	1.000670000
C	-1.884560000	1.317417000	0.569742000
C	-1.617192000	-0.174224000	2.543873000
C	1.314410000	0.779717000	4.825701000
C	-0.007722000	0.635833000	4.351157000
C	2.388909000	0.417460000	3.989213000
C	2.115942000	-0.079671000	2.709623000
N	0.832284000	-0.226901000	2.252217000
C	-0.223305000	0.123585000	3.068331000
C	-2.662867000	-1.033297000	0.330528000
C	-2.171962000	-1.445925000	-1.046027000
N	-0.805073000	-1.527012000	-1.215302000
C	-0.300622000	-1.981682000	-2.405679000
C	-1.135796000	-2.375825000	-3.457721000
C	-3.052143000	-1.817156000	-2.066602000
C	-2.532287000	-2.297790000	-3.288318000
H	-1.889408000	-1.208263000	2.785869000
H	-2.348563000	0.482983000	3.019252000
H	1.499064000	1.164573000	5.824541000
H	-0.847823000	0.904636000	4.984674000
H	3.417731000	0.513636000	4.320265000
H	2.922193000	-0.365276000	2.044748000
H	-3.663730000	-0.601445000	0.262855000
H	-2.721685000	-1.913197000	0.981822000
H	0.776478000	-2.030687000	-2.510343000
H	-0.699738000	-2.738093000	-4.382867000
H	-4.125958000	-1.753557000	-1.917248000
H	-3.202479000	-2.602961000	-4.086810000
Cr	0.237923000	-1.026230000	0.470374000
O	-0.381782000	-2.655983000	1.383849000
O	0.632911000	-3.586663000	1.339595000
C	2.160566000	-1.946594000	-0.085577000
H	1.429518000	-2.897404000	0.703756000

H	2.216451000	-2.599461000	-0.966966000
H	2.405456000	-0.934621000	-0.460112000
N	-0.993107000	2.078443000	-0.141302000
N	-2.994595000	2.090255000	0.790903000
C	-1.548408000	3.340447000	-0.369883000
C	-2.794566000	3.345763000	0.210951000
C	0.348512000	1.677403000	-0.616907000
C	-4.264229000	1.763975000	1.509811000
H	-1.032888000	4.118296000	-0.912292000
H	-3.536995000	4.128649000	0.255279000
H	0.811139000	2.521453000	-1.135062000
H	1.004403000	1.444755000	0.232027000
H	0.270424000	0.868921000	-1.354612000
H	-4.402693000	2.476513000	2.327949000
H	-5.102312000	1.851813000	0.812350000
H	-4.244987000	0.754490000	1.918430000
H	3.022842000	-2.176464000	0.563961000

Cr(II)LK1 ³2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-1.626868000	0.021267000	0.945453000
C	-1.958624000	1.369214000	0.525553000
C	-1.509782000	-0.065610000	2.488543000
C	1.517159000	0.708571000	4.703104000
C	0.187333000	0.695984000	4.228733000
C	2.536627000	0.155015000	3.904118000
C	2.205199000	-0.372936000	2.650523000
N	0.916946000	-0.373435000	2.185778000
C	-0.087607000	0.137193000	2.976370000
C	-2.612051000	-1.014764000	0.348883000
C	-2.189797000	-1.456856000	-1.038385000
N	-0.839943000	-1.653643000	-1.224814000
C	-0.396101000	-2.190835000	-2.402041000
C	-1.278966000	-2.531864000	-3.435509000
C	-3.115890000	-1.765450000	-2.038689000
C	-2.657761000	-2.311577000	-3.258545000
H	-1.854392000	-1.065690000	2.781214000
H	-2.171106000	0.658207000	2.970289000
H	1.747955000	1.132461000	5.676120000
H	-0.614268000	1.099030000	4.840521000
H	3.567138000	0.130168000	4.242350000
H	2.966700000	-0.811494000	2.016315000
H	-3.632767000	-0.628750000	0.326088000
H	-2.608428000	-1.877469000	1.027611000
H	0.668338000	-2.359106000	-2.506765000
H	-0.890172000	-2.961254000	-4.352825000
H	-4.177541000	-1.606152000	-1.875564000
H	-3.362551000	-2.563691000	-4.045537000
Cr	0.298636000	-1.147932000	0.399605000
O	0.725055000	-2.830780000	0.910003000
O	0.891124000	-3.876057000	-0.034574000
C	2.019539000	-0.867183000	-0.681346000
H	0.997887000	-4.699484000	0.523521000
H	2.481049000	-1.852136000	-0.797724000
H	1.722760000	-0.442464000	-1.644398000
N	-1.156960000	2.229078000	-0.173732000
N	-3.136918000	2.031500000	0.782021000
C	-1.834403000	3.433916000	-0.370149000
C	-3.067250000	3.309909000	0.224480000
C	0.208915000	1.981683000	-0.684250000
C	-4.359132000	1.577539000	1.511386000
H	-1.400109000	4.267078000	-0.900872000
H	-3.879166000	4.017870000	0.295235000
H	0.643481000	2.933952000	-0.995953000
H	0.845550000	1.580112000	0.108778000
H	0.174919000	1.321994000	-1.555056000
H	-4.659082000	2.362225000	2.210929000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	-5.171224000	1.409294000	0.797384000
H	-4.175764000	0.664677000	2.076927000
H	2.658356000	-0.183801000	-0.115067000

Fe(II)LK2 ⁵1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	2.136366000	-3.120514000	1.704452000
C	0.936016000	-3.162688000	0.962553000
C	2.925964000	-1.953859000	1.671498000
C	2.491929000	-0.866265000	0.906093000
C	0.556466000	-2.050726000	0.203282000
N	1.327183000	-0.910513000	0.183120000
C	-0.656444000	-2.092014000	-0.716402000
N	-1.341247000	-0.726958000	-0.854851000
N	-0.570857000	1.692383000	-2.190716000
C	-1.706645000	1.053284000	-2.633710000
C	-0.314943000	2.977798000	-2.594670000
C	-1.179732000	3.667017000	-3.451782000
C	-2.348924000	3.021719000	-3.901248000
C	-2.612735000	1.699949000	-3.480879000
C	-1.875364000	-0.412128000	-2.257327000
C	-2.322092000	-0.493078000	0.176475000
N	-2.233387000	0.460974000	1.154100000
N	-3.491618000	-1.185392000	0.339891000
C	-4.180522000	-0.662171000	1.456914000
C	-3.382918000	0.385637000	1.978215000
C	-3.782761000	1.125781000	3.105825000
C	-5.412355000	-1.020966000	2.033291000
C	-5.811001000	-0.284284000	3.156022000
C	-5.009689000	0.770368000	3.682484000
C	-1.143458000	1.431553000	1.359709000
C	-4.049055000	-2.308737000	-0.455589000
Fe	0.591567000	0.576244000	-0.970900000
H	2.447063000	-3.979058000	2.292792000
H	0.320721000	-4.057338000	0.971795000
H	3.856333000	-1.887174000	2.225427000
H	3.072721000	0.048018000	0.861513000
H	-1.353675000	-2.853867000	-0.358629000
H	-0.335207000	-2.395703000	-1.720671000
H	0.591206000	3.445991000	-2.227231000
H	-0.942382000	4.680449000	-3.757540000
H	-3.040015000	3.533714000	-4.564585000
H	-3.505713000	1.186501000	-3.824509000
H	-1.310288000	-1.032172000	-2.964601000
H	-2.927512000	-0.690541000	-2.356379000
H	-3.194113000	1.933606000	3.528362000
H	-6.033470000	-1.820836000	1.643807000
H	-6.753708000	-0.519708000	3.640221000
H	-5.362422000	1.311875000	4.554793000
H	-1.381840000	2.047825000	2.227849000
H	-0.201469000	0.917923000	1.584841000
H	-1.058817000	2.110426000	0.502787000
H	-4.205003000	-3.171619000	0.199278000
H	-5.011878000	-2.008558000	-0.880856000
H	-3.381870000	-2.600604000	-1.265987000
O	1.658123000	-0.424099000	-2.911229000
C	2.708387000	2.420346000	-0.646576000
H	2.773209000	3.399242000	-1.129059000
H	3.627571000	2.246154000	-0.080819000
H	1.862463000	2.436957000	0.062030000
H	2.647913000	1.653169000	-1.439962000
O	2.446488000	-0.701038000	-3.858382000

Fe(II)LK2 ³TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
------	------	------	------

C	2.108997000	-2.973415000	1.886898000
C	1.057864000	-3.120896000	0.956178000
C	2.667992000	-1.696543000	2.095677000
C	2.179900000	-0.610865000	1.360270000
C	0.615957000	-2.004682000	0.241792000
N	1.179380000	-0.761658000	0.436615000
C	-0.462367000	-2.083193000	-0.818433000
N	-1.183131000	-0.719669000	-0.923014000
N	-0.646117000	1.786135000	-1.880122000
C	-1.626483000	1.109143000	-2.573621000
C	-0.502311000	3.137229000	-2.058613000
C	-1.310153000	3.848112000	-2.952431000
C	-2.302388000	3.158222000	-3.677724000
C	-2.467896000	1.771794000	-3.470593000
C	-1.694599000	-0.385744000	-2.341454000
C	-2.236097000	-0.601500000	0.077514000
N	-2.253481000	0.280010000	1.124461000
N	-3.363094000	-1.375255000	0.127679000
C	-4.133460000	-0.984359000	1.247250000
C	-3.428284000	0.063636000	1.886383000
C	-3.916673000	0.681910000	3.051994000
C	-5.364198000	-1.460820000	1.733222000
C	-5.854824000	-0.842978000	2.891124000
C	-5.142887000	0.208602000	3.538874000
C	-1.245642000	1.288001000	1.498426000
C	-3.825594000	-2.466908000	-0.771734000
Fe	0.475088000	0.597047000	-0.789815000
H	2.477026000	-3.833232000	2.439338000
H	0.605609000	-4.093963000	0.789368000
H	3.470470000	-1.542587000	2.809513000
H	2.592120000	0.379408000	1.502970000
H	-1.164966000	-2.886578000	-0.588283000
H	-0.017729000	-2.291932000	-1.797313000
H	0.264483000	3.644033000	-1.487557000
H	-1.160392000	4.915388000	-3.077541000
H	-2.937531000	3.686925000	-4.382693000
H	-3.234700000	1.224560000	-4.010772000
H	-1.044919000	-0.908413000	-3.051988000
H	-2.714569000	-0.744652000	-2.490408000
H	-3.391406000	1.477541000	3.570220000
H	-5.918562000	-2.260871000	1.253682000
H	-6.800801000	-1.172160000	3.309948000
H	-5.563946000	0.651896000	4.436064000
H	-0.837864000	1.780887000	0.604452000
H	-1.738782000	2.085577000	2.059995000
H	-0.461944000	0.852930000	2.124601000
H	-3.972739000	-3.376483000	-0.181418000
H	-4.779487000	-2.180121000	-1.225429000
H	-3.107687000	-2.677159000	-1.563071000
O	1.166624000	-0.306923000	-2.333202000
C	2.122541000	1.982653000	-0.558477000
H	2.247554000	2.855004000	-1.215728000
H	3.105836000	1.688686000	-0.160638000
H	1.572238000	2.359525000	0.316004000
H	2.333054000	1.119003000	-1.644133000
O	2.377985000	0.282424000	-2.591007000

Fe(II)LK2 ⁵2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	1.948347000	-2.836625000	2.241201000
C	0.949673000	-2.975956000	1.253470000
C	2.598506000	-1.596264000	2.389229000
C	2.244436000	-0.539507000	1.541666000
C	0.637057000	-1.889467000	0.430250000
N	1.288350000	-0.681924000	0.572557000
C	-0.377686000	-1.995726000	-0.698871000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

N	-1.165387000	-0.688113000	-0.838411000
N	-0.525392000	1.897223000	-1.832927000
C	-1.559430000	1.214151000	-2.438459000
C	-0.411939000	3.249396000	-2.012597000
C	-1.312177000	3.966288000	-2.809595000
C	-2.365224000	3.275102000	-3.439025000
C	-2.489593000	1.883249000	-3.240485000
C	-1.596784000	-0.296805000	-2.254161000
C	-2.246310000	-0.607606000	0.114382000
N	-2.339948000	0.258315000	1.169529000
N	-3.349055000	-1.422808000	0.114380000
C	-4.175193000	-1.076154000	1.205952000
C	-3.532763000	-0.011400000	1.881361000
C	-4.087088000	0.576480000	3.033159000
C	-5.405350000	-1.601238000	1.641093000
C	-5.960516000	-1.014781000	2.786090000
C	-5.311976000	0.054220000	3.470240000
C	-1.400714000	1.315710000	1.587122000
C	-3.724989000	-2.510520000	-0.823515000
Fe	0.746989000	0.644744000	-0.861767000
H	2.207821000	-3.675016000	2.881080000
H	0.433669000	-3.922987000	1.127377000
H	3.366835000	-1.448119000	3.140742000
H	2.729821000	0.424713000	1.635559000
H	-1.034003000	-2.850924000	-0.520052000
H	0.137909000	-2.169385000	-1.651298000
H	0.405284000	3.758423000	-1.515186000
H	-1.186139000	5.036718000	-2.933248000
H	-3.076031000	3.805615000	-4.065864000
H	-3.297546000	1.333670000	-3.714029000
H	-0.898674000	-0.774778000	-2.952212000
H	-2.597537000	-0.665839000	-2.491340000
H	-3.608635000	1.385800000	3.574982000
H	-5.911546000	-2.414856000	1.131905000
H	-6.908951000	-1.382363000	3.165555000
H	-5.781976000	0.472011000	4.355205000
H	-0.874219000	1.718342000	0.719627000
H	-1.973953000	2.137197000	2.023503000
H	-0.696383000	0.937411000	2.334031000
H	-3.854845000	-3.441429000	-0.262968000
H	-4.671218000	-2.257542000	-1.312179000
H	-2.964656000	-2.665810000	-1.588114000
O	1.716710000	-0.180519000	-2.343761000
C	2.360799000	2.027077000	-0.608806000
H	2.372395000	2.518829000	-1.583194000
H	3.218348000	1.376962000	-0.432136000
H	2.017556000	2.627288000	0.238797000
H	2.419070000	-0.106978000	-4.139582000
O	1.687263000	0.359231000	-3.642967000

Ni(II)LK2 ⁵1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	2.113418000	-3.059072000	1.721766000
C	0.941521000	-3.140383000	0.939584000
C	2.846553000	-1.856978000	1.737050000
C	2.390303000	-0.773531000	0.974416000
C	0.541289000	-2.029231000	0.189394000
N	1.259414000	-0.858306000	0.211943000
C	-0.641766000	-2.085575000	-0.764221000
N	-1.320054000	-0.709059000	-0.900384000
N	-0.578873000	1.694513000	-2.174318000
C	-1.697835000	1.067046000	-2.665630000
C	-0.304523000	2.979764000	-2.550953000
C	-1.135639000	3.681338000	-3.434062000
C	-2.288138000	3.046897000	-3.936090000
C	-2.571921000	1.722485000	-3.540020000
C	-1.881231000	-0.397450000	-2.299435000
C	-2.290010000	-0.475987000	0.150909000

N	-2.185681000	0.465092000	1.138729000
N	-3.454100000	-1.173801000	0.322511000
C	-4.123069000	-0.669726000	1.461194000
C	-3.316511000	0.369120000	1.985889000
C	-3.690630000	1.087048000	3.136362000
C	-5.344562000	-1.037690000	2.053534000
C	-5.720503000	-0.320737000	3.196984000
C	-4.907262000	0.722237000	3.728995000
C	-1.096509000	1.433296000	1.356959000
C	-4.032594000	-2.282394000	-0.480975000
Ni	0.462074000	0.528707000	-0.954657000
H	2.444268000	-3.913873000	2.304296000
H	0.365155000	-4.060262000	0.911544000
H	3.753102000	-1.757432000	2.324568000
H	2.929570000	0.165365000	0.966907000
H	-1.352093000	-2.846221000	-0.432323000
H	-0.297790000	-2.372835000	-1.765120000
H	0.586153000	3.441600000	-2.143713000
H	-0.883012000	4.697472000	-3.717859000
H	-2.951281000	3.568856000	-4.619664000
H	-3.452938000	1.214416000	-3.920761000
H	-1.334604000	-1.027309000	-3.011784000
H	-2.937275000	-0.666661000	-2.370996000
H	-3.087530000	1.880254000	3.566351000
H	-5.974601000	-1.829392000	1.661724000
H	-6.654385000	-0.563939000	3.694330000
H	-5.241657000	1.245577000	4.619450000
H	-1.463409000	2.234536000	2.002143000
H	-0.240397000	0.963275000	1.850970000
H	-0.822879000	1.923234000	0.412112000
H	-4.193834000	-3.148762000	0.167813000
H	-4.995072000	-1.965029000	-0.894482000
H	-3.376979000	-2.576817000	-1.299725000
O	1.458509000	-0.531305000	-2.847324000
C	2.582254000	2.305094000	-0.684474000
H	2.680196000	3.258642000	-1.209529000
H	3.506137000	2.109102000	-0.134342000
H	1.753282000	2.385459000	0.038395000
H	2.466889000	1.510261000	-1.444411000
O	2.313622000	-0.728636000	-3.755243000

Ni(II)LK2 ¹TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	2.172268000	-2.902512000	1.874280000
C	1.084742000	-3.058819000	0.989874000
C	2.765883000	-1.633252000	2.010693000
C	2.275905000	-0.564392000	1.248184000
C	0.640591000	-1.959049000	0.248355000
N	1.242027000	-0.728590000	0.371257000
C	-0.473735000	-2.053059000	-0.770577000
N	-1.200214000	-0.690393000	-0.878829000
N	-0.608736000	1.803671000	-1.875876000
C	-1.622647000	1.143228000	-2.529144000
C	-0.454752000	3.147272000	-2.054018000
C	-1.291291000	3.875011000	-2.912040000
C	-2.317209000	3.203735000	-3.602442000
C	-2.489887000	1.819389000	-3.392879000
C	-1.698239000	-0.350118000	-2.302371000
C	-2.262635000	-0.577571000	0.109932000
N	-2.302070000	0.278308000	1.175614000
N	-3.393731000	-1.354700000	0.121335000
C	-4.181335000	-0.992282000	1.234900000
C	-3.489844000	0.040799000	1.907751000
C	-4.001043000	0.633579000	3.078071000
C	-5.422237000	-1.480772000	1.691207000
C	-5.937869000	-0.885833000	2.852760000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	-5.240020000	0.150731000	3.533919000
C	-1.317068000	1.292728000	1.599211000
C	-3.832129000	-2.434360000	-0.805183000
Ni	0.460419000	0.592245000	-0.801511000
H	2.541099000	-3.748712000	2.446471000
H	0.603417000	-4.025699000	0.876745000
H	3.595517000	-1.467938000	2.690145000
H	2.713210000	0.420802000	1.342534000
H	-1.167939000	-2.851157000	-0.499460000
H	-0.065527000	-2.278879000	-1.761698000
H	0.335907000	3.648353000	-1.511773000
H	-1.132288000	4.941364000	-3.033274000
H	-2.971104000	3.742966000	-4.281478000
H	-3.281971000	1.281110000	-3.904892000
H	-1.045194000	-0.877981000	-3.005625000
H	-2.718317000	-0.703950000	-2.462385000
H	-3.483419000	1.416364000	3.622933000
H	-5.965273000	-2.273442000	1.186681000
H	-6.890571000	-1.226250000	3.246558000
H	-5.675830000	0.575922000	4.432846000
H	-0.791995000	1.700090000	0.729953000
H	-1.852088000	2.122883000	2.066702000
H	-0.607413000	0.870499000	2.316340000
H	-4.013377000	-3.345832000	-0.227533000
H	-4.762681000	-2.133776000	-1.297012000
H	-3.083287000	-2.650146000	-1.565442000
O	1.260121000	-0.267141000	-2.504382000
C	2.158535000	1.933553000	-0.747105000
H	2.189025000	2.689710000	-1.536344000
H	3.164790000	1.775347000	-0.317688000
H	1.581796000	2.337671000	0.097358000
H	2.512484000	0.853455000	-1.547917000
O	2.560246000	-0.221459000	-2.220426000

Ni(II)LK2 ³2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	2.036875000	-2.824667000	2.102910000
C	1.007487000	-2.965229000	1.148534000
C	2.666053000	-1.574598000	2.248272000
C	2.261909000	-0.510099000	1.430477000
C	0.647661000	-1.870219000	0.354492000
N	1.279851000	-0.654091000	0.493201000
C	-0.406505000	-1.977203000	-0.734756000
N	-1.194110000	-0.664426000	-0.853280000
N	-0.563200000	1.898732000	-1.852302000
C	-1.593738000	1.222422000	-2.467584000
C	-0.440253000	3.246700000	-2.034866000
C	-1.322820000	3.966534000	-2.851402000
C	-2.369428000	3.281697000	-3.496035000
C	-2.507276000	1.893212000	-3.289314000
C	-1.654075000	-0.283035000	-2.265958000
C	-2.264439000	-0.590862000	0.115636000
N	-2.341476000	0.272146000	1.174540000
N	-3.367707000	-1.403443000	0.126769000
C	-4.179293000	-1.057791000	1.229938000
C	-3.526116000	0.003358000	1.901275000
C	-4.065356000	0.587506000	3.062057000
C	-5.405186000	-1.581941000	1.677748000
C	-5.945484000	-0.998573000	2.831306000
C	-5.286261000	0.066348000	3.511529000
C	-1.385268000	1.318721000	1.581184000
C	-3.758537000	-2.489188000	-0.807859000
Ni	0.548107000	0.684309000	-0.757771000
H	2.333551000	-3.667878000	2.719633000
H	0.502047000	-3.918341000	1.024972000
H	3.455233000	-1.420609000	2.976593000
H	2.730018000	0.461374000	1.529535000

H	-1.062100000	-2.826800000	-0.529489000
H	0.068816000	-2.158180000	-1.705700000
H	0.367283000	3.756061000	-1.523908000
H	-1.187175000	5.035849000	-2.974334000
H	-3.065655000	3.813820000	-4.137480000
H	-3.313008000	1.345771000	-3.769227000
H	-0.982479000	-0.785046000	-2.972117000
H	-2.666481000	-0.638157000	-2.471660000
H	-3.579473000	1.393316000	3.602432000
H	-5.919201000	-2.392557000	1.171635000
H	-6.890151000	-1.365399000	3.220747000
H	-5.744533000	0.481966000	4.403635000
H	-0.941784000	1.794095000	0.701042000
H	-1.931910000	2.101689000	2.111712000
H	-0.617214000	0.912173000	2.245784000
H	-3.888888000	-3.418594000	-0.245033000
H	-4.707472000	-2.230506000	-1.288216000
H	-3.005717000	-2.650061000	-1.578619000
O	1.413922000	-0.271684000	-2.505877000
C	2.103021000	1.971270000	-0.574207000
H	2.122745000	2.509905000	-1.520040000
H	2.971232000	1.329563000	-0.434705000
H	1.806457000	2.561335000	0.298980000
H	2.920126000	-0.344622000	-3.708178000
O	2.650386000	0.176651000	-2.893357000

Co(II)LK2 ⁶1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	2.084169000	-3.079912000	1.754341000
C	0.918412000	-3.147130000	0.962086000
C	2.833592000	-1.887871000	1.772504000
C	2.398726000	-0.800900000	1.003028000
C	0.540544000	-2.034008000	0.202899000
N	1.274178000	-0.873811000	0.227756000
C	-0.634414000	-2.075067000	-0.759458000
N	-1.310765000	-0.697357000	-0.889287000
N	-0.590346000	1.709529000	-2.184223000
C	-1.708352000	1.070670000	-2.660284000
C	-0.337630000	3.000811000	-2.559443000
C	-1.188929000	3.694453000	-3.429071000
C	-2.340669000	3.047322000	-3.916596000
C	-2.602850000	1.718978000	-3.519502000
C	-1.868311000	-0.394462000	-2.291493000
C	-2.286488000	-0.469796000	0.156434000
N	-2.191001000	0.470144000	1.146496000
N	-3.450338000	-1.171365000	0.321620000
C	-4.127365000	-0.670194000	1.456323000
C	-3.327061000	0.370518000	1.986300000
C	-3.711432000	1.086526000	3.134780000
C	-5.351230000	-1.042710000	2.041049000
C	-5.736575000	-0.328264000	3.182730000
C	-4.930058000	0.717175000	3.720095000
C	-1.106561000	1.443280000	1.372065000
C	-4.022160000	-2.281581000	-0.483957000
Co	0.534851000	0.573061000	-0.959220000
H	2.397604000	-3.937039000	2.342998000
H	0.328599000	-4.058394000	0.932887000
H	3.735829000	-1.798346000	2.368264000
H	2.951550000	0.131073000	0.999908000
H	-1.347848000	-2.839092000	-0.442171000
H	-0.280988000	-2.352853000	-1.759750000
H	0.553028000	3.474134000	-2.163290000
H	-0.952572000	4.714428000	-3.713211000
H	-3.019803000	3.563082000	-4.589037000
H	-3.483819000	1.201731000	-3.887743000
H	-1.306185000	-1.014413000	-3.000456000
H	-2.918990000	-0.681819000	-2.371120000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	-3.114833000	1.882625000	3.568361000
H	-5.976279000	-1.836002000	1.644546000
H	-6.672634000	-0.574894000	3.674234000
H	-5.271629000	1.239164000	4.608608000
H	-1.460890000	2.204715000	2.069264000
H	-0.230189000	0.961036000	1.817046000
H	-0.867796000	1.975261000	0.442534000
H	-4.184213000	-3.148140000	0.164407000
H	-4.983704000	-1.967060000	-0.901840000
H	-3.362584000	-2.575031000	-1.299679000
O	1.532645000	-0.512592000	-2.885066000
C	2.659934000	2.312625000	-0.739590000
H	2.761502000	3.266150000	-1.264513000
H	3.584527000	2.107990000	-0.193527000
H	1.837485000	2.404665000	-0.009410000
H	2.542870000	1.522249000	-1.505028000
O	2.340006000	-0.770998000	-3.821268000

Co(II)LK2 ²TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	2.129905000	-2.993559000	1.852253000
C	1.069252000	-3.131261000	0.932954000
C	2.692644000	-1.719758000	2.059431000
C	2.198051000	-0.627640000	1.334406000
C	0.621557000	-2.008068000	0.230386000
N	1.186397000	-0.768333000	0.426733000
C	-0.456074000	-2.087243000	-0.828881000
N	-1.183521000	-0.726171000	-0.928982000
N	-0.645178000	1.780995000	-1.893240000
C	-1.624441000	1.101665000	-2.581212000
C	-0.493322000	3.124651000	-2.091663000
C	-1.297924000	3.829461000	-2.996242000
C	-2.292247000	3.138224000	-3.714227000
C	-2.462276000	1.756474000	-3.489440000
C	-1.691279000	-0.392013000	-2.349196000
C	-2.236706000	-0.612426000	0.071119000
N	-2.239374000	0.269912000	1.115340000
N	-3.368766000	-1.375142000	0.126697000
C	-4.129937000	-0.973790000	1.250457000
C	-3.411578000	0.069112000	1.884645000
C	-3.887045000	0.695665000	3.050699000
C	-5.362970000	-1.436134000	1.743561000
C	-5.841825000	-0.809441000	2.902024000
C	-5.116439000	0.236473000	3.543916000
C	-1.207596000	1.255185000	1.470060000
C	-3.842603000	-2.465046000	-0.769203000
Co	0.401835000	0.591954000	-0.739403000
H	2.502879000	-3.857339000	2.394725000
H	0.613654000	-4.102036000	0.761641000
H	3.502589000	-1.568673000	2.765429000
H	2.613552000	0.359258000	1.485310000
H	-1.157271000	-2.893511000	-0.603966000
H	-0.011968000	-2.288278000	-1.809467000
H	0.269287000	3.640309000	-1.524384000
H	-1.142046000	4.894685000	-3.131075000
H	-2.923043000	3.660809000	-4.427315000
H	-3.227455000	1.203104000	-4.025747000
H	-1.037564000	-0.914789000	-3.055641000
H	-2.709452000	-0.755267000	-2.500223000
H	-3.350310000	1.486972000	3.564022000
H	-5.927827000	-2.232026000	1.269373000
H	-6.789207000	-1.127798000	3.326030000
H	-5.529176000	0.686489000	4.441640000
H	-0.779170000	1.712638000	0.560582000
H	-1.678272000	2.093486000	1.991959000
H	-0.442164000	0.819860000	2.117474000
H	-3.998595000	-3.370918000	-0.175556000
H	-4.793175000	-2.170112000	-1.224552000

H	-3.125377000	-2.684934000	-1.558791000
O	1.165260000	-0.229680000	-2.246162000
C	2.018173000	1.995683000	-0.460911000
H	2.126438000	2.881743000	-1.101947000
H	3.003847000	1.709415000	-0.061073000
H	1.460342000	2.342816000	0.417656000
H	2.287382000	1.174585000	-1.545847000
O	2.363149000	0.362485000	-2.502873000

Co(II)LK2 ⁴2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	1.949097000	-2.781362000	2.221332000
C	0.961743000	-2.940295000	1.225381000
C	2.569217000	-1.526662000	2.377821000
C	2.200421000	-0.476801000	1.527461000
C	0.635340000	-1.859466000	0.399578000
N	1.261637000	-0.640170000	0.545980000
C	-0.388142000	-1.973070000	-0.719472000
N	-1.180062000	-0.668392000	-0.848001000
N	-0.521021000	1.899097000	-1.824841000
C	-1.563377000	1.238015000	-2.438066000
C	-0.394634000	3.252741000	-1.980247000
C	-1.285780000	3.991899000	-2.767750000
C	-2.345867000	3.322525000	-3.408512000
C	-2.487033000	1.929568000	-3.229463000
C	-1.630611000	-0.270963000	-2.253787000
C	-2.254082000	-0.597801000	0.114762000
N	-2.354814000	0.267228000	1.170212000
N	-3.346474000	-1.427895000	0.120725000
C	-4.171019000	-1.093583000	1.216993000
C	-3.539918000	-0.020014000	1.888446000
C	-4.096170000	0.560004000	3.043367000
C	-5.391089000	-1.636162000	1.659072000
C	-5.948154000	-1.057574000	2.807106000
C	-5.311038000	0.020610000	3.487443000
C	-1.432551000	1.341168000	1.586996000
C	-3.715057000	-2.518094000	-0.816878000
Co	0.691808000	0.683314000	-0.821659000
H	2.220555000	-3.614580000	2.862972000
H	0.462964000	-3.896188000	1.096985000
H	3.325050000	-1.361771000	3.138426000
H	2.662660000	0.497982000	1.626211000
H	-1.038891000	-2.830559000	-0.531332000
H	0.113746000	-2.150419000	-1.677663000
H	0.428845000	3.743347000	-1.475003000
H	-1.147895000	5.062705000	-2.874026000
H	-3.050751000	3.870540000	-4.026908000
H	-3.304226000	1.397013000	-3.706698000
H	-0.961428000	-0.769987000	-2.965105000
H	-2.645034000	-0.615970000	-2.469554000
H	-3.626252000	1.376025000	3.582536000
H	-5.888139000	-2.457314000	1.152997000
H	-6.889026000	-1.438696000	3.192004000
H	-5.781856000	0.431904000	4.374998000
H	-0.919498000	1.759936000	0.719933000
H	-2.019572000	2.147314000	2.033345000
H	-0.716135000	0.972119000	2.327009000
H	-3.808926000	-3.456791000	-0.261982000
H	-4.678105000	-2.285025000	-1.281921000
H	-2.969488000	-2.646847000	-1.600655000
O	1.517453000	-0.452784000	-2.528905000
C	2.306564000	1.931829000	-0.676087000
H	2.326728000	2.406469000	-1.659301000
H	3.153967000	1.266780000	-0.501826000
H	2.050552000	2.589933000	0.160132000
H	2.610980000	-0.277365000	-4.110192000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

O 2.165799000 0.335257000 -3.451094000

Mn(II)LK2 ⁶1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	2.142903000	-3.074693000	1.752002000
C	0.971173000	-3.137232000	0.967434000
C	2.885480000	-1.878332000	1.781995000
C	2.439292000	-0.783803000	1.031009000
C	0.582357000	-2.013836000	0.231040000
N	1.308150000	-0.843379000	0.261970000
C	-0.597542000	-2.045918000	-0.722799000
N	-1.253515000	-0.647433000	-0.850774000
N	-0.578439000	1.754432000	-2.122544000
C	-1.687226000	1.108070000	-2.622712000
C	-0.343069000	3.051565000	-2.491982000
C	-1.191312000	3.740151000	-3.367964000
C	-2.326955000	3.080845000	-3.877201000
C	-2.577622000	1.746141000	-3.492101000
C	-1.829856000	-0.358439000	-2.260092000
C	-2.253135000	-0.434767000	0.184537000
N	-2.194290000	0.510203000	1.172829000
N	-3.409772000	-1.153487000	0.325385000
C	-4.120806000	-0.656571000	1.441441000
C	-3.351316000	0.400777000	1.983094000
C	-3.778246000	1.120361000	3.114353000
C	-5.351400000	-1.047429000	1.999435000
C	-5.777367000	-0.331686000	3.125623000
C	-5.003784000	0.733364000	3.672916000
C	-1.134543000	1.509175000	1.409408000
C	-3.952789000	-2.278868000	-0.480771000
Mn	0.497177000	0.586390000	-0.892677000
H	2.465777000	-3.938714000	2.325403000
H	0.387451000	-4.052041000	0.928725000
H	3.791413000	-1.793015000	2.372683000
H	2.987472000	0.150105000	1.039936000
H	-1.322082000	-2.796415000	-0.400579000
H	-0.256265000	-2.326522000	-1.726385000
H	0.534015000	3.535553000	-2.080442000
H	-0.965462000	4.765147000	-3.642339000
H	-3.002683000	3.591653000	-4.556926000
H	-3.445764000	1.219818000	-3.877490000
H	-1.259729000	-0.973344000	-2.966803000
H	-2.876008000	-0.662438000	-2.331008000
H	-3.211332000	1.935168000	3.552863000
H	-5.952138000	-1.855330000	1.595064000
H	-6.720291000	-0.591805000	3.596608000
H	-5.377228000	1.257644000	4.547136000
H	-1.412248000	2.112521000	2.274823000
H	-0.184644000	1.021422000	1.657288000
H	-1.049753000	2.197737000	0.560526000
H	-4.093179000	-3.149151000	0.167835000
H	-4.922222000	-1.987188000	-0.896812000
H	-3.289307000	-2.555748000	-1.298576000
O	1.498331000	-0.646295000	-3.035178000
C	2.553549000	2.123692000	-0.841425000
H	2.646213000	3.071591000	-1.375887000
H	3.477770000	1.926043000	-0.294119000
H	1.735888000	2.229861000	-0.099912000
H	2.438860000	1.325350000	-1.598308000
O	2.262612000	-0.948610000	-3.995223000

Mn(II)LK2 ²TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	0.810765000	4.718949000	0.226738000
C	0.340172000	3.715600000	1.101266000

C	1.583469000	4.346558000	-0.890107000
C	1.875814000	2.993247000	-1.094974000
C	0.665140000	2.378889000	0.854825000
N	1.432236000	2.021982000	-0.236201000
C	0.267173000	1.262277000	1.801422000
N	-0.010988000	-0.035556000	1.024717000
N	1.613410000	-1.922539000	-0.287502000
C	0.881183000	-2.372748000	0.793623000
C	2.147480000	-2.832632000	-1.162540000
C	1.982072000	-4.210361000	-0.985577000
C	1.245547000	-4.676287000	0.120191000
C	0.682720000	-3.738687000	1.012231000
C	0.376197000	-1.322732000	1.764676000
C	-1.351786000	-0.072709000	0.489277000
N	-1.676431000	-0.025566000	-0.839553000
N	-2.504057000	-0.138190000	1.224481000
C	-3.608930000	-0.130790000	0.343102000
C	-3.085705000	-0.052937000	-0.970618000
C	-3.923552000	-0.015645000	-2.100065000
C	-4.991899000	-0.184163000	0.592944000
C	-5.827682000	-0.151433000	-0.531153000
C	-5.302356000	-0.067593000	-1.853521000
C	-0.766439000	0.069947000	-1.993063000
C	-2.689229000	-0.209978000	2.696786000
Mn	1.838440000	0.064844000	-0.316516000
H	0.576213000	5.763121000	0.412402000
H	-0.260366000	3.981211000	1.966051000
H	1.959049000	5.086661000	-1.588886000
H	2.467221000	2.683194000	-1.946769000
H	-0.597287000	1.569142000	2.395139000
H	1.090172000	1.052356000	2.494971000
H	2.710831000	-2.453906000	-2.004853000
H	2.426034000	-4.897470000	-1.698199000
H	1.108182000	-5.741258000	0.283546000
H	0.107669000	-4.075679000	1.869435000
H	1.172536000	-1.059889000	2.471336000
H	-0.458596000	-1.724986000	2.342973000
H	-3.549587000	0.056248000	-3.116215000
H	-5.407971000	-0.247741000	1.593102000
H	-6.904112000	-0.189645000	-0.395320000
H	-5.992468000	-0.041535000	-2.691224000
H	0.130666000	-0.539428000	-1.824234000
H	-1.256561000	-0.368021000	-2.866014000
H	-0.516028000	1.110822000	-2.217694000
H	-3.324755000	0.620575000	3.018722000
H	-3.180266000	-1.153169000	2.956351000
H	-1.739317000	-0.147594000	3.226559000
O	3.047779000	0.028903000	1.024044000
C	3.290159000	0.083485000	-1.726211000
H	4.105150000	-0.643064000	-1.756546000
H	3.674452000	1.077015000	-1.967198000
H	2.428517000	-0.198723000	-2.346049000
H	4.139140000	0.145692000	-0.614743000
O	4.395899000	0.250160000	0.573349000

Mn(II)LK2 ⁴2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	1.992292000	-2.917536000	2.156328000
C	0.956115000	-3.016848000	1.202856000
C	2.678147000	-1.696538000	2.297185000
C	2.319217000	-0.617440000	1.479404000
C	0.643104000	-1.910318000	0.406917000
N	1.325662000	-0.719136000	0.544103000
C	-0.400973000	-1.985292000	-0.696328000
N	-1.184855000	-0.666952000	-0.815443000
N	-0.530634000	1.901854000	-1.892757000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	-1.575466000	1.208253000	-2.468441000
C	-0.408646000	3.245641000	-2.124229000
C	-1.306425000	3.940270000	-2.944223000
C	-2.369679000	3.237144000	-3.541174000
C	-2.505250000	1.855144000	-3.289332000
C	-1.625953000	-0.295027000	-2.239376000
C	-2.267017000	-0.593771000	0.138003000
N	-2.358177000	0.279729000	1.187311000
N	-3.366813000	-1.411509000	0.146998000
C	-4.189327000	-1.059294000	1.239804000
C	-3.548022000	0.012662000	1.906037000
C	-4.102779000	0.605514000	3.055228000
C	-5.416076000	-1.586498000	1.681925000
C	-5.970669000	-0.994879000	2.824262000
C	-5.324335000	0.081423000	3.498999000
C	-1.409839000	1.340625000	1.577552000
C	-3.746725000	-2.506068000	-0.781704000
Mn	0.703722000	0.702115000	-0.784517000
H	2.252866000	-3.771650000	2.774529000
H	0.413248000	-3.949303000	1.080841000
H	3.476739000	-1.577959000	3.021872000
H	2.829020000	0.333664000	1.570948000
H	-1.063526000	-2.834290000	-0.513478000
H	0.088726000	-2.156858000	-1.663174000
H	0.413436000	3.765554000	-1.647745000
H	-1.171082000	5.004240000	-3.107361000
H	-3.079707000	3.750354000	-4.183060000
H	-3.320897000	1.295705000	-3.737502000
H	-0.940101000	-0.799311000	-2.931306000
H	-2.632096000	-0.660486000	-2.456915000
H	-3.628384000	1.420609000	3.591783000
H	-5.920092000	-2.405723000	1.179656000
H	-6.916496000	-1.363674000	3.208993000
H	-5.793306000	0.503740000	4.382349000
H	-1.053678000	1.878716000	0.694388000
H	-1.940054000	2.070212000	2.192610000
H	-0.580968000	0.931866000	2.163758000
H	-3.860943000	-3.436101000	-0.216248000
H	-4.702029000	-2.262055000	-1.257009000
H	-2.997204000	-2.657380000	-1.557611000
O	1.756596000	-0.289784000	-2.415642000
C	2.183107000	2.073843000	-0.431960000
H	2.261873000	2.679190000	-1.339016000
H	3.098455000	1.501715000	-0.259121000
H	1.865521000	2.652198000	0.443903000
H	2.833988000	0.078683000	-3.972519000
O	1.929398000	0.343742000	-3.628056000

Cr(II)LK2 ³1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	2.133051000	-3.138556000	1.740900000
C	0.944997000	-3.174270000	0.979334000
C	2.927709000	-1.976188000	1.719962000
C	2.512055000	-0.885279000	0.945741000
C	0.588723000	-2.059249000	0.213061000
N	1.364362000	-0.921382000	0.201382000
C	-0.607187000	-2.080654000	-0.725286000
N	-1.256610000	-0.681874000	-0.865941000
N	-0.614930000	1.748009000	-2.176182000
C	-1.728207000	1.079342000	-2.632994000
C	-0.416449000	3.050069000	-2.544456000
C	-1.312310000	3.726728000	-3.382548000
C	-2.455073000	3.048162000	-3.847576000
C	-2.665269000	1.706784000	-3.460385000
C	-1.823056000	-0.395523000	-2.280292000
C	-2.251830000	-0.448827000	0.165343000

N	-2.177634000	0.497240000	1.151514000
N	-3.422898000	-1.145031000	0.306106000
C	-4.128386000	-0.629419000	1.416759000
C	-3.339779000	0.414497000	1.957075000
C	-3.756614000	1.146683000	3.084117000
C	-5.368532000	-0.993493000	1.971891000
C	-5.784261000	-0.265053000	3.093698000
C	-4.991561000	0.786482000	3.639707000
C	-1.094800000	1.469599000	1.394104000
C	-3.979559000	-2.268274000	-0.492961000
Cr	0.575546000	0.559641000	-0.991424000
H	2.429330000	-3.998165000	2.334867000
H	0.323299000	-4.064586000	0.979203000
H	3.848930000	-1.913273000	2.289453000
H	3.099622000	0.025220000	0.914379000
H	-1.334121000	-2.819329000	-0.381498000
H	-0.284837000	-2.381543000	-1.729625000
H	0.470335000	3.547130000	-2.167758000
H	-1.116260000	4.756440000	-3.662092000
H	-3.167018000	3.548910000	-4.497076000
H	-3.537842000	1.166305000	-3.814758000
H	-1.222420000	-0.983601000	-2.985123000
H	-2.856904000	-0.734285000	-2.369365000
H	-3.175325000	1.952040000	3.521147000
H	-5.983935000	-1.790486000	1.567902000
H	-6.733984000	-0.504357000	3.562055000
H	-5.357721000	1.321657000	4.510396000
H	-1.352374000	2.064269000	2.271437000
H	-0.154173000	0.956087000	1.621762000
H	-0.999903000	2.165224000	-0.552778000
H	-4.155996000	-3.123179000	0.167118000
H	-4.932378000	-1.959673000	-0.934544000
H	-3.305644000	-2.577889000	-1.290360000
O	1.421367000	-0.499120000	-2.922586000
C	2.625277000	2.281944000	-0.796152000
H	2.685729000	3.298151000	-1.194415000
H	3.568508000	2.034776000	-0.303403000
H	1.821523000	2.270696000	-0.035341000
H	2.505674000	1.601066000	-1.658914000
O	2.552302000	-0.968299000	-3.255807000

Cr(II)LK2 ³TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	2.110130000	-3.080309000	1.887281000
C	1.027336000	-3.169802000	0.986056000
C	2.752006000	-1.839852000	2.070616000
C	2.299068000	-0.727781000	1.350899000
C	0.623847000	-2.029699000	0.284074000
N	1.253012000	-0.817199000	0.471079000
C	-0.449432000	-2.080184000	-0.789763000
N	-1.189580000	-0.725443000	-0.895997000
N	-0.694587000	1.839901000	-1.898871000
C	-1.674385000	1.119462000	-2.548437000
C	-0.588785000	3.186552000	-2.122186000
C	-1.445068000	3.856341000	-3.004576000
C	-2.444846000	3.124562000	-3.674444000
C	-2.562875000	1.738784000	-3.432562000
C	-1.671160000	-0.382743000	-2.325946000
C	-2.254516000	-0.613010000	0.083530000
N	-2.272412000	0.279771000	1.121172000
N	-3.387530000	-1.374389000	0.131124000
C	-4.166161000	-0.961167000	1.237428000
C	-3.458716000	0.089542000	1.872176000
C	-3.958533000	0.728465000	3.021301000
C	-5.406328000	-1.421225000	1.715049000
C	-5.906302000	-0.784190000	2.858223000
C	-5.194389000	0.271366000	3.499417000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	-1.238485000	1.272721000	1.456766000
C	-3.842493000	-2.474790000	-0.760281000
Cr	0.520214000	0.654679000	-0.745525000
H	2.444237000	-3.959198000	2.431008000
H	0.524838000	-4.119342000	0.827664000
H	3.589060000	-1.733921000	2.752729000
H	2.773409000	0.238877000	1.472008000
H	-1.146693000	-2.896134000	-0.589012000
H	0.012826000	-2.266838000	-1.766379000
H	0.187375000	3.725395000	-1.592479000
H	-1.325566000	4.922996000	-3.162926000
H	-3.118566000	3.619075000	-4.368158000
H	-3.326829000	1.157837000	-3.940638000
H	-0.968336000	-0.859895000	-3.019465000
H	-2.662901000	-0.795390000	-2.519728000
H	-3.437743000	1.531401000	3.533108000
H	-5.960871000	-2.223289000	1.239079000
H	-6.859910000	-1.100135000	3.269816000
H	-5.623677000	0.731892000	4.383928000
H	-1.042284000	1.934031000	0.599430000
H	-1.617242000	1.932845000	2.240098000
H	-0.339502000	0.788743000	1.855282000
H	-3.998167000	-3.377773000	-0.162112000
H	-4.790083000	-2.191402000	-1.228960000
H	-3.114065000	-2.693452000	-1.539882000
O	1.318786000	-0.164138000	-2.282778000
C	2.204601000	2.055908000	-0.529854000
H	2.153713000	2.954758000	-1.155710000
H	3.260706000	1.917209000	-0.230528000
H	1.733990000	2.319807000	0.435436000
H	2.569799000	1.117582000	-1.563613000
O	2.593081000	0.304910000	-2.481665000

Cr(II)LK2 ³2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	2.470180000	-3.129641000	1.771572000
C	1.223970000	-3.193108000	1.113488000
C	3.237707000	-1.951553000	1.677689000
C	2.730544000	-0.868516000	0.951921000
C	0.775887000	-2.085258000	0.385075000
N	1.513716000	-0.926134000	0.324426000
C	-0.474331000	-2.160663000	-0.472475000
N	-1.138683000	-0.780285000	-0.689536000
N	-0.563914000	1.698376000	-1.946307000
C	-1.594120000	0.952874000	-2.472560000
C	-0.450740000	3.018493000	-2.279943000
C	-1.369660000	3.642021000	-3.135490000
C	-2.435736000	2.889029000	-3.661289000
C	-2.546485000	1.521922000	-3.321622000
C	-1.549219000	-0.529453000	-2.163249000
C	-2.267164000	-0.598677000	0.208446000
N	-2.320837000	0.272912000	1.257619000
N	-3.451408000	-1.287557000	0.142911000
C	-4.305441000	-0.818452000	1.168280000
C	-3.587831000	0.173963000	1.877260000
C	-4.145353000	0.851268000	2.977012000
C	-5.615199000	-1.186811000	1.524043000
C	-6.172270000	-0.515294000	2.620773000
C	-5.450278000	0.485830000	3.334025000
C	-1.268124000	1.178655000	1.744758000
C	-3.873793000	-2.393594000	-0.756089000
Cr	0.704668000	0.575283000	-0.796607000
H	2.835643000	-3.982321000	2.336367000
H	0.627875000	-4.099798000	1.158417000
H	4.208498000	-1.871629000	2.155153000
H	3.300191000	0.048116000	0.854547000
H	-1.185308000	-2.856660000	-0.021010000
H	-0.211477000	-2.559230000	-1.460791000

H	0.386530000	3.570201000	-1.871891000
H	-1.244795000	4.690794000	-3.383306000
H	-3.161454000	3.349538000	-4.325220000
H	-3.351581000	0.919410000	-3.731055000
H	-0.786652000	-1.017111000	-2.784596000
H	-2.505914000	-0.996375000	-2.399526000
H	-3.617220000	1.621812000	3.529197000
H	-6.181957000	-1.942490000	0.990115000
H	-7.181460000	-0.760301000	2.937272000
H	-5.928392000	0.978180000	4.175241000
H	-1.389402000	2.180769000	1.323439000
H	-1.336114000	1.243704000	2.833845000
H	-0.278830000	0.768567000	1.522809000
H	-4.282506000	-3.202471000	-0.143616000
H	-4.652385000	-2.042270000	-1.441050000
H	-3.038437000	-2.794847000	-1.328544000
O	2.025258000	0.428612000	-2.006127000
C	1.528181000	2.197384000	0.148137000
H	2.260565000	2.618724000	-0.546622000
H	1.997425000	1.847274000	1.071529000
H	0.706507000	2.891376000	0.347114000
H	2.953339000	1.051074000	-3.577847000
O	2.240798000	1.437063000	-2.992816000

Fe(II)LK3 ⁷1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-1.861724000	0.312692000	-0.123813000
C	-0.837355000	1.313767000	-0.226703000
C	-2.783641000	0.576465000	1.067624000
C	-5.522045000	-1.496563000	2.749242000
C	-4.805093000	-0.394359000	2.242567000
C	-5.048891000	-2.800286000	2.495925000
C	-3.885429000	-2.957641000	1.739899000
N	-3.183565000	-1.880911000	1.252395000
C	-3.631509000	-0.607393000	1.506329000
C	-2.603048000	0.106680000	-1.452372000
C	-1.771413000	-0.716636000	-2.423642000
N	-1.160930000	-1.834428000	-1.903164000
C	-0.430081000	-2.656617000	-2.716797000
C	-0.294353000	-2.399525000	-4.086443000
C	-1.667515000	-0.411121000	-3.783941000
C	-0.926074000	-1.264198000	-4.630961000
H	-3.448051000	1.425230000	0.868827000
H	-2.128488000	0.869893000	1.897402000
H	-6.428508000	-1.341963000	3.327207000
H	-5.154287000	0.616370000	2.431690000
H	-5.572027000	-3.673526000	2.870652000
H	-3.499853000	-3.945610000	1.514873000
H	-2.865801000	1.059966000	-1.918372000
H	-3.547133000	-0.407813000	-1.226073000
H	0.038823000	-3.524580000	-2.264594000
H	0.286152000	-3.073642000	-4.707206000
H	-2.159870000	0.468179000	-4.187699000
H	-0.842728000	-1.045312000	-5.691538000
Fe	-1.583370000	-2.086539000	0.050402000
O	-2.263498000	-5.635270000	-0.912240000
O	-1.989702000	-4.498292000	-0.434968000
C	0.199205000	-3.309264000	1.636139000
H	-0.108101000	-4.329043000	1.877292000
H	0.398033000	-3.246799000	0.549773000
N	0.523552000	1.158253000	0.002213000
N	-1.029581000	2.663009000	-0.540414000
C	1.198211000	2.385682000	-0.196322000
C	0.209583000	3.342269000	-0.544333000
H	-0.549245000	-2.600429000	2.038094000
C	-2.205056000	3.368147000	-0.815312000
C	-2.140294000	4.715513000	-1.110186000
C	-0.893452000	5.412124000	-1.134893000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	0.276803000	4.720771000	-0.846510000
C	1.244022000	0.032579000	0.388791000
C	2.611077000	0.114173000	0.558235000
C	3.311789000	1.341237000	0.346506000
C	2.598293000	2.473107000	-0.026839000
H	0.682751000	-0.870761000	0.568148000
H	3.155212000	-0.772578000	0.866164000
H	4.386128000	1.384627000	0.486868000
H	3.094845000	3.424651000	-0.185206000
H	1.239514000	5.220812000	-0.843817000
H	-0.868104000	6.471034000	-1.367549000
H	-3.064691000	5.244788000	-1.317153000
H	-3.144356000	2.837314000	-0.769789000
H	1.139795000	-3.081524000	2.146107000

Fe(II)LK3³TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-2.376490000	0.294407000	-0.945903000
C	-1.303251000	1.197435000	-0.583283000
C	-3.628039000	0.511198000	-0.065800000
C	-3.840683000	-0.576420000	3.609660000
C	-4.038042000	0.191393000	2.441618000
C	-3.018179000	-1.719164000	3.551387000
C	-2.436262000	-2.077666000	2.330594000
N	-2.654665000	-1.348437000	1.193000000
C	-3.437719000	-0.215473000	1.247997000
C	-2.666614000	0.315584000	-2.460415000
C	-1.723147000	-0.634493000	-3.167126000
N	-1.284011000	-1.711550000	-2.426841000
C	-0.450504000	-2.633168000	-3.003651000
C	-0.049943000	-2.524627000	-4.339200000
C	-1.345211000	-0.471965000	-4.502374000
C	-0.508081000	-1.434339000	-5.105924000
H	-4.490163000	0.105610000	-0.605797000
H	-3.810341000	1.574358000	0.107827000
H	-4.312237000	-0.284711000	4.543663000
H	-4.657802000	1.082539000	2.468208000
H	-2.834720000	-2.326410000	4.431475000
H	-1.800391000	-2.950042000	2.257585000
H	-2.561213000	1.324899000	-2.865940000
H	-3.704813000	-0.003327000	-2.607045000
H	-0.112054000	-3.459998000	-2.393270000
H	0.601261000	-3.279820000	-4.766544000
H	-1.700285000	0.381480000	-5.072060000
H	-0.216305000	-1.331880000	-6.147148000
Fe	-2.057818000	-1.769018000	-0.622674000
O	-4.044204000	-3.393712000	-1.247404000
O	-3.841113000	-2.038229000	-1.298525000
C	-1.624339000	-3.853148000	-0.236204000
H	-2.917078000	-3.691180000	-0.773516000
H	-1.386483000	-4.572253000	-1.033782000
N	-0.080777000	0.880738000	-0.010329000
N	-1.395780000	2.590703000	-0.585647000
C	0.590427000	2.063478000	0.385826000
C	-0.243364000	3.151198000	0.010094000
H	-0.647378000	-3.494051000	0.120743000
C	-2.406542000	3.425138000	-1.070688000
C	-2.268175000	4.795474000	-0.958366000
C	-1.111595000	5.378297000	-0.356688000
C	-0.101757000	4.551512000	0.124262000
C	0.542907000	-0.352895000	0.173224000
C	1.766521000	-0.423739000	0.809475000
C	2.433954000	0.756632000	1.256754000
C	1.849275000	1.996440000	1.022402000
H	0.099292000	-1.221065000	-0.299475000
H	2.238826000	-1.392860000	0.935198000
H	3.399469000	0.682258000	1.744871000
H	2.345161000	2.915314000	1.317928000

H	0.792855000	4.963466000	0.579248000
H	-1.023839000	6.456975000	-0.284201000
H	-3.059824000	5.428673000	-1.345747000
H	-3.267765000	2.972831000	-1.541862000
H	-2.053478000	-4.394286000	0.619863000

Fe(II)LK3⁵2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-2.395789000	0.356317000	-0.968170000
C	-1.338315000	1.227352000	-0.547399000
C	-3.648381000	0.491065000	-0.095545000
C	-3.871742000	-0.701585000	3.550595000
C	-3.998735000	0.121036000	2.411061000
C	-3.214851000	-1.941471000	3.432619000
C	-2.717085000	-2.328123000	2.182666000
N	-2.855144000	-1.536035000	1.076416000
C	-3.486884000	-0.314601000	1.184976000
C	-2.615642000	0.388747000	-2.484448000
C	-1.611729000	-0.517893000	-3.180944000
N	-1.300446000	-1.704041000	-2.549187000
C	-0.433958000	-2.581253000	-3.142788000
C	0.138704000	-2.318751000	-4.392588000
C	-1.064126000	-0.205750000	-4.429396000
C	-0.184387000	-1.116819000	-5.051723000
H	-4.503608000	0.116043000	-0.670925000
H	-3.855966000	1.535124000	0.154841000
H	-4.272524000	-0.379372000	4.507215000
H	-4.497075000	1.083005000	2.482907000
H	-3.092764000	-2.599037000	4.286725000
H	-2.207892000	-3.277137000	2.063968000
H	-2.528823000	1.403446000	-2.882940000
H	-3.637063000	0.040994000	-2.683890000
H	-0.202643000	-3.498447000	-2.614303000
H	0.815692000	-3.041124000	-4.836113000
H	-1.320829000	0.729168000	-4.918155000
H	0.241168000	-0.890553000	-6.025022000
Fe	-2.370998000	-1.949718000	-0.847574000
O	-5.237695000	-2.607463000	-0.898142000
O	-4.084538000	-2.355786000	-1.669896000
C	-2.021294000	-4.035045000	-0.587851000
H	-5.898822000	-2.999718000	-1.536310000
H	-1.030277000	-4.056875000	-0.125421000
N	-0.101488000	0.899824000	-0.006889000
N	-1.386424000	2.621010000	-0.606581000
C	0.630919000	2.077875000	0.279636000
C	-0.188455000	3.172712000	-0.102752000
H	-2.861456000	-4.310521000	0.052390000
C	-2.402091000	3.460016000	-1.072730000
C	-2.223065000	4.828987000	-1.031775000
C	-1.018677000	5.405084000	-0.522792000
C	-0.005327000	4.573021000	-0.060717000
C	0.464879000	-0.343355000	0.265389000
C	1.728199000	-0.420550000	0.814054000
C	2.480015000	0.757575000	1.112050000
C	1.925147000	2.001841000	0.841383000
H	-0.120801000	-1.217922000	0.024202000
H	2.151463000	-1.398690000	1.017755000
H	3.471840000	0.674883000	1.542490000
H	2.467235000	2.917579000	1.052936000
H	0.921487000	4.979399000	0.330092000
H	-0.901327000	6.483015000	-0.500924000
H	-3.020768000	5.467131000	-1.397697000
H	-3.304845000	3.006844000	-1.457531000
H	-2.092765000	-4.428456000	-1.602450000

Ni(II)LK3⁵1

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-2.403505000	0.277044000	-0.615038000
C	-1.409084000	1.227358000	-0.202941000
C	-3.647871000	0.264666000	0.280344000
C	-4.174699000	-1.582914000	3.598154000
C	-4.238922000	-0.577103000	2.612143000
C	-3.377347000	-2.720461000	3.366481000
C	-2.666977000	-2.816171000	2.163704000
N	-2.734701000	-1.841760000	1.205989000
C	-3.516884000	-0.733835000	1.422444000
C	-2.697020000	0.344421000	-2.127585000
C	-1.613799000	-0.362100000	-2.926365000
N	-1.067492000	-1.482977000	-2.351780000
C	-0.144961000	-2.215092000	-3.040502000
C	0.255206000	-1.862253000	-4.336953000
C	-1.246636000	0.045614000	-4.213256000
C	-0.304499000	-0.717916000	-4.935421000
H	-4.505384000	-0.010163000	-0.346329000
H	-3.844445000	1.262308000	0.684075000
H	-4.733905000	-1.480448000	4.523419000
H	-4.852621000	0.304932000	2.769361000
H	-3.305303000	-3.516762000	4.099570000
H	-2.041064000	-3.675515000	1.957138000
H	-2.800473000	1.377525000	-2.469519000
H	-3.662187000	-0.149429000	-2.289389000
H	0.267510000	-3.087744000	-2.549884000
H	0.982953000	-2.472911000	-4.860556000
H	-1.692047000	0.930110000	-4.658594000
H	-0.015552000	-0.424640000	-5.940320000
Ni	-1.818550000	-1.814360000	-0.554559000
O	-4.697496000	-3.566900000	-1.863943000
O	-3.896548000	-2.626795000	-1.594595000
C	-0.815682000	-4.399507000	-0.380320000
H	-1.786402000	-4.121594000	-0.825654000
H	-0.224443000	-3.549866000	0.003257000
N	-0.138773000	0.947990000	0.274045000
N	-1.450506000	2.603775000	-0.437305000
C	0.652018000	2.122162000	0.282244000
C	-0.190908000	3.181445000	-0.160322000
H	-1.004562000	-5.094857000	0.441379000
C	-2.514763000	3.401836000	-0.859675000
C	-2.318366000	4.760114000	-1.023153000
C	-1.048479000	5.359970000	-0.763638000
C	0.010869000	4.567406000	-0.327395000
C	0.386399000	-0.248660000	0.763592000
C	1.716822000	-0.306460000	1.141713000
C	2.547827000	0.850855000	1.091839000
C	2.000681000	2.068938000	0.689053000
H	-0.311173000	-1.045512000	0.990862000
H	2.110944000	-1.239163000	1.532477000
H	3.583043000	0.789846000	1.409440000
H	2.595255000	2.976812000	0.688814000
H	0.981062000	4.999717000	-0.106257000
H	-0.918666000	6.429060000	-0.894112000
H	-3.156020000	5.371376000	-1.342855000
H	-3.476840000	2.931933000	-1.012006000
H	-0.229209000	-4.909863000	-1.148582000

Ni(II)LK3⁵TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-2.135487000	0.600861000	-0.868928000
C	-1.243187000	1.573651000	-0.515651000
C	-3.399607000	0.445144000	-0.018358000
C	-3.550849000	-0.607681000	3.666273000

C	-3.565140000	0.192625000	2.503618000
C	-3.198165000	-1.962460000	3.554304000
C	-2.874617000	-2.472308000	2.286350000
N	-2.897192000	-1.699284000	1.164833000
C	-3.240645000	-0.372639000	1.260690000
C	-2.182969000	0.160035000	-2.345303000
C	-1.218869000	-0.918252000	-2.827623000
N	-1.238101000	-2.156925000	-2.230662000
C	-0.493049000	-3.169546000	-2.758321000
C	0.296923000	-2.999409000	-3.907452000
C	-0.435880000	-0.687293000	-3.970089000
C	0.326917000	-1.738012000	-4.524812000
H	-4.150999000	-0.020862000	-0.663480000
H	-3.790690000	1.425181000	0.268932000
H	-3.821379000	-0.184523000	4.628992000
H	-3.863154000	1.235008000	2.569846000
H	-3.184970000	-2.617895000	4.418554000
H	-2.612356000	-3.516842000	2.160469000
H	-2.042928000	1.048322000	-2.970186000
H	-3.208546000	-0.190629000	-2.506002000
H	-0.551372000	-4.132550000	-2.263299000
H	0.855573000	-3.839232000	-4.306776000
H	-0.444302000	0.286588000	-4.450925000
H	0.916144000	-1.574739000	-5.422219000
Ni	-2.459205000	-2.477329000	-0.645624000
O	-4.767017000	-3.257002000	-1.786158000
O	-4.201821000	-2.019093000	-1.610638000
C	-2.820176000	-4.595715000	-0.525826000
H	-3.923041000	-3.919644000	-1.256830000
H	-2.774902000	-5.324396000	-1.349286000
N	0.131518000	1.405948000	-0.239868000
N	-1.480827000	2.964580000	-0.355162000
C	0.731405000	2.628034000	0.112425000
C	-0.308239000	3.630561000	0.046542000
H	-1.802142000	-4.598893000	-0.093122000
C	-2.649826000	3.665742000	-0.619402000
C	-2.673035000	5.039882000	-0.420127000
C	-1.512521000	5.723813000	0.033296000
C	-0.315110000	5.011004000	0.253361000
C	0.847966000	0.220940000	-0.241404000
C	2.197423000	0.252037000	0.085165000
C	2.830376000	1.477892000	0.425803000
C	2.085702000	2.676141000	0.446031000
H	0.305736000	-0.679962000	-0.495306000
H	2.761911000	-0.674185000	0.082800000
H	3.886095000	1.491535000	0.679843000
H	2.552725000	3.616570000	0.720423000
H	0.588582000	5.525779000	0.563625000
H	-1.542265000	6.798074000	0.189665000
H	-3.588285000	5.584394000	-0.628223000
H	-3.497519000	3.113561000	-1.003515000
H	-3.487140000	-4.978499000	0.258210000

Ni(II)LK3³2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-2.367305000	0.356092000	-0.950156000
C	-1.310430000	1.235352000	-0.544892000
C	-3.624473000	0.512196000	-0.079960000
C	-3.971977000	-0.761586000	3.524591000
C	-4.058459000	0.085701000	2.400378000
C	-3.312893000	-1.997988000	3.398332000
C	-2.775230000	-2.357542000	2.154894000
N	-2.877643000	-1.544528000	1.064770000
C	-3.507345000	-0.326319000	1.181586000
C	-2.597615000	0.372995000	-2.468674000
C	-1.620204000	-0.556594000	-3.166208000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

N	-1.314383000	-1.731701000	-2.517497000
C	-0.477261000	-2.630689000	-3.110510000
C	0.071791000	-2.403107000	-4.379945000
C	-1.096241000	-0.274956000	-4.433032000
C	-0.246133000	-1.211564000	-5.057271000
H	-4.484082000	0.185769000	-0.675566000
H	-3.797145000	1.556891000	0.192411000
H	-4.403425000	-0.460183000	4.474451000
H	-4.555409000	1.048165000	2.476761000
H	-3.216699000	-2.675450000	4.240047000
H	-2.262657000	-3.303750000	2.034246000
H	-2.506210000	1.382598000	-2.878951000
H	-3.625749000	0.032826000	-2.645445000
H	-0.245079000	-3.539897000	-2.569628000
H	0.727696000	-3.145845000	-4.821392000
H	-1.350636000	0.654164000	-4.933984000
H	0.159863000	-1.012454000	-6.044579000
Ni	-2.224502000	-1.839458000	-0.768340000
O	-5.017082000	-2.810332000	-0.937049000
O	-4.054488000	-2.184954000	-1.719208000
C	-2.017191000	-3.842447000	-0.570030000
H	-5.779375000	-3.032804000	-1.548021000
H	-1.025273000	-3.929167000	-0.114075000
N	-0.062771000	0.914392000	-0.023163000
N	-1.373136000	2.629865000	-0.587495000
C	0.660181000	2.096329000	0.271005000
C	-0.175999000	3.188460000	-0.089783000
H	-2.852514000	-4.127584000	0.067785000
C	-2.399084000	3.462085000	-1.042815000
C	-2.234127000	4.832868000	-0.989789000
C	-1.033127000	5.415277000	-0.481977000
C	-0.005788000	4.587993000	-0.035920000
C	0.518640000	-0.326282000	0.228667000
C	1.788385000	-0.397748000	0.764116000
C	2.529362000	0.784380000	1.069692000
C	1.958436000	2.027991000	0.819097000
H	-0.053050000	-1.208153000	-0.021934000
H	2.223504000	-1.374028000	0.950689000
H	3.525968000	0.707604000	1.490441000
H	2.493819000	2.946122000	1.037397000
H	0.920666000	5.001011000	0.348835000
H	-0.925428000	6.494126000	-0.450723000
H	-3.039103000	5.466353000	-1.347740000
H	-3.295375000	3.002854000	-1.435202000
H	-2.096982000	-4.230347000	-1.584439000

Co(II)LK3 ⁶1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-2.286385000	0.247716000	-0.758979000
C	-1.307513000	1.207109000	-0.327469000
C	-3.548202000	0.262707000	0.116298000
C	-3.889355000	-1.264225000	3.622509000
C	-4.003030000	-0.345703000	2.556452000
C	-3.144675000	-2.445708000	3.437216000
C	-2.538905000	-2.675682000	2.196789000
N	-2.663707000	-1.790976000	1.158581000
C	-3.387208000	-0.633385000	1.334515000
C	-2.541345000	0.311910000	-2.273355000
C	-1.522776000	-0.514221000	-3.045793000
N	-1.107481000	-1.691973000	-2.464473000
C	-0.241918000	-2.511633000	-3.138888000
C	0.224612000	-2.195907000	-4.419724000
C	-1.078393000	-0.142363000	-4.318253000
C	-0.199456000	-0.994512000	-5.021732000
H	-4.385692000	-0.093721000	-0.496814000
H	-3.793790000	1.277839000	0.439867000
H	-4.368570000	-1.059543000	4.575481000
H	-4.572259000	0.570317000	2.682044000

H	-3.034620000	-3.173021000	4.234454000
H	-1.954251000	-3.570979000	2.022742000
H	-2.521199000	1.343219000	-2.635450000
H	-3.550923000	-0.076160000	-2.458636000
H	0.066629000	-3.425148000	-2.645085000
H	0.900734000	-2.873426000	-4.930136000
H	-1.412835000	0.788340000	-4.766408000
H	0.148026000	-0.724123000	-6.014644000
Co	-1.925315000	-1.981147000	-0.677502000
O	-5.037752000	-3.355352000	-2.018745000
O	-4.149460000	-2.548186000	-1.624065000
C	-1.156558000	-4.612805000	-0.445122000
H	-2.102814000	-4.275471000	-0.905514000
H	-0.477653000	-3.803836000	-0.117794000
N	-0.041936000	0.988179000	0.203219000
N	-1.478094000	2.591389000	-0.386252000
C	0.589502000	2.227065000	0.476147000
C	-0.325731000	3.245414000	0.100746000
H	-1.403967000	-5.235078000	0.418221000
C	-2.570512000	3.339995000	-0.833310000
C	-2.508715000	4.719421000	-0.795930000
C	-1.349753000	5.397838000	-0.308446000
C	-0.262329000	4.656299000	0.138965000
C	0.634651000	-0.196893000	0.483035000
C	1.906929000	-0.161033000	1.014779000
C	2.558088000	1.079885000	1.292531000
C	1.892127000	2.268296000	1.021950000
H	0.123996000	-1.126127000	0.275379000
H	2.412862000	-1.097679000	1.224965000
H	3.558307000	1.087065000	1.711215000
H	2.353272000	3.229800000	1.222092000
H	0.631719000	5.140968000	0.516610000
H	-1.324966000	6.481906000	-0.288935000
H	-3.365397000	5.285954000	-1.146173000
H	-3.441034000	2.811743000	-1.195667000
H	-0.629154000	-5.220875000	-1.184771000

Co(II)LK3 ⁴TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-2.197070000	0.334620000	-0.846901000
C	-1.209025000	1.293415000	-0.459143000
C	-3.481779000	0.442613000	0.029591000
C	-3.816464000	-0.803978000	3.640683000
C	-3.926617000	0.034071000	2.510870000
C	-3.082084000	-1.999267000	3.535722000
C	-2.495755000	-2.333530000	2.306723000
N	-2.624898000	-1.532771000	1.210238000
C	-3.327561000	-0.354050000	1.308130000
C	-2.467818000	0.345096000	-2.369861000
C	-1.549561000	-0.622584000	-3.091153000
N	-1.199973000	-1.764653000	-2.411541000
C	-0.430811000	-2.707047000	-3.028808000
C	0.001935000	-2.553730000	-4.353093000
C	-1.137524000	-0.410845000	-4.411225000
C	-0.360033000	-1.392607000	-5.060167000
H	-4.306619000	0.038540000	-0.566961000
H	-3.711199000	1.485445000	0.263295000
H	-4.290168000	-0.527634000	4.577954000
H	-4.486104000	0.962849000	2.569896000
H	-2.966848000	-2.667104000	4.382809000
H	-1.924954000	-3.246731000	2.200874000
H	-2.348974000	1.349734000	-2.784488000
H	-3.510158000	0.040995000	-2.514834000
H	-0.164332000	-3.591476000	-2.464689000
H	0.602238000	-3.331257000	-4.813357000
H	-1.426430000	0.494861000	-4.936043000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	-0.044273000	-1.251803000	-6.089552000
Co	-1.948299000	-1.821350000	-0.601792000
O	-4.118109000	-3.400304000	-1.292074000
O	-3.871320000	-2.082801000	-1.435196000
C	-1.741107000	-4.018864000	-0.349639000
H	-3.013357000	-3.734817000	-0.807436000
H	-1.565205000	-4.697136000	-1.194139000
N	0.058254000	1.066810000	0.074228000
N	-1.358126000	2.684167000	-0.541659000
C	0.710899000	2.297670000	0.322893000
C	-0.196037000	3.329676000	-0.068603000
H	-0.755229000	-3.607949000	-0.065567000
C	-2.435732000	-4.033967000	-1.017844000
C	-2.355595000	4.815330000	-1.012079000
C	-1.191152000	5.483277000	-0.531686000
C	-0.108820000	4.732554000	-0.061906000
C	0.709073000	-0.130208000	0.357743000
C	1.992821000	-0.112604000	0.868709000
C	2.663872000	1.119077000	1.125353000
C	2.013455000	2.324948000	0.850255000
H	0.174708000	-1.048741000	0.162946000
H	2.486340000	-1.055433000	1.080150000
H	3.669415000	1.116086000	1.532860000
H	2.499252000	3.277616000	1.034638000
H	0.791221000	5.216505000	0.302814000
H	-1.147084000	6.567507000	-0.535894000
H	-3.199740000	5.386174000	-1.385072000
H	-3.305131000	2.908323000	-1.386537000
H	-2.103082000	-4.576619000	0.521974000

Co(II)LK3 ⁶2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-1.896304000	0.653908000	-0.676057000
C	-1.174437000	1.775508000	-0.425242000
C	-2.837353000	0.115730000	0.418499000
C	-1.992035000	-2.331527000	3.243848000
C	-2.131952000	-1.141522000	2.500360000
C	-2.245507000	-3.558392000	2.610143000
C	-2.639493000	-3.544608000	1.263912000
N	-2.785737000	-2.391983000	0.548357000
C	-2.524420000	-1.184924000	1.149776000
C	-2.135833000	0.248058000	-2.124649000
C	-1.299485000	-0.931324000	-2.612148000
N	-1.792052000	-2.202647000	-2.453450000
C	-1.118665000	-3.257899000	-2.998044000
C	0.074444000	-3.100172000	-3.717953000
C	-0.104373000	-0.716010000	-3.319548000
C	0.594815000	-1.804765000	-3.878710000
H	-3.823584000	0.026936000	-0.053506000
H	-2.912781000	0.907449000	1.170072000
H	-1.713490000	-2.297624000	4.292925000
H	-1.985139000	-0.183156000	2.990796000
H	-2.164698000	-4.500991000	3.140756000
H	-2.864179000	-4.475684000	0.752023000
H	-1.886247000	1.096538000	-2.766786000
H	-3.201941000	0.021595000	-2.233145000
H	-1.554206000	-4.243907000	-2.866563000
H	0.566776000	-3.966821000	-4.145893000
H	0.264195000	0.294897000	-3.469502000
H	1.509459000	-1.643382000	-4.441321000
Co	-3.466889000	-2.658196000	-1.367116000
O	-5.554260000	-1.050626000	-0.601559000
O	-4.716496000	-1.326968000	-1.804251000
C	-4.640104000	-4.420690000	-1.861208000
H	-6.467208000	-0.977999000	-0.976601000
H	-3.927788000	-5.236624000	-1.696552000
N	-0.094808000	1.909150000	0.474321000
N	-1.358425000	3.071040000	-0.974091000

C	0.399623000	3.226640000	0.477942000
C	-0.405025000	3.970514000	-0.461123000
H	-5.452877000	-4.340157000	-1.135556000
C	-2.368660000	3.504555000	-1.823119000
C	-2.387344000	4.832485000	-2.226052000
C	-1.399954000	5.744454000	-1.762682000
C	-0.411332000	5.309939000	-0.858406000
C	0.509179000	0.908325000	1.219152000
C	1.592897000	1.232173000	2.023607000
C	2.086768000	2.564798000	2.072510000
C	1.490237000	3.566571000	1.282363000
H	0.109908000	-0.092230000	1.118721000
H	2.066995000	0.450067000	2.606810000
H	2.934194000	2.806265000	2.706796000
H	1.873310000	4.581869000	1.287775000
H	0.324320000	6.002882000	-0.463099000
H	-1.422774000	6.780073000	-2.087938000
H	-3.177423000	5.166495000	-2.890399000
H	-3.126466000	2.790551000	-2.116187000
H	-4.926145000	-4.235632000	-2.898211000

Mn(II)LK3 ⁶1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-2.263474000	0.286402000	-0.778068000
C	-1.293271000	1.241658000	-0.338165000
C	-3.533374000	0.290976000	0.085666000
C	-3.966489000	-1.151783000	3.615407000
C	-3.998100000	-0.242375000	2.536543000
C	-3.338960000	-2.400906000	3.443786000
C	-2.761012000	-2.700696000	2.204790000
N	-2.797223000	-1.819864000	1.156069000
C	-3.415286000	-0.599846000	1.315565000
C	-2.517065000	0.352156000	-2.291346000
C	-1.534226000	-0.491868000	-3.092635000
N	-1.202006000	-1.728196000	-2.585945000
C	-0.406135000	-2.567187000	-3.320870000
C	0.082682000	-2.208130000	-4.582237000
C	-1.062600000	-0.075778000	-4.342737000
C	-0.247769000	-0.941934000	-5.102847000
H	-4.362438000	-0.064926000	-0.540809000
H	-3.790089000	1.304935000	0.404877000
H	-4.422373000	-0.890623000	4.565946000
H	-4.483584000	0.722157000	2.650015000
H	-3.298273000	-3.126790000	4.248868000
H	-2.267518000	-3.652551000	2.041196000
H	-2.477460000	1.383315000	-2.653234000
H	-3.537779000	-0.010458000	-2.473561000
H	-0.166926000	-3.533583000	-2.890508000
H	0.703264000	-2.902268000	-5.138824000
H	-1.332255000	0.901207000	-4.732223000
H	0.118257000	-0.634967000	-6.078218000
Mn	-1.987323000	-2.115297000	-0.718084000
O	-4.718124000	-3.790425000	-1.901620000
O	-4.093155000	-2.724397000	-1.625978000
C	-0.898244000	-4.713372000	-0.316815000
H	-1.910495000	-4.568217000	-0.734001000
H	-0.350041000	-3.783973000	-0.069316000
N	-0.032375000	1.009734000	0.195066000
N	-1.459914000	2.627421000	-0.363572000
C	0.598163000	2.238421000	0.510256000
C	-0.312148000	3.267572000	0.152919000
H	-0.989828000	-5.307043000	0.596373000
C	-2.545717000	3.387086000	-0.807275000
C	-2.483797000	4.764893000	-0.735205000
C	-1.330691000	5.429947000	-0.215429000
C	-0.248918000	4.677296000	0.226745000
C	0.639520000	-0.185344000	0.436722000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	1.905433000	-0.171156000	0.983787000
C	2.554310000	1.059411000	1.311592000
C	1.895318000	2.258116000	1.070986000
H	0.131942000	-1.102831000	0.173040000
H	2.410686000	-1.114512000	1.163169000
H	3.550001000	1.050397000	1.740838000
H	2.358140000	3.211055000	1.305274000
H	0.641003000	5.152211000	0.625899000
H	-1.305546000	6.513200000	-0.169441000
H	-3.334525000	5.341005000	-1.084243000
H	-3.408664000	2.866740000	-1.198318000
H	-0.307708000	-5.272532000	-1.047131000

Mn(II)LK3 ⁶TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-2.305238000	0.358446000	-0.730563000
C	-1.274034000	1.296743000	-0.388447000
C	-3.554170000	0.476826000	0.170841000
C	-3.964057000	-0.892016000	3.732635000
C	-4.023451000	-0.010568000	2.632196000
C	-3.291061000	-2.122007000	3.594764000
C	-2.705056000	-2.438720000	2.364426000
N	-2.774843000	-1.586494000	1.294610000
C	-3.430286000	-0.378487000	1.420198000
C	-2.616034000	0.363038000	-2.246889000
C	-1.643566000	-0.519338000	-3.012272000
N	-1.254252000	-1.692754000	-2.400731000
C	-0.439343000	-2.570658000	-3.061476000
C	0.007531000	-2.316671000	-4.363522000
C	-1.218465000	-0.214750000	-4.308645000
C	-0.390598000	-1.125377000	-5.000760000
H	-4.418952000	0.142082000	-0.415988000
H	-3.727661000	1.518671000	0.453528000
H	-4.431722000	-0.623238000	4.675398000
H	-4.538190000	0.941342000	2.721338000
H	-3.223152000	-2.823836000	4.419239000
H	-2.179033000	-3.376341000	2.228242000
H	-2.586886000	1.375602000	-2.654592000
H	-3.637440000	-0.014625000	-2.376077000
H	-0.149869000	-3.478266000	-2.544758000
H	0.645695000	-3.037820000	-4.863110000
H	-1.533334000	0.709129000	-4.784364000
H	-0.063583000	-0.907490000	-6.013348000
Mn	-2.071520000	-1.908541000	-0.572126000
O	-4.242601000	-3.526963000	-1.348594000
O	-4.105220000	-2.180558000	-1.364758000
C	-1.857102000	-4.217409000	-0.420302000
H	-3.136164000	-3.885161000	-0.905350000
H	-1.619091000	-4.825558000	-1.302000000
N	-0.023043000	1.040657000	0.159999000
N	-1.324546000	2.670866000	-0.634874000
C	0.732748000	2.236531000	0.224794000
C	-0.099450000	3.274518000	-0.276352000
H	-0.897535000	-3.843097000	-0.021015000
C	-2.374089000	3.453515000	-1.123282000
C	-2.190860000	4.814513000	-1.277268000
C	-0.951454000	5.438530000	-0.939418000
C	0.088464000	4.664809000	-0.432951000
C	0.532125000	-0.146782000	0.631551000
C	1.824466000	-0.161944000	1.116536000
C	2.609784000	1.029991000	1.162541000
C	2.052985000	2.226786000	0.724722000
H	-0.104048000	-1.020798000	0.660849000
H	2.235232000	-1.096163000	1.485424000
H	3.621611000	0.999322000	1.551508000
H	2.614178000	3.154652000	0.762709000
H	1.035433000	5.112534000	-0.150498000
H	-0.831514000	6.508973000	-1.066873000

H	-3.016736000	5.409076000	-1.654108000
H	-3.315271000	2.970361000	-1.345328000
H	-2.298254000	-4.836977000	0.372062000

Mn(II)LK3 ⁶2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-2.361114000	0.369727000	-0.900616000
C	-1.300291000	1.247937000	-0.502572000
C	-3.613597000	0.522900000	-0.022132000
C	-3.903187000	-0.655562000	3.621740000
C	-3.980357000	0.174186000	2.482403000
C	-3.314405000	-1.928443000	3.503977000
C	-2.828667000	-2.338630000	2.255855000
N	-2.917545000	-1.540124000	1.148873000
C	-3.486220000	-0.287907000	1.258480000
C	-2.618234000	0.404552000	-2.416018000
C	-1.658116000	-0.514043000	-3.156840000
N	-1.380180000	-1.730571000	-2.569192000
C	-0.568041000	-2.621243000	-3.215842000
C	-0.017929000	-2.341688000	-4.473162000
C	-1.129956000	-0.181168000	-4.408417000
C	-0.304441000	-1.106108000	-5.083395000
H	-4.473504000	0.168680000	-0.605588000
H	-3.802257000	1.570444000	0.227353000
H	-4.290389000	-0.313219000	4.576921000
H	-4.427716000	1.160962000	2.553367000
H	-3.232563000	-2.593561000	4.357023000
H	-2.367673000	-3.311705000	2.136987000
H	-2.529972000	1.418924000	-2.813821000
H	-3.653415000	0.079808000	-2.584283000
H	-0.361943000	-3.562689000	-2.721226000
H	0.615821000	-3.076855000	-4.957570000
H	-1.360465000	0.778648000	-4.860600000
H	0.106530000	-0.864394000	-6.059183000
Mn	-2.298560000	-1.957424000	-0.755795000
O	-4.891928000	-3.440227000	-1.782607000
O	-4.467079000	-2.141631000	-1.643879000
C	-1.938028000	-3.954081000	-0.500904000
H	-5.820037000	-3.416456000	-2.163769000
H	-0.933415000	-4.056129000	-0.074053000
N	-0.058465000	0.926549000	0.032488000
N	-1.343256000	2.640615000	-0.589698000
C	0.682922000	2.107096000	0.282603000
C	-0.136152000	3.197087000	-0.113762000
H	-2.726936000	-4.314107000	0.165444000
C	-2.362372000	3.475925000	-1.055431000
C	-2.176097000	4.844478000	-1.045476000
C	-0.960980000	5.424769000	-0.568006000
C	0.054606000	4.596833000	-0.103439000
C	0.505853000	-0.311677000	0.331437000
C	1.775673000	-0.381977000	0.865825000
C	2.536910000	0.799290000	1.124009000
C	1.983648000	2.038969000	0.829932000
H	-0.084603000	-1.193472000	1.130246000
H	2.194621000	-1.357272000	1.090774000
H	3.533515000	0.722516000	1.544378000
H	2.531765000	2.957272000	1.012821000
H	0.988732000	5.006130000	0.266340000
H	-0.837948000	6.502276000	-0.570014000
H	-2.977143000	5.479060000	-1.410280000
H	-3.275382000	3.020821000	-1.412334000
H	-2.030804000	-4.401093000	-1.494577000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

Cr(II)LK3 ³1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-2.271273000	0.187755000	-0.761527000
C	-1.287780000	1.153590000	-0.331117000
C	-3.552490000	0.249308000	0.108430000
C	-4.013753000	-1.229063000	3.618032000
C	-4.068489000	-0.313158000	2.545627000
C	-3.312117000	-2.438914000	3.453804000
C	-2.685735000	-2.697255000	2.227991000
N	-2.747491000	-1.814840000	1.184959000
C	-3.435601000	-0.632427000	1.339600000
C	-2.552440000	0.298785000	-2.283939000
C	-1.526230000	-0.476688000	-3.090141000
N	-1.099239000	-1.665899000	-2.544200000
C	-0.245500000	-2.463039000	-3.254014000
C	0.204019000	-2.109745000	-4.532912000
C	-1.100360000	-0.064265000	-4.356641000
C	-0.227778000	-0.893067000	-5.094516000
H	-4.386939000	-0.092064000	-0.516926000
H	-3.769402000	1.276958000	0.409511000
H	-4.507147000	-1.001839000	4.558433000
H	-4.607785000	0.623153000	2.652886000
H	-3.250310000	-3.167393000	4.255194000
H	-2.132780000	-3.616561000	2.072525000
H	-2.566967000	1.342797000	-2.604806000
H	-3.553737000	-0.113901000	-2.460174000
H	0.072249000	-3.391470000	-2.793594000
H	0.872437000	-2.772797000	-5.071704000
H	-1.446691000	0.875796000	-4.775314000
H	0.105543000	-0.594447000	-6.084015000
Cr	-1.897781000	-1.982088000	-0.678828000
O	-4.868311000	-3.435240000	-1.270231000
O	-3.954724000	-2.625202000	-1.616591000
C	-1.043945000	-4.516328000	-0.429283000
H	-1.980384000	-4.259254000	-0.956683000
H	-0.422507000	-3.670480000	-0.076730000
N	-0.021490000	0.936893000	0.200283000
N	-1.461604000	2.537993000	-0.391465000
C	0.607635000	2.177054000	0.471066000
C	-0.308772000	3.193162000	0.094365000
H	-1.301287000	-5.138231000	0.431124000
C	-2.553561000	3.291087000	-0.835016000
C	-2.489319000	4.670499000	-0.797396000
C	-1.329117000	5.347889000	-0.312866000
C	-0.242864000	4.603692000	0.132574000
C	0.659271000	-0.244844000	0.483789000
C	1.930569000	-0.204974000	1.017674000
C	2.578751000	1.037847000	1.292568000
C	1.909684000	2.223424000	1.017565000
H	0.154648000	-1.178786000	0.278144000
H	2.438110000	-1.140079000	1.230894000
H	3.578594000	1.048776000	1.712067000
H	2.367839000	3.186889000	1.215176000
H	0.652855000	5.086074000	0.509224000
H	-1.302460000	6.431910000	-0.293454000
H	-3.346594000	5.237459000	-1.145633000
H	-3.427855000	2.768956000	-1.195667000
H	-0.435771000	-5.099924000	-1.125387000

Cr(II)LK3 ³TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
------	------	------	------

N	-2.342864000	0.318506000	-1.052913000
C	-1.290912000	1.233735000	-0.680416000
C	-3.611564000	0.501977000	-0.184023000
C	-3.813487000	-0.265824000	3.572929000
C	-4.002877000	0.402154000	2.343609000
C	-2.989812000	-1.407011000	3.615979000
C	-2.392529000	-1.859315000	2.432369000
N	-2.594251000	-1.223630000	1.239565000
C	-3.387540000	-0.097783000	1.192431000
C	-2.627906000	0.291070000	-2.565189000
C	-1.699922000	-0.678897000	-3.276380000
N	-1.265128000	-1.768443000	-2.552225000
C	-0.513001000	-2.733301000	-3.170026000
C	-0.169054000	-2.644437000	-4.523165000
C	-1.372886000	-0.533571000	-4.628774000
C	-0.602892000	-1.528757000	-5.266293000
H	-4.430010000	-0.018862000	-0.694317000
H	-3.888822000	1.555636000	-0.103193000
H	-4.297118000	0.098428000	4.474599000
H	-4.633585000	1.284441000	2.290098000
H	-2.817381000	-1.942762000	4.543408000
H	-1.753828000	-2.734142000	2.434215000
H	-2.532149000	1.290927000	-2.997339000
H	-3.667179000	-0.034370000	-2.697694000
H	-0.193226000	-3.578679000	-2.572365000
H	0.420715000	-3.431536000	-4.981019000
H	-1.721681000	0.330196000	-5.186824000
H	-0.350210000	-1.435704000	-6.318460000
Cr	-1.942980000	-1.787075000	-0.615125000
O	-3.855205000	-3.623120000	-1.275676000
O	-3.708916000	-2.260123000	-1.211248000
C	-1.474775000	-3.887888000	-0.142274000
H	-2.754622000	-3.887010000	-0.821465000
H	-1.304595000	-4.786175000	-0.764687000
N	-0.097143000	0.880508000	-0.079733000
N	-1.409599000	2.618307000	-0.543090000
C	0.520574000	2.013094000	0.498042000
C	-0.308834000	3.126561000	0.186095000
H	-0.443956000	-3.516066000	0.005254000
C	-2.396340000	3.481827000	-1.020021000
C	-2.295189000	4.835367000	-0.759358000
C	-1.197348000	5.366401000	-0.015490000
C	-0.204915000	4.509605000	0.450915000
C	0.537177000	-0.365400000	-0.033263000
C	1.708174000	-0.504479000	0.694024000
C	2.303279000	0.611390000	1.355571000
C	1.727053000	1.872011000	1.219855000
H	0.249514000	-1.101728000	-0.778843000
H	2.210286000	-1.467123000	0.704222000
H	3.226120000	0.483207000	1.910461000
H	2.192684000	2.749408000	1.657318000
H	0.649976000	4.887601000	1.001771000
H	-1.135085000	6.433601000	0.168820000
H	-3.064305000	5.496782000	-1.144902000
H	-3.196973000	3.065375000	-1.616107000
H	-1.825484000	-4.226805000	0.839821000

Cr(II)LK3 ⁵2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	-1.782270000	0.684708000	-0.770951000
C	-1.086831000	1.818624000	-0.495075000
C	-2.997520000	0.343041000	0.078675000
C	-2.346253000	-1.788205000	3.207173000
C	-2.384823000	-0.686252000	2.328385000
C	-2.764255000	-3.044472000	2.737264000
C	-3.196584000	-3.159779000	1.406091000
N	-3.224184000	-2.096252000	0.555633000
C	-2.828491000	-0.860983000	1.008067000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	-1.645075000	0.045539000	-2.163962000
C	-1.036324000	-1.344898000	-2.315929000
N	-1.825967000	-2.450536000	-2.096714000
C	-1.332804000	-3.692361000	-2.365582000
C	-0.040237000	-3.894980000	-2.874544000
C	0.260309000	-1.492786000	-2.836557000
C	0.770640000	-2.776346000	-3.121233000
H	-3.860307000	0.214373000	-0.586890000
H	-3.217673000	1.202965000	0.717853000
H	-2.020998000	-1.663412000	4.235595000
H	-2.107414000	0.301195000	2.687129000
H	-2.771953000	-3.916234000	3.382909000
H	-3.540942000	-4.110035000	1.016819000
H	-1.055376000	0.741301000	-2.767672000
H	-2.663475000	0.039582000	-2.583655000
H	-1.994596000	-4.532009000	-2.194636000
H	0.299263000	-4.901911000	-3.092514000
H	0.852915000	-0.613953000	-3.075090000
H	1.762645000	-2.894785000	-3.546751000
Cr	-3.784020000	-2.230926000	-1.467835000
O	-5.476113000	-1.026729000	-1.802671000
O	-4.482145000	-1.249724000	-2.956915000
C	-4.559610000	-4.094143000	-1.537688000
H	-6.355840000	-1.294291000	-2.166013000
H	-3.906565000	-4.845205000	-1.076755000
N	0.309280000	1.937892000	-0.328597000
N	-1.590610000	3.136315000	-0.349241000
C	0.674802000	3.272833000	-0.074636000
C	-0.547766000	4.041421000	-0.075815000
H	-5.514815000	-4.042312000	-0.996544000
C	-2.895815000	3.576245000	-0.525234000
C	-3.180651000	4.924886000	-0.361847000
C	-2.149666000	5.848334000	-0.037263000
C	-0.819332000	5.401519000	0.090783000
C	1.246103000	0.916331000	-0.321544000
C	2.580850000	1.232643000	-0.108320000
C	2.979686000	2.579536000	0.113245000
C	2.014167000	3.605517000	0.141713000
H	0.879356000	-0.092155000	-0.462933000
H	3.315965000	0.434970000	-0.100992000
H	4.026922000	2.815164000	0.276640000
H	2.300464000	4.633889000	0.337158000
H	-0.015839000	6.100131000	0.300759000
H	-2.384690000	6.900643000	0.090766000
H	-4.201724000	5.265038000	-0.499402000
H	-3.642846000	2.848998000	-0.813920000
H	-4.731733000	-4.324959000	-2.595941000

Fe(II)LK4 ⁷1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Fe	-0.214596000	-0.994352000	-0.130281000
C	-4.925348000	-0.296890000	-0.849777000
C	-3.962727000	0.691315000	-1.145902000
C	-4.509037000	-1.511878000	-0.268851000
C	-3.148237000	-1.705103000	-0.011904000
C	-2.612672000	0.442955000	-0.870675000
N	-2.211069000	-0.748275000	-0.312886000
C	-1.530340000	1.443932000	-1.262186000
N	-0.260598000	1.320369000	-0.436146000
C	1.010159000	1.490985000	-1.251994000
N	1.772249000	-0.663748000	-0.281128000
C	2.130111000	0.540889000	-0.839917000
C	2.745252000	-1.577275000	0.039605000
C	4.100136000	-1.326567000	-0.198563000
C	4.471968000	-0.098068000	-0.781136000
C	3.471944000	0.845871000	-1.097413000

C	-0.279993000	2.035726000	0.823090000
C	0.917741000	2.439383000	1.469284000
C	-1.498619000	2.373723000	1.467869000
C	-1.490248000	3.090981000	2.663434000
C	0.869060000	3.155254000	2.664551000
N	-0.320711000	3.482521000	3.251255000
C	-0.342413000	4.306887000	4.513651000
O	-0.177501000	-1.821418000	-2.419009000
O	-0.150962000	-2.546993000	-3.452598000
C	-0.174698000	-3.453484000	1.155754000
H	0.727675000	-4.012293000	1.417476000
H	-1.049737000	-4.061079000	1.401439000
H	-0.206094000	-2.539322000	1.773956000
H	-0.170172000	-3.297202000	0.058436000
H	-5.974958000	-0.121909000	-1.067971000
H	-4.265973000	1.631719000	-1.597531000
H	-5.220909000	-2.293074000	-0.024374000
H	-2.794066000	-2.628304000	0.432516000
H	-1.923934000	2.465988000	-1.215754000
H	-1.257891000	1.264493000	-2.308050000
H	1.359166000	2.529460000	-1.213287000
H	0.755193000	1.288735000	-2.298137000
H	2.424794000	-2.512542000	0.484459000
H	4.841450000	-2.074722000	0.061267000
H	5.516128000	0.121003000	-0.985216000
H	3.740865000	1.795915000	-1.550598000
H	1.898451000	2.226461000	1.065484000
H	-2.465938000	2.107924000	1.062848000
H	-2.411185000	3.374123000	3.160692000
H	1.772603000	3.488553000	3.162712000
H	-0.350245000	5.369018000	4.250339000
H	-1.235435000	4.060337000	5.091424000
H	0.542635000	4.077373000	5.110573000

Fe(II)LK4 ⁵TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Fe	-0.225803000	-0.977518000	-0.138672000
C	-4.930556000	-0.438738000	-0.516485000
C	-3.999504000	0.528416000	-0.954978000
C	-4.468592000	-1.578961000	0.171584000
C	-3.092851000	-1.740404000	0.369571000
C	-2.636364000	0.321768000	-0.725231000
N	-2.188689000	-0.817469000	-0.085419000
C	-1.573432000	1.298909000	-1.204052000
N	-0.288966000	1.179059000	-0.374657000
C	0.979900000	1.370525000	-1.214383000
N	1.724240000	-0.706371000	-0.100011000
C	2.101004000	0.457197000	-0.742004000
C	2.683121000	-1.576297000	0.347351000
C	4.045822000	-1.335640000	0.139807000
C	4.436490000	-0.169976000	-0.549847000
C	3.448287000	0.742255000	-0.980821000
C	-0.305701000	1.944434000	0.875028000
C	0.892864000	2.377267000	1.494753000
C	-1.521866000	2.296400000	1.511219000
C	-1.511187000	3.053259000	2.684076000
C	0.847536000	3.132527000	2.667644000
N	-0.340535000	3.469166000	3.250765000
C	-0.359638000	4.331209000	4.489745000
O	-0.224260000	-1.225587000	-2.244684000
O	-0.176646000	-2.564036000	-2.438084000
C	-0.161340000	-3.212040000	0.127008000
H	0.755901000	-3.808384000	0.038784000
H	-1.051589000	-3.847917000	0.043467000
H	-0.165224000	-2.809070000	1.157038000
H	-0.163802000	-2.934559000	-1.231625000
H	-5.991887000	-0.300476000	-0.702681000
H	-4.338912000	1.419610000	-1.475407000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	-5.156218000	-2.333755000	0.538384000
H	-2.708168000	-2.608740000	0.889651000
H	-1.946777000	2.328577000	-1.189629000
H	-1.313631000	1.063576000	-2.241552000
H	1.293338000	2.420037000	-1.206045000
H	0.725801000	1.117341000	-2.249027000
H	2.352188000	-2.465832000	0.868714000
H	4.778444000	-2.049882000	0.500661000
H	5.486784000	0.029396000	-0.743102000
H	3.732072000	1.651768000	-1.502868000
H	1.872590000	2.161084000	1.090795000
H	-2.490362000	2.015370000	1.120210000
H	-2.431073000	3.347141000	3.177210000
H	1.752223000	3.488136000	3.148172000
H	0.531949000	4.126139000	5.085813000
H	-0.377878000	5.384669000	4.193511000
H	-1.246754000	4.094670000	5.080646000

Fe(II)LK4 ⁵2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Fe	-0.236923000	-0.864048000	-0.240272000
C	-4.920884000	-0.259611000	-0.965925000
C	-3.974644000	0.762230000	-1.187843000
C	-4.486831000	-1.503488000	-0.464892000
C	-3.125072000	-1.688598000	-0.200923000
C	-2.622731000	0.523187000	-0.907277000
N	-2.210518000	-0.693748000	-0.415743000
C	-1.550471000	1.557818000	-1.240538000
N	-0.271027000	1.373385000	-0.436575000
C	1.001598000	1.593742000	-1.242329000
N	1.730640000	-0.633895000	-0.411551000
C	2.105592000	0.594510000	-0.904456000
C	2.675249000	-1.599345000	-0.193326000
C	4.031139000	-1.372306000	-0.455028000
C	4.427136000	-0.116334000	-0.957313000
C	3.449859000	0.875107000	-1.182927000
C	-0.279326000	2.001019000	0.871418000
C	0.924570000	2.349712000	1.536141000
C	-1.492407000	2.303941000	1.542016000
C	-1.473133000	2.945090000	2.780167000
C	0.887058000	2.989904000	2.774409000
N	-0.297665000	3.290461000	3.384884000
C	-0.308780000	4.037925000	4.694547000
O	-0.217678000	-2.084621000	-2.017239000
O	-0.225520000	-1.518530000	-3.276696000
C	-0.221607000	-1.995757000	1.419088000
H	0.684397000	-1.745054000	1.974830000
H	-0.202978000	-3.002810000	0.983422000
H	-1.138407000	-1.776912000	1.970519000
H	-0.214094000	-2.274044000	-3.934922000
H	-5.971332000	-0.089779000	-1.183698000
H	-4.289001000	1.722789000	-1.586617000
H	-5.184584000	-2.314844000	-0.286620000
H	-2.754419000	-2.633699000	0.179627000
H	-1.944953000	2.572748000	-1.116197000
H	-1.287033000	1.453955000	-2.299075000
H	1.364232000	2.621199000	-1.123917000
H	0.740719000	1.475478000	-2.300008000
H	2.333397000	-2.554932000	0.187965000
H	4.753485000	-2.161242000	-0.274093000
H	5.472192000	0.085865000	-1.173391000
H	3.734894000	1.844230000	-1.583007000
H	1.901684000	2.153219000	1.115342000
H	-2.463381000	2.070509000	1.125778000
H	-2.389484000	3.203651000	3.298863000
H	1.795465000	3.283295000	3.288497000

H	-0.332832000	5.113598000	4.494624000
H	-1.189663000	3.746343000	5.270097000
H	0.588391000	3.784927000	5.263128000

Ni(II)LK4 ⁵1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Ni	-0.214018000	-0.878930000	-0.268063000
C	-4.893556000	-0.382177000	-1.004909000
C	-3.957475000	0.646580000	-1.242490000
C	-4.448389000	-1.609818000	-0.476390000
C	-3.084244000	-1.775450000	-0.204167000
C	-2.605510000	0.420213000	-0.956733000
N	-2.179131000	-0.779539000	-0.443901000
C	-1.532477000	1.451554000	-1.289399000
N	-0.257181000	1.260636000	-0.467056000
C	1.019992000	1.505489000	-1.272270000
N	1.746667000	-0.699023000	-0.421838000
C	2.130009000	0.518151000	-0.927496000
C	2.688574000	-1.658019000	-0.173441000
C	4.048031000	-1.436511000	-0.428908000
C	4.449261000	-0.190413000	-0.949330000
C	3.474968000	0.799884000	-1.196485000
C	-0.279262000	1.911088000	0.840885000
C	0.918927000	2.267615000	1.509056000
C	-1.499459000	2.220161000	1.492440000
C	-1.492159000	2.877148000	2.723913000
C	0.869133000	2.923363000	2.740040000
N	-0.322157000	3.230030000	3.334214000
C	-0.345264000	3.992519000	4.636376000
O	-0.184821000	-1.591560000	-2.570420000
O	-0.173965000	-2.371257000	-3.563524000
C	-0.187692000	-2.655971000	1.694088000
H	0.712185000	-3.051562000	2.171341000
H	-1.076156000	-3.082713000	2.165805000
H	-0.207033000	-1.560937000	1.866006000
H	-0.178795000	-2.968687000	0.631069000
H	-5.944753000	-0.228822000	-1.230967000
H	-4.281094000	1.596633000	-1.658432000
H	-5.138988000	-2.423855000	-0.283408000
H	-2.707257000	-2.708934000	0.197915000
H	-1.915635000	2.470998000	-1.170032000
H	-1.256215000	1.342597000	-2.343664000
H	1.359287000	2.539480000	-1.145829000
H	0.762422000	1.387641000	-2.330318000
H	2.345110000	-2.607188000	0.221939000
H	4.768724000	-2.222387000	-0.229341000
H	5.496016000	0.006229000	-1.162122000
H	3.764640000	1.763235000	-1.606819000
H	1.899599000	2.065542000	1.098844000
H	-2.465868000	1.980213000	1.069041000
H	-2.413520000	3.141449000	3.230841000
H	1.772305000	3.223477000	3.259636000
H	-0.352515000	5.065992000	4.423160000
H	-1.239456000	3.718649000	5.199927000
H	0.539475000	3.734578000	5.222049000

Ni(II)LK4 ¹TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Ni	-0.111790000	-0.866680000	-0.042480000
C	-4.827091000	-0.624725000	-0.292255000
C	-3.960742000	0.344094000	-0.842714000
C	-4.281211000	-1.674446000	0.469838000
C	-2.889651000	-1.757847000	0.621016000
C	-2.581805000	0.217041000	-0.649529000
N	-2.053805000	-0.841656000	0.052981000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	-1.576623000	1.200549000	-1.214946000
N	-0.278365000	1.152201000	-0.401048000
C	0.957869000	1.439211000	-1.264167000
N	1.800649000	-0.571836000	-0.135808000
C	2.122778000	0.574821000	-0.824671000
C	2.795343000	-1.396336000	0.308485000
C	4.144245000	-1.125774000	0.042273000
C	4.480586000	0.022169000	-0.701716000
C	3.453008000	0.891352000	-1.122895000
C	-0.315781000	1.915311000	0.857059000
C	0.877689000	2.327661000	1.500063000
C	-1.539073000	2.293475000	1.461817000
C	-1.539541000	3.055775000	2.632299000
C	0.820885000	3.089037000	2.668837000
N	-0.373917000	3.450254000	3.223244000
C	-0.403443000	4.316487000	4.459603000
O	-0.218825000	-1.321064000	-2.018139000
O	0.584791000	-2.383209000	-2.079318000
C	0.013260000	-2.974320000	0.435002000
H	0.905890000	-3.624484000	0.439011000
H	-0.895158000	-3.564189000	0.283363000
H	-0.013093000	-2.563363000	1.456152000
H	0.310845000	-2.832811000	-0.927839000
H	-5.899681000	-0.554579000	-0.448258000
H	-4.358702000	1.175727000	-1.417555000
H	-4.913049000	-2.425953000	0.931522000
H	-2.451858000	-2.560626000	1.198790000
H	-1.975296000	2.220574000	-1.244231000
H	-1.324981000	0.919811000	-2.242212000
H	1.209843000	2.504455000	-1.224913000
H	0.695226000	1.202078000	-2.299407000
H	2.514014000	-2.269861000	0.881038000
H	4.906950000	-1.805885000	0.407039000
H	5.517267000	0.240761000	-0.941000000
H	3.688168000	1.792301000	-1.682608000
H	1.861395000	2.089849000	1.118241000
H	-2.503903000	2.031231000	1.050252000
H	-2.464472000	3.370840000	3.102492000
H	1.721040000	3.428568000	3.169092000
H	-0.380378000	5.368995000	4.159654000
H	-1.315026000	4.109744000	5.023774000
H	0.463445000	4.086096000	5.082349000

Ni(II)LK4³²

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Ni	-0.237557000	-0.782648000	-0.502597000
C	-4.895374000	-0.177757000	-1.095984000
C	-3.964711000	0.872186000	-1.235116000
C	-4.440927000	-1.454288000	-0.707539000
C	-3.073435000	-1.643575000	-0.476891000
C	-2.606250000	0.625053000	-0.993292000
N	-2.174170000	-0.624402000	-0.626656000
C	-1.549886000	1.702135000	-1.225625000
N	-0.272054000	1.478746000	-0.431311000
C	0.998248000	1.740639000	-1.225859000
N	1.693466000	-0.564337000	-0.622730000
C	2.087258000	0.697022000	-0.991480000
C	2.623305000	-1.555300000	-0.470609000
C	3.984446000	-1.324863000	-0.701464000
C	4.399802000	-0.035802000	-1.092390000
C	3.437592000	0.985078000	-1.233470000
C	-0.279967000	2.020400000	0.906497000
C	0.924506000	2.325532000	1.593233000
C	-1.492978000	2.285270000	1.595072000
C	-1.472975000	2.854163000	2.867409000
C	0.887474000	2.893464000	2.865714000

N	-0.297066000	3.162476000	3.492034000
C	-0.307862000	3.834636000	4.841471000
O	-0.202279000	-2.803826000	-1.333925000
O	-0.210455000	-2.793301000	-2.709529000
C	-0.228596000	-1.496864000	1.410389000
H	0.688779000	-1.099302000	1.841892000
H	-0.214216000	-2.566058000	1.185431000
H	-1.156568000	-1.124488000	1.841731000
H	-0.191675000	-3.747802000	-3.018375000
H	-5.950421000	-0.003093000	-1.285754000
H	-4.295335000	1.860860000	-1.541144000
H	-5.128230000	-2.285079000	-0.588186000
H	-2.685732000	-2.610830000	-0.176009000
H	-1.966105000	2.694276000	-1.017547000
H	-1.280670000	1.700346000	-2.287819000
H	1.383372000	2.745563000	-1.019220000
H	0.729413000	1.728730000	-2.288060000
H	2.264911000	-2.533183000	-0.167710000
H	4.696756000	-2.134066000	-0.580392000
H	5.449049000	0.170585000	-1.282479000
H	3.737959000	1.982828000	-1.541232000
H	1.901390000	2.149768000	1.162436000
H	-2.464016000	2.076861000	1.165573000
H	-2.388985000	3.085047000	3.399695000
H	1.796119000	3.154727000	3.396531000
H	-0.335049000	4.919848000	4.703439000
H	-1.186858000	3.508448000	5.401190000
H	0.590873000	3.552418000	5.393620000

Co(II)LK4⁶¹

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Co	-0.200558000	-0.925391000	-0.178736000
C	-4.874132000	-0.433765000	-1.039149000
C	-3.939123000	0.604712000	-1.240264000
C	-4.433873000	-1.669455000	-0.522895000
C	-3.076406000	-1.831656000	-0.225810000
C	-2.591459000	0.381367000	-0.936114000
N	-2.167343000	-0.827504000	-0.435311000
C	-1.524360000	1.430529000	-1.237188000
N	-0.255709000	1.264198000	-0.401559000
C	1.025083000	1.479616000	-1.209323000
N	1.756378000	-0.769290000	-0.430996000
C	2.129852000	0.470209000	-0.900246000
C	2.707424000	-1.737067000	-0.237644000
C	4.059694000	-1.505472000	-0.511007000
C	4.449500000	-0.237945000	-0.989893000
C	3.470292000	0.760508000	-1.180142000
C	-0.281700000	1.943943000	0.885361000
C	0.914694000	2.305043000	1.555307000
C	-1.503796000	2.273304000	1.524209000
C	-1.499505000	2.954873000	2.741532000
C	0.861713000	2.985668000	2.771790000
N	-0.331049000	3.313245000	3.352157000
C	-0.356679000	4.102664000	4.637613000
O	-0.199359000	-1.351540000	-2.816503000
O	-0.188537000	-2.089770000	-3.842348000
C	-0.205499000	-2.711455000	1.748226000
H	0.764981000	-2.867669000	2.223558000
H	-0.966701000	-3.311150000	2.256096000
H	-0.505806000	-1.651831000	1.884847000
H	-0.164330000	-3.066986000	0.701287000
H	-5.921828000	-0.280966000	-1.281865000
H	-4.262183000	1.560658000	-1.642853000
H	-5.124909000	-2.489088000	-0.357277000
H	-2.702416000	-2.768245000	0.172649000
H	-1.930502000	2.441213000	-1.119814000
H	-1.234874000	1.332508000	-2.288742000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	1.391678000	2.503244000	-1.076528000
H	0.759961000	1.379831000	-2.267172000
H	2.371138000	-2.700658000	0.128820000
H	4.785230000	-2.297019000	-0.356564000
H	5.492063000	-0.031408000	-1.214268000
H	3.754038000	1.738876000	-1.557761000
H	1.896615000	2.085358000	1.156654000
H	-2.469179000	2.028253000	1.100927000
H	-2.422106000	3.234749000	3.237683000
H	1.763597000	3.289316000	3.291536000
H	-0.350109000	5.171562000	4.402979000
H	-1.258460000	3.850365000	5.199101000
H	0.519833000	3.846914000	5.236472000

Co(II)LK4 ⁴TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Co	1.060412000	0.028417000	-0.514418000
C	0.946426000	4.673709000	0.307782000
C	0.371617000	3.726032000	1.180844000
C	1.537182000	4.234124000	-0.893896000
C	1.551694000	2.864046000	-1.183742000
C	0.417085000	2.370229000	0.836437000
N	1.012962000	1.948577000	-0.324541000
C	-0.101569000	1.266375000	1.736148000
N	-0.408709000	-0.008470000	0.924369000
C	-0.042313000	-1.269088000	1.733718000
N	1.106953000	-1.892283000	-0.326646000
C	0.530735000	-2.344585000	0.832659000
C	1.690790000	-2.778870000	-1.186709000
C	1.742925000	-4.148522000	-0.899221000
C	1.172530000	-4.618604000	0.300778000
C	0.550865000	-3.701654000	1.174548000
C	-1.788008000	-0.040547000	0.406485000
C	-2.450073000	-1.264205000	0.150668000
C	-2.508766000	1.150646000	0.156018000
C	-3.827657000	1.092358000	-0.298592000
C	-3.770324000	-1.268078000	-0.303865000
N	-4.449940000	-0.103196000	-0.518572000
C	-5.893344000	-0.136751000	-0.958767000
O	2.207649000	-0.064646000	0.820735000
O	3.581140000	0.123569000	0.540136000
C	2.382961000	0.055802000	-1.798286000
H	1.414410000	0.010011000	-2.297542000
H	3.008353000	-0.812895000	-2.018944000
H	2.910298000	0.998487000	-1.949397000
H	3.344023000	0.248508000	-0.686287000
H	0.930818000	5.730120000	0.559315000
H	-0.087498000	4.043418000	2.112829000
H	1.981243000	4.936010000	-1.591824000
H	1.991830000	2.488981000	-2.100890000
H	-0.982345000	1.580512000	2.305730000
H	0.670673000	1.008156000	2.468410000
H	-0.908270000	-1.626601000	2.300441000
H	0.714940000	-0.976028000	2.468478000
H	2.113009000	-2.381110000	-2.102731000
H	2.221664000	-4.826611000	-1.597761000
H	1.207991000	-5.674988000	0.550402000
H	0.106305000	-4.042769000	2.105204000
H	-1.978866000	-2.227089000	0.298662000
H	-2.084866000	2.134579000	0.308369000
H	-4.405319000	1.991573000	-0.481638000
H	-4.303569000	-2.193481000	-0.491011000
H	-6.537885000	-0.147327000	-0.074370000
H	-6.106346000	0.745755000	-1.565453000
H	-6.067434000	-1.032738000	-1.558005000

Co(II)LK4 ²2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Co	-0.238000000	-0.713890000	-0.555150000
C	-4.894073000	-0.188961000	-1.114771000
C	-3.977625000	0.871251000	-1.278501000
C	-4.419661000	-1.454038000	-0.713809000
C	-3.046494000	-1.630253000	-0.502396000
C	-2.616985000	0.633649000	-1.052475000
N	-2.160809000	-0.605886000	-0.683440000
C	-1.542836000	1.679920000	-1.272691000
N	-0.269700000	1.340789000	-0.471027000
C	0.992997000	1.720421000	-1.270981000
N	1.680738000	-0.546279000	-0.685007000
C	2.098628000	0.707132000	-1.052323000
C	2.597466000	-1.543277000	-0.505517000
C	3.964516000	-1.324896000	-0.717172000
C	4.399882000	-0.045260000	-1.116313000
C	3.451330000	0.986626000	-1.278175000
C	-0.279355000	1.909118000	0.888608000
C	0.923538000	2.216128000	1.566770000
C	-1.491780000	2.181308000	1.564704000
C	-1.473908000	2.755205000	2.837443000
C	0.886984000	2.789234000	2.839520000
N	-0.298150000	3.060153000	3.461603000
C	-0.309502000	3.728988000	4.814689000
O	-0.207981000	-2.562804000	-0.963560000
O	-0.213992000	-2.721664000	-2.347392000
C	-0.227908000	-1.197743000	1.361044000
H	0.676100000	-0.763264000	1.789345000
H	-0.204189000	-2.290375000	1.355212000
H	-1.149934000	-0.802914000	1.789473000
H	-0.195977000	-3.709208000	-2.521088000
H	-5.953360000	-0.029644000	-1.293787000
H	-4.322071000	1.853821000	-1.588388000
H	-5.097158000	-2.289182000	-0.570732000
H	-2.645249000	-2.587141000	-0.187878000
H	-1.894311000	2.687421000	-1.027173000
H	-1.266802000	1.692802000	-2.332352000
H	1.313266000	2.737639000	-1.022853000
H	0.717574000	1.727372000	-2.330831000
H	2.225773000	-2.512329000	-0.191889000
H	4.667271000	-2.139140000	-0.575418000
H	5.453756000	0.146733000	-1.295215000
H	3.765461000	1.979778000	-1.586531000
H	1.900369000	2.032724000	1.138694000
H	-2.462144000	1.969859000	1.134924000
H	-2.390392000	2.988053000	3.368127000
H	1.795474000	3.048301000	3.371754000
H	-0.332082000	4.814579000	4.677997000
H	-1.191463000	3.404249000	5.370516000
H	0.587086000	3.441139000	5.367374000

Mn(II)LK4 ⁶1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Mn	-0.217697000	-0.860010000	-0.088951000
C	-4.928030000	-0.315394000	-0.892507000
C	-3.968019000	0.676688000	-1.184336000
C	-4.510543000	-1.517671000	-0.288511000
C	-3.151843000	-1.696508000	-0.002591000
C	-2.623980000	0.438472000	-0.875787000
N	-2.214779000	-0.740769000	-0.292805000
C	-1.531247000	1.428080000	-1.251063000
N	-0.258096000	1.223195000	-0.417440000
C	1.013130000	1.475130000	-1.240505000
N	1.775176000	-0.658161000	-0.263876000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	2.142433000	0.535646000	-0.845181000
C	2.747456000	-1.572261000	0.043624000
C	4.101497000	-1.336513000	-0.222754000
C	4.476377000	-0.119515000	-0.825084000
C	3.479435000	0.829808000	-1.135087000
C	-0.277892000	1.943743000	0.867763000
C	0.919881000	2.345061000	1.508323000
C	-1.496904000	2.275453000	1.508124000
C	-1.489333000	2.990588000	2.707370000
C	0.870881000	3.058719000	2.707364000
N	-0.319569000	3.381313000	3.293773000
C	-0.342110000	4.201126000	4.561063000
O	-0.176401000	-1.814619000	-2.480288000
O	-0.165570000	-2.551428000	-3.506405000
C	-0.177874000	-3.137779000	1.101628000
H	0.721034000	-3.694966000	1.374287000
H	-1.058477000	-3.723960000	1.373159000
H	-0.193311000	-2.208900000	1.704143000
H	-0.178578000	-3.022621000	-0.001978000
H	-5.974574000	-0.153461000	-1.133763000
H	-4.268507000	1.607620000	-1.656885000
H	-5.219360000	-2.303296000	-0.049351000
H	-2.801961000	-2.612151000	0.456945000
H	-1.882260000	2.462819000	-1.169559000
H	-1.256714000	1.270405000	-2.299667000
H	1.318832000	2.524689000	-1.166163000
H	0.755826000	1.295656000	-2.290020000
H	2.429883000	-2.500633000	0.501210000
H	4.839457000	-2.090463000	0.029815000
H	5.518582000	0.086155000	-1.051354000
H	3.747051000	1.770977000	-1.607118000
H	1.900165000	2.132627000	1.102741000
H	-2.463303000	2.007349000	1.101994000
H	-2.410476000	3.270359000	3.206317000
H	1.774194000	3.391567000	3.206397000
H	-0.354963000	5.263943000	4.300212000
H	-1.233224000	3.948351000	5.139089000
H	0.545584000	3.972933000	5.154522000

Mn(II)LK4 ⁴TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Mn	-0.122485000	-1.124772000	-0.020766000
C	-4.884131000	-0.553114000	-0.436139000
C	-3.950762000	0.425880000	-0.839418000
C	-4.424764000	-1.719355000	0.207751000
C	-3.049401000	-1.886702000	0.403708000
C	-2.586312000	0.210918000	-0.616349000
N	-2.142757000	-0.946713000	-0.011909000
C	-1.531838000	1.204782000	-1.090529000
N	-0.242747000	1.134513000	-0.268405000
C	1.015298000	1.332208000	-1.117047000
N	1.867273000	-0.735089000	-0.039914000
C	2.177247000	0.459958000	-0.654840000
C	2.873697000	-1.572538000	0.365076000
C	4.220692000	-1.261974000	0.148094000
C	4.545103000	-0.057042000	-0.506508000
C	3.507971000	0.816219000	-0.899331000
C	-0.269770000	1.905280000	0.966995000
C	0.921223000	2.378341000	1.574787000
C	-1.489858000	2.225625000	1.615105000
C	-1.490445000	2.989055000	2.782762000
C	0.864311000	3.138585000	2.742839000
N	-0.327586000	3.443843000	3.336147000
C	-0.359437000	4.312788000	4.569067000

O	-0.114359000	-1.398524000	-2.223181000
O	-0.002721000	-2.734338000	-2.357441000
C	0.004792000	-3.461746000	0.201695000
H	0.929054000	-4.035714000	0.056985000
H	-0.885304000	-4.087276000	0.063519000
H	0.004909000	-3.100397000	1.244637000
H	0.015974000	-3.116384000	-1.223868000
H	-5.944973000	-0.405454000	-0.617300000
H	-4.288308000	1.334224000	-1.330699000
H	-5.113579000	-2.487115000	0.544052000
H	-2.665509000	-2.774064000	0.893569000
H	-1.933506000	2.224017000	-1.087843000
H	-1.269047000	0.969574000	-2.127871000
H	1.306574000	2.388203000	-1.133323000
H	0.758714000	1.057257000	-2.146061000
H	2.591960000	-2.493169000	0.862855000
H	4.991463000	-1.951207000	0.476583000
H	5.581736000	0.200621000	-0.703989000
H	3.740657000	1.752337000	-1.399256000
H	1.903007000	2.187646000	1.163205000
H	-2.452958000	1.912157000	1.235514000
H	-2.413896000	3.258088000	3.283227000
H	1.762388000	3.524039000	3.212589000
H	0.534888000	4.124439000	5.166628000
H	-0.393490000	5.364177000	4.267251000
H	-1.242757000	4.066982000	5.161782000

Mn(II)LK4 ⁶2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Mn	-0.235956000	-0.934007000	-0.184175000
C	-4.953054000	-0.193625000	-0.920731000
C	-3.981663000	0.800784000	-1.159695000
C	-4.549021000	-1.437620000	-0.396881000
C	-3.192422000	-1.649234000	-0.127423000
C	-2.635415000	0.532616000	-0.880162000
N	-2.248596000	-0.684377000	-0.366155000
C	-1.547173000	1.545599000	-1.230357000
N	-0.271174000	1.381268000	-0.417859000
C	0.998464000	1.581726000	-1.232233000
N	1.768369000	-0.622797000	-0.362302000
C	2.117866000	0.604802000	-0.877807000
C	2.741434000	-1.557130000	-0.119899000
C	4.091301000	-1.303619000	-0.387111000
C	4.457170000	-0.048560000	-0.912516000
C	3.455533000	0.914475000	-1.155365000
C	-0.279927000	2.037503000	0.873270000
C	0.923952000	2.396985000	1.533266000
C	-1.493294000	2.353079000	1.538487000
C	-1.474010000	3.010784000	2.767584000
C	0.886108000	3.053775000	2.762457000
N	-0.298631000	3.362493000	3.368972000
C	-0.309832000	4.124003000	4.670208000
O	-0.218152000	-2.188263000	-2.166275000
O	-0.220566000	-1.558973000	-3.389511000
C	-0.216917000	-2.362218000	1.295018000
H	0.688693000	-2.202168000	1.886380000
H	-0.206035000	-3.305270000	0.734365000
H	-1.125448000	-2.223777000	1.887405000
H	-0.211619000	-2.275330000	-4.090830000
H	-5.999228000	-0.001476000	-1.140612000
H	-4.273874000	1.763148000	-1.570713000
H	-5.266142000	-2.227928000	-0.201973000
H	-2.849003000	-2.595556000	0.274517000
H	-1.935636000	2.566232000	-1.135815000
H	-1.280313000	1.412613000	-2.284817000
H	1.354797000	2.614532000	-1.143399000
H	0.735044000	1.434575000	-2.285699000
H	2.427051000	-2.513076000	0.282980000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	4.832420000	-2.070737000	-0.189342000
H	5.497244000	0.175902000	-1.130730000
H	3.718289000	1.884664000	-1.567857000
H	1.901022000	2.193449000	1.115840000
H	-2.464103000	2.114122000	1.125113000
H	-2.390383000	3.276826000	3.282405000
H	1.794426000	3.353192000	3.273174000
H	-0.333902000	5.197513000	4.459202000
H	-1.190576000	3.838368000	5.248953000
H	0.587200000	3.876951000	5.241610000

Cr(II)LK4 ³1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Cr	-0.233281000	-0.946096000	-0.154866000
C	-4.982371000	-0.239480000	-0.842590000
C	-4.001697000	0.725904000	-1.155388000
C	-4.588097000	-1.449805000	-0.239343000
C	-3.229557000	-1.663671000	0.024143000
C	-2.658574000	0.452900000	-0.871545000
N	-2.275793000	-0.734244000	-0.291210000
C	-1.545433000	1.412478000	-1.272185000
N	-0.270244000	1.216611000	-0.438349000
C	0.998878000	1.461154000	-1.266800000
N	1.802881000	-0.667431000	-0.301717000
C	2.144765000	0.540014000	-0.867076000
C	2.790052000	-1.561157000	0.016563000
C	4.141794000	-1.291803000	-0.230855000
C	4.494127000	-0.061560000	-0.819848000
C	3.479297000	0.867390000	-1.134507000
C	-0.286316000	1.937904000	0.841523000
C	0.913675000	2.332711000	1.483393000
C	-1.502812000	2.283691000	1.480473000
C	-1.490477000	3.000689000	2.678008000
C	0.869580000	3.048648000	2.680708000
N	-0.318402000	3.382314000	3.265982000
C	-0.335856000	4.204066000	4.531602000
O	-0.294112000	-1.759162000	-2.347840000
O	0.523278000	-2.347698000	-3.118863000
C	-0.195841000	-3.317769000	1.075206000
H	0.711911000	-3.867536000	1.335384000
H	-1.066729000	-3.904961000	1.377372000
H	-0.205524000	-2.380181000	1.663400000
H	-0.228839000	-3.224548000	-0.028057000
H	-6.028112000	-0.050363000	-1.066814000
H	-4.286077000	1.663012000	-1.625720000
H	-5.313849000	-2.214470000	0.016272000
H	-2.894435000	-2.586378000	0.483741000
H	-1.881072000	2.454114000	-1.216643000
H	-1.276598000	1.221946000	-2.316924000
H	1.298149000	2.513437000	-1.205508000
H	0.739151000	1.268763000	-2.313550000
H	2.486818000	-2.499683000	0.466521000
H	4.894592000	-2.029167000	0.026902000
H	5.533869000	0.170759000	-1.031095000
H	3.731664000	1.819463000	-1.592981000
H	1.892854000	2.112441000	1.079705000
H	-2.471216000	2.023963000	1.074285000
H	-2.409871000	3.289705000	3.174875000
H	1.775242000	3.374911000	3.179749000
H	-0.347480000	5.266571000	4.269538000
H	-1.225654000	3.953711000	5.112733000
H	0.553020000	3.975286000	5.123031000

Cr(II)LK4 ³TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Cr	-0.132583000	-1.019777000	-0.036257000
C	-4.896152000	-0.409346000	-0.517045000
C	-3.946560000	0.543539000	-0.945946000
C	-4.457812000	-1.556134000	0.174380000
C	-3.086821000	-1.732105000	0.396139000
C	-2.589356000	0.318800000	-0.694462000
N	-2.164202000	-0.816473000	-0.037349000
C	-1.506878000	1.267805000	-1.190723000
N	-0.221790000	1.149330000	-0.358084000
C	1.042408000	1.359455000	-1.203774000
N	1.876352000	-0.635737000	-0.010824000
C	2.203629000	0.518360000	-0.690816000
C	2.873925000	-1.451845000	0.452382000
C	4.225453000	-1.159732000	0.232374000
C	4.564500000	0.001813000	-0.489246000
C	3.536579000	0.856338000	-0.944105000
C	-0.246551000	1.936971000	0.882584000
C	0.944336000	2.416727000	1.482865000
C	-1.466120000	2.267283000	1.524433000
C	-1.466693000	3.047532000	2.682537000
C	0.887931000	3.194055000	2.641154000
N	-0.303670000	3.507954000	3.229445000
C	-0.334162000	4.393398000	4.451865000
O	-0.117887000	-1.333700000	-1.922747000
O	-0.198769000	-2.679006000	-2.186480000
C	-0.054809000	-3.168036000	0.423024000
H	0.926750000	-3.658060000	0.399066000
H	-0.827583000	-3.950147000	0.315675000
H	-0.200435000	-2.839594000	1.470760000
H	-0.188105000	-3.039957000	-1.021199000
H	-5.952778000	-0.257681000	-0.718275000
H	-4.266300000	1.434383000	-1.479255000
H	-5.159675000	-2.304790000	0.526440000
H	-2.717841000	-2.607479000	0.916903000
H	-1.861815000	2.303944000	-1.202029000
H	-1.247386000	1.003057000	-2.221562000
H	1.306383000	2.421854000	-1.242952000
H	0.800386000	1.047737000	-2.225632000
H	2.582215000	-2.341641000	0.996921000
H	4.988648000	-1.832744000	0.608681000
H	5.604604000	0.240646000	-0.691901000
H	3.778851000	1.759149000	-1.497753000
H	1.926262000	2.222433000	1.073812000
H	-2.429958000	1.953284000	1.147537000
H	-2.390411000	3.324654000	3.178156000
H	1.786517000	3.585586000	3.105052000
H	-0.353281000	5.440903000	4.135227000
H	-1.225083000	4.165971000	5.040449000
H	0.553655000	4.201844000	5.058127000

Cr(II)LK4 ³2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Cr	-0.238050000	-0.852573000	-0.493848000
C	-4.957760000	-0.049717000	-1.179102000
C	-3.993044000	0.971976000	-1.306815000
C	-4.546016000	-1.342864000	-0.798452000
C	-3.186226000	-1.581356000	-0.569484000
C	-2.646392000	0.673066000	-1.067409000
N	-2.248505000	-0.592852000	-0.713836000
C	-1.543247000	1.697830000	-1.270210000
N	-0.271213000	1.361728000	-0.472371000
C	0.987836000	1.732147000	-1.275025000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

N	1.764525000	-0.531468000	-0.707451000
C	2.123365000	0.744898000	-1.064941000
C	2.732153000	-1.489520000	-0.556533000
C	4.084437000	-1.209463000	-0.783189000
C	4.456402000	0.094397000	-1.168162000
C	3.460529000	1.085023000	-1.302224000
C	-0.277126000	1.911181000	0.888884000
C	0.926994000	2.218089000	1.567127000
C	-1.488501000	2.164149000	1.576661000
C	-1.468283000	2.716710000	2.857961000
C	0.891986000	2.769396000	2.848854000
N	-0.291832000	3.020364000	3.481897000
O	-0.301381000	3.665412000	4.845902000
O	-0.205400000	-2.739960000	-0.935565000
O	-0.207106000	-2.994540000	-2.307854000
C	-0.231275000	-1.356008000	1.481339000
H	0.667267000	-0.924593000	1.932845000
H	-0.205188000	-2.450651000	1.514141000
H	-1.151503000	-0.968124000	1.928685000
H	-0.185647000	-3.991662000	-2.406527000
H	-6.006078000	0.160365000	-1.370413000
H	-4.291258000	1.974501000	-1.600413000
H	-5.261298000	-2.150441000	-0.683813000
H	-2.832816000	-2.561492000	-0.268303000
H	-1.888535000	2.708420000	-1.026683000
H	-1.267037000	1.710136000	-2.330100000
H	1.300415000	2.755780000	-1.041833000
H	0.709711000	1.725045000	-2.334467000
H	2.408494000	-2.478880000	-0.252109000
H	4.824382000	-1.993772000	-0.663587000
H	5.498097000	0.336364000	-1.357981000
H	3.728051000	2.095156000	-1.599318000
H	1.903207000	2.049851000	1.131720000
H	-2.459387000	1.951777000	1.148554000
H	-2.383729000	2.933423000	3.397115000
H	1.801054000	3.026994000	3.380751000
H	-0.331424000	4.753070000	4.728772000
H	-1.178618000	3.325330000	5.399989000
H	0.599290000	3.373600000	5.389785000

Fe(II)LK5 ⁷1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Fe	-0.159216000	-1.008819000	-0.288255000
C	-4.621592000	0.335981000	-1.451938000
C	-3.510007000	1.207189000	-1.498576000
C	-4.448971000	-0.980018000	-0.979384000
C	-3.171129000	-1.395130000	-0.584100000
C	-2.258909000	0.739979000	-1.087035000
N	-2.093626000	-0.552608000	-0.647045000
C	-0.987774000	1.568060000	-1.179504000
N	-0.048401000	1.349702000	0.007856000
C	1.360894000	1.760604000	-0.408557000
N	1.684276000	-0.642795000	-1.044131000
C	2.134377000	0.655102000	-1.118886000
C	2.434540000	-1.648284000	-1.611188000
C	3.638880000	-1.394597000	-2.270337000
C	4.091281000	-0.062432000	-2.369630000
C	3.326644000	0.967296000	-1.786669000
C	-0.489754000	1.976752000	1.250436000
N	0.178109000	1.688085000	2.434336000
C	-1.571473000	2.871908000	1.306302000
C	-1.957239000	3.480890000	2.514467000
C	-0.187030000	2.294837000	3.618106000
C	-1.245817000	3.192578000	3.693216000
O	-0.473758000	-3.134937000	-1.531906000
O	-0.781251000	-3.988856000	-2.410789000
C	-0.068843000	-2.690797000	1.679867000

H	0.130599000	-2.984278000	2.716517000
H	-0.534627000	-3.537100000	1.170739000
H	-0.764094000	-1.831609000	1.755701000
H	0.920056000	-2.468377000	1.241628000
H	-5.599790000	0.678941000	-1.776672000
H	-3.627180000	2.222373000	-1.866707000
H	-5.282400000	-1.672379000	-0.924401000
H	-3.000505000	-2.403810000	-0.222380000
H	-1.209552000	2.630138000	-1.326209000
H	-0.418590000	1.258371000	-2.066059000
H	1.922376000	2.075254000	0.474727000
H	1.299331000	2.645597000	-1.055010000
H	2.052135000	-2.660127000	-1.530040000
H	4.202413000	-2.215675000	-2.700622000
H	5.017358000	0.168650000	-2.888099000
H	3.662953000	1.998408000	-1.850319000
C	1.333478000	0.732545000	2.547950000
H	-2.116650000	3.127318000	0.409949000
H	-2.787924000	4.180573000	2.527558000
H	0.402422000	2.032747000	4.490277000
H	-1.497427000	3.648364000	4.644584000
H	2.267674000	1.290337000	2.666536000
H	1.180725000	0.106360000	3.429760000
H	1.400827000	0.096309000	1.669065000

Fe(II)LK5 ⁵TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Fe	-0.334331000	-1.003792000	-0.629977000
C	-4.905981000	-0.412370000	-1.688529000
C	-3.878203000	0.497884000	-2.026774000
C	-4.604668000	-1.531995000	-0.888865000
C	-3.283616000	-1.730630000	-0.462740000
C	-2.582809000	0.259215000	-1.564790000
N	-2.297981000	-0.848511000	-0.794949000
C	-1.373799000	1.106130000	-1.932487000
N	-0.377991000	1.164492000	-0.756709000
C	1.003182000	1.620626000	-1.252445000
N	1.542981000	-0.817396000	-1.202699000
C	1.921292000	0.452863000	-1.586025000
C	2.382216000	-1.877405000	-1.441878000
C	3.624921000	-1.706702000	-2.056503000
C	4.011980000	-0.413860000	-2.466536000
C	3.145734000	0.672894000	-2.227824000
C	-0.859314000	1.967210000	0.381522000
N	-0.202165000	1.877652000	1.601694000
C	-1.944319000	2.849162000	0.274826000
C	-2.358333000	3.635092000	1.368832000
C	-0.599532000	2.648753000	2.672450000
C	-1.671572000	3.533519000	2.590706000
O	-0.547940000	-2.366634000	-2.272459000
O	-0.557490000	-3.511241000	-1.546659000
H	-0.423916000	-3.112139000	-0.375779000
H	-5.918611000	-0.250528000	-2.046858000
H	-4.092586000	1.359406000	-2.652814000
H	-5.370338000	-2.249411000	-0.612414000
H	-3.014275000	-2.592621000	0.136690000
H	-1.652908000	2.105509000	-2.278769000
H	-0.825736000	0.642674000	-2.765890000
H	1.468524000	2.244386000	-0.482876000
H	0.869760000	2.267386000	-2.128181000
H	2.044704000	-2.863354000	-1.145459000
H	4.263469000	-2.567641000	-2.224306000
H	4.964577000	-0.255275000	-2.964040000
H	3.428195000	1.675210000	-2.537940000
C	0.980838000	0.988468000	1.878958000
H	-2.475340000	2.960039000	-0.659335000
H	-3.193258000	4.321087000	1.257756000
H	-0.024935000	2.531170000	3.585393000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	-1.947770000	4.123450000	3.458187000
H	1.873590000	1.605885000	2.019168000
H	0.788009000	0.425270000	2.795426000
H	1.159834000	0.293414000	1.062942000
C	-0.193249000	-2.514415000	0.925256000
H	-0.458292000	-3.558451000	1.178004000
H	0.855569000	-2.379196000	1.206564000
H	-0.865712000	-1.910951000	1.552457000

Fe(II)LK5 ⁵2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Fe	-0.292252000	-0.783253000	-1.201443000
C	-5.004625000	-0.064052000	-0.447629000
C	-4.077963000	0.976779000	-0.674106000
C	-4.540196000	-1.391288000	-0.369303000
C	-3.171681000	-1.641756000	-0.528276000
C	-2.722227000	0.671633000	-0.831840000
N	-2.275350000	-0.633064000	-0.762860000
C	-1.686489000	1.732747000	-1.170515000
N	-0.348052000	1.426417000	-0.486750000
C	0.885130000	1.837975000	-1.300691000
N	1.708689000	-0.469953000	-0.974668000
C	2.035009000	0.867430000	-1.076424000
C	2.705209000	-1.399580000	-0.844859000
C	4.057179000	-1.035248000	-0.823200000
C	4.398071000	0.326559000	-0.933401000
C	3.369263000	1.285969000	-1.053740000
C	-0.304643000	2.026571000	0.862245000
N	-0.205975000	1.248716000	2.001155000
C	-0.362942000	3.420759000	1.001345000
C	-0.323685000	4.033118000	2.269090000
C	-0.167134000	1.836613000	3.246247000
C	-0.223996000	3.220048000	3.411802000
O	-0.495563000	-0.558804000	-3.142564000
O	0.609241000	-0.560859000	-4.010039000
C	-0.221823000	-2.906168000	-1.497738000
H	-0.137658000	-3.280005000	-0.473021000
H	0.225670000	-0.642514000	-4.929976000
H	0.663707000	-3.005973000	-2.127799000
H	-1.156963000	-3.114534000	-2.018384000
H	-6.061646000	0.158044000	-0.332954000
H	-4.416885000	2.006542000	-0.737290000
H	-5.220653000	-2.217647000	-0.192619000
H	-2.789199000	-2.653882000	-0.469718000
H	-2.062205000	2.723907000	-0.901767000
H	-1.508552000	1.735592000	-2.252715000
H	1.203010000	2.857501000	-1.064969000
H	0.598579000	1.826625000	-2.359128000
H	2.416602000	-2.440591000	-0.758806000
H	4.818938000	-1.801639000	-0.725935000
H	5.438921000	0.636905000	-0.923728000
H	3.612317000	2.340843000	-1.139685000
C	-0.133050000	-0.247173000	1.956136000
H	-0.439365000	4.042129000	0.114455000
H	-0.369422000	5.114719000	2.357548000
H	-0.089343000	1.168363000	4.095922000
H	-0.190027000	3.637708000	4.412451000
H	0.769177000	-0.556148000	1.424679000
H	-0.076455000	-0.628181000	2.976571000
H	-1.037139000	-0.646874000	1.492736000

Ni(II)LK5 ⁵1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Ni	-0.224847000	-1.023143000	-0.555793000
C	-4.978864000	-0.598628000	-0.304788000
C	-4.107579000	0.479088000	-0.574674000
C	-4.438443000	-1.880155000	-0.085332000
C	-3.048079000	-2.049587000	-0.136475000
C	-2.728915000	0.247080000	-0.626569000
N	-2.206756000	-1.005753000	-0.403654000
C	-1.742317000	1.323094000	-1.048545000
N	-0.371125000	1.126098000	-0.371139000
C	0.814681000	1.522012000	-1.273754000
N	1.726049000	-0.708063000	-0.766634000
C	2.008237000	0.606256000	-1.057782000
C	2.746753000	-1.613129000	-0.675525000
C	4.082717000	-1.238939000	-0.874482000
C	4.378947000	0.106524000	-1.165322000
C	3.323822000	1.040480000	-1.252844000
C	-0.315808000	1.861703000	0.915403000
N	-0.155375000	1.201909000	2.119651000
C	-0.428587000	3.258175000	0.917860000
C	-0.381835000	3.991339000	2.120596000
C	-0.109193000	1.908624000	3.301716000
C	-0.219470000	3.298482000	3.333382000
O	-0.439426000	-1.168231000	-2.915467000
O	-0.497491000	-1.698110000	-4.060069000
C	0.010316000	-3.763303000	-0.250700000
H	0.050947000	-3.137346000	0.656862000
H	-0.825063000	-4.461364000	-0.154426000
H	-0.118405000	-3.208496000	-1.198732000
H	0.939946000	-4.33801000	-0.320478000
H	-6.052693000	-0.439733000	-0.269495000
H	-4.505915000	1.472949000	-0.756047000
H	-5.076848000	-2.733016000	0.119818000
H	-2.602417000	-3.022097000	0.031313000
H	-2.144820000	2.317885000	-0.841710000
H	-1.578037000	1.258810000	-2.130748000
H	1.097730000	2.565932000	-1.116527000
H	0.472726000	1.432787000	-2.311749000
H	2.487464000	-2.639368000	-0.447149000
H	4.866522000	-1.985700000	-0.803701000
H	5.405829000	0.423407000	-1.322476000
C	3.531538000	2.080693000	-1.485635000
H	-0.022667000	-0.286120000	2.212716000
H	-0.554082000	3.788379000	-0.021138000
H	-0.470194000	5.073937000	2.105407000
H	0.018032000	1.330338000	4.209682000
H	-0.177508000	3.813695000	4.287340000
H	0.881343000	-0.611087000	1.687621000
H	0.090681000	-0.572638000	3.259783000
H	-0.936591000	-0.763611000	1.844385000

Ni(II)LK5 ¹TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Ni	-0.280112000	-0.702098000	-0.926118000
C	-4.973249000	-0.123279000	-0.630900000
C	-4.063147000	0.927367000	-0.875915000
C	-4.475231000	-1.421739000	-0.414830000
C	-3.091403000	-1.642367000	-0.469610000
C	-2.693849000	0.649817000	-0.924583000
N	-2.216984000	-0.627587000	-0.730075000
C	-1.650951000	1.690124000	-1.260668000
N	-0.326316000	1.340143000	-0.539617000
C	0.917994000	1.797889000	-1.339116000
N	1.650055000	-0.505762000	-0.954140000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	2.038476000	0.799409000	-1.154981000
C	2.596108000	-1.484137000	-0.828747000
C	3.963824000	-1.195106000	-0.925898000
C	4.370843000	0.134524000	-1.150253000
C	3.391034000	1.144246000	-1.251805000
C	-0.309004000	1.945622000	0.826533000
N	-0.202503000	1.187371000	1.977030000
C	-0.392658000	3.340399000	0.938933000
C	-0.373959000	3.975164000	2.196876000
C	-0.185072000	1.800090000	3.212016000
C	-0.269290000	3.184701000	3.354110000
O	-0.443935000	-0.416337000	-2.932302000
O	0.332037000	-1.387614000	-3.407061000
C	-0.279421000	-2.845328000	-1.294308000
H	-0.277504000	-2.851198000	-0.194672000
H	0.057297000	-2.226534000	-2.493956000
H	0.563183000	-3.512306000	-1.554755000
H	-1.228778000	-3.265560000	-1.637879000
H	-6.041774000	0.069875000	-0.605318000
H	-4.422354000	1.939515000	-1.036982000
H	-5.139651000	-2.255291000	-0.212067000
H	-2.692426000	-2.634086000	-0.302092000
H	-1.993168000	2.692637000	-0.994583000
H	-1.445613000	1.684406000	-2.336187000
H	1.231797000	2.799025000	-1.034406000
H	0.627689000	1.843817000	-2.394129000
H	2.262072000	-2.497181000	-0.647014000
H	4.687075000	-1.998231000	-0.828543000
H	5.424914000	0.381212000	-1.238657000
H	3.681503000	2.177571000	-1.417205000
C	-0.092730000	-0.308110000	1.973101000
H	-0.469475000	3.950443000	0.044602000
H	-0.438693000	5.057520000	2.263860000
H	-0.100760000	1.148668000	4.074157000
H	-0.250979000	3.619717000	4.347976000
H	0.836430000	-0.611300000	1.485756000
H	-0.063094000	-0.662839000	3.004590000
H	-0.975946000	-0.742782000	1.499436000

Ni(II)LK5 ⁵²

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Ni	-0.255235000	-0.695216000	-1.025732000
C	-4.968791000	-0.093129000	-0.544485000
C	-4.051813000	0.959383000	-0.750342000
C	-4.484700000	-1.410979000	-0.448562000
C	-3.107462000	-1.641518000	-0.573423000
C	-2.687551000	0.672070000	-0.873571000
N	-2.222841000	-0.623810000	-0.791196000
C	-1.658583000	1.746542000	-1.178623000
N	-0.325457000	1.431934000	-0.481444000
C	0.913288000	1.864996000	-1.279577000
N	1.709789000	-0.452106000	-0.981562000
C	2.052633000	0.879934000	-1.081616000
C	2.693957000	-1.391339000	-0.859718000
C	4.052185000	-1.043638000	-0.851216000
C	4.411122000	0.312085000	-0.964761000
C	3.392898000	1.283197000	-1.072264000
C	-0.299298000	2.018019000	0.876604000
N	-0.203748000	1.228559000	2.007727000
C	-0.370424000	3.409834000	1.029579000
C	-0.347287000	4.008520000	2.304349000
C	-0.180729000	1.803197000	3.259568000
C	-0.250760000	3.184178000	3.439263000
O	-0.452810000	-0.264270000	-3.138992000
O	0.108412000	-1.176172000	-3.996678000
C	-0.189278000	-2.688725000	-1.393565000

H	-0.112964000	-3.104520000	-0.383488000
H	-0.096386000	-0.875705000	-4.932953000
H	0.689655000	-2.813800000	-2.023183000
H	-1.120205000	-2.902748000	-1.916137000
H	-6.031481000	0.113014000	-0.456961000
H	-4.402113000	1.984727000	-0.822938000
H	-5.154622000	-2.247991000	-0.282194000
H	-2.714964000	-2.648017000	-0.496755000
H	-2.041082000	2.730280000	-0.893950000
H	-1.463804000	1.775507000	-2.256549000
H	1.234002000	2.874958000	-1.009866000
H	0.625252000	1.890904000	-2.337067000
H	2.396569000	-2.428662000	-0.767946000
H	4.803313000	-1.821063000	-0.759235000
H	5.455781000	0.609065000	-0.965082000
H	3.646506000	2.335818000	-1.156183000
C	-0.118023000	-0.266077000	1.947678000
H	-0.444049000	4.040424000	0.149049000
H	-0.402812000	5.088723000	2.403815000
H	-0.104660000	1.126529000	4.102766000
H	-0.229057000	3.591426000	4.444557000
H	0.793573000	-0.564136000	1.424561000
H	-0.066278000	-0.659154000	2.964042000
H	-1.018114000	-0.670021000	1.478101000

Co(II)LK5 ⁶¹

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Co	-0.065159000	-1.137982000	-0.101076000
C	-4.607438000	-0.171564000	-1.227859000
C	-3.564248000	0.777083000	-1.322489000
C	-4.324259000	-1.464182000	-0.745578000
C	-3.008917000	-1.777789000	-0.376948000
C	-2.272314000	0.407414000	-0.939323000
N	-2.003281000	-0.856903000	-0.472793000
C	-1.059175000	1.306478000	-1.091277000
N	-0.095424000	1.135323000	0.084931000
C	1.310096000	1.595131000	-0.307733000
N	1.639893000	-0.755067000	-1.053704000
C	2.064764000	0.550083000	-1.116193000
C	2.346303000	-1.727357000	-1.718424000
C	3.498024000	-1.432207000	-2.452777000
C	3.931778000	-0.092759000	-2.528401000
C	3.200726000	0.906663000	-1.853720000
C	-0.532690000	1.806331000	1.314383000
N	-0.092633000	1.295878000	2.528608000
C	-1.316973000	2.965348000	1.322648000
C	-1.653238000	3.607589000	2.532974000
C	-0.406650000	1.922094000	3.713818000
C	-1.185936000	3.077402000	3.747783000
O	-0.604497000	-2.560600000	-2.685865000
O	-0.911902000	-3.134977000	-3.769519000
C	0.157870000	-3.445410000	0.842072000
H	1.155770000	-3.054392000	1.080650000
H	-0.614775000	-3.096292000	1.540217000
H	-0.127255000	-3.348778000	-0.223769000
H	0.222372000	-4.532186000	0.984233000
H	-5.617205000	0.093592000	-1.527593000
H	-3.763884000	1.774065000	-1.703622000
H	-5.101324000	-2.216631000	-0.662005000
H	-2.754648000	-2.767213000	-0.011669000
H	-1.346747000	2.349747000	-1.242281000
H	-0.495369000	1.014043000	-1.986083000
H	1.870587000	1.823657000	0.606649000
H	1.243660000	2.534880000	-0.870766000
H	1.976289000	-2.744736000	-1.654929000
H	4.035261000	-2.228162000	-2.957444000
H	4.816451000	0.168723000	-3.101839000
H	3.519901000	1.943817000	-1.902791000
C	0.693501000	0.026407000	2.616620000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	-1.660422000	3.402781000	0.394613000
H	-2.254552000	4.512154000	2.518653000
H	-0.020053000	1.470758000	4.620720000
H	-1.409796000	3.542737000	4.701759000
H	1.533585000	0.025000000	1.919509000
H	1.106582000	-0.073456000	3.622195000
H	0.022276000	-0.828272000	2.459414000

Co(II)LK5 ²TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Co	-0.262148000	-0.687769000	-0.880931000
C	-4.979060000	-0.103039000	-0.785486000
C	-4.060795000	0.950869000	-0.978040000
C	-4.489891000	-1.405305000	-0.565013000
C	-3.106453000	-1.623864000	-0.556902000
C	-2.690122000	0.675123000	-0.969869000
N	-2.218157000	-0.604013000	-0.763484000
C	-1.642540000	1.724016000	-1.269433000
N	-0.316415000	1.353292000	-0.564143000
C	0.921983000	1.809114000	-1.371984000
N	1.691724000	-0.470527000	-0.907128000
C	2.058063000	0.835114000	-1.153573000
C	2.661122000	-1.423716000	-0.762052000
C	4.022217000	-1.111530000	-0.876427000
C	4.402773000	0.217783000	-1.142312000
C	3.401747000	1.204127000	-1.268943000
C	-0.281220000	1.936438000	0.808039000
N	-0.200593000	1.138227000	1.933371000
C	-0.329706000	3.326934000	0.964409000
C	-0.298064000	3.916682000	2.244722000
C	-0.169527000	1.704200000	3.189887000
C	-0.216681000	3.085470000	3.375924000
O	-0.327637000	-0.365195000	-2.755631000
O	-0.499954000	-1.568040000	-3.363895000
C	-0.192184000	-2.835712000	-1.063478000
H	-0.169021000	-2.844190000	0.034445000
H	-0.382765000	-2.249602000	-2.318057000
H	0.733264000	-3.325979000	-1.389476000
H	-1.051530000	-3.478289000	-1.316116000
H	-6.047888000	0.089339000	-0.804560000
H	-4.414787000	1.963627000	-1.146724000
H	-5.163198000	-2.240980000	-0.404645000
H	-2.711579000	-2.615466000	-0.381437000
H	-1.982736000	2.718573000	-0.971872000
H	-1.440471000	1.748385000	-2.345462000
H	1.214881000	2.826309000	-1.101400000
H	0.634948000	1.814462000	-2.428843000
H	2.351352000	-2.438031000	-0.550931000
H	4.761024000	-1.898004000	-0.762308000
H	5.451175000	0.482371000	-1.244991000
H	3.670415000	2.237066000	-1.469630000
C	-0.132376000	-0.354616000	1.860170000
H	-0.392285000	3.967366000	0.090275000
H	-0.336188000	4.997382000	2.349256000
H	-0.105362000	1.021419000	4.029613000
H	-0.189669000	3.487880000	4.383303000
H	0.806454000	-0.660928000	1.389502000
H	-0.136184000	-0.769488000	2.870413000
H	-1.028414000	-0.743320000	1.362974000

Co(II)LK5 ⁴2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Co	-0.263692000	-0.779261000	-1.141039000
C	-4.956366000	-0.114133000	-0.448221000
C	-4.047178000	0.936927000	-0.696184000
C	-4.468878000	-1.431042000	-0.339633000
C	-3.096338000	-1.661940000	-0.496293000
C	-2.686707000	0.649993000	-0.851099000
N	-2.218829000	-0.645233000	-0.760076000
C	-1.661902000	1.723713000	-1.179802000
N	-0.329095000	1.425980000	-0.483691000
C	0.913341000	1.839785000	-1.279103000
N	1.698476000	-0.479564000	-0.962130000
C	2.047875000	0.851428000	-1.059860000
C	2.675951000	-1.424887000	-0.808795000
C	4.033874000	-1.083046000	-0.767647000
C	4.399414000	0.272138000	-0.877808000
C	3.388663000	1.248355000	-1.015962000
C	-0.303626000	2.031773000	0.864478000
N	-0.205492000	1.264656000	2.010777000
C	-0.377470000	3.426816000	0.992745000
C	-0.355588000	4.050303000	2.255103000
C	-0.183904000	1.863984000	3.251069000
C	-0.257414000	3.247734000	3.405254000
O	-0.513626000	-0.188167000	-3.254057000
O	0.289665000	-0.883628000	-4.127925000
C	-0.221354000	-2.781479000	-1.572702000
H	-0.120073000	-3.256631000	-0.591760000
H	-0.001317000	-0.644367000	-5.058631000
H	0.649330000	-2.861916000	-2.226731000
H	-1.164323000	-2.972116000	-2.087197000
H	-6.016845000	0.092475000	-0.336720000
H	-4.401810000	1.960324000	-0.774446000
H	-5.134488000	-2.264481000	-0.141090000
H	-2.695898000	-2.665470000	-0.416480000
H	-2.051574000	2.708707000	-0.908319000
H	-1.475556000	1.740112000	-2.259767000
H	1.241850000	2.850742000	-1.021457000
H	0.634010000	1.855522000	-2.339200000
H	2.367315000	-2.460252000	-0.725193000
H	4.780721000	-1.861816000	-0.654618000
H	5.444992000	0.565147000	-0.852155000
H	3.650387000	2.299263000	-1.095978000
C	-0.116257000	-0.231457000	1.983754000
H	-0.451833000	4.040020000	0.100035000
H	-0.413065000	5.132064000	2.333960000
H	-0.105936000	1.203644000	4.106809000
H	-0.236531000	3.673575000	4.402784000
H	0.782925000	-0.537963000	1.446669000
H	-0.044924000	-0.597881000	3.008528000
H	-1.019348000	-0.647425000	1.533648000

Mn(II)LK5 ⁶1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Mn	-0.197506000	-1.324729000	-0.486189000
C	-4.725146000	0.207553000	-1.382530000
C	-3.597521000	1.058505000	-1.396945000
C	-4.562680000	-1.146223000	-1.029651000
C	-3.278928000	-1.614941000	-0.720440000
C	-2.341535000	0.535639000	-1.073758000
N	-2.185046000	-0.792652000	-0.751422000
C	-1.061171000	1.354665000	-1.143889000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

N	-0.100646000	1.071690000	0.011705000
C	1.298317000	1.534862000	-0.384573000
N	1.690504000	-0.810621000	-1.196393000
C	2.106996000	0.498956000	-1.161503000
C	2.478477000	-1.744576000	-1.830608000
C	3.686303000	-1.408531000	-2.446071000
C	4.104091000	-0.061803000	-2.430052000
C	3.301443000	0.896024000	-1.780952000
C	-0.532932000	1.602030000	1.298917000
N	0.134716000	1.206782000	2.451950000
C	-1.599400000	2.506770000	1.433440000
C	-1.972595000	3.017353000	2.690055000
C	-0.217948000	1.716012000	3.684539000
C	-1.263925000	2.618617000	3.838335000
O	-0.382725000	-2.993593000	-2.210748000
O	-1.164290000	-3.256652000	-3.170905000
C	-0.088312000	-3.256180000	1.178545000
H	-0.727482000	-2.489080000	1.646393000
H	-0.024905000	-4.063856000	1.918183000
H	-0.543566000	-3.718729000	0.291570000
H	0.954870000	-2.942929000	1.013182000
H	-5.706662000	0.594409000	-1.640899000
H	-3.706372000	2.102984000	-1.674757000
H	-5.407384000	-1.826493000	-1.001911000
H	-3.119549000	-2.654740000	-0.451637000
H	-1.278126000	2.424621000	-1.230511000
H	-0.508647000	1.091769000	-2.056416000
H	1.852241000	1.811839000	0.516823000
H	1.213980000	2.455459000	-0.976890000
H	2.123703000	-2.770277000	-1.843250000
H	4.278224000	-2.177814000	-2.930517000
H	5.031688000	0.234605000	-2.911054000
H	3.609237000	1.937711000	-1.755949000
C	1.279892000	0.233632000	2.476868000
H	-2.139158000	2.847523000	0.562296000
H	-2.790860000	3.727713000	2.765102000
H	0.370703000	1.373778000	4.529147000
H	-1.506919000	2.996387000	4.825446000
H	1.372036000	-0.288856000	1.527189000
H	2.214375000	0.766052000	2.680226000
H	1.105068000	-0.492409000	3.274488000

Mn(II)LK5 ⁶TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Mn	-0.192146000	-0.851155000	-0.711974000
C	-4.724603000	0.522175000	-1.429212000
C	-3.600431000	1.373750000	-1.532903000
C	-4.551349000	-0.798748000	-0.973506000
C	-3.261960000	-1.244060000	-0.649252000
C	-2.339878000	0.879421000	-1.194181000
N	-2.177844000	-0.420629000	-0.759797000
C	-1.050894000	1.673213000	-1.341227000
N	-0.085660000	1.346097000	-0.188498000
C	1.339060000	1.816362000	-0.520147000
N	1.754749000	-0.553279000	-1.202933000
C	2.183236000	0.756579000	-1.215405000
C	2.549541000	-1.527370000	-1.757880000
C	3.789283000	-1.232553000	-2.330191000
C	4.225341000	0.107710000	-2.360002000
C	3.408467000	1.108273000	-1.796258000
C	-0.523060000	1.882437000	1.110459000
N	-0.055809000	1.275794000	2.269021000
C	-1.340595000	3.011902000	1.228782000
C	-1.684279000	3.532539000	2.494358000
C	-0.379885000	1.783514000	3.506965000
C	-1.191980000	2.907738000	3.652198000
O	-0.516834000	-1.435072000	-2.860174000
O	-0.650335000	-2.773777000	-2.739130000

C	-0.231675000	-3.020950000	-0.113551000
H	-0.988097000	-2.795060000	0.650757000
H	-0.496725000	-2.966532000	-1.562801000
H	0.791438000	-2.954011000	0.278914000
H	-0.386283000	-4.083494000	-0.372146000
H	-5.711850000	0.884445000	-1.701353000
H	-3.716410000	2.393391000	-1.888537000
H	-5.392279000	-1.478283000	-0.882153000
H	-3.094663000	-2.260577000	-0.311705000
H	-1.240356000	2.746371000	-1.428053000
H	-0.528268000	1.387368000	-2.266087000
H	1.830679000	2.113679000	0.413271000
H	1.281689000	2.722815000	-1.135592000
H	2.179923000	-2.546035000	-1.746199000
H	4.388948000	-2.031301000	-2.753870000
H	5.177317000	0.368634000	-2.813340000
H	3.729809000	2.146109000	-1.807537000
C	0.773564000	0.026279000	2.250760000
H	-1.705450000	3.521441000	0.347382000
H	-2.310536000	4.417300000	2.565589000
H	0.027690000	1.263342000	4.366638000
H	-1.419914000	3.277152000	4.646396000
H	1.573173000	0.086844000	1.513112000
H	1.238078000	-0.105599000	3.229456000
H	0.125606000	-0.840229000	2.072664000

Mn(II)LK5 ⁴2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Mn	-0.274191000	-0.804959000	-1.134673000
C	-5.018342000	-0.029703000	-0.511488000
C	-4.073505000	1.003586000	-0.694985000
C	-4.574266000	-1.364701000	-0.471770000
C	-3.206934000	-1.631234000	-0.622407000
C	-2.721341000	0.681637000	-0.848043000
N	-2.292454000	-0.631026000	-0.813744000
C	-1.669763000	1.736228000	-1.153708000
N	-0.335544000	1.418183000	-0.454285000
C	0.896681000	1.848639000	-1.270344000
N	1.746367000	-0.458859000	-1.013695000
C	2.057224000	0.885413000	-1.077257000
C	2.757064000	-1.377013000	-0.920035000
C	4.104982000	-0.995351000	-0.900532000
C	4.428194000	0.372693000	-0.971437000
C	3.385790000	1.321641000	-1.053028000
C	-0.300840000	2.018033000	0.895311000
N	-0.204033000	1.234600000	2.030675000
C	-0.364540000	3.410935000	1.040598000
C	-0.332568000	4.016581000	2.311994000
C	-0.172097000	1.815682000	3.279059000
C	-0.234511000	3.198202000	3.451061000
O	-0.546455000	-0.444488000	-3.292756000
O	0.479664000	-0.707138000	-4.172944000
C	-0.200429000	-2.845589000	-1.300533000
H	-0.146212000	-3.244505000	-0.280643000
H	0.060496000	-0.998362000	-5.037505000
H	0.689927000	-3.067801000	-1.894881000
H	-1.110820000	-3.142001000	-1.828253000
H	-0.730840000	0.204784000	-0.400981000
H	-4.396545000	2.039769000	-0.730409000
H	-5.268259000	-2.186414000	-0.329557000
H	-2.839988000	-2.649836000	-0.591224000
H	-2.040334000	2.727806000	-0.880785000
H	-1.473578000	1.753247000	-2.233087000
H	1.206901000	2.866701000	-1.020204000
H	0.599260000	1.854035000	-2.326106000
H	2.482138000	-2.423065000	-0.860512000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	4.876748000	-1.754861000	-0.833011000
H	5.464947000	0.696311000	-0.961185000
H	3.614347000	2.381746000	-1.109384000
C	-0.128436000	-0.260718000	1.975759000
H	-0.439280000	4.037178000	0.157004000
H	-0.382445000	5.097565000	2.405804000
H	-0.095436000	1.143319000	4.125656000
H	-0.205884000	3.611187000	4.453830000
H	0.770527000	-0.566456000	1.435325000
H	-0.058297000	-0.649236000	2.992625000
H	-1.039292000	-0.661359000	1.524533000

Cr(II)LK5 ³1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Cr	-0.200144000	-1.043675000	-0.681646000
C	-4.835231000	0.220667000	-1.182173000
C	-3.736604000	1.096750000	-1.340665000
C	-4.609092000	-1.101767000	-0.754623000
C	-3.292682000	-1.523575000	-0.512866000
C	-2.450187000	0.620030000	-1.080095000
N	-2.232019000	-0.680079000	-0.680501000
C	-1.182042000	1.437285000	-1.271190000
N	-0.151016000	1.098122000	-0.170587000
C	1.234512000	1.659380000	-0.564357000
N	1.757993000	-0.693176000	-1.195682000
C	2.143062000	0.627310000	-1.218988000
C	2.607289000	-1.646545000	-1.701750000
C	3.850192000	-1.316656000	-2.249955000
C	4.234956000	0.039013000	-2.298986000
C	3.367956000	1.019048000	-1.775633000
C	-0.551439000	1.602729000	1.161153000
N	0.052407000	1.066421000	2.290051000
C	-1.473019000	2.643254000	1.328464000
C	-1.787885000	3.140795000	2.610230000
C	-0.246597000	1.551293000	3.543346000
C	-1.162397000	2.584125000	3.737279000
O	-0.411344000	-2.704034000	-1.874794000
O	-0.831686000	-3.457871000	-2.796203000
C	0.011996000	-3.542001000	1.204117000
H	-0.850309000	-2.857536000	1.122068000
H	0.206389000	-3.721571000	2.265662000
H	-0.244064000	-4.493118000	0.729762000
H	0.930311000	-3.147935000	0.743677000
H	-5.844046000	0.566251000	-1.388534000
H	-3.894469000	2.117993000	-1.675090000
H	-5.430814000	-1.797058000	-0.618785000
H	-3.082112000	-2.538667000	-0.191760000
H	-1.382465000	2.510815000	-1.321859000
H	-0.694330000	1.181241000	-2.222871000
H	1.718900000	2.049999000	0.337285000
H	1.087562000	2.521086000	-1.226735000
H	2.274896000	-2.678509000	-1.663320000
H	4.494468000	-2.099614000	-2.635734000
H	5.188242000	0.326509000	-2.732841000
H	3.651525000	2.067586000	-1.798106000
C	1.014270000	-0.085836000	2.239285000
H	-1.949155000	3.102163000	0.474015000
H	-2.497468000	3.956396000	2.715955000
H	0.268907000	1.086606000	4.376321000
H	-1.364851000	2.937905000	4.742526000
H	1.709302000	0.007561000	1.407344000
H	1.600642000	-0.095224000	3.159796000
H	0.456620000	-1.025626000	2.181969000

Cr(II)LK5 ⁵TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Cr	-0.271433000	-0.825107000	-0.859576000
C	-5.042837000	-0.005681000	-0.626923000
C	-4.087146000	1.005510000	-0.869016000
C	-4.604766000	-1.324493000	-0.395641000
C	-3.231888000	-1.599231000	-0.418110000
C	-2.729853000	0.672864000	-0.890395000
N	-2.304710000	-0.621222000	-0.664881000
C	-1.652709000	1.671205000	-1.269796000
N	-0.320131000	1.339631000	-0.550442000
C	0.910374000	1.767836000	-1.389779000
N	1.748168000	-0.503604000	-0.940123000
C	2.073523000	0.816206000	-1.178212000
C	2.746138000	-1.439604000	-0.857321000
C	4.093911000	-1.093012000	-1.007718000
C	4.431742000	0.254370000	-1.244907000
C	3.404238000	1.219737000	-1.323829000
C	-0.282799000	1.978199000	0.788561000
N	-0.179530000	1.216581000	1.938882000
C	-0.348505000	3.371755000	0.903544000
C	-0.314597000	4.000531000	2.165129000
C	-0.146227000	1.820174000	3.177909000
C	-0.212648000	3.205596000	3.320881000
O	-0.396186000	-0.561325000	-2.807894000
O	-0.295173000	-1.794194000	-3.413565000
C	-0.209535000	-3.015977000	-1.054784000
H	0.041399000	-3.003289000	0.022936000
H	-0.206316000	-2.454714000	-2.386736000
H	0.568573000	-3.687362000	-1.461480000
H	-1.170647000	-3.538349000	-1.133946000
H	-6.102654000	0.232288000	-0.620403000
H	-4.405815000	2.026947000	-1.054636000
H	-5.309715000	-2.127204000	-0.206024000
H	-2.869286000	-2.604548000	-0.241840000
H	-1.971388000	2.693868000	-1.054986000
H	-1.458614000	1.603281000	-2.346489000
H	1.200126000	2.796190000	-1.160514000
H	0.605704000	1.736049000	-2.442304000
H	2.457133000	-2.467449000	-0.673557000
H	4.856725000	-1.862036000	-0.944433000
H	5.470075000	0.548447000	-1.368500000
H	3.645122000	2.261233000	-1.515167000
C	-0.095917000	-0.276534000	1.907171000
H	-0.425338000	3.983081000	0.009890000
H	-0.366118000	5.083300000	2.237665000
H	-0.064826000	1.165013000	4.037941000
H	-0.183122000	3.639745000	4.314894000
H	-0.010768000	-0.659448000	2.926285000
H	-1.025024000	-0.693585000	1.499084000
H	0.815570000	-0.587168000	1.382759000

Cr(II)LK5 ⁵2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Cr	-0.276462000	-0.767766000	-0.933285000
C	-5.051085000	-0.024352000	-0.540757000
C	-4.112136000	1.009256000	-0.750929000
C	-4.596333000	-1.349884000	-0.397783000
C	-3.221076000	-1.605956000	-0.469230000
C	-2.751584000	0.693863000	-0.823787000
N	-2.311962000	-0.604847000	-0.678141000
C	-1.692755000	1.724316000	-1.177954000
N	-0.348638000	1.393766000	-0.488772000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	0.878298000	1.828767000	-1.323887000
N	1.744212000	-0.431703000	-0.892851000
C	2.054135000	0.898325000	-1.080757000
C	2.751632000	-1.350783000	-0.785461000
C	4.099648000	-0.978638000	-0.860190000
C	4.422489000	0.379785000	-1.046885000
C	3.382285000	1.328960000	-1.152317000
C	-0.297488000	1.997314000	0.862044000
N	-0.201844000	1.208862000	1.994803000
C	-0.345634000	3.389026000	1.009718000
C	-0.298146000	3.989122000	2.284067000
C	-0.154585000	1.784270000	3.246208000
C	-0.200604000	3.166812000	3.420892000
O	-0.554727000	-0.726001000	-2.793192000
O	0.638940000	-0.509982000	-3.606242000
C	-0.234236000	-2.886206000	-1.659905000
H	-0.165009000	-3.219524000	-0.609724000
H	0.318774000	-0.714386000	-4.526655000
H	0.671114000	-2.971310000	-2.258741000
H	-1.149667000	-3.157567000	-2.180473000
H	-6.112326000	0.201746000	-0.492309000
H	-4.446286000	2.035470000	-0.871317000
H	-5.289497000	-2.169255000	-0.239000000
H	-2.841876000	-2.616930000	-0.364490000
H	-2.029990000	2.732973000	-0.925947000
H	-1.509718000	1.693148000	-2.258070000
H	1.149835000	2.867288000	-1.118285000
H	0.587111000	1.761169000	-2.378455000
H	2.473381000	-2.389667000	-0.643054000
H	4.872907000	-1.735262000	-0.778767000
H	5.459909000	0.694943000	-1.111493000
H	3.612406000	2.379087000	-1.305294000
C	-0.143173000	-0.284664000	1.929427000
H	-0.420901000	4.019479000	0.129376000
H	-0.336282000	5.070397000	2.381397000
H	-0.079553000	1.108843000	4.090807000
H	-0.160491000	3.577699000	4.424258000
H	0.765805000	-0.596231000	1.402972000
H	-0.078113000	-0.689342000	2.941050000
H	-1.069146000	-0.673403000	1.491223000

Fe(II)LK6 ⁷1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Fe	0.188215000	-0.833087000	0.027863000
C	-4.406373000	0.223329000	-0.944148000
C	-3.362570000	1.168684000	-1.005255000
C	-4.127813000	-1.086990000	-0.504217000
C	-2.814502000	-1.412828000	-0.149942000
C	-2.063820000	0.786542000	-0.643528000
N	-1.799541000	-0.495558000	-0.225260000
C	-0.874206000	1.725936000	-0.809072000
N	0.285021000	1.372988000	0.103839000
C	1.618955000	1.663732000	-0.581273000
N	1.548360000	-0.649258000	-1.457783000
C	1.998108000	0.637251000	-1.637595000
C	1.933574000	-1.634497000	-2.328844000
C	2.789289000	-1.370758000	-3.403384000
C	3.251423000	-0.053311000	-3.596900000
C	2.844346000	0.960831000	-2.704850000
C	-0.989049000	2.387581000	2.195140000
C	-1.449192000	1.451849000	3.150195000
C	-1.670432000	3.625576000	2.127485000
C	-2.741728000	3.897834000	2.984105000
C	-2.522666000	1.762785000	3.989851000
N	-3.150879000	2.974390000	3.904308000
O	0.004529000	-3.214765000	-0.027891000
O	0.144372000	-4.448726000	0.207328000
C	1.528051000	-1.513701000	2.286410000

H	1.923052000	-0.776284000	2.989417000
H	1.735457000	-2.520551000	2.658478000
H	0.425951000	-1.408327000	2.234637000
H	2.060628000	-1.402529000	1.326382000
H	-5.414024000	0.499862000	-1.240823000
H	-3.557324000	2.178574000	-1.354255000
H	-4.905797000	-1.840898000	-0.448837000
H	-2.558106000	-2.412824000	0.182973000
H	-1.186155000	2.767606000	-0.669737000
H	-0.517890000	1.646563000	-1.844654000
H	2.391528000	1.667188000	0.198510000
H	1.606187000	2.669157000	-1.022512000
H	1.545577000	-2.632364000	-2.155673000
H	3.081361000	-2.174018000	-4.071236000
H	3.912747000	0.180944000	-4.425940000
H	3.191406000	1.980923000	-2.839808000
C	-4.254170000	3.321930000	4.872085000
H	-1.354374000	4.411894000	1.449038000
H	-3.263680000	4.848249000	2.971461000
H	-2.877154000	1.078728000	4.752434000
H	-0.957079000	0.496139000	3.295109000
H	-4.758621000	2.407998000	5.191351000
H	-3.822146000	3.830461000	5.739554000
H	-4.975208000	3.976906000	4.378764000
C	0.304394000	2.186167000	1.405970000
H	0.693504000	3.183481000	1.157783000
H	1.042710000	1.707460000	2.058264000

Fe(II)LK6 ⁷TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Fe	0.121942000	-0.767234000	-0.029027000
C	-4.453152000	-0.395020000	-1.498121000
C	-3.733257000	0.718615000	-1.011935000
C	-3.827688000	-1.656614000	-1.547356000
C	-2.503107000	-1.773503000	-1.111020000
C	-2.415549000	0.547040000	-0.576984000
N	-1.813787000	-0.689431000	-0.629571000
C	-1.604898000	1.684504000	0.029778000
N	-0.115196000	1.464150000	-0.136718000
C	0.280151000	1.624144000	-1.612318000
N	1.602502000	-0.423834000	-1.355492000
C	1.510657000	0.806720000	-1.964581000
C	2.612997000	-1.287495000	-1.684032000
C	3.577921000	-0.941661000	-2.637802000
C	3.500454000	0.320455000	-3.260556000
C	2.453178000	1.205114000	-2.916058000
C	0.487799000	2.700842000	2.146198000
C	1.402840000	2.217383000	3.108976000
C	-0.531873000	3.568638000	2.608953000
C	-0.616532000	3.910013000	3.961373000
C	1.287091000	2.588031000	4.453904000
N	0.287510000	3.422773000	4.864558000
O	0.256487000	-2.892167000	-0.363989000
O	0.402324000	-3.503058000	0.845648000
C	0.529973000	-1.188205000	2.082778000
H	0.699894000	-1.762609000	3.007798000
H	0.452534000	-2.539347000	1.542143000
H	-0.369533000	-0.580437000	2.276383000
H	1.445994000	-0.595007000	1.925968000
H	-5.478340000	-0.276645000	-1.836914000
H	-4.199619000	1.698806000	-0.977869000
H	-4.349014000	-2.531497000	-1.920845000
H	-1.978249000	-2.722165000	-1.149708000
H	-1.818578000	1.737742000	1.103187000
H	-1.908322000	2.640032000	-0.419765000
H	0.435803000	2.682672000	-1.850499000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	-0.562649000	1.278634000	-2.222597000
H	2.627477000	-2.253645000	-1.191179000
H	4.363498000	-1.646585000	-2.888073000
H	4.237209000	0.610895000	-4.004002000
H	2.374431000	2.176058000	-3.395886000
C	0.211221000	3.864304000	6.305521000
H	-1.241866000	4.031004000	1.930886000
H	-1.374178000	4.587621000	4.339130000
H	1.990803000	2.251982000	5.206903000
H	2.244939000	1.592173000	2.830902000
H	0.692493000	4.842105000	6.405621000
H	-0.836124000	3.929946000	6.608219000
H	0.722199000	3.134386000	6.935839000
C	0.729971000	2.479547000	0.651298000
H	0.592222000	3.453694000	0.158849000
H	1.773677000	2.189079000	0.496263000

Fe(II)LK6 ³2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Fe	-0.390297000	-0.627820000	-0.786587000
C	-5.007428000	-0.371739000	-1.785680000
C	-4.213904000	0.784892000	-1.648792000
C	-4.440593000	-1.634859000	-1.514832000
C	-3.096981000	-1.709668000	-1.141879000
C	-2.877415000	0.658532000	-1.251012000
N	-2.325030000	-0.580738000	-1.016177000
C	-1.986949000	1.867974000	-1.041801000
N	-0.555669000	1.458355000	-0.707290000
C	0.352789000	1.753018000	-1.919541000
N	1.474535000	-0.273727000	-1.212665000
C	1.637088000	0.961333000	-1.796220000
C	2.527338000	-1.136313000	-1.105934000
C	3.795814000	-0.781723000	-1.581801000
C	3.975569000	0.480358000	-2.183452000
C	2.878260000	1.364688000	-2.291429000
C	-0.735441000	2.367729000	1.795123000
C	-1.854581000	1.623925000	2.224921000
C	-0.222701000	3.336097000	2.696747000
C	-0.808320000	3.530724000	3.945525000
C	-2.416516000	1.857124000	3.486829000
N	-1.897942000	2.795487000	4.328912000
O	-0.240302000	-2.388878000	-1.115932000
O	-0.279621000	-2.510058000	-2.577322000
C	-0.115701000	-1.151761000	1.172842000
H	0.418925000	-2.099408000	1.113262000
H	-0.093936000	-3.472809000	-2.740701000
H	-1.145536000	-1.259504000	1.519093000
H	0.447318000	-0.339107000	1.631115000
H	-6.044417000	-0.289693000	-2.098352000
H	-4.632871000	1.766178000	-1.852393000
H	-5.023185000	-2.545272000	-1.606727000
H	-2.610657000	-2.657756000	-0.949797000
H	-2.390100000	2.485256000	-0.233834000
H	-1.991472000	2.502235000	-1.936352000
H	0.541853000	2.829390000	-2.006006000
H	-0.191113000	1.443105000	-2.821901000
H	2.335884000	-2.103201000	-0.655451000
H	4.618407000	-1.483037000	-1.490714000
H	4.949797000	0.771096000	-2.565768000
H	2.995674000	2.336125000	-2.761972000
C	-2.511288000	3.044814000	5.683915000
H	0.633208000	3.953076000	2.438896000
H	-0.435162000	4.265527000	4.650566000
H	-3.279236000	1.304135000	3.839550000
H	-2.318815000	0.862128000	1.611522000
H	-1.757679000	2.871145000	6.456888000

H	-2.868931000	4.077123000	5.731911000
H	-3.349213000	2.362565000	5.834637000
C	0.013623000	2.251351000	0.465600000
H	0.171060000	3.280085000	0.108036000
H	1.009527000	1.840593000	0.671840000

Ni(II)LK6 ³1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Ni	-0.116435000	-0.442013000	-0.259856000
C	-4.787850000	0.180347000	0.044455000
C	-3.921250000	1.124098000	-0.541487000
C	-4.244281000	-0.983300000	0.624447000
C	-2.858791000	-1.178414000	0.586139000
C	-2.543484000	0.874261000	-0.551486000
N	-2.022590000	-0.271601000	-0.003445000
C	-1.545933000	1.787146000	-1.230082000
N	-0.136554000	1.474172000	-0.745377000
C	0.886804000	1.517286000	-1.890722000
N	1.774996000	-0.372867000	-0.661444000
C	2.079706000	0.676602000	-1.496671000
C	2.765032000	-1.219186000	-0.250669000
C	4.088385000	-1.060051000	-0.684182000
C	4.402731000	0.000859000	-1.555563000
C	3.381517000	0.887607000	-1.958527000
C	-0.463570000	2.614705000	1.621712000
C	-0.293798000	1.755955000	2.732248000
C	-1.280736000	3.753766000	1.802912000
C	-1.881130000	4.007732000	3.040929000
C	-0.909698000	2.046437000	3.952874000
N	-1.687137000	3.162688000	4.096553000
O	-0.940764000	-0.983692000	-3.272907000
O	-1.231703000	-1.655284000	-4.304620000
C	-0.104984000	-2.909059000	-0.124522000
H	0.808356000	-3.497373000	-0.230646000
H	-0.947644000	-3.562534000	0.113225000
H	0.034275000	-2.227916000	0.748429000
H	-0.315910000	-2.438892000	-1.099743000
H	-5.861054000	0.346847000	0.045950000
H	-4.317033000	2.026224000	-0.998728000
H	-4.878727000	-1.731592000	1.087433000
H	-2.413516000	-2.064076000	1.020845000
H	-1.785995000	2.842933000	-1.064495000
H	-1.580627000	1.620474000	-2.312748000
H	1.168284000	2.551710000	-2.119472000
H	0.407381000	1.095084000	-2.780399000
H	2.496784000	-2.022658000	0.424202000
H	4.849909000	-1.754453000	-0.345500000
H	5.420237000	0.140030000	-1.908610000
H	3.601559000	1.718562000	-2.621892000
C	-2.278961000	3.499662000	5.443133000
H	-1.427996000	4.482582000	1.011862000
H	-2.492329000	4.886155000	3.215953000
H	-0.774401000	1.425731000	4.831296000
H	0.354970000	0.886760000	2.687747000
H	-2.456628000	2.578916000	6.002117000
H	-1.579371000	4.138796000	5.990780000
H	-3.226818000	4.022776000	5.301185000
C	0.351914000	2.448991000	0.341217000
H	0.432796000	3.429316000	-0.146563000
H	1.364978000	2.131033000	0.605801000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

Ni(II)LK6 ³TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Ni	-0.251914000	-0.445114000	-0.763178000
C	-4.935951000	0.182710000	-0.510499000
C	-4.039392000	1.176897000	-0.948828000
C	-4.422108000	-1.040351000	-0.037398000
C	-3.037389000	-1.245942000	-0.044918000
C	-2.663198000	0.919768000	-0.936553000
N	-2.172877000	-0.291051000	-0.501133000
C	-1.645958000	1.907217000	-1.466150000
N	-0.263783000	1.577807000	-0.928314000
C	0.834959000	1.789354000	-1.976656000
N	1.670709000	-0.288792000	-1.003903000
C	2.001263000	0.887923000	-1.643652000
C	2.652835000	-1.173882000	-0.662881000
C	3.996779000	-0.930200000	-0.976058000
C	4.340976000	0.253450000	-1.655890000
C	3.326584000	1.178976000	-1.978737000
C	-0.788047000	2.399025000	1.536929000
C	-0.670159000	1.424801000	2.554986000
C	-1.648868000	3.492739000	1.785233000
C	-2.338086000	3.593824000	2.998510000
C	-1.375247000	1.563424000	3.754394000
N	-2.192110000	2.639657000	3.965596000
O	-0.554878000	-0.655804000	-2.820933000
O	-0.565115000	-1.990958000	-2.962169000
C	-0.174359000	-2.626304000	-0.416990000
H	0.722502000	-3.207212000	-0.662364000
H	-0.381021000	-2.324680000	-1.758973000
H	-1.063337000	-3.270104000	-0.425818000
H	-0.055084000	-2.273428000	0.616237000
H	-6.007599000	0.357104000	-0.538952000
H	-4.409901000	2.129569000	-1.316011000
H	-5.076651000	-1.829807000	0.316724000
H	-2.623080000	-2.178784000	0.310546000
H	-1.926192000	2.937838000	-1.221851000
H	-1.613310000	1.837987000	-2.559723000
H	1.138008000	2.841954000	-2.014115000
H	0.425883000	1.525192000	-2.957384000
H	2.369714000	-2.075858000	-0.137713000
H	4.749397000	-1.659331000	-0.695053000
H	5.374315000	0.456620000	-1.921337000
H	3.568045000	2.107591000	-2.487276000
C	-2.883457000	2.813201000	5.295953000
H	-1.762423000	4.303662000	1.072403000
H	-2.983270000	4.435090000	3.226618000
H	-1.280795000	0.851442000	4.566476000
H	0.009026000	0.582648000	2.464562000
H	-3.039818000	1.834758000	5.753886000
H	-2.257119000	3.432214000	5.945887000
H	-3.850271000	3.296534000	5.140715000
C	0.123780000	2.399157000	0.310919000
H	0.233092000	3.436520000	-0.032824000
H	1.118131000	2.052223000	0.610904000

Ni(II)LK6 ³2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Ni	-0.346021000	-0.617008000	-0.952034000
C	-5.035751000	-0.072284000	-1.045159000
C	-4.147018000	1.018335000	-1.033685000
C	-4.520361000	-1.382878000	-0.957198000
C	-3.136953000	-1.557574000	-0.866311000
C	-2.764978000	0.787079000	-0.939746000
N	-2.277728000	-0.491750000	-0.863808000

C	-1.770334000	1.946023000	-0.987356000
N	-0.363020000	1.516708000	-0.641490000
C	0.633666000	1.803678000	-1.762342000
N	1.567981000	-0.401081000	-1.242671000
C	1.840443000	0.881810000	-1.653903000
C	2.563611000	-1.329889000	-1.182696000
C	3.880036000	-1.010379000	-1.543390000
C	4.172632000	0.300681000	-1.967020000
C	3.137205000	1.258401000	-2.019376000
C	-0.732800000	2.357972000	1.833120000
C	-1.141422000	1.329981000	2.712722000
C	-1.099846000	3.681300000	2.175000000
C	-1.825773000	3.942232000	3.341162000
C	-1.866450000	1.632319000	3.869340000
N	-2.195924000	2.923958000	4.173671000
O	-0.413173000	-2.416410000	-2.279742000
O	-0.437899000	-2.070486000	-3.611910000
C	-0.137686000	-1.785264000	0.671046000
H	0.034737000	-2.749925000	0.186989000
H	-0.458722000	-2.920618000	-4.142414000
H	-1.086411000	-1.719293000	1.201810000
H	0.727171000	-1.387243000	1.202385000
H	-6.106208000	0.093196000	-1.124027000
H	-4.523610000	2.034401000	-1.110504000
H	-5.174533000	-2.248146000	-0.965947000
H	-2.699799000	-2.548099000	-0.803411000
H	-2.112850000	2.739110000	-0.315960000
H	-1.782667000	2.380393000	-1.995334000
H	0.946521000	2.855301000	-1.756586000
H	0.125256000	1.626809000	-2.720243000
H	2.301420000	-2.328322000	-0.850669000
H	4.651488000	-1.771307000	-1.492871000
H	5.184927000	0.573589000	-2.250119000
H	3.340977000	2.273100000	-2.347873000
C	-2.920647000	3.239867000	5.457953000
H	-0.802330000	4.528071000	1.564245000
H	-2.102666000	4.948356000	3.636129000
H	-2.172071000	0.868907000	4.575521000
H	-0.873204000	0.294453000	2.541731000
H	-2.190542000	3.536092000	6.217386000
H	-3.627713000	4.053656000	5.282958000
H	-3.466304000	2.356394000	5.793977000
C	0.202643000	2.123182000	0.647898000
H	0.642303000	3.094258000	0.383476000
H	1.028066000	1.477438000	0.966688000

Co(II)LK6 ⁶1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Co	-0.372891000	-0.475768000	-0.143213000
C	-4.591874000	-0.039621000	-2.328778000
C	-3.860798000	1.058849000	-1.830812000
C	-4.093200000	-1.344655000	-2.141147000
C	-2.877093000	-1.512497000	-1.470392000
C	-2.656952000	0.832798000	-1.152622000
N	-2.174119000	-0.444249000	-0.980729000
C	-1.877399000	1.979748000	-0.513442000
N	-0.414328000	1.642904000	-0.306466000
C	0.347648000	1.714518000	-1.641854000
N	1.398741000	-0.426694000	-1.038189000
C	1.556900000	0.787838000	-1.666523000
C	2.392770000	-1.362225000	-1.093836000
C	3.587829000	-1.116020000	-1.782163000
C	3.761524000	0.126437000	-2.423919000
C	2.732101000	1.091130000	-2.360966000
C	-0.277045000	2.748308000	2.076005000
C	0.176070000	1.935437000	3.139922000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	-1.144349000	3.817220000	2.405082000
C	-1.525017000	4.042147000	3.731377000
C	-0.226779000	2.195284000	4.454478000
N	-1.064550000	3.237435000	4.736070000
O	-0.165605000	-3.624166000	-1.486826000
O	0.022224000	-4.716357000	-2.097563000
C	-0.349575000	-2.030178000	1.716819000
H	0.572156000	-1.440059000	1.842036000
H	-0.335581000	-2.754789000	2.540574000
H	-1.278119000	-1.455811000	1.858286000
H	-0.351693000	-2.649710000	0.807011000
H	-5.527618000	0.120368000	-2.856352000
H	-4.229504000	2.070613000	-1.971521000
H	-4.629176000	-2.211273000	-2.512933000
H	-2.446819000	-2.497022000	-1.324099000
H	-2.313470000	2.190368000	0.469666000
H	-1.982504000	2.888016000	-1.122001000
H	0.648744000	2.748044000	-1.848433000
H	-0.349645000	1.418645000	-2.435959000
H	2.219475000	-2.305133000	-0.586884000
H	4.358896000	-1.878257000	-1.814752000
H	4.678806000	0.341308000	-2.964294000
H	2.847756000	2.050841000	-2.855581000
C	-1.440026000	3.544887000	6.164660000
H	-1.502751000	4.512193000	1.651969000
H	-2.171938000	4.864887000	4.015249000
H	0.126005000	1.606956000	5.293793000
H	0.885699000	1.129863000	2.979747000
H	-1.312183000	2.648668000	6.774243000
H	-0.793595000	4.344077000	6.540226000
H	-2.485129000	3.859960000	6.203296000
C	0.278446000	2.607569000	0.659334000
H	0.268446000	3.601830000	0.190535000
H	1.324002000	2.286619000	0.714963000

Co(II)LK6 ⁴TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Co	1.133795000	0.389345000	-0.546455000
C	-0.612288000	4.587664000	0.749412000
C	-0.822091000	3.418441000	1.504700000
C	0.060230000	4.495397000	-0.486850000
C	0.518804000	3.247364000	-0.918985000
C	-0.354423000	2.191244000	1.014361000
N	0.322492000	2.112864000	-0.177729000
C	-0.576001000	0.893119000	1.762502000
N	0.037466000	-0.286191000	1.012196000
C	1.256567000	-0.819417000	1.802957000
N	2.053033000	-1.331912000	-0.417717000
C	2.054645000	-1.731656000	0.897961000
C	2.724268000	-2.066046000	-1.348496000
C	3.447858000	-3.212721000	-0.984902000
C	3.478256000	-3.610627000	0.364551000
C	2.758652000	-2.860559000	1.321030000
C	-2.353999000	-1.230780000	0.327353000
C	-2.835092000	-0.115218000	-0.389871000
C	-3.267063000	-2.291416000	0.558319000
C	-4.576526000	-2.220534000	0.087610000
C	-4.161494000	-0.082548000	-0.838106000
N	-5.012974000	-1.121264000	-0.601728000
O	2.666592000	0.995916000	0.435758000
O	3.819220000	1.275893000	-0.348339000
C	2.186666000	0.662963000	-2.278547000
H	3.101805000	0.083580000	-2.408526000
H	3.229705000	0.820416000	-1.361353000
H	2.201816000	1.602051000	-2.833065000
H	1.284877000	0.067359000	-2.423765000
H	-0.962191000	5.548076000	1.116268000
H	-1.337090000	3.464777000	2.459977000

H	0.239073000	5.373743000	-1.097718000
H	1.062293000	3.141333000	-1.849382000
H	-1.646810000	0.722446000	1.904822000
H	-0.140787000	0.952637000	2.767349000
H	0.925303000	-1.328947000	2.715270000
H	1.852973000	0.049838000	2.113046000
H	2.692776000	-1.728046000	-2.375206000
H	3.977659000	-3.772912000	-1.747903000
H	4.041512000	-4.488188000	0.667699000
H	2.756656000	-3.152558000	2.366815000
C	-6.440197000	-1.079126000	-1.086731000
H	-2.975033000	-3.182153000	1.106797000
H	-5.293258000	-3.017899000	0.251198000
H	-4.558979000	0.762272000	-1.388222000
H	-2.212593000	0.741030000	-0.616102000
H	-6.616242000	-1.923344000	-1.759002000
H	-7.113780000	-1.135662000	-0.227151000
H	-6.614201000	-0.145527000	-1.623765000
C	-0.937823000	-1.450796000	0.860307000
H	-1.041060000	-1.907237000	1.855555000
H	-0.447205000	-2.196847000	0.224686000

Co(II)LK6 ²2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Co	-0.470104000	-0.535212000	-0.981229000
C	-5.147429000	-0.188445000	-1.578176000
C	-4.313981000	0.941907000	-1.482105000
C	-4.589348000	-1.470848000	-1.396170000
C	-3.218691000	-1.585679000	-1.145707000
C	-2.949292000	0.767753000	-1.212938000
N	-2.408026000	-0.485210000	-1.062774000
C	-2.005771000	1.943318000	-1.065437000
N	-0.581419000	1.473609000	-0.781413000
C	0.312119000	1.772805000	-2.009383000
N	1.440722000	-0.224748000	-1.258091000
C	1.603644000	0.998918000	-1.863816000
C	2.522384000	-1.026932000	-1.052257000
C	3.803744000	-0.640935000	-1.476249000
C	3.972776000	0.597084000	-2.123560000
C	2.851962000	1.436199000	-2.310496000
C	-0.696905000	2.307568000	1.742778000
C	-1.792388000	1.534181000	2.181103000
C	-0.192632000	3.280078000	2.643840000
C	-0.762979000	3.448732000	3.903818000
C	-2.339611000	1.742433000	3.453307000
N	-1.828449000	2.684269000	4.296802000
O	-0.529530000	-2.202973000	-1.720698000
O	0.533662000	-3.109671000	-1.554459000
C	-0.227988000	-1.237537000	0.849150000
H	0.362234000	-2.145252000	0.715918000
H	0.307420000	-3.881104000	-2.147730000
H	-1.233121000	-1.440889000	1.220582000
H	0.307465000	-0.461595000	1.397110000
H	-6.205896000	-0.073183000	-1.792112000
H	-4.721050000	1.939649000	-1.618968000
H	-5.199764000	-2.365176000	-1.461016000
H	-2.749824000	-2.554358000	-1.027023000
H	-2.346521000	2.596243000	-0.256985000
H	-2.013613000	2.555514000	-1.975286000
H	0.484691000	2.851471000	-2.100867000
H	-0.240875000	1.453917000	-2.903792000
H	2.358856000	-1.977694000	-0.563709000
H	4.644567000	-1.304257000	-1.303927000
H	4.953956000	0.908751000	-2.469132000
H	2.957211000	2.401141000	-2.797058000
C	-2.423062000	2.903645000	5.665114000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	0.645073000	3.918565000	2.379063000
H	-0.395747000	4.185030000	4.610404000
H	-3.182797000	1.165730000	3.814959000
H	-2.244119000	0.767221000	1.565021000
H	-1.654425000	2.729208000	6.423014000
H	-2.794803000	3.929647000	5.735236000
H	-3.248477000	2.206950000	5.818721000
C	0.043457000	2.195825000	0.409594000
H	0.257231000	3.222636000	0.078723000
H	1.013130000	1.720792000	0.597717000

Mn(II)LK6 ⁴1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Mn	-0.391920000	-0.828615000	-0.319911000
C	-4.731565000	0.088683000	-2.384039000
C	-3.927912000	1.107593000	-1.834525000
C	-4.303552000	-1.250112000	-2.288519000
C	-3.084027000	-1.523780000	-1.660553000
C	-2.724169000	0.772787000	-1.199996000
N	-2.302375000	-0.533212000	-1.122562000
C	-1.891102000	1.840076000	-0.498505000
N	-0.436106000	1.462410000	-0.354431000
C	0.277840000	1.572055000	-1.704841000
N	1.506574000	-0.477630000	-1.126167000
C	1.563064000	0.757574000	-1.730928000
C	2.604276000	-1.293521000	-1.155321000
C	3.789539000	-0.915302000	-1.799132000
C	3.849436000	0.343850000	-2.427872000
C	2.721493000	1.191279000	-2.385276000
C	-0.222324000	2.567733000	2.031964000
C	0.281024000	1.802149000	3.108300000
C	-1.103356000	3.628548000	2.353483000
C	-1.448963000	3.889112000	3.682202000
C	-0.087046000	2.097415000	4.425870000
N	-0.939864000	3.129160000	4.698829000
O	-0.354286000	-3.079342000	-1.045998000
O	0.425372000	-3.820435000	-1.713416000
C	-0.587774000	-1.928742000	2.008117000
H	0.456357000	-2.036396000	1.671639000
H	-0.620260000	-2.407891000	2.993266000
H	-0.897585000	-0.884463000	2.164749000
H	-1.301270000	-2.489784000	1.390270000
H	-5.667502000	0.334153000	-2.877105000
H	-4.240947000	2.145434000	-1.900266000
H	-4.894992000	-2.062405000	-2.697099000
H	-2.718377000	-2.542243000	-1.584634000
H	-2.298418000	1.980854000	0.509319000
H	-1.994774000	2.796390000	-1.030903000
H	0.486567000	2.622455000	-1.943399000
H	-0.409650000	1.201485000	-2.476425000
H	2.529175000	-2.256246000	-0.659306000
H	4.638434000	-1.590587000	-1.808365000
H	4.753860000	0.661190000	-2.938514000
H	2.748736000	2.165454000	-2.864094000
C	-1.281116000	3.477523000	6.126227000
H	-1.498591000	4.291296000	1.590027000
H	-2.105201000	4.706813000	3.959142000
H	0.305135000	1.545602000	5.272415000
H	1.003110000	1.007111000	2.951088000
H	-1.081131000	2.617583000	6.767698000
H	-0.667871000	4.326342000	6.443908000
H	-2.340483000	3.735906000	6.191202000
C	0.305509000	2.393971000	0.607930000
H	0.334605000	3.390520000	0.142574000
H	1.337315000	2.031481000	0.654974000

Mn(II)LK6 ⁴TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Mn	-0.374414000	-0.605333000	-0.223788000
C	-4.871886000	-0.458658000	-1.865940000
C	-4.072095000	0.696517000	-1.765420000
C	-4.393898000	-1.675944000	-1.338819000
C	-3.126078000	-1.707373000	-0.753130000
C	-2.817760000	0.616815000	-1.146429000
N	-2.348227000	-0.580670000	-0.656154000
C	-1.972655000	1.858911000	-0.916426000
N	-0.534760000	1.536224000	-0.550254000
C	0.375306000	1.560093000	-1.787622000
N	1.578529000	-0.224899000	-0.613935000
C	1.681171000	0.842204000	-1.482400000
C	2.682760000	-0.972522000	-0.314182000
C	3.933110000	-0.680225000	-0.873664000
C	4.047293000	0.404419000	-1.765282000
C	2.904718000	1.178344000	-2.066912000
C	-0.665714000	2.705525000	1.801010000
C	-0.436167000	1.816304000	2.876164000
C	-1.453457000	3.849713000	2.066672000
C	-1.973110000	4.074786000	3.345864000
C	-0.973558000	2.077716000	4.140460000
N	-1.728815000	3.195541000	4.362711000
O	-0.176134000	-2.148566000	-1.838248000
O	0.047230000	-3.273054000	-1.117540000
C	-0.233682000	-2.183304000	1.319910000
H	-0.105129000	-3.245451000	1.591105000
H	-0.034138000	-2.892362000	-0.015107000
H	-1.219461000	-1.904041000	1.719191000
H	0.578993000	-1.655836000	1.840828000
H	-5.844589000	-0.411348000	-2.346782000
H	-4.424872000	1.643771000	-2.163033000
H	-4.981659000	-2.585840000	-1.396774000
H	-2.719297000	-2.634582000	-0.366765000
H	-2.417613000	2.419047000	-0.087363000
H	-2.002519000	2.514866000	-1.795752000
H	0.559198000	2.592150000	-2.109837000
H	-0.157187000	1.055701000	-2.606440000
H	2.558092000	-1.808440000	0.364496000
H	4.790550000	-1.295580000	-0.622498000
H	5.004885000	0.644745000	-2.217984000
H	2.973746000	2.019010000	-2.750809000
C	-2.247172000	3.495635000	5.748069000
H	-1.644858000	4.599154000	1.304634000
H	-2.563982000	4.952997000	3.581859000
H	-0.794392000	1.429157000	4.990424000
H	0.202723000	0.944795000	2.772637000
H	-2.342941000	2.564325000	6.309145000
H	-1.545310000	4.165234000	6.254812000
H	-3.227427000	3.970916000	5.671712000
C	0.033529000	2.552397000	0.451112000
H	0.035992000	3.529038000	-0.051704000
H	1.078151000	2.274218000	0.622635000

Mn(II)LK6 ⁴2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Mn	-0.454974000	-0.642506000	-0.842386000
C	-5.100402000	-0.174730000	-1.948370000
C	-4.284550000	0.950879000	-1.716335000
C	-4.563867000	-1.465199000	-1.762048000
C	-3.229750000	-1.595273000	-1.366590000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	-2.959693000	0.766306000	-1.302656000
N	-2.438707000	-0.497039000	-1.139275000
C	-2.052705000	1.940806000	-0.991244000
N	-0.621707000	1.491881000	-0.717687000
C	0.245836000	1.779266000	-1.962930000
N	1.443332000	-0.220434000	-1.267757000
C	1.551989000	1.019096000	-1.862340000
C	2.537848000	-1.029959000	-1.157160000
C	3.786310000	-0.622594000	-1.649017000
C	3.906469000	0.635830000	-2.267760000
C	2.769557000	1.470452000	-2.371406000
C	-0.698499000	2.345897000	1.799393000
C	-1.774641000	1.556331000	2.256123000
C	-0.187247000	3.319260000	2.695457000
C	-0.734886000	3.474796000	3.967210000
C	-2.299166000	1.750951000	3.540266000
N	-1.783404000	2.695666000	4.377374000
O	-0.514168000	-2.332275000	-1.464728000
O	0.579959000	-3.254474000	-1.115425000
C	-0.196041000	-1.296354000	1.090093000
H	0.380022000	-2.213694000	0.953009000
H	0.386231000	-4.037439000	-1.694573000
H	-1.213939000	-1.479547000	1.442335000
H	0.338780000	-0.495213000	1.604303000
H	-6.129153000	-0.047343000	-2.272680000
H	-4.677616000	1.953249000	-1.860283000
H	-5.160549000	-2.354530000	-1.934173000
H	-2.759678000	-2.564138000	-1.248567000
H	-2.436401000	2.476318000	-0.118417000
H	-2.062325000	2.661003000	-1.818515000
H	0.412766000	2.857581000	-2.067572000
H	-0.323913000	1.451737000	-2.843633000
H	2.393387000	-2.003060000	-0.705846000
H	4.638845000	-1.286477000	-1.553470000
H	4.863199000	0.965236000	-2.662596000
H	2.840688000	2.443624000	-2.847700000
C	-2.355443000	2.903483000	5.757482000
H	0.636896000	3.969583000	2.417150000
H	-0.362949000	4.212379000	4.670035000
H	-3.128521000	1.162611000	3.915083000
H	-2.231526000	0.787913000	1.644949000
H	-1.570600000	2.737024000	6.500415000
H	-2.739000000	3.924444000	5.837203000
H	-3.168890000	2.195788000	5.924168000
C	0.005875000	2.257828000	0.444379000
H	0.160533000	3.291060000	0.099405000
H	1.004050000	1.833088000	0.606717000

Cr(II)LK6 ³1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Cr	-0.253568000	-0.535437000	-0.883400000
C	-4.951772000	0.599549000	-0.469703000
C	-3.956528000	1.560644000	-0.737248000
C	-4.576248000	-0.743997000	-0.264880000
C	-3.221820000	-1.084514000	-0.340268000
C	-2.615453000	1.160009000	-0.806392000
N	-2.254975000	-0.151742000	-0.611605000
C	-1.507664000	2.121688000	-1.206457000
N	-0.129934000	1.581988000	-0.837574000
C	0.885302000	1.833084000	-1.967172000
N	1.742631000	-0.372204000	-1.369054000
C	2.060227000	0.880163000	-1.844908000
C	2.712367000	-1.334529000	-1.303738000
C	4.027427000	-1.081617000	-1.715651000
C	4.356606000	0.199304000	-2.200841000
C	3.356858000	1.194892000	-2.261167000
C	-0.428850000	2.369412000	1.679179000
C	-0.527395000	1.344862000	2.648254000

C	-1.033442000	3.610492000	1.988996000
C	-1.691542000	3.797820000	3.208701000
C	-1.193528000	1.573184000	3.856447000
N	-1.761357000	2.787337000	4.125646000
O	-0.459892000	-2.411380000	-1.561371000
O	-0.557165000	-3.418860000	-2.319505000
C	0.241482000	-2.357260000	1.725313000
H	1.007195000	-1.697625000	1.287743000
H	0.427210000	-2.422266000	2.801881000
H	-0.781611000	-1.986142000	1.568805000
H	0.334848000	-3.361817000	1.303530000
H	-5.997636000	0.889893000	-0.430791000
H	-4.228511000	2.597480000	-0.912505000
H	-5.315742000	-1.511681000	-0.063523000
H	-2.897044000	-2.109844000	-0.196094000
H	-1.670900000	3.110621000	-0.765881000
H	-1.540264000	2.263405000	-2.293973000
H	1.213595000	2.879136000	-1.967646000
H	0.369716000	1.654637000	-2.919889000
H	2.425518000	-2.309459000	-0.923470000
H	4.770639000	-1.869774000	-1.659324000
H	5.368623000	0.420077000	-2.527182000
H	3.590181000	2.186449000	-2.637078000
C	-2.411841000	3.038095000	5.463640000
H	-0.965287000	4.461416000	1.318181000
H	-2.142372000	4.745612000	3.481445000
H	-1.261993000	0.816777000	4.629798000
H	-0.055842000	0.378057000	2.508987000
H	-2.765971000	2.092449000	5.878166000
H	-1.677892000	3.488392000	6.139132000
H	-3.260199000	3.713044000	5.332308000
C	0.448701000	2.239698000	0.434316000
H	0.762345000	3.250167000	0.141860000
H	1.355678000	1.681596000	0.689048000

Cr(II)LK6 ³TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Cr	-0.483056000	-0.843429000	-0.035506000
C	-4.330683000	-0.238029000	-2.907030000
C	-3.798259000	0.819699000	-2.136110000
C	-3.720259000	-1.506568000	-2.856217000
C	-2.596444000	-1.689037000	-2.041843000
C	-2.678769000	0.580824000	-1.335419000
N	-2.085116000	-0.660659000	-1.290543000
C	-2.072450000	1.630869000	-0.421549000
N	-0.601933000	1.325566000	-0.165984000
C	0.187038000	1.564175000	-1.470223000
N	1.189269000	-0.637569000	-1.086707000
C	1.359896000	0.618682000	-1.616445000
C	2.140591000	-1.604404000	-1.270451000
C	3.305562000	-1.338789000	-1.999238000
C	3.501923000	-0.050080000	-2.534524000
C	2.515478000	0.939037000	-2.336830000
C	-0.731301000	2.528679000	2.219520000
C	-0.267582000	1.990448000	3.441114000
C	-1.772557000	3.487277000	2.296616000
C	-2.313164000	3.855888000	3.531026000
C	-0.833107000	2.390547000	4.658069000
N	-1.842592000	3.308593000	4.692605000
O	-0.617135000	-2.796672000	-0.218434000
O	0.035158000	-3.471141000	0.781873000
C	0.459586000	-1.119873000	1.916779000
H	0.957234000	-1.769388000	2.663938000
H	0.381897000	-2.516312000	1.389195000
H	-0.427618000	-0.732125000	2.448386000
H	1.205280000	-0.333770000	1.746811000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	-5.200793000	-0.071665000	-3.535519000
H	-4.254756000	1.804464000	-2.167197000
H	-4.103643000	-2.340110000	-3.434916000
H	-2.100896000	-2.650748000	-1.971257000
H	-2.594228000	1.620772000	0.541600000
H	-2.186117000	2.632252000	-0.857056000
H	0.517044000	2.606615000	-1.526497000
H	-0.500518000	1.398559000	-2.307448000
H	1.961281000	-2.584342000	-0.844127000
H	4.038381000	-2.126311000	-2.139669000
H	4.402344000	0.179834000	-3.096689000
H	2.643416000	1.935033000	-2.750190000
C	-2.404463000	3.770233000	6.014793000
H	-2.149951000	3.995560000	1.415359000
H	-3.097922000	4.598999000	3.618629000
H	-0.480954000	2.006784000	5.608830000
H	0.558910000	1.290610000	3.479987000
H	-2.216624000	3.008585000	6.773613000
H	-1.918554000	4.707932000	6.301678000
H	-3.481704000	3.921272000	5.916425000
C	0.006377000	2.267411000	0.900817000
H	0.127945000	3.244808000	0.413948000
H	1.009555000	1.887258000	1.110463000

Cr(II)LK6 ³2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Cr	-0.471437000	-0.649883000	-0.833155000
C	-5.185072000	-0.066824000	-1.706366000
C	-4.307356000	1.028632000	-1.596845000
C	-4.699425000	-1.367776000	-1.455482000
C	-3.352923000	-1.533533000	-1.121942000
C	-2.969298000	0.805099000	-1.242160000
N	-2.496268000	-0.465992000	-1.019596000
C	-1.998491000	1.961659000	-1.068265000
N	-0.580036000	1.489930000	-0.762177000
C	0.325591000	1.743355000	-1.988364000
N	1.502571000	-0.238223000	-1.212259000
C	1.630059000	0.983604000	-1.832215000
C	2.602489000	-1.026524000	-1.032758000
C	3.867807000	-0.625373000	-1.485790000
C	4.001502000	0.616264000	-2.136517000
C	2.863562000	1.437065000	-2.304996000
C	-0.695511000	2.350975000	1.743554000
C	-1.730211000	1.511300000	2.206567000
C	-0.251150000	3.372407000	2.621221000
C	-0.818664000	3.522331000	3.884999000
C	-2.276503000	1.701711000	3.481769000
N	-1.822752000	2.691203000	4.303549000
O	-0.519040000	-2.291574000	-1.728669000
O	0.542245000	-3.209946000	-1.695606000
C	-0.220480000	-1.453698000	1.001598000
H	0.397642000	-2.349093000	0.880795000
H	0.327941000	-3.881626000	-2.404593000
H	-1.210301000	-1.713044000	1.390937000
H	0.291198000	-0.699586000	1.610717000
H	-6.223257000	0.088876000	-1.984765000
H	-4.662069000	2.037593000	-1.786955000
H	-5.346948000	-2.234749000	-1.530901000
H	-2.934778000	-2.518269000	-0.947381000
H	-2.346948000	2.605996000	-0.255184000
H	-1.992172000	2.587004000	-1.969231000
H	0.498514000	2.818738000	-2.113823000
H	-0.220866000	1.398614000	-2.877438000
H	2.458857000	-1.977854000	-0.535040000
H	4.723446000	-1.274235000	-1.332408000
H	4.970387000	0.943983000	-2.501712000
H	2.946446000	2.400460000	-2.798906000
C	-2.412812000	2.888589000	5.676997000

H	0.537311000	4.062382000	2.335642000
H	-0.496613000	4.294345000	4.575282000
H	-3.072330000	1.073117000	3.863633000
H	-2.133603000	0.704282000	1.607720000
H	-1.628499000	2.756013000	6.427349000
H	-2.833577000	3.895448000	5.746366000
H	-3.201851000	2.153599000	5.842884000
C	0.040327000	2.248979000	0.408238000
H	0.229388000	3.275969000	0.063014000
H	1.021623000	1.797372000	0.598083000

Fe(II)LK7 ⁷1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Fe	-1.366847000	-1.123254000	0.929881000
C	-1.522552000	2.136442000	4.480987000
C	-1.455344000	2.490611000	3.117817000
C	-1.539512000	0.773022000	4.838690000
C	-1.485213000	-0.189953000	3.826339000
C	-1.417332000	1.484125000	2.145283000
N	-1.427778000	0.156054000	2.501996000
C	-1.467298000	1.809307000	0.658381000
N	-0.813128000	0.721289000	-0.185627000
C	-1.504998000	0.467741000	-1.519716000
N	-1.353715000	-1.930197000	-0.932487000
C	-1.385403000	-0.991784000	-1.938291000
C	-1.338156000	-3.263877000	-1.248359000
C	-1.361103000	-3.706990000	-2.574758000
C	-1.391993000	-2.751323000	-3.609947000
C	-1.398249000	-1.379303000	-3.282842000
O	-3.827536000	-0.916148000	0.751927000
O	-5.072886000	-1.102854000	0.845364000
H	-1.562781000	2.906403000	5.245909000
H	-1.447364000	3.535746000	2.823457000
H	-1.595113000	0.463570000	5.876842000
H	-1.493574000	-1.247188000	4.063788000
H	-0.999901000	2.781441000	0.471424000
H	-2.516941000	1.888504000	0.346828000
H	-1.103854000	1.118389000	-2.302843000
H	-2.566457000	0.718421000	-1.399153000
H	-1.313377000	-3.970631000	-0.426469000
H	-1.357935000	-4.770238000	-2.789461000
H	-1.412147000	-3.067085000	-4.648934000
H	-1.428023000	-0.629632000	-4.067563000
C	0.603037000	0.938333000	-0.351232000
C	1.605097000	1.698927000	-0.987454000
C	1.921062000	0.583908000	-0.042003000
N	2.713278000	-0.227284000	0.639344000
N	1.866600000	2.692399000	-1.812139000
C	2.063802000	-1.388323000	1.372539000
C	2.567694000	-2.738292000	0.821374000
C	2.219078000	-1.266194000	2.902018000
H	0.984005000	-1.307203000	1.128306000
H	2.037069000	-3.562787000	1.313110000
H	2.414540000	-2.817898000	-2.260810000
H	3.632968000	-2.886142000	1.026445000
H	1.671955000	-2.079939000	3.393694000
H	3.263678000	-1.364335000	3.213643000
H	1.839746000	-0.308931000	3.277378000
C	0.685601000	3.558586000	-2.265763000
C	0.891462000	5.025886000	-1.836931000
C	0.419690000	3.409202000	-3.777100000
H	-0.183096000	3.168269000	-1.718778000
H	-0.493347000	3.957251000	-4.037212000
H	1.225927000	3.833071000	-4.384442000
H	0.288277000	2.360240000	-4.072915000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	-0.012411000	5.598875000	-2.074618000
H	1.078983000	5.115141000	-0.760428000
H	1.719181000	5.503586000	-2.371143000
C	3.216397000	3.030517000	-2.442329000
C	3.684432000	1.884678000	-3.362128000
C	4.259177000	3.501657000	-1.414398000
C	4.218868000	-0.065005000	0.848872000
C	5.025162000	-0.209704000	-0.453009000
C	4.517301000	1.216922000	1.652211000
H	2.989139000	3.888384000	-3.079474000
H	4.645458000	2.152646000	-3.814927000
C	3.823056000	0.942307000	-2.823015000
H	2.971674000	1.713930000	-4.176398000
H	5.124380000	3.904686000	-1.952886000
H	3.864946000	4.302636000	-0.778863000
H	4.624083000	2.692244000	-0.779977000
H	4.482732000	-0.917713000	1.479894000
H	6.089223000	-0.280364000	-0.200290000
H	4.755095000	-1.121629000	-0.997919000
H	4.909804000	0.647440000	-1.117651000
H	5.599167000	1.311110000	1.797744000
H	4.172346000	2.120439000	1.140296000
H	4.051595000	1.185278000	2.643421000
C	-1.723082000	-3.554879000	2.382351000
H	-1.840162000	-3.643289000	3.465886000
H	-0.718456000	-3.148653000	2.171380000
H	-2.557864000	-2.944674000	1.998636000
H	-1.795082000	-4.550995000	1.937401000

Fe(II)LK7 ⁵TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Fe	-1.398057000	-1.030759000	0.904189000
C	-1.360207000	2.136295000	4.449923000
C	-1.408175000	2.497477000	3.087230000
C	-1.256751000	0.774452000	4.798263000
C	-1.218474000	-0.185111000	3.781642000
C	-1.376346000	1.497791000	2.110960000
N	-1.287591000	0.165647000	2.460695000
C	-1.508880000	1.791557000	0.630863000
N	-0.839614000	0.670133000	-0.179126000
C	-1.514377000	0.403396000	-1.532989000
N	-1.234053000	-1.935226000	-0.834994000
C	-1.341408000	-1.057912000	-1.895509000
C	-1.113155000	-3.276960000	-1.073237000
C	-1.119571000	-3.794120000	-2.372891000
C	-1.249022000	-2.907435000	-3.460708000
C	-1.348317000	-1.521892000	-3.213490000
O	-3.436942000	-0.529229000	0.557479000
O	-4.160679000	-1.500485000	1.168605000
H	-1.400611000	2.900075000	5.221131000
H	-1.482843000	3.541275000	2.797985000
H	-1.213378000	0.459741000	5.835526000
H	-1.139359000	-1.237979000	4.019229000
H	-1.068781000	2.761125000	0.381808000
H	-2.569476000	1.815887000	0.353504000
H	-1.098283000	1.053557000	-2.307254000
H	-2.580639000	0.635631000	-1.427487000
H	-1.018853000	-3.933634000	-0.217892000
H	-1.034222000	-4.864755000	-2.525377000
H	-1.269099000	-3.285277000	-4.478845000
H	-1.443355000	-0.822523000	-4.038374000
C	0.584064000	0.895157000	-0.333724000
C	1.572574000	1.679617000	-0.961603000
C	1.907647000	0.545410000	-0.041153000
N	2.711860000	-0.274577000	0.611694000
N	1.816964000	2.689807000	-1.768557000
C	2.079657000	-1.463072000	1.320055000
C	2.567490000	-2.789805000	0.702444000

C	2.279209000	-1.401068000	2.847644000
H	0.994997000	-1.373781000	1.111425000
H	2.056214000	-3.633013000	1.182731000
H	2.377248000	-2.830920000	-0.376103000
H	3.639583000	-2.942021000	0.864582000
H	1.742822000	-2.232952000	3.320625000
H	3.330851000	-1.514636000	3.128456000
H	1.913931000	-0.458759000	3.271445000
C	0.622311000	3.541169000	-2.221461000
C	0.788193000	5.001150000	-1.752596000
C	0.384191000	3.422568000	-3.740024000
H	-0.246547000	3.117148000	-1.700642000
H	-0.537210000	3.956344000	-4.000276000
H	1.188976000	3.879793000	-4.324505000
H	0.280047000	2.378934000	-4.063859000
H	-0.124949000	5.559215000	-1.990316000
H	0.958268000	5.068339000	-0.671484000
H	1.612091000	5.510835000	-2.262483000
C	3.166924000	3.072807000	-2.378317000
C	3.661433000	1.965390000	-3.330487000
C	4.188910000	3.533550000	-1.325511000
C	4.221817000	-0.112335000	0.805809000
C	5.011840000	-0.188230000	-0.511253000
C	4.523188000	1.132454000	1.664675000
H	2.926698000	3.945649000	-2.989649000
H	4.620660000	2.265298000	-3.766834000
H	3.812871000	1.008371000	-2.822137000
H	2.958312000	1.809688000	-4.155891000
H	5.056846000	3.957643000	-1.842949000
H	3.776066000	4.317309000	-0.680382000
H	4.554446000	2.716437000	-0.701467000
H	4.497285000	-0.993255000	1.391142000
H	6.077551000	-0.281490000	-0.273182000
H	4.730156000	-1.065258000	-1.105396000
H	4.898215000	0.707879000	-1.121963000
H	5.606486000	1.225892000	1.799807000
H	4.167040000	2.056724000	1.199123000
H	4.071843000	1.053010000	2.659705000
C	-2.044126000	-2.822015000	2.030765000
H	-2.374738000	-2.809704000	3.077619000
H	-0.937569000	-2.842520000	2.073417000
H	-3.194309000	-2.173529000	1.608103000
H	-2.338348000	-3.764879000	1.552441000

Fe(II)LK7 ⁵2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Fe	-1.604837000	-1.042812000	0.833045000
C	-1.234083000	2.249665000	4.337998000
C	-1.310505000	2.568674000	2.966773000
C	-1.191866000	0.896462000	4.725954000
C	-1.236835000	-0.093308000	3.737734000
C	-1.361967000	1.539201000	2.020939000
N	-1.328666000	0.217429000	2.409210000
C	-1.530540000	1.810624000	0.534937000
N	-0.860786000	0.706271000	-0.273272000
C	-1.493523000	0.425441000	-1.629702000
N	-1.217201000	-1.932546000	-0.956921000
C	-1.263670000	-1.031718000	-1.999717000
C	-1.047368000	-3.264162000	-1.220639000
C	-0.940790000	-3.748644000	-2.529158000
C	-1.005672000	-2.837178000	-3.601093000
C	-1.158531000	-1.462563000	-3.326286000
O	-3.519530000	-0.831330000	0.535710000
O	-4.354237000	-0.256240000	1.517722000
H	-1.206358000	3.038151000	5.084304000
H	-1.340679000	3.605204000	2.645052000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	-1.130359000	0.610595000	5.770578000	C	-1.417653000	1.505608000	2.102774000
H	-1.204300000	-1.141326000	4.008785000	N	-1.345553000	0.182455000	2.461705000
H	-1.123748000	2.793600000	0.278524000	C	-1.515138000	1.807097000	0.614972000
H	-2.597582000	1.814250000	0.279198000	N	-0.841113000	0.711628000	-0.209770000
H	-1.090339000	1.084816000	-2.404244000	C	-1.516093000	0.419309000	-1.548021000
H	-2.569619000	0.623181000	-1.547402000	N	-1.256992000	-1.936852000	-0.871902000
H	-1.002654000	-3.942842000	-0.377609000	C	-1.358023000	-1.049002000	-1.914995000
H	-0.817397000	-4.812732000	-2.700095000	C	-1.187759000	-3.276532000	-1.128906000
H	-0.935337000	-3.187325000	-4.626750000	C	-1.231108000	-3.779591000	-2.435382000
H	-1.205431000	-0.742520000	-4.137431000	C	-1.338411000	-2.875759000	-3.510040000
C	0.563205000	0.914355000	-0.389247000	C	-1.394896000	-1.492528000	-3.241988000
C	1.574876000	1.689817000	-0.990051000	O	-3.710547000	-0.752814000	0.676364000
C	1.876884000	0.551017000	-0.067601000	O	-4.927283000	-1.042004000	0.850384000
N	2.662004000	-0.277575000	0.599436000	H	-1.572236000	2.934543000	5.198221000
N	1.847280000	2.701615000	-1.789714000	H	-1.547066000	3.557847000	2.769981000
C	2.005725000	-1.466239000	1.284409000	H	-1.452411000	0.496286000	5.834995000
C	2.502508000	-2.790077000	0.666477000	H	-1.295406000	-1.214117000	4.025524000
C	2.181787000	-1.419489000	2.815962000	H	-1.076511000	2.784039000	0.390201000
H	0.930428000	-1.367321000	1.057674000	H	-2.571070000	1.843269000	0.319736000
H	1.979617000	-3.635629000	1.130177000	H	-1.108884000	1.059711000	-2.336147000
H	2.330013000	-2.822170000	-0.415440000	H	-2.581087000	0.660430000	-1.444885000
H	3.571157000	-2.947723000	0.845399000	H	-1.103813000	-3.943563000	-0.279870000
H	1.628793000	-2.249820000	3.272655000	H	-1.185349000	-4.850423000	-2.602189000
H	3.226934000	-1.544952000	3.115367000	H	-1.377114000	-3.238347000	-4.532954000
H	1.816012000	-0.478041000	3.241101000	H	-1.480882000	-0.779080000	-4.055924000
C	0.671683000	3.563990000	-2.262792000	C	0.577310000	0.936402000	-0.361936000
C	0.839047000	5.020624000	-1.783637000	C	1.581380000	1.705302000	-0.983900000
C	0.463482000	3.456111000	-3.786760000	C	1.891709000	0.574172000	-0.053638000
H	-0.211832000	3.144984000	-1.763545000	N	2.670517000	-0.258027000	0.616717000
H	-0.447194000	3.999847000	-4.063729000	N	1.843919000	2.709186000	-1.792951000
H	1.284971000	3.907797000	-4.352110000	C	2.003715000	-1.420021000	1.332569000
H	0.356188000	2.414799000	-4.116897000	C	2.440556000	-2.765875000	0.720201000
H	-0.062535000	5.589139000	-2.040021000	C	2.199093000	-1.354628000	2.859759000
H	0.984457000	5.080151000	-0.698465000	H	0.914919000	-1.294464000	1.124516000
H	1.680343000	5.524248000	-2.270776000	H	1.907333000	-3.590130000	1.209040000
C	3.211116000	3.071212000	-2.369441000	H	2.243007000	-2.806232000	-0.356774000
C	3.715052000	1.961581000	-3.314461000	H	3.508845000	-2.948606000	0.877004000
C	4.216690000	3.519112000	-1.295244000	H	1.636637000	-2.165930000	3.337383000
C	4.165346000	-0.124548000	0.826995000	H	3.246859000	-1.499124000	3.141483000
C	4.986689000	-0.203865000	-0.470881000	H	1.862158000	-0.398960000	3.275927000
C	4.456076000	1.116670000	1.695111000	C	0.659449000	3.565422000	-2.261032000
H	2.995089000	3.948312000	-2.983908000	C	0.826885000	5.024991000	-1.791288000
H	4.687063000	2.251179000	-3.728996000	C	0.439965000	3.446337000	-3.782285000
H	3.843564000	1.001285000	-2.806000000	H	-0.217524000	3.145334000	-1.750201000
H	3.027673000	1.816448000	-4.155032000	H	-0.473867000	3.986764000	-4.055209000
H	5.100390000	3.934099000	-1.793022000	H	1.256007000	3.896460000	-4.356689000
H	3.798186000	4.306104000	-0.657664000	H	0.331790000	2.402936000	-4.105111000
H	4.558824000	2.697319000	-0.664289000	H	-0.079995000	5.587867000	-2.041228000
H	4.423833000	-1.007352000	1.417157000	H	0.983080000	5.091820000	-0.708080000
H	6.046149000	-0.302479000	-0.208232000	H	1.660287000	5.529709000	-2.290657000
H	4.713867000	-1.079490000	-1.071238000	C	3.204093000	3.079625000	-2.384405000
H	4.891589000	0.692146000	-1.084779000	C	3.698990000	1.971261000	-3.335311000
H	5.536744000	1.205660000	1.852575000	C	4.218158000	3.520666000	-1.315661000
H	4.112239000	2.043693000	1.225758000	C	4.182975000	-0.133657000	0.819655000
H	3.983578000	1.035592000	2.680222000	C	4.974432000	-0.226423000	-0.495485000
C	-1.962824000	-2.792284000	1.951992000	C	4.511587000	1.103653000	1.679168000
H	-2.603412000	-2.423112000	2.754962000	H	2.982704000	3.958738000	-2.993982000
H	-0.959275000	-3.111092000	2.247321000	H	4.664646000	2.264763000	-3.761762000
H	-5.284778000	-0.458675000	1.217909000	H	3.838006000	1.011832000	-2.827789000
H	-2.486800000	-3.447151000	1.255055000	H	3.002345000	1.822694000	-4.167423000

Ni(II)LK7 ⁵1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Ni	-1.267472000	-1.022060000	0.888057000
C	-1.505925000	2.164924000	4.434939000
C	-1.489810000	2.515731000	3.069569000
C	-1.437808000	0.804981000	4.795213000
C	-1.352150000	-0.160107000	3.784183000

H	4.880929000	0.672493000	-1.105779000
H	5.596039000	1.167759000	1.822138000
H	4.184038000	2.036015000	1.208896000
H	4.050490000	1.039085000	2.670704000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	-1.715184000	-3.374629000	2.364042000
H	-1.830719000	-3.452333000	3.448309000
H	-0.712611000	-2.963178000	2.148377000
H	-2.547508000	-2.770173000	1.972106000
H	-1.782967000	-4.374141000	1.927208000

Ni(II)LK7 ⁵TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Ni	2.275538000	0.173749000	0.042389000
C	2.033684000	-4.029217000	-2.193125000
C	1.313607000	-2.884129000	-2.589033000
C	2.860803000	-3.955814000	-1.056999000
C	2.953157000	-2.743924000	-0.360234000
C	1.450124000	-1.696542000	-1.860459000
N	2.271914000	-1.630523000	-0.757528000
C	0.761763000	-0.408414000	-2.274351000
N	0.493981000	0.452728000	-1.045599000
C	0.541989000	1.956278000	-1.292627000
N	1.877270000	1.961547000	0.778122000
C	1.002099000	2.657487000	-0.026694000
C	2.348139000	2.541165000	1.919971000
C	1.987504000	3.843288000	2.290488000
C	1.111265000	4.570641000	1.463527000
C	0.606417000	3.960218000	0.297640000
O	2.928287000	0.937213000	-1.633436000
O	4.298728000	1.100610000	-1.733842000
H	1.947476000	-4.954472000	-2.754971000
H	0.663184000	-2.917068000	-3.457826000
H	3.427325000	-4.815100000	-0.714418000
H	3.579955000	-2.664853000	0.518511000
H	-0.163341000	-0.624324000	-2.817588000
H	1.413999000	0.163830000	-2.945782000
H	-0.431290000	2.339301000	-1.613312000
H	1.256080000	2.141937000	-2.103708000
H	3.019440000	1.961815000	2.540858000
H	2.390116000	4.271812000	3.202055000
H	0.823270000	5.585343000	1.721782000
H	-0.077723000	4.497664000	-0.351795000
C	-0.721908000	0.064887000	-0.369846000
C	-2.129887000	0.072665000	-0.414223000
C	-1.365046000	-0.520784000	0.726949000
N	-1.222571000	-1.120558000	1.896346000
N	-3.199710000	0.415099000	-1.103064000
C	0.179253000	-1.193117000	2.481359000
C	0.261511000	-0.391622000	3.796894000
C	0.668426000	-2.647334000	2.633672000
H	0.825975000	-0.690320000	1.738141000
H	1.290884000	-0.404003000	4.175429000
H	-0.048565000	0.650272000	3.657393000
H	-0.365019000	-0.831290000	4.579986000
H	1.708658000	-2.647760000	2.981701000
H	0.092402000	-3.198722000	3.383412000
H	0.614252000	-3.198693000	1.688303000
C	-2.982661000	0.947569000	-2.524071000
C	-3.675406000	0.035984000	-3.557712000
C	-3.408292000	2.424272000	-2.648689000
H	-1.899441000	0.884301000	-2.692605000
H	-3.138520000	2.792603000	-3.645298000
H	-4.490371000	2.555109000	-2.546063000
H	-2.916911000	3.061035000	-1.901774000
H	-3.414841000	0.375110000	-4.567120000
H	-3.361662000	-1.009718000	-3.456433000
H	-4.766907000	0.076005000	-3.482008000
C	-4.645677000	0.414773000	-0.611073000
C	-4.830598000	1.443191000	0.523104000
C	-5.171558000	-0.997137000	-0.301872000
C	-2.315174000	-1.829529000	2.696626000
C	-3.423981000	-0.879899000	3.180307000

C	-2.821856000	-3.071082000	1.934911000
H	-5.206592000	0.778600000	-1.475132000
H	-5.875893000	1.437374000	0.851468000
H	-4.207253000	1.224915000	1.395496000
H	-4.598106000	2.456963000	0.179168000
H	-6.252045000	-0.939123000	-0.128406000
H	-5.009579000	-1.679009000	-1.144364000
H	-4.724351000	-1.429794000	0.594546000
H	-1.789725000	-2.180653000	3.588304000
H	-4.042473000	-1.410135000	3.913449000
H	-3.012101000	0.006215000	3.677039000
H	-4.085990000	-0.561053000	2.374627000
H	-3.596353000	-3.570360000	2.527733000
H	-3.260459000	-2.815002000	0.965403000
H	-2.016214000	-3.794073000	1.766448000
C	4.013521000	0.088781000	0.665832000
H	4.747513000	-0.438347000	0.058354000
H	3.481221000	-0.534787000	1.391151000
H	4.382389000	0.674839000	-0.550914000
H	4.402914000	1.022094000	1.070527000

Ni(II)LK7 ³2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Ni	-1.432134000	-0.985594000	0.826399000
C	-1.265726000	2.183512000	4.384136000
C	-1.326654000	2.533577000	3.020179000
C	-1.228181000	0.821981000	4.737751000
C	-1.264208000	-0.145069000	3.724633000
C	-1.368941000	1.525410000	2.049791000
N	-1.344679000	0.195363000	2.405822000
C	-1.508448000	1.831086000	0.569199000
N	-0.846923000	0.729803000	-0.250012000
C	-1.497023000	0.453622000	-1.600690000
N	-1.242998000	-1.899166000	-0.915806000
C	-1.293784000	-1.006920000	-1.964059000
C	-1.084045000	-3.229724000	-1.172109000
C	-0.996769000	-3.725436000	-2.479693000
C	-1.070031000	-2.824023000	-3.557919000
C	-1.208636000	-1.447116000	-3.289887000
O	-3.526451000	-0.588575000	0.411488000
O	-4.407236000	-0.928075000	1.409095000
H	-1.244132000	2.953907000	5.149141000
H	-1.349248000	3.577118000	2.721100000
H	-1.174857000	0.509154000	5.775054000
H	-1.232336000	-1.198032000	3.972696000
H	-1.080515000	2.811221000	0.337297000
H	-2.569706000	1.860033000	0.292133000
H	-1.090704000	1.104820000	-2.380224000
H	-2.567770000	0.671814000	-1.510180000
H	-1.029180000	-3.903822000	-0.326883000
H	-0.879621000	-4.791581000	-2.641824000
H	-1.015172000	-3.182211000	-4.581605000
H	-1.258693000	-0.731107000	-4.104433000
C	0.576580000	0.935839000	-0.379742000
C	1.588677000	1.699759000	-0.993364000
C	1.889429000	0.568315000	-0.061385000
N	2.669818000	-0.260268000	0.610779000
N	1.861705000	2.703371000	-1.802539000
C	2.006460000	-1.434689000	1.313170000
C	2.484695000	-2.770731000	0.708064000
C	2.187382000	-1.370902000	2.843061000
H	0.928452000	-1.329303000	1.090911000
H	1.954241000	-3.604602000	1.183835000
H	2.307473000	-2.813261000	-0.372650000
H	3.552365000	-2.937734000	0.884860000
H	1.627057000	-2.189547000	3.311102000
H	3.232538000	-1.503707000	3.139665000
H	1.832935000	-0.420702000	3.258041000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	0.687429000	3.568768000	-2.273565000
C	0.869370000	5.029401000	-1.812277000
C	0.464563000	3.445336000	-3.794252000
H	-0.193887000	3.161679000	-1.760441000
H	-0.444473000	3.992728000	-4.069379000
H	1.284461000	3.884681000	-4.371560000
H	0.347096000	2.401248000	-4.111913000
H	-0.031226000	5.600754000	-2.065846000
H	1.025773000	5.100041000	-0.729353000
H	1.708761000	5.522303000	-2.313445000
C	3.223858000	3.059082000	-2.394850000
C	3.714896000	1.937203000	-3.332123000
C	4.239472000	3.509697000	-1.331298000
C	4.176029000	-0.118329000	0.829442000
C	4.988736000	-0.217814000	-0.472425000
C	4.481742000	1.129597000	1.682432000
H	3.008997000	3.931646000	-3.016185000
H	4.685075000	2.217849000	-3.756957000
H	3.842950000	0.981714000	-2.814497000
H	3.020416000	1.786430000	-4.165825000
H	5.122524000	3.914493000	-1.838525000
H	3.830657000	4.304709000	-0.697415000
H	4.580376000	2.690623000	-0.695999000
H	4.429898000	-0.997237000	1.427372000
H	6.049000000	-0.321745000	-0.215094000
H	4.705648000	-1.097570000	-1.061889000
H	4.896749000	0.672572000	-1.095177000
H	5.563740000	1.209096000	1.835784000
H	4.146297000	2.054602000	1.203158000
H	4.011204000	1.064861000	2.669640000
C	-1.914308000	-2.644478000	1.858009000
H	-2.544157000	-2.293895000	2.674001000
H	-0.938514000	-3.036076000	2.162491000
H	-5.332386000	-0.750471000	1.063869000
H	-2.457685000	-3.275170000	1.155580000

Co(II)LK7 ⁶1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Co	-1.334236000	-1.243827000	0.909325000
C	-1.555247000	1.946284000	4.476451000
C	-1.509525000	2.298496000	3.111912000
C	-1.523078000	0.584055000	4.837059000
C	-1.445170000	-0.380236000	3.826827000
C	-1.447030000	1.290449000	2.142576000
N	-1.413244000	-0.037953000	2.501646000
C	-1.509921000	1.611904000	0.654734000
N	-0.816341000	0.539185000	-0.184557000
C	-1.475030000	0.274877000	-1.535142000
N	-1.280807000	-2.100772000	-0.898998000
C	-1.332280000	-1.188811000	-1.927037000
C	-1.225766000	-3.438278000	-1.184594000
C	-1.235345000	-3.912688000	-2.501140000
C	-1.290939000	-2.983370000	-3.558531000
C	-1.332317000	-1.604726000	-3.262799000
O	-3.855784000	-0.871310000	0.583640000
O	-5.082488000	-1.138320000	0.725291000
H	-1.614671000	2.716580000	5.239767000
H	-1.535615000	3.342475000	2.814575000
H	-1.558789000	0.275715000	5.876428000
H	-1.415012000	-1.435877000	4.067283000
H	-1.072021000	2.596258000	0.463146000
H	-2.560267000	1.653712000	0.339671000
H	-1.052307000	0.920670000	-2.310437000
H	-2.539686000	0.524342000	-1.444743000
H	-1.181824000	-4.124705000	-0.347744000
H	-1.202890000	-4.980232000	-2.690513000
H	-1.301440000	-3.323488000	-4.589908000
H	-1.377681000	-0.873559000	-4.064107000

C	0.600298000	0.785944000	-0.319451000
C	1.591297000	1.580911000	-0.929098000
C	1.922626000	0.451933000	-0.003716000
N	2.726777000	-0.356833000	0.664831000
N	1.837997000	2.595361000	-1.731936000
C	2.099847000	-1.552955000	1.363051000
C	2.642182000	-2.874594000	0.780719000
C	2.242155000	-1.466966000	2.896085000
H	1.021447000	-1.493719000	1.111911000
H	2.127516000	-3.724011000	1.246199000
H	2.498758000	-2.929627000	-0.304284000
H	3.709106000	-3.002328000	0.990713000
H	1.709983000	-2.305593000	3.361665000
H	3.286294000	-1.549776000	3.213527000
H	1.838116000	-0.528928000	3.293589000
C	0.641111000	3.436908000	-2.191611000
C	0.797978000	4.900967000	-1.732280000
C	0.406777000	3.307911000	-3.710047000
H	-0.226257000	3.012048000	-1.668723000
H	-0.515903000	3.836169000	-3.976990000
H	1.211989000	3.763927000	-4.295008000
H	0.308580000	2.261455000	-4.026722000
H	-0.117173000	5.453124000	-1.976001000
H	0.964279000	4.975291000	-0.651130000
H	1.621188000	5.411243000	-2.242784000
C	3.188584000	2.982917000	-2.332913000
C	3.701205000	1.870315000	-3.269602000
C	4.199314000	3.461459000	-1.276870000
C	4.226765000	-0.164469000	0.893984000
C	5.049501000	-0.244785000	-0.402887000
C	4.484714000	1.097836000	1.741522000
H	2.947832000	3.847811000	-2.955442000
H	4.660548000	2.174496000	-3.702731000
H	3.858277000	0.920450000	-2.749414000
H	3.004915000	1.698290000	-4.097699000
H	5.066718000	3.890493000	-1.791129000
H	3.773866000	4.245028000	-0.639790000
H	4.568108000	2.652066000	-0.644705000
H	4.504977000	-1.031012000	1.499320000
H	6.111622000	-0.306900000	-0.139971000
H	4.802145000	-1.139171000	-0.986230000
H	4.926731000	0.636276000	-1.033626000
H	5.562448000	1.213984000	1.901381000
H	4.122387000	2.008534000	1.254543000
H	4.010499000	1.023473000	2.726366000
C	-1.778505000	-3.596648000	2.337103000
H	-1.909815000	-3.691365000	3.418159000
H	-0.766638000	-3.193865000	2.145578000
H	-2.603410000	-2.977178000	1.947206000
H	-1.851075000	-4.587827000	1.882768000

Co(II)LK7 ⁴TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Co	2.276836000	0.115756000	-0.170204000
C	1.756766000	-4.242703000	-2.024524000
C	1.049675000	-3.110206000	-2.474451000
C	2.646785000	-4.102182000	-0.943798000
C	2.815829000	-2.841397000	-0.357876000
C	1.264702000	-1.874121000	-1.855547000
N	2.146315000	-1.740270000	-0.807676000
C	0.605763000	-0.599245000	-2.331631000
N	0.431326000	0.352961000	-1.149104000
C	0.493626000	1.828357000	-1.542825000
N	1.962749000	1.970825000	0.412859000
C	1.056312000	2.627648000	-0.387844000
C	2.539523000	2.638216000	1.454728000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	2.253454000	3.983337000	1.720974000
C	1.342622000	4.666683000	0.894319000
C	0.729075000	3.969506000	-0.165754000
O	3.008007000	0.969961000	-1.586703000
O	4.393264000	0.880282000	-1.287458000
H	1.614326000	-5.207323000	-2.502401000
H	0.351735000	-3.189558000	-3.302260000
H	3.206397000	-4.948486000	-0.559878000
H	3.494849000	-2.719957000	0.474494000
H	-0.353181000	-0.808352000	-2.814937000
H	1.250865000	-0.101037000	-3.065590000
H	-0.492974000	2.200413000	-1.834719000
H	1.156134000	1.913022000	-2.412689000
H	3.236096000	2.098096000	2.080973000
H	2.741915000	4.478689000	2.553304000
H	1.112604000	5.713019000	1.071628000
H	0.017085000	4.470224000	-0.814560000
C	-0.755739000	0.055464000	-0.383237000
C	-2.165033000	0.066048000	-0.342690000
C	-1.326688000	-0.397130000	0.807394000
N	-1.085852000	-0.860289000	2.022536000
N	-3.276400000	0.334135000	-0.994641000
C	0.363861000	-0.886134000	2.474114000
C	0.590626000	0.097910000	3.639235000
C	0.849989000	-2.314560000	2.787068000
H	0.941698000	-0.513887000	1.597405000
H	1.651223000	0.113492000	3.918430000
H	0.278381000	1.115313000	3.378950000
H	0.037942000	-0.207969000	4.533798000
H	1.918069000	-2.295792000	3.036354000
H	0.340278000	-2.735141000	3.659544000
H	0.697205000	-2.994205000	1.941875000
C	-3.150553000	0.731748000	-2.471168000
C	-3.848823000	-0.307299000	-3.372322000
C	-3.648288000	2.169701000	-2.717279000
H	-2.074162000	0.698773000	-2.686636000
H	-3.442439000	2.445199000	-3.758137000
H	-4.729098000	2.266469000	-2.573126000
H	-3.149775000	2.897548000	-2.064858000
H	-3.654214000	-0.060445000	-4.422506000
H	-3.482845000	-1.324026000	-3.185384000
H	-4.936006000	-0.305116000	-3.242873000
C	-4.693112000	0.347155000	-0.422484000
C	-4.859449000	1.502210000	0.585705000
C	-5.137583000	-1.032159000	0.091776000
C	-2.104507000	-1.435143000	3.007930000
C	-3.179807000	-0.416407000	3.420695000
C	-2.661281000	-2.777275000	2.491000000
H	-5.314980000	0.577290000	-1.290667000
H	-5.883441000	1.498332000	0.975568000
H	-4.178628000	1.417224000	1.438196000
H	-4.692257000	2.473483000	0.108047000
H	-6.210027000	-0.995258000	0.313592000
H	-4.984753000	-1.811197000	-0.663857000
H	-4.629197000	-1.325124000	1.012118000
H	-1.507740000	-1.644197000	3.899796000
H	-3.738434000	-0.823893000	4.270951000
H	-2.738236000	0.534105000	3.742121000
H	-3.902145000	-0.223945000	2.626633000
H	-3.377693000	-3.176343000	3.217719000
H	-3.183616000	-2.670657000	1.535280000
H	-1.867354000	-3.521551000	2.366414000
C	3.866014000	-0.184762000	0.961631000
H	4.403381000	-1.079105000	0.651462000
H	3.000114000	-0.372379000	1.606501000
H	4.435134000	0.254711000	-0.206066000
H	4.543515000	0.581084000	1.332144000

Co(II)LK7 ⁴2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Co	-1.526790000	-1.029555000	0.843458000
C	-1.215746000	2.165068000	4.388635000
C	-1.299419000	2.522425000	3.027061000
C	-1.169510000	0.801724000	4.737974000
C	-1.218493000	-0.160603000	3.722358000
C	-1.356782000	1.518821000	2.053758000
N	-1.322855000	0.187452000	2.404900000
C	-1.510967000	1.824793000	0.573731000
N	-0.859388000	0.721387000	-0.246932000
C	-1.499504000	0.451877000	-1.600967000
N	-1.210075000	-1.898372000	-0.922597000
C	-1.277108000	-1.005442000	-1.970477000
C	-1.013677000	-3.226686000	-1.178686000
C	-0.909240000	-3.718008000	-2.485319000
C	-1.001485000	-2.815676000	-3.562852000
C	-1.174894000	-1.442004000	-3.295578000
O	-3.621940000	-0.532370000	0.332315000
O	-4.489118000	-0.585846000	1.400551000
H	-1.183310000	2.932392000	5.156483000
H	-1.327225000	3.567582000	2.734225000
H	-1.100636000	0.486638000	5.773670000
H	-1.184889000	-1.216252000	3.961151000
H	-1.081940000	2.804114000	0.339516000
H	-2.574569000	1.858575000	0.306356000
H	-1.093973000	1.109211000	-2.375980000
H	-2.573165000	0.659888000	-1.518395000
H	-0.950781000	-3.897587000	-0.330947000
H	-0.766094000	-4.780588000	-2.650006000
H	-0.933532000	-3.171504000	-4.586700000
H	-1.236547000	-0.727384000	-4.110501000
C	0.566175000	0.920557000	-0.371185000
C	1.576405000	1.686269000	-0.985646000
C	1.881564000	0.556186000	-0.053716000
N	2.672847000	-0.264611000	0.615143000
N	1.846417000	2.690919000	-1.795876000
C	2.028017000	-1.450499000	1.317183000
C	2.531986000	-2.777682000	0.712604000
C	2.211740000	-1.384868000	2.847032000
H	0.951689000	-1.362590000	1.095327000
H	2.015340000	-3.620357000	1.188157000
H	2.355558000	-2.823660000	-0.368239000
H	3.602228000	-2.926723000	0.889571000
H	1.662426000	-2.211172000	3.314842000
H	3.258611000	-1.503649000	3.143397000
H	1.844673000	-0.439707000	3.262900000
C	0.671474000	3.558097000	-2.260257000
C	0.859936000	5.019359000	-1.803414000
C	0.436862000	3.432829000	-3.779159000
H	-0.207307000	3.154773000	-1.740171000
H	-0.473667000	3.980632000	-4.048506000
H	1.252802000	3.870374000	-4.363388000
H	0.316379000	2.388325000	-4.094559000
H	-0.040840000	5.592580000	-2.052135000
H	1.023809000	5.091736000	-0.721717000
H	1.697322000	5.509031000	-2.311066000
C	3.204289000	3.044096000	-2.398963000
C	3.690578000	1.916525000	-3.331956000
C	4.227011000	3.505479000	-1.346739000
C	4.176712000	-0.101902000	0.832037000
C	4.992309000	-0.204391000	-0.467925000
C	4.466906000	1.156294000	1.675362000
H	2.984040000	3.911577000	-3.025504000
H	4.659162000	2.193699000	-3.762654000
H	3.819857000	0.963733000	-2.809738000
H	2.992123000	1.761951000	-4.161718000
H	5.104304000	3.910041000	-1.864114000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	3.820394000	4.303399000	-0.715108000
H	4.576156000	2.692490000	-0.708431000
H	4.441081000	-0.972085000	1.437941000
H	6.053436000	-0.293363000	-0.208504000
H	4.720183000	-1.093465000	-1.048486000
H	4.890586000	0.677920000	-1.100360000
H	5.548043000	1.253267000	1.824661000
H	4.115675000	2.073138000	1.191779000
H	4.000632000	1.090307000	2.664571000
C	-2.036994000	-2.705908000	1.855983000
H	-2.677446000	-2.337949000	2.660564000
H	-1.083150000	-3.127473000	2.188978000
H	-5.419026000	-0.512338000	1.032185000
H	-2.581565000	-3.329119000	1.144693000

Mn(II)LK7⁶1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Mn	-1.301893000	-1.082544000	0.909786000
C	-1.456048000	2.141662000	4.476505000
C	-1.437351000	2.489602000	3.110262000
C	-1.418615000	0.780679000	4.838524000
C	-1.364318000	-0.187080000	3.829096000
C	-1.393960000	1.475743000	2.146778000
N	-1.356532000	0.145863000	2.501607000
C	-1.481763000	1.768191000	0.661047000
N	-0.831819000	0.633664000	-0.149022000
C	-1.507698000	0.406288000	-1.510663000
N	-1.288719000	-1.960451000	-0.900461000
C	-1.359745000	-1.045077000	-1.927220000
C	-1.228817000	-3.293698000	-1.201416000
C	-1.249838000	-3.759161000	-2.521420000
C	-1.328292000	-2.824432000	-3.572181000
C	-1.377244000	-1.448483000	-3.266384000
O	-3.984876000	-0.618384000	0.593901000
O	-5.241883000	-0.730574000	0.661008000
H	-1.499766000	2.913830000	5.238893000
H	-1.469464000	3.532351000	2.809324000
H	-1.433776000	0.474624000	5.879091000
H	-1.330072000	-1.240833000	4.076547000
H	-1.016416000	2.728730000	0.421653000
H	-2.535243000	1.825082000	0.360241000
H	-1.094151000	1.078123000	-2.267663000
H	-2.570775000	0.650075000	-1.394343000
H	-1.167708000	-3.987702000	-0.372189000
H	-1.210516000	-4.825136000	-2.718338000
H	-1.350966000	-3.158109000	-4.605417000
H	-1.441683000	-0.711980000	-4.061424000
C	0.593586000	0.861910000	-0.314200000
C	1.574557000	1.648000000	-0.950270000
C	1.921943000	0.528238000	-0.019212000
N	2.741696000	-0.271521000	0.639871000
N	1.815815000	2.652309000	-1.767517000
C	2.136840000	-1.469345000	1.355029000
C	2.689467000	-2.789260000	0.778742000
C	2.292010000	-1.368110000	2.885907000
H	1.056744000	-1.426378000	1.112244000
H	2.185391000	-3.639804000	1.253555000
H	2.539335000	-2.854044000	-0.304786000
H	3.758693000	-2.905530000	0.983393000
H	1.774135000	-2.209265000	3.363044000
H	3.339719000	-1.436161000	3.195055000
H	1.880136000	-0.431784000	3.279346000
C	0.623700000	3.507515000	-2.214524000
C	0.814376000	4.975237000	-1.780284000
C	0.355211000	3.360846000	-3.725789000
H	-0.239602000	3.106251000	-1.667522000

H	-0.566117000	3.897476000	-3.980445000
H	1.153167000	3.798688000	-4.334011000
H	0.237588000	2.311682000	-4.026671000
H	-0.096427000	5.538896000	-2.013829000
H	1.003742000	5.062889000	-0.703964000
H	1.635161000	5.464213000	-2.314886000
C	3.158859000	3.013283000	-2.403524000
C	3.641773000	1.874158000	-3.323958000
C	4.194864000	3.509469000	-1.380591000
C	4.244006000	-0.066231000	0.847929000
C	5.054840000	-0.170681000	-0.454774000
C	4.503544000	1.212690000	1.669393000
H	2.912536000	3.864919000	-3.041798000
H	4.599463000	2.154871000	-3.776092000
H	3.791727000	0.932438000	-2.787187000
H	2.931590000	1.696336000	-4.138987000
H	5.052701000	3.921722000	-1.923904000
H	3.788140000	4.309981000	-0.752474000
H	4.573532000	2.713018000	-0.738338000
H	4.532015000	-0.919174000	1.467641000
H	6.119355000	-0.225200000	-0.199835000
H	4.804889000	-1.077699000	-1.017090000
H	4.924891000	0.696239000	-1.103200000
H	5.582357000	1.338451000	1.813840000
H	4.129341000	2.112743000	1.171915000
H	4.042129000	1.151816000	2.661245000
C	-1.912338000	-3.216837000	2.209411000
H	-2.093324000	-3.271837000	3.285108000
H	-0.862655000	-2.893301000	2.055994000
H	-2.693700000	-2.569517000	1.772621000
H	-2.024699000	-4.210550000	1.770428000

Mn(II)LK7⁶TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Mn	-1.409172000	-1.089541000	0.935365000
C	-1.376097000	2.160024000	4.469868000
C	-1.385428000	2.505314000	3.102473000
C	-1.326852000	0.800375000	4.836360000
C	-1.296943000	-0.172144000	3.831608000
C	-1.366109000	1.494101000	2.136890000
N	-1.322947000	0.165669000	2.505388000
C	-1.484023000	1.782000000	0.652859000
N	-0.811764000	0.668305000	-0.167545000
C	-1.504782000	0.415349000	-1.515780000
N	-1.286067000	-1.953101000	-0.878553000
C	-1.356176000	-1.041375000	-1.911626000
C	-1.216738000	-3.291815000	-1.154211000
C	-1.230861000	-3.770600000	-2.468475000
C	-1.313874000	-2.848129000	-3.530199000
C	-1.366244000	-1.468132000	-3.242760000
O	-3.504555000	-0.580105000	0.590522000
O	-4.158964000	-1.597496000	1.208844000
H	-1.406829000	2.934423000	5.230800000
H	-1.422907000	3.547335000	2.799758000
H	-1.317652000	0.496766000	5.877794000
H	-1.257611000	-1.224716000	4.082870000
H	-1.046792000	2.754185000	0.408752000
H	-2.544366000	1.805940000	0.372826000
H	-1.097308000	1.073297000	-2.287976000
H	-2.568645000	0.652319000	-1.393625000
H	-1.156426000	-3.976199000	-0.317046000
H	-1.185868000	-4.838914000	-2.651432000
H	-1.336642000	-3.194833000	-4.559256000
H	-1.429742000	-0.742131000	-4.047455000
C	0.607082000	0.899179000	-0.333062000
C	1.592984000	1.683094000	-0.966638000
C	1.932506000	0.555007000	-0.041552000
N	2.741556000	-0.259697000	0.612646000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

N	1.835531000	2.689184000	-1.779478000
C	2.116482000	-1.454094000	1.316637000
C	2.648877000	-2.777575000	0.728964000
C	2.274426000	-1.370117000	2.848370000
H	1.037094000	-1.391701000	1.074314000
H	2.133505000	-3.624983000	1.197398000
H	2.498089000	-2.831159000	-0.355148000
H	3.716444000	-2.911133000	0.931525000
H	1.745758000	-2.208609000	3.318610000
H	3.321323000	-1.456097000	3.155505000
H	1.878005000	-0.431080000	3.251404000
C	0.640698000	3.540746000	-2.229756000
C	0.820029000	5.006797000	-1.785567000
C	0.383909000	3.400625000	-3.743504000
H	-0.223729000	3.129989000	-1.691054000
H	-0.537461000	3.935387000	-4.001762000
H	1.184689000	3.844291000	-4.343783000
H	0.271366000	2.352604000	-4.050277000
H	-0.093316000	5.565807000	-2.020246000
H	1.003719000	5.089408000	-0.707833000
H	1.639966000	5.504477000	-2.313409000
C	3.182155000	3.059883000	-2.403205000
C	3.671197000	1.933939000	-3.336332000
C	4.210696000	3.539324000	-1.365070000
C	4.246840000	-0.077454000	0.821504000
C	5.053374000	-0.167668000	-0.484840000
C	4.524243000	1.185090000	1.662288000
H	2.939395000	3.920935000	-3.030126000
H	4.628600000	2.224350000	-3.782932000
H	3.824454000	0.986704000	-2.810260000
H	2.963778000	1.762983000	-4.155130000
H	5.075286000	3.954444000	-1.895247000
H	3.801696000	4.333934000	-0.730937000
H	4.580076000	2.733022000	-0.729286000
H	4.525218000	-0.944513000	1.425959000
H	6.117594000	-0.240977000	-0.233511000
H	4.790667000	-1.059940000	-1.064657000
H	4.933548000	0.714363000	-1.114814000
H	5.604657000	1.292541000	1.809436000
H	4.164464000	2.097577000	1.176732000
H	4.061054000	1.117410000	2.652881000
C	-2.053503000	-2.952547000	2.088371000
H	-2.396121000	-2.938696000	3.131388000
H	-0.949283000	-2.992881000	2.137026000
H	-3.166981000	-2.271655000	1.642218000
H	-2.364794000	-3.890173000	1.609564000

Mn(II)LK7 ²2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Mn	-1.801720000	-0.924217000	0.785058000
C	-1.741442000	2.449671000	4.192625000
C	-1.482782000	2.721286000	2.832868000
C	-2.034610000	1.129313000	4.583791000
C	-2.054215000	0.119296000	3.614821000
C	-1.525427000	1.673857000	1.907486000
N	-1.797931000	0.384817000	2.298000000
C	-1.405683000	1.895356000	0.417146000
N	-0.779289000	0.661533000	-0.274272000
C	-1.329496000	0.470696000	-1.707761000
N	-1.756373000	-1.823749000	-0.997597000
C	-1.444277000	-0.998347000	-2.049159000
C	-2.047248000	-3.139360000	-1.226904000
C	-2.006078000	-3.682299000	-2.515920000
C	-1.657992000	-2.848700000	-3.597952000
C	-1.377921000	-1.487149000	-3.358130000

O	-3.477871000	-1.492649000	0.970072000
O	-4.094108000	-1.582699000	2.269624000
H	-1.719536000	3.250227000	4.926054000
H	-1.269874000	3.734001000	2.504849000
H	-2.248673000	0.882422000	5.618077000
H	-2.287652000	-0.902603000	3.881490000
H	-0.820203000	2.792375000	0.204610000
H	-2.405916000	2.041006000	-0.011473000
H	-0.699506000	0.994419000	-2.430018000
H	-2.327297000	0.926906000	-1.745815000
H	-2.327229000	-3.744355000	-0.372343000
H	-2.248212000	-4.728825000	-2.666844000
H	-1.617803000	-3.246749000	-4.607585000
H	-1.134589000	-0.822744000	-4.181451000
C	0.670617000	0.834113000	-0.342781000
C	1.662690000	1.643437000	-0.936234000
C	2.002455000	0.489174000	-0.049135000
N	2.839878000	-0.327604000	0.560885000
N	1.925133000	2.666449000	-1.727401000
C	2.266207000	-1.603040000	1.160270000
C	2.911049000	-2.846688000	0.512024000
C	2.377440000	-1.607454000	2.698961000
H	1.206992000	-1.588648000	0.875676000
H	2.419069000	-3.750861000	0.890259000
H	2.812885000	-2.832815000	-0.579447000
H	3.973171000	-2.939982000	0.760540000
H	1.910812000	-2.515124000	3.100022000
H	3.418837000	-1.627847000	3.035372000
H	1.894895000	-0.731259000	3.150492000
C	0.755082000	3.530680000	-2.209940000
C	0.902112000	4.978293000	-1.697867000
C	0.579151000	3.453964000	-3.740513000
H	-0.138640000	3.097360000	-1.745641000
H	-0.336870000	3.986637000	-4.021526000
H	1.400498000	3.934218000	-4.281361000
H	0.497825000	2.419336000	-4.097896000
H	0.008004000	5.550575000	-1.971516000
H	1.015700000	5.018473000	-0.607764000
H	1.757324000	5.491817000	-2.148944000
C	3.290421000	3.050319000	-2.301512000
C	3.812141000	1.938872000	-3.234875000
C	4.280681000	3.533275000	-1.228259000
C	4.328117000	-0.087023000	0.825812000
C	5.194197000	-0.108245000	-0.445087000
C	4.519803000	1.151160000	1.725208000
H	3.063884000	3.917086000	-2.926343000
H	4.793465000	2.225306000	-3.629214000
H	3.926440000	0.977492000	-2.725752000
H	3.142378000	1.796954000	-4.090188000
H	5.158015000	3.958426000	-1.728917000
H	3.842802000	4.322507000	-0.606699000
H	4.636221000	2.731522000	-0.580949000
H	4.617931000	-0.961983000	1.412259000
H	6.246671000	-0.172014000	-0.145745000
H	4.976449000	-0.983710000	-1.067226000
H	5.087515000	0.792499000	-1.048635000
H	5.589226000	1.307292000	1.905733000
H	4.123275000	2.065849000	1.273715000
H	4.037255000	1.013008000	2.699246000
C	-1.053900000	-2.397879000	1.907347000
H	-1.898943000	-2.817180000	2.457862000
H	-0.317194000	-1.924387000	2.558094000
H	-5.047737000	-1.781386000	2.059116000
H	-0.616388000	-3.107560000	1.201015000

Cr(II)LK7 ⁷1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Cr	-1.345219000	-1.132177000	0.938469000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	-1.412998000	2.190107000	4.481836000
C	-1.387693000	2.514446000	3.109673000
C	-1.413514000	0.835433000	4.867843000
C	-1.386094000	-0.150594000	3.874506000
C	-1.376564000	1.483983000	2.162458000
N	-1.373078000	0.162285000	2.543117000
C	-1.470440000	1.756198000	0.671416000
N	-0.816817000	0.624666000	-0.142325000
C	-1.503035000	0.400771000	-1.500485000
N	-1.317869000	-1.984654000	-0.939612000
C	-1.356377000	-1.044600000	-1.943641000
C	-1.272395000	-3.311731000	-1.265574000
C	-1.276069000	-3.748322000	-2.595998000
C	-1.316067000	-2.789193000	-3.626443000
C	-1.349746000	-1.419418000	-3.291597000
O	-4.078323000	-0.663292000	0.606461000
O	-5.340058000	-0.732839000	0.642792000
H	-1.433181000	2.976227000	5.230774000
H	-1.391465000	3.552592000	2.791589000
H	-1.435800000	0.547969000	5.913555000
H	-1.379282000	-1.201824000	4.139442000
H	-1.013735000	2.718395000	0.422319000
H	-2.526301000	1.803825000	0.376775000
H	-1.100410000	1.083335000	-2.253695000
H	-2.566751000	0.636888000	-1.372258000
H	-1.238130000	-4.024723000	-0.449516000
H	-1.251000000	-4.810214000	-2.815897000
H	-1.321604000	-3.099622000	-4.667097000
H	-1.385578000	-0.665178000	-4.071641000
C	0.605705000	0.856237000	-0.312463000
C	1.582801000	1.645507000	-0.950954000
C	1.936371000	0.528658000	-0.018989000
N	2.762666000	-0.264848000	0.639210000
N	1.819705000	2.649829000	-1.770236000
C	2.166893000	-1.468960000	1.352550000
C	2.744570000	-2.782561000	0.785888000
C	2.310166000	-1.359810000	2.884384000
H	1.090316000	-1.441421000	1.100691000
H	2.246691000	-3.638348000	1.257922000
H	2.605051000	-2.852795000	-0.298792000
H	3.813149000	-2.884759000	1.000733000
H	1.801768000	-2.207163000	3.360984000
H	3.356383000	-1.409824000	3.201932000
H	1.880303000	-0.428507000	3.271015000
C	0.625172000	3.502126000	-2.214268000
C	0.816894000	4.972132000	-1.788217000
C	0.348148000	3.348480000	-3.723371000
H	-0.234843000	3.103122000	-1.660455000
H	-0.575032000	3.883048000	-3.975661000
H	1.142500000	3.784061000	-4.337901000
H	0.230274000	2.297706000	-4.018674000
H	-0.095637000	5.534026000	-2.019273000
H	1.012249000	5.064874000	-0.713405000
H	1.634384000	5.459169000	-2.329606000
C	3.159305000	3.010025000	-2.413164000
C	3.642491000	1.865785000	-3.327138000
C	4.197961000	3.516619000	-1.397942000
C	4.261682000	-0.044355000	0.850165000
C	5.078153000	-0.151538000	-0.448910000
C	4.507222000	1.242587000	1.663424000
H	2.908617000	3.856343000	-3.056835000
H	4.598727000	2.145095000	-3.783188000
H	3.795215000	0.927895000	-2.784435000
H	2.930752000	1.681309000	-4.139393000
H	5.051604000	3.929190000	-1.947610000
H	3.790689000	4.319105000	-0.772718000
H	4.582770000	2.725621000	-0.752682000
H	4.555584000	-0.889739000	1.477419000
H	6.142403000	-0.192759000	-0.190382000

H	4.839149000	-1.066011000	-1.003812000
H	4.941009000	0.707893000	-1.105812000
H	5.584363000	1.379473000	1.810194000
H	4.126014000	2.135868000	1.159110000
H	4.043373000	1.183637000	2.654324000
C	-2.001908000	-3.326245000	2.270765000
H	-2.187631000	-3.391914000	3.345590000
H	-0.943121000	-3.032640000	2.127974000
H	-2.767872000	-2.653659000	1.843720000
H	-2.140853000	-4.311386000	1.819218000

Cr(II)LK7 ³TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Cr	-1.339570000	-1.075752000	0.942722000
C	-1.329925000	2.309944000	4.400357000
C	-1.404249000	2.609105000	3.024006000
C	-1.208005000	0.966656000	4.806799000
C	-1.167726000	-0.036305000	3.831477000
C	-1.372206000	1.565553000	2.093535000
N	-1.251105000	0.253980000	2.497234000
C	-1.563574000	1.793270000	0.605208000
N	-0.879265000	0.672403000	-0.190134000
C	-1.544757000	0.390586000	-1.543650000
N	-1.179215000	-1.953692000	-0.898954000
C	-1.310932000	-1.057254000	-1.937010000
C	-1.046668000	-3.287966000	-1.170255000
C	-1.048213000	-3.775072000	-2.482393000
C	-1.185579000	-2.864393000	-3.548345000
C	-1.309449000	-1.487523000	-3.267426000
O	-3.216793000	-0.733491000	0.671413000
O	-3.979281000	-1.740787000	1.206848000
H	-1.369832000	3.106758000	5.137247000
H	-1.503808000	3.637452000	2.690181000
H	-1.152269000	0.698588000	5.856484000
H	-1.078726000	-1.078387000	4.111981000
H	-1.177339000	2.771032000	0.303963000
H	-2.633348000	1.761395000	0.363668000
H	-1.167390000	1.073059000	-2.310238000
H	-2.620310000	0.572502000	-1.427762000
H	-0.949323000	-3.961978000	-0.328029000
H	-0.953020000	-4.840856000	-2.660786000
H	-1.198957000	-3.217439000	-4.575341000
H	-1.422209000	-0.770612000	-4.074904000
C	0.539835000	0.912460000	-0.341630000
C	1.540116000	1.689712000	-0.961158000
C	1.855779000	0.549633000	-0.043627000
N	2.637111000	-0.288890000	0.617743000
N	1.800119000	2.698971000	-1.763121000
C	1.976293000	-1.455594000	1.327617000
C	2.392837000	-2.796461000	0.690879000
C	2.191577000	-1.414406000	2.853010000
H	0.882010000	-1.318942000	1.136173000
H	1.867310000	-3.625635000	1.179786000
H	2.177935000	-2.822010000	-0.383025000
H	3.463212000	-2.983123000	0.826688000
H	1.625554000	-2.224688000	3.328250000
H	3.241253000	-1.578042000	3.115863000
H	1.876433000	-0.459461000	3.286630000
C	0.614346000	3.556760000	-2.229369000
C	0.770956000	5.009483000	-1.735543000
C	0.408147000	3.459771000	-3.753908000
H	-0.264830000	3.124079000	-1.733642000
H	-0.507299000	3.998472000	-4.024820000
H	1.224981000	3.924487000	-4.315320000
H	0.308323000	2.421059000	-4.093831000
H	-0.136373000	5.571855000	-1.984987000
H	0.917585000	5.060610000	-0.650078000
H	1.606084000	5.525744000	-2.219968000
C	3.161472000	3.082486000	-2.346045000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	3.659997000	1.991328000	-3.314754000
C	4.172125000	3.508734000	-1.268300000
C	4.153338000	-0.171127000	0.811282000
C	4.933433000	-0.245926000	-0.511470000
C	4.490912000	1.051864000	1.687477000
H	2.938420000	3.971187000	-2.940733000
H	4.626648000	2.293243000	-3.733000000
H	3.798265000	1.023144000	-2.823930000
H	2.966415000	1.856981000	-4.151711000
H	5.050642000	3.938197000	-1.762858000
H	3.756704000	4.279745000	-0.609527000
H	4.522669000	2.672978000	-0.660209000
H	4.407981000	-1.068954000	1.380570000
H	5.997907000	-0.368124000	-0.281026000
H	4.627557000	-1.106527000	-1.117662000
H	4.837858000	0.662370000	-1.107095000
H	5.576784000	1.112585000	1.820861000
H	4.160010000	1.991980000	1.235545000
H	4.040016000	0.971786000	2.682540000
C	-1.770274000	-2.905481000	2.108062000
H	-2.063613000	-2.840270000	3.165431000
H	-0.669521000	-3.008332000	2.124862000
H	-3.067679000	-2.380190000	1.641649000
H	-2.104855000	-3.883784000	1.723892000

Cr(II)LK7 ³2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
Cr	-1.632097000	-1.107440000	0.582016000
C	-1.625802000	1.227883000	4.821521000
C	-1.387571000	1.886963000	3.598815000
C	-1.846170000	-0.164155000	4.820896000
C	-1.814624000	-0.855370000	3.605840000
C	-1.378452000	1.143505000	2.412452000
N	-1.576778000	-0.215046000	2.419026000
C	-1.261656000	1.809474000	1.055858000
N	-0.844549000	0.804613000	-0.037401000
C	-1.672722000	0.985575000	-1.325023000
N	-1.601144000	-1.451622000	-1.434202000
C	-1.666923000	-0.284704000	-2.153741000
C	-1.682919000	-2.653165000	-2.076793000
C	-1.840477000	-2.729761000	-3.466353000
C	-1.918943000	-1.536835000	-4.210605000
C	-1.825409000	-0.297242000	-3.542809000
O	-3.330294000	-1.598522000	0.648153000
O	-4.089580000	-1.639578000	1.884401000
H	-1.647792000	1.788949000	5.751200000
H	-1.232402000	2.961574000	3.574180000
H	-2.048123000	-0.702848000	5.740457000
H	-2.007351000	-1.920571000	3.566185000
H	-0.548312000	2.638479000	1.083778000
H	-2.235475000	2.227671000	0.771954000
H	-1.307515000	1.837296000	-1.900638000
H	-2.699440000	1.214463000	-1.012207000
H	-1.635914000	-3.550033000	-1.471193000
H	-1.911552000	-3.699567000	-3.947009000
H	-2.054914000	-1.569399000	-5.287595000
H	-1.901691000	0.632240000	-4.097535000
C	0.579930000	0.874097000	-0.309381000
C	1.607681000	1.491772000	-1.058246000
C	1.901885000	0.618524000	0.112637000
N	2.705418000	0.054821000	0.991759000
N	1.946666000	2.330321000	-2.021238000
C	2.099726000	-0.877627000	2.031711000
C	2.735399000	-2.280075000	1.943946000
C	2.186557000	-0.273406000	3.448763000
H	1.039311000	-0.955715000	1.758999000

H	2.220955000	-2.958661000	2.634452000
H	2.669459000	-2.699417000	0.933214000
H	3.789122000	-2.273738000	2.240755000
H	1.663027000	-0.930462000	4.153121000
H	3.219573000	-0.195742000	3.802658000
H	1.730977000	0.722577000	3.498560000
C	0.891808000	3.318067000	-2.531043000
C	1.404729000	4.768910000	-2.416331000
C	0.419557000	2.969666000	-3.957102000
H	0.051001000	3.223106000	-1.831612000
H	-0.427126000	3.612050000	-4.227077000
H	1.199798000	3.150982000	-4.703313000
H	0.111158000	1.920706000	-4.045102000
H	0.590336000	5.452365000	-2.683996000
H	1.725351000	5.009045000	-1.396598000
H	2.232752000	4.976210000	-3.101351000
C	3.274733000	2.341639000	-2.791010000
C	3.561488000	0.944966000	-3.377274000
C	4.451483000	2.973357000	-2.025903000
C	4.200581000	0.341113000	1.146364000
C	5.035306000	-0.233473000	-0.011265000
C	4.429125000	1.833399000	1.460447000
H	3.057195000	3.005301000	-3.631218000
H	4.498385000	0.977232000	-3.944260000
H	3.670227000	0.174929000	-2.606419000
H	2.768008000	0.634357000	-4.066913000
H	5.257520000	3.172646000	-2.741745000
H	4.174453000	3.930524000	-1.571713000
H	4.862348000	2.320530000	-1.255793000
H	4.475118000	-0.223136000	2.040886000
H	6.098163000	-0.118607000	0.229890000
H	4.843308000	-1.303355000	-0.149047000
H	4.859521000	0.276934000	-0.958752000
H	5.503733000	2.025056000	1.554288000
H	4.042681000	2.494538000	0.679731000
H	3.960451000	2.111100000	2.411276000
C	-0.741431000	-2.854717000	1.082282000
H	-1.459994000	-3.654575000	0.885956000
H	-0.456802000	-2.825667000	2.135477000
H	-5.018988000	-1.799727000	1.562515000
H	0.129024000	-2.909432000	0.416266000

Fe(II)LK8 ⁷1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	0.168305000	-0.203662000	-0.674730000
C	0.182371000	1.168048000	-1.330620000
H	-0.762576000	1.244846000	-1.885298000
H	0.979728000	1.273678000	-2.065157000
C	-0.479461000	-1.280666000	-1.537293000
H	-0.112706000	-1.203004000	-2.567788000
H	-0.146806000	-2.251123000	-1.150047000
C	-2.002927000	-1.254789000	-1.544691000
C	-2.713931000	-1.871444000	-2.582406000
C	-4.027133000	-0.753623000	-0.413061000
C	-4.120441000	-1.939044000	-2.516368000
C	-4.785533000	-1.375329000	-1.408500000
H	-2.185926000	-2.302028000	-3.428267000
H	-4.507829000	-0.291241000	0.442175000
H	-4.683675000	-2.418578000	-3.311635000
H	-5.866319000	-1.409521000	-1.322381000
C	0.255644000	2.290523000	-0.305564000
C	0.965500000	3.473998000	-0.530604000
C	0.912979000	4.506512000	0.431597000
C	-0.534249000	3.114141000	1.778607000
C	0.155850000	4.320128000	1.604917000
H	1.537803000	3.606567000	-1.443674000
H	1.450288000	5.436059000	0.267112000
H	-1.136373000	2.940149000	2.664154000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	0.094204000	5.092274000	2.364367000
N	-2.657107000	-0.694338000	-0.475670000
N	-0.488906000	2.120574000	0.838984000
Fe	-1.526022000	0.382881000	0.802703000
O	-3.396132000	2.474541000	-0.274297000
O	-4.223907000	3.351363000	-0.654041000
C	-3.039625000	0.506570000	2.958632000
H	-3.173468000	1.218188000	2.120877000
H	-3.903350000	0.693840000	3.607629000
H	-2.139168000	0.709354000	3.548598000
H	-3.095683000	-0.550357000	2.664552000
C	1.404092000	-0.677662000	-0.043454000
N	2.619235000	-0.346027000	-0.510532000
C	3.823548000	-0.263155000	0.421104000
C	2.943708000	-0.123663000	-1.976360000
C	4.883754000	0.676057000	-0.175820000
C	4.351132000	-0.673411000	-2.287874000
C	5.443083000	0.114672000	-1.512416000
H	4.260963000	-1.256954000	0.554359000
H	2.186718000	-0.625982000	-2.585530000
H	5.689012000	0.780721000	0.560165000
H	4.387836000	-1.744583000	-2.051038000
H	6.296267000	-0.543963000	-1.319594000
N	1.257889000	-1.499240000	1.029251000
C	0.110513000	-1.401519000	1.989092000
C	2.210376000	-2.658658000	1.274386000
C	0.405855000	-2.163296000	3.303100000
C	1.410640000	-3.900886000	1.708953000
C	0.656099000	-3.671948000	3.048244000
H	-0.021274000	-0.335304000	2.257770000
H	2.944446000	-2.384555000	2.039147000
H	1.273776000	-1.700242000	3.788436000
H	2.117129000	-4.733011000	1.805084000
H	1.233149000	-4.073945000	3.886984000
H	2.933340000	0.951065000	-2.194262000
H	4.511181000	-0.591500000	-3.368990000
H	5.822619000	0.940961000	-2.122598000
H	4.460429000	1.680199000	-0.311499000
H	3.458259000	0.089669000	1.391600000
H	-0.806301000	-1.829561000	1.541663000
H	-0.441673000	-2.024511000	3.984518000
H	-0.292261000	-4.220572000	3.036473000
H	0.714261000	-4.184556000	0.907898000
H	2.736526000	-2.852858000	0.335709000

Fe(II)LK8 ⁵TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	0.257849000	0.254203000	-0.742540000
C	0.623273000	1.720624000	-1.020679000
H	-0.042910000	2.078161000	-1.813996000
H	1.643021000	1.821952000	-1.386035000
C	-0.393375000	-0.479218000	-1.940747000
H	-0.752904000	0.293050000	-2.631219000
H	0.342636000	-1.080520000	-2.478817000
C	-1.553767000	-1.366978000	-1.530255000
C	-1.922961000	-2.481939000	-2.291203000
C	-3.383355000	-1.722628000	-0.057343000
C	-3.067990000	-3.221551000	-1.929872000
C	-3.803101000	-2.837445000	-0.790312000
H	-1.341462000	-2.766840000	-3.163066000
H	-3.925659000	-1.409664000	0.825682000
H	-3.376660000	-4.078604000	-2.521547000
H	-4.685606000	-3.385115000	-0.476776000
C	0.438394000	2.578827000	0.217864000
C	1.218981000	3.712288000	0.465772000
C	0.945982000	4.510170000	1.597563000

C	-0.841438000	2.987546000	2.180171000
C	-0.093254000	4.133437000	2.471520000
H	2.020384000	3.984083000	-0.214554000
H	1.534660000	5.401536000	1.794647000
H	-1.643497000	2.671934000	2.835356000
H	-0.324739000	4.715794000	3.357137000
N	-2.285345000	-0.991790000	-0.425269000
N	-0.590094000	2.230924000	1.068303000
Fe	-1.585442000	0.661120000	0.397910000
O	-2.336696000	1.787287000	-1.259295000
O	-3.550461000	2.221415000	-0.853012000
C	-3.480410000	1.137805000	1.554404000
H	-3.571801000	1.723772000	0.293773000
H	-4.444594000	0.631974000	1.415053000
H	-3.613157000	2.095129000	2.071895000
H	-2.885815000	0.489741000	2.222843000
C	1.378664000	-0.557863000	-0.176530000
N	2.611769000	-0.477220000	-0.707968000
C	3.842999000	-0.827399000	0.129190000
C	2.951377000	-0.066708000	-2.131848000
C	5.092118000	-0.124324000	-0.424460000
C	4.127528000	-0.914189000	-2.658607000
C	5.427195000	-0.620533000	-1.856730000
H	4.005044000	-1.908745000	0.103367000
H	2.073148000	-0.173867000	-2.769418000
H	5.920869000	-0.344648000	0.258353000
H	3.863245000	-1.978858000	-2.616522000
H	6.040270000	-1.526627000	-1.809988000
N	1.091375000	-1.393879000	0.850176000
C	0.128706000	-1.048639000	1.954220000
C	1.739571000	-2.765682000	0.969215000
C	0.491811000	-1.807204000	3.254338000
C	0.742991000	-3.749880000	1.605296000
C	0.395450000	-3.344264000	3.063519000
H	0.190481000	0.028642000	2.147143000
H	2.642246000	-2.707691000	1.584954000
H	1.501449000	-1.509364000	3.563790000
H	1.199140000	-4.746094000	1.584896000
H	1.078664000	-3.831432000	3.766790000
H	3.254387000	0.987151000	-2.133730000
H	4.265569000	-0.671412000	-3.718358000
H	6.030439000	0.135072000	-2.370099000
H	4.959305000	0.965068000	-0.398656000
H	3.625340000	-0.526693000	1.159691000
H	-0.893114000	-1.348823000	1.667068000
H	-0.184528000	-1.472781000	4.049753000
H	-0.609342000	-3.701244000	3.314837000
H	-0.160578000	-3.813569000	0.983465000
H	2.021010000	-3.082868000	-0.039675000

Fe(II)LK8 ⁵2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	3.118164000	-0.125397000	-1.778399000
C	4.092157000	0.094113000	-0.649090000
H	4.554261000	-0.885088000	-0.447750000
H	3.598651000	0.377253000	0.282635000
C	2.417353000	-1.450969000	-1.739632000
H	2.174458000	-1.697787000	-0.695446000
H	1.456690000	-1.339160000	-2.253036000
C	3.133010000	-2.656349000	-2.348885000
C	2.484750000	-3.901094000	-2.266305000
C	4.938303000	-3.676801000	-3.508946000
C	3.073032000	-5.046071000	-2.829903000
C	4.325924000	-4.926979000	-3.468550000
H	1.523736000	-3.974335000	-1.764777000
H	5.915276000	-3.558255000	-3.965202000
H	2.571850000	-6.007831000	-2.770587000
H	4.818496000	-5.784854000	-3.913440000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	5.175339000	1.109618000	-0.984519000
C	5.509607000	2.171451000	-0.138173000
C	6.572493000	3.033785000	-0.485126000
C	6.912128000	1.726527000	-2.489071000
C	7.274828000	2.813617000	-1.684825000
H	4.969005000	2.319048000	0.791180000
H	6.847305000	3.855798000	0.169562000
H	7.452448000	1.510382000	-3.403404000
H	8.095260000	3.456400000	-1.985610000
N	4.356586000	-2.549775000	-2.961532000
N	5.887307000	0.889627000	-2.142503000
Fe	5.497683000	-0.892496000	-2.995331000
O	7.200880000	-1.847588000	-2.625772000
O	8.418609000	-1.167103000	-2.538458000
C	6.133400000	-0.521568000	-5.066571000
H	9.107890000	-1.867349000	-2.350086000
H	7.214507000	-0.638672000	-4.983053000
H	5.761680000	0.487047000	-5.254106000
H	5.592021000	-1.334944000	-5.555988000
C	2.310222000	0.973277000	-2.235697000
N	2.010236000	2.012046000	-1.421055000
C	1.866654000	3.425875000	-1.953733000
C	1.642018000	1.836250000	0.036574000
C	2.086582000	4.436001000	-0.815177000
C	0.515101000	2.821469000	0.410346000
C	0.993348000	4.294401000	0.280607000
H	0.866724000	3.578474000	-2.370289000
H	1.318995000	0.801983000	0.195146000
H	2.064716000	5.443044000	-1.246705000
H	-0.360038000	2.631976000	-0.224334000
H	0.135643000	4.932653000	0.043511000
N	1.853106000	0.916380000	-3.509039000
C	2.539850000	0.140312000	-4.592240000
C	0.539913000	1.558219000	-3.913046000
C	2.212727000	0.733627000	-5.975582000
C	-0.152298000	0.705744000	-4.991010000
C	0.693551000	0.626237000	-6.290243000
H	3.617681000	0.181731000	-4.392578000
H	0.724160000	2.566732000	-4.298665000
H	2.541081000	1.780840000	-6.006228000
H	-1.128533000	1.157871000	-5.198659000
H	0.414456000	1.432308000	-6.976644000
H	2.510208000	2.043604000	0.674954000
H	0.203201000	2.606661000	1.438783000
H	1.388322000	4.652393000	1.237574000
H	3.090779000	4.304208000	-0.390233000
H	2.598974000	3.550686000	-2.759031000
H	2.226542000	-0.912107000	-4.559767000
H	2.794306000	0.198805000	-6.736290000
H	0.476643000	-0.312804000	-6.810839000
H	-0.360072000	-0.296646000	-4.592456000
H	-0.080977000	1.634031000	-3.015354000

Ni(II)LK8⁷1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	3.185354000	0.319179000	-1.816673000
C	4.140925000	0.579167000	-0.657577000
H	4.320044000	-0.388611000	-0.173411000
H	3.680690000	1.225237000	0.096552000
C	2.333126000	-0.935215000	-1.567021000
H	1.904450000	-0.917778000	-0.558150000
H	1.505918000	-0.907870000	-2.286501000
C	3.152938000	-2.204262000	-1.760917000
C	2.814838000	-3.417880000	-1.151015000
C	4.979948000	-3.228133000	-2.885191000
C	3.581894000	-4.568431000	-1.434203000

C	4.678129000	-4.470882000	-2.313440000
H	1.969097000	-3.476619000	-0.472405000
H	5.825334000	-3.109656000	-3.555144000
H	3.330963000	-5.519102000	-0.972911000
H	5.290974000	-5.334417000	-2.548607000
C	5.475852000	1.146770000	-1.115194000
C	6.285270000	1.942751000	-0.297102000
C	7.563824000	2.325323000	-0.756786000
C	7.142722000	1.111052000	-2.806538000
C	7.997232000	1.903656000	-2.028983000
H	5.945116000	2.246437000	0.688564000
H	8.209771000	2.935422000	-0.132208000
H	7.438914000	0.762797000	-3.790141000
H	8.974982000	2.177151000	-2.410839000
N	4.222657000	-2.123533000	-2.617713000
N	5.908749000	0.745044000	-2.352124000
Ni	4.548069000	-0.307083000	-3.285677000
O	5.675152000	-0.785448000	-5.183481000
O	5.901551000	-1.038369000	-6.398921000
C	7.930124000	-3.778406000	-5.454334000
H	8.003840000	-3.127622000	-4.570946000
H	8.536470000	-4.672003000	-5.282418000
H	8.326048000	-3.255690000	-6.330721000
H	6.894272000	-4.085979000	-5.648511000
C	2.429396000	1.529592000	-2.238536000
N	1.644351000	2.200900000	-1.178682000
C	2.133929000	3.489116000	-0.640741000
C	0.350523000	1.692745000	-0.654712000
C	1.552026000	3.803179000	0.749259000
C	-0.614128000	2.848413000	-0.278326000
C	-0.003571000	3.836526000	0.755858000
H	1.817010000	4.268623000	-1.365301000
H	-0.077007000	0.994785000	-1.381638000
H	1.954118000	4.769099000	1.071918000
H	-0.900409000	3.376871000	-1.197384000
H	-0.356621000	4.848774000	0.534200000
N	1.801759000	1.470454000	-3.488361000
C	2.540571000	0.846430000	-4.632399000
C	0.778880000	2.494706000	-3.903717000
C	1.855387000	1.116824000	-5.995690000
C	-0.288937000	1.874492000	-4.834695000
C	0.332557000	0.902984000	-5.880929000
H	3.570484000	1.262470000	-4.670789000
H	1.303783000	3.319630000	-4.405244000
H	2.079552000	2.135176000	-6.334669000
H	-0.799491000	2.704322000	-5.336662000
H	-0.131695000	1.054042000	-6.859644000
H	0.577519000	1.125034000	0.269191000
H	-1.527312000	2.389766000	0.115780000
H	-0.357901000	3.601264000	1.763947000
H	1.918993000	3.055313000	1.467054000
H	3.230177000	3.490434000	-0.683131000
H	2.556040000	-0.252493000	-4.489192000
H	2.288290000	0.437276000	-6.738997000
H	0.129591000	-0.139937000	-5.602138000
H	-1.048893000	1.352259000	-4.241962000
H	0.304715000	2.914490000	-3.013497000

Ni(II)LK8⁵TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	0.111803000	-0.074822000	-0.786555000
C	0.228693000	1.316239000	-1.425580000
H	-0.675375000	1.439306000	-2.037353000
H	1.079059000	1.392740000	-2.099644000
C	-0.423152000	-1.125423000	-1.781209000
H	-0.066724000	-0.891104000	-2.790001000
H	0.002229000	-2.095226000	-1.498393000
C	-1.935351000	-1.220057000	-1.756391000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	-2.651398000	-1.853030000	-2.776911000	H	3.452984000	0.951955000	-0.173699000
C	-3.926863000	-0.857106000	-0.517046000	C	2.356689000	-1.398420000	-1.772744000
C	-4.049146000	-1.998319000	-2.648014000	H	1.733557000	-1.228311000	-0.876922000
C	-4.691028000	-1.498623000	-1.497042000	H	1.690142000	-1.537067000	-2.650570000
H	-2.139723000	-2.235009000	-3.655481000	C	3.209907000	-2.659735000	-1.558637000
H	-4.393809000	-0.449426000	0.371445000	C	2.680829000	-3.780126000	-0.892988000
H	-4.622217000	-2.489108000	-3.429326000	C	5.247657000	-3.824141000	-1.974274000
H	-5.763065000	-1.594937000	-1.362232000	C	3.457962000	-4.956974000	-0.774453000
C	0.277284000	2.375241000	-0.343147000	C	4.760495000	-4.970805000	-1.327833000
C	0.936154000	3.599988000	-0.473368000	H	1.661736000	-3.737933000	-0.478473000
C	0.851125000	4.538800000	0.578887000	H	6.261515000	-3.783636000	-2.407850000
C	-0.524396000	2.971971000	1.811280000	H	3.052130000	-5.847111000	-0.260908000
C	0.118500000	4.214475000	1.738235000	H	5.401589000	-5.865408000	-1.262607000
H	1.493401000	3.835126000	-1.375067000	C	5.305657000	1.042808000	-1.321811000
H	1.347157000	5.501445000	0.494911000	C	5.879560000	2.145923000	-0.659814000
H	-1.097340000	2.695861000	2.689442000	C	7.024534000	2.772580000	-1.210820000
H	0.038122000	4.910716000	2.566320000	C	6.933117000	1.199330000	-3.072730000
N	-2.567597000	-0.717821000	-0.642820000	C	7.539422000	2.304830000	-2.446602000
N	-0.454139000	2.072272000	0.783337000	H	5.439123000	2.511681000	0.281486000
Ni	-1.421325000	0.366174000	0.524526000	H	7.491469000	3.634048000	-0.699418000
O	-1.813619000	1.749491000	-0.382415000	H	7.233240000	0.873996000	-4.085519000
O	-2.996248000	2.132151000	-0.001679000	H	8.401268000	2.798013000	-2.928190000
C	-2.982836000	0.365758000	1.655337000	N	4.498382000	-2.642688000	-2.101386000
H	-3.459448000	1.557001000	1.068203000	N	5.830325000	0.531857000	-2.511868000
H	-3.964684000	-0.060355000	1.430937000	Ni	5.093816000	-1.129491000	-3.231515000
H	-3.130737000	1.324406000	2.162906000	O	6.981981000	-1.951484000	-2.782153000
H	-2.446199000	-0.326197000	2.318900000	O	8.250762000	-1.414296000	-2.779552000
C	1.352994000	-0.602564000	-0.121548000	C	4.937817000	-1.511304000	-4.945844000
N	2.577233000	-0.327783000	-0.596328000	H	8.121296000	-0.361365000	-2.723518000
C	3.782687000	-0.302285000	0.344994000	H	5.548895000	-2.388928000	-5.208858000
C	2.933148000	-0.119842000	-2.060720000	H	5.239164000	-0.754100000	-5.677620000
C	4.890427000	0.584163000	-0.244877000	H	3.924012000	-1.808329000	-5.245815000
C	4.313713000	-0.742913000	-2.357216000	C	2.258449000	0.997180000	-2.487529000
C	5.437072000	-0.010086000	-1.572305000	N	1.554847000	1.673840000	-1.503042000
H	4.170129000	-1.316243000	0.478991000	C	1.325931000	3.189702000	-1.655423000
H	2.160558000	-0.578104000	-2.683578000	C	0.846310000	1.037206000	-0.286642000
H	5.691272000	0.651790000	0.500466000	C	1.557638000	3.871724000	-0.270888000
H	4.292849000	-1.814410000	-2.120037000	C	-0.156775000	2.044472000	0.352698000
H	6.252053000	-0.711744000	-1.366745000	C	0.537066000	3.364977000	0.806368000
N	1.164433000	-1.419468000	0.940891000	H	0.295235000	3.380195000	-2.013132000
C	0.024806000	-1.279516000	1.910784000	H	0.295148000	0.149176000	-0.651290000
C	2.067098000	-2.623715000	1.179926000	H	1.452212000	4.959976000	-0.428200000
C	0.308203000	-2.039834000	3.230685000	H	-0.965238000	2.253647000	-0.367832000
C	1.214118000	-3.823472000	1.632628000	H	-0.241859000	4.125654000	0.980202000
C	0.503049000	-3.557683000	2.988356000	N	2.078245000	1.331358000	-3.804548000
H	-0.079554000	-0.213060000	2.174952000	C	3.131648000	1.212820000	-4.910733000
H	2.820242000	-2.380434000	1.936000000	C	0.721389000	1.906657000	-4.272261000
H	1.195761000	-1.599430000	3.701649000	C	2.873035000	2.288983000	-6.010480000
H	1.881613000	-4.688942000	1.713798000	C	0.450081000	1.446135000	-5.735124000
H	1.089240000	-3.970091000	3.815671000	C	1.501223000	2.051879000	-6.723316000
H	2.985419000	0.954696000	-2.271607000	H	4.121522000	1.347682000	-4.438788000
H	4.486904000	-0.669859000	-3.437026000	H	0.758220000	3.012532000	-4.221280000
H	5.866706000	0.792847000	-2.180203000	H	2.912561000	3.291319000	-5.550758000
H	4.518975000	1.607410000	-0.387593000	H	-0.568300000	1.784967000	-5.996856000
H	3.426101000	0.068304000	1.312048000	H	1.138649000	3.013644000	-7.122566000
H	-0.902080000	-1.698087000	1.474884000	H	1.597219000	0.722914000	0.465046000
H	-0.528863000	-1.861332000	3.915364000	H	-0.613691000	1.534893000	1.219808000
H	-0.461965000	-4.075740000	3.006394000	H	1.061525000	3.206073000	1.763119000
H	0.487024000	-4.072801000	0.847657000	H	2.596215000	3.684266000	0.050116000
H	2.571473000	-2.845669000	0.235291000	H	2.050097000	3.553803000	-2.406639000
				H	3.058566000	0.199513000	-5.347651000
				H	3.701635000	2.224224000	-6.737303000
				H	1.630060000	1.365661000	-7.576606000
				H	0.452323000	0.343576000	-5.776211000
				H	-0.042639000	1.529334000	-3.566875000

Ni(II)LK8 ⁵2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	3.247261000	-0.161621000	-2.090073000
C	4.049011000	0.295097000	-0.830192000
H	4.328599000	-0.617798000	-0.264508000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

Co(II)LK8 ² 1				H	0.279959000	-0.496398000	-4.574263000
				H	-0.036661000	1.310629000	-2.852929000
Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)	Co(II)LK8 ² TS1/2			
				Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	3.353485000	0.165635000	-1.393448000	N	0.105663000	-0.073109000	-0.784635000
C	4.303941000	0.697394000	-0.298859000	C	0.223237000	1.318167000	-1.423068000
H	4.803107000	-0.187276000	0.120061000	H	-0.681173000	1.442278000	-2.034123000
H	3.768397000	1.177021000	0.516963000	H	1.073176000	1.394294000	-2.097713000
C	2.592641000	-1.108014000	-0.952432000	C	-0.430882000	-1.122783000	-1.779410000
H	2.826670000	-1.299375000	0.101280000	H	-0.074994000	-0.888266000	-2.788347000
H	1.515517000	-0.923362000	-1.013840000	H	-0.006096000	-2.093074000	-1.497376000
C	2.946853000	-2.309945000	-1.805667000	C	-1.943140000	-1.216181000	-1.753539000
C	2.300038000	-3.541210000	-1.640593000	C	-2.660451000	-1.848065000	-2.773846000
C	4.283574000	-3.192261000	-3.552000000	C	-3.933451000	-0.852190000	-0.512570000
C	2.666698000	-4.626321000	-2.460585000	C	-4.058225000	-1.992263000	-2.644003000
C	3.670309000	-4.443665000	-3.433594000	C	-4.698857000	-1.492598000	-1.492322000
H	1.526736000	-3.659884000	-0.886926000	H	-2.149731000	-2.230039000	-3.652973000
H	5.059225000	-3.024411000	-4.289781000	H	-4.399414000	-0.444557000	0.376459000
H	2.179978000	-5.590170000	-2.344386000	H	-4.632268000	-2.482198000	-3.425137000
H	3.977442000	-5.253911000	-4.086232000	H	-5.770875000	-1.588093000	-1.356779000
C	5.318635000	1.622750000	-0.934415000	C	0.273490000	2.376601000	-0.340155000
C	5.907450000	2.719895000	-0.300589000	C	0.933276000	3.600867000	-0.470260000
C	6.893655000	3.458131000	-0.991760000	C	0.849787000	4.539236000	0.582513000
C	6.616251000	1.975958000	-2.889316000	C	-0.526131000	2.972943000	1.815144000
C	7.244443000	3.084810000	-2.304032000	C	0.117738000	4.214952000	1.742236000
H	5.625366000	2.991703000	0.711993000	H	1.490062000	3.835984000	-1.372249000
H	7.375811000	4.306985000	-0.515796000	H	1.346553000	5.501512000	0.498645000
H	6.862134000	1.662380000	-3.898212000	H	-1.098665000	2.696878000	2.693588000
H	7.993893000	3.634459000	-2.863743000	H	0.038536000	4.910856000	2.570718000
N	3.931641000	-2.141963000	-2.745245000	N	-2.574162000	-0.713965000	-0.639264000
N	5.680684000	1.253284000	-2.207310000	N	-0.457365000	2.073687000	0.786712000
Co	4.786790000	-0.408056000	-2.693170000	Co	-1.426147000	0.368515000	0.527775000
O	6.349894000	-1.007144000	-3.858321000	O	-1.817957000	1.752596000	-0.378208000
O	7.576915000	-1.306911000	-3.791586000	O	-2.999993000	2.136047000	0.003574000
C	7.418996000	-4.082165000	-5.712888000	C	-2.986835000	0.368837000	1.659721000
H	7.587536000	-4.995279000	-6.290725000	H	-3.462890000	1.560758000	1.073513000
H	8.304722000	-3.445843000	-5.814122000	H	-3.969198000	-0.056356000	1.435828000
H	7.274209000	-4.358841000	-4.660177000	H	-3.133576000	1.327359000	2.167864000
H	6.539757000	-3.567813000	-6.125503000	H	-2.450288000	-0.323884000	2.322557000
C	2.373938000	1.184313000	-1.923328000	C	1.346901000	-0.602198000	-0.120787000
N	1.810954000	2.075812000	-1.087266000	N	2.571021000	-0.328197000	-0.596323000
C	1.367282000	3.448075000	-1.596103000	C	3.777179000	-0.304153000	0.344135000
C	1.471121000	1.825393000	0.374840000	C	2.926043000	-0.119837000	-2.060872000
C	1.327420000	4.452643000	-0.434042000	C	4.885222000	0.581668000	-0.246111000
C	0.131609000	2.507346000	0.723923000	C	4.305878000	-0.743903000	-2.358675000
C	0.251955000	4.053474000	0.613758000	C	5.430412000	-0.012385000	-1.574225000
H	0.368856000	3.376592000	-2.035831000	H	4.163881000	-1.318495000	0.477356000
H	1.418598000	0.749015000	0.554823000	H	2.152623000	-0.577158000	-2.683391000
H	1.099397000	5.437757000	-0.857162000	H	5.686665000	0.648270000	0.498683000
H	-0.661883000	2.119518000	0.072115000	H	4.284301000	-1.815498000	-2.122003000
H	-0.720368000	4.475091000	0.338699000	H	6.244962000	-0.714816000	-1.369599000
N	2.044884000	1.113007000	-3.230569000	N	1.158438000	-1.419464000	0.941391000
C	2.967434000	0.652773000	-4.331829000	C	0.019631000	-1.279043000	1.912181000
C	0.636034000	1.460091000	-3.702737000	C	2.060281000	-2.624572000	1.179184000
C	2.563565000	1.279246000	-5.688772000	C	0.303360000	-2.040238000	3.231505000
C	0.245212000	0.556571000	-4.884937000	C	1.206640000	-3.823845000	1.631923000
C	1.149307000	0.809157000	-6.121586000	C	0.496776000	-3.558129000	2.988297000
H	3.988040000	1.001021000	-4.099633000	H	-0.083656000	-0.212631000	2.176943000
H	0.595607000	2.510533000	-4.006958000	H	2.814175000	-2.382281000	1.934829000
H	2.611067000	2.372175000	-5.607159000	H	1.191623000	-1.600796000	3.702038000
H	-0.802454000	0.767550000	-5.127936000	H	1.873478000	-4.689905000	1.712187000
H	0.705832000	1.571734000	-6.770003000	H	1.083227000	-3.971424000	3.814984000
H	2.251681000	2.259767000	1.010198000	H	2.979048000	0.954760000	-2.271275000
H	-0.136909000	2.213724000	1.745203000	H	4.478344000	-0.670466000	-3.438575000
H	0.512977000	4.485941000	1.585164000	H	5.860267000	0.790489000	-2.182044000
H	2.320954000	4.540178000	0.025057000	H	4.514511000	1.605290000	-0.388059000
H	2.075991000	3.746060000	-2.376241000	H	3.421602000	0.066259000	1.311627000
H	2.916918000	-0.439197000	-4.423521000				
H	3.311711000	0.989619000	-6.435815000				
H	1.215501000	-0.105241000	-6.720725000				

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	-0.907916000	-1.696637000	1.476751000
H	-0.533061000	-1.861378000	3.916879000
H	-0.468652000	-4.075398000	3.006784000
H	0.478770000	-4.072191000	0.847359000
H	2.563786000	-2.846482000	0.234075000

Co(II)LK8 ⁴²

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	3.195241000	-0.261056000	-1.947275000
C	3.787260000	-0.132149000	-0.511829000
H	4.127101000	-1.156382000	-0.249012000
H	3.034694000	0.168624000	0.234085000
C	2.363582000	-1.575040000	-1.979484000
H	1.910415000	-1.755856000	-0.983001000
H	1.538330000	-1.443309000	-2.704925000
C	3.246166000	-2.769254000	-2.400231000
C	2.762227000	-4.086904000	-2.305018000
C	5.270283000	-3.550878000	-3.394323000
C	3.559615000	-5.162266000	-2.764705000
C	4.829095000	-4.881570000	-3.325170000
H	1.764055000	-4.272435000	-1.878368000
H	6.251847000	-3.300740000	-3.830697000
H	3.190750000	-6.201527000	-2.695320000
H	5.476755000	-5.686507000	-3.709905000
C	5.000172000	0.812653000	-0.526984000
C	5.373837000	1.656748000	0.535841000
C	6.554305000	2.434010000	0.423826000
C	6.907068000	1.500564000	-1.801823000
C	7.319911000	2.362488000	-0.767098000
H	4.763899000	1.696757000	1.452321000
H	6.866740000	3.097010000	1.251285000
H	7.426847000	1.476424000	-2.776562000
H	8.231013000	2.971410000	-0.897012000
N	4.508153000	-2.468586000	-2.925087000
N	5.757840000	0.702475000	-1.694814000
Co	5.241921000	-0.630267000	-3.060925000
O	6.934837000	-1.788248000	-2.126691000
O	8.093235000	-1.296933000	-1.574873000
C	5.819586000	-0.156847000	-4.696668000
H	7.996538000	-0.238913000	-1.565640000
H	6.915673000	-0.211137000	-4.786026000
H	5.579649000	0.859892000	-5.029907000
H	5.463436000	-0.801350000	-5.510650000
C	2.298845000	0.931286000	-2.389434000
N	2.115723000	2.046423000	-1.590169000
C	2.088171000	3.443514000	-2.243789000
C	1.650394000	2.023170000	-0.119555000
C	2.480386000	4.504592000	-1.173119000
C	0.673583000	3.212412000	0.139637000
C	1.391308000	4.588470000	-0.051348000
H	1.076377000	3.671742000	-2.628196000
H	1.145921000	1.055746000	0.064560000
H	2.578632000	5.475169000	-1.690810000
H	-0.195921000	3.120408000	-0.533015000
H	0.637128000	5.349212000	-0.312476000
N	1.724495000	0.851702000	-3.637538000
C	2.247309000	0.026583000	-4.822838000
C	0.408251000	1.605514000	-3.924350000
C	1.761790000	0.644866000	-6.168483000
C	-0.473686000	0.756125000	-4.888432000
C	0.203502000	0.596824000	-6.289467000
H	3.350591000	0.025619000	-4.763024000
H	0.648109000	2.583639000	-4.387203000
H	2.132427000	1.681487000	-6.241858000
H	-1.442297000	1.278912000	-4.982360000
H	-0.124048000	1.404666000	-6.964648000

H	2.530013000	2.127562000	0.544862000
H	0.301957000	3.109209000	1.174746000
H	1.865920000	4.904118000	0.892401000
H	3.467475000	4.250384000	-0.751734000
H	2.801178000	3.417009000	-3.089526000
H	1.874385000	-1.012544000	-4.726121000
H	2.231156000	0.066692000	-6.983781000
H	-0.114831000	-0.359147000	-6.737100000
H	-0.673481000	-0.226027000	-4.426855000
H	-0.088385000	1.764789000	-2.949207000

Mn(II)LK8 ⁴¹

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	3.024366000	-0.016367000	-1.861579000
C	4.083152000	0.072344000	-0.770983000
H	4.401344000	-0.961932000	-0.577291000
H	3.682180000	0.444674000	0.170517000
C	2.116016000	-1.234259000	-1.721939000
H	1.756857000	-1.312583000	-0.688552000
H	1.238639000	-1.053522000	-2.354274000
C	2.744610000	-2.563196000	-2.129067000
C	2.193481000	-3.765110000	-1.664398000
C	4.288228000	-3.758478000	-3.477179000
C	2.700041000	-4.992010000	-2.138502000
C	3.760794000	-4.985842000	-3.066546000
H	1.374132000	-3.752859000	-0.951479000
H	5.118475000	-3.717627000	-4.174437000
H	2.277214000	-5.930016000	-1.790760000
H	4.174627000	-5.909578000	-3.456545000
C	5.288502000	0.902108000	-1.194336000
C	5.949108000	1.773054000	-0.321963000
C	7.114419000	2.440380000	-0.759510000
C	6.883372000	1.339198000	-2.899920000
C	7.583664000	2.223833000	-2.069476000
H	5.582052000	1.921477000	0.689002000
H	7.644676000	3.112061000	-0.090619000
H	7.225324000	1.139703000	-3.910608000
H	8.475024000	2.720207000	-2.438136000
N	3.790700000	-2.562963000	-3.019199000
N	5.761100000	0.686540000	-2.469846000
Mn	4.646814000	-0.743053000	-3.459361000
O	5.262590000	-0.918421000	-5.651671000
O	6.283229000	-0.736942000	-6.379813000
C	7.789904000	-2.504719000	-3.604737000
H	6.915485000	-1.844850000	-3.434008000
H	7.801469000	-3.289634000	-2.843420000
H	8.701708000	-1.907332000	-3.517808000
H	7.746783000	-2.954461000	-4.601631000
C	2.258860000	1.195397000	-2.172541000
N	1.981053000	2.126442000	-1.243422000
C	1.806286000	3.590811000	-1.630159000
C	1.713492000	1.828174000	0.220023000
C	2.085699000	4.490540000	-0.415655000
C	0.598502000	2.756568000	0.744635000
C	1.049597000	4.243626000	0.715611000
H	0.784039000	3.767083000	-1.977255000
H	1.422927000	0.778324000	0.319827000
H	2.039908000	5.532005000	-0.753664000
H	-0.313064000	2.604750000	0.152486000
H	0.173542000	4.884813000	0.572833000
N	1.818792000	1.318564000	-3.450712000
C	2.563959000	0.767228000	-4.629439000
C	0.469153000	1.940270000	-3.769607000
C	2.063111000	1.387251000	-5.954779000
C	-0.236930000	1.110184000	-4.858069000
C	0.559389000	1.096023000	-6.192929000
H	3.627281000	1.050474000	-4.518507000
H	0.603073000	2.975473000	-4.100331000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	2.252042000	2.467474000	-5.930228000
H	-1.232064000	1.542856000	-5.010841000
H	0.164826000	1.849552000	-6.881875000
H	2.623972000	2.011381000	0.803604000
H	0.356977000	2.446629000	1.767716000
H	1.487448000	4.528829000	1.677944000
H	3.111546000	4.328733000	-0.058371000
H	2.494363000	3.790142000	-2.458848000
H	2.435037000	-0.328816000	-4.687127000
H	2.666295000	0.984383000	-6.776715000
H	0.430880000	0.127774000	-6.689328000
H	-0.403220000	0.089236000	-4.487628000
H	-0.117923000	1.938554000	-2.847094000

Mn(II)LK8 ²TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	0.093250000	-0.069614000	-0.780720000
C	0.212223000	1.322095000	-1.417948000
H	-0.692880000	1.448335000	-2.027542000
H	1.061291000	1.397462000	-2.093774000
C	-0.446532000	-1.117396000	-1.775739000
H	-0.091741000	-0.882477000	-2.784969000
H	-0.022965000	-2.088680000	-1.495294000
C	-1.958906000	-1.208275000	-1.747723000
C	-2.678787000	-1.837937000	-2.767593000
C	-3.946764000	-0.842167000	-0.503451000
C	-4.076608000	-1.979913000	-2.635825000
C	-4.714695000	-1.480313000	-1.482703000
H	-2.170010000	-2.219897000	-3.647853000
H	-4.410726000	-0.434633000	0.386669000
H	-4.652630000	-2.468105000	-3.416594000
H	-5.786671000	-1.574139000	-1.345669000
C	0.265858000	2.379368000	-0.334063000
C	0.927512000	3.602651000	-0.463932000
C	0.847160000	4.540113000	0.589893000
C	-0.529572000	2.974914000	1.823006000
C	0.116280000	4.215909000	1.750375000
H	1.483360000	3.837725000	-1.366510000
H	1.345421000	5.501634000	0.506242000
H	-1.101270000	2.698941000	2.702022000
H	0.039475000	4.911123000	2.579663000
N	-2.587433000	-0.706104000	-0.632019000
N	-0.463840000	2.076565000	0.793584000
Mn	-1.435874000	0.373284000	0.534391000
O	-1.826691000	1.758921000	-0.369639000
O	-3.007513000	2.143981000	0.014271000
C	-2.994885000	0.375108000	1.668645000
H	-3.469798000	1.568410000	1.084323000
H	-3.978292000	-0.048209000	1.445785000
H	-3.139259000	1.333371000	2.177954000
H	-2.458526000	-0.319172000	2.330000000
C	1.334574000	-0.601450000	-0.119234000
N	2.558450000	-0.329036000	-0.596309000
C	3.766035000	-0.307956000	0.342387000
C	2.911658000	-0.119821000	-2.061174000
C	4.874695000	0.576585000	-0.248620000
C	4.289998000	-0.745911000	-2.361637000
C	5.416920000	-0.017066000	-1.578126000
H	4.151224000	-1.323079000	0.474031000
H	2.136549000	-0.575221000	-2.683001000
H	5.677348000	0.641099000	0.495053000
H	4.266966000	-1.817703000	-2.125994000
H	6.230587000	-0.721069000	-1.375402000
N	1.146305000	-1.419451000	0.942413000
C	0.009172000	-1.278079000	1.915025000
C	2.046467000	-2.626311000	1.177677000

C	0.293568000	-2.041059000	3.233174000
C	1.191478000	-3.824595000	1.630491000
C	0.484068000	-3.559031000	2.988176000
H	-0.091927000	-0.211757000	2.180996000
H	2.801885000	-2.386039000	1.932446000
H	1.183265000	-1.603580000	3.702826000
H	1.856975000	-4.691854000	1.708910000
H	1.071043000	-3.974133000	3.813585000
H	2.966161000	0.954894000	-2.270591000
H	4.460992000	-0.671693000	-3.441717000
H	5.847228000	0.785687000	-2.185786000
H	4.505499000	1.600970000	-0.389006000
H	3.412513000	0.062093000	1.310771000
H	-0.919719000	-1.693679000	1.480555000
H	-0.541537000	-1.861473000	3.919961000
H	-0.482202000	-4.074694000	3.007579000
H	0.462032000	-4.070937000	0.846759000
H	2.548201000	-2.848129000	0.231605000

Mn(II)LK8 ⁴2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	3.613387000	0.093277000	-1.693897000
C	4.299664000	0.990094000	-0.600098000
H	4.488372000	0.358065000	0.292247000
C	3.630980000	1.817797000	-0.308601000
C	2.965938000	-1.200130000	-1.057348000
H	3.536492000	-1.436748000	-0.134804000
H	1.912246000	-1.033390000	-0.774464000
C	3.069783000	-2.373592000	-2.049573000
C	2.148851000	-3.433902000	-2.080896000
C	4.424290000	-3.438262000	-3.709989000
C	2.382552000	-4.530082000	-2.949995000
C	3.536014000	-4.528383000	-3.769541000
H	1.266565000	-3.419006000	-1.422201000
H	5.338165000	-3.406227000	-4.327926000
H	1.674011000	-5.377542000	-2.979358000
H	3.755829000	-5.368036000	-4.449697000
C	5.623835000	1.574252000	-1.133557000
C	6.150113000	2.794598000	-0.676687000
C	7.414616000	3.228960000	-1.149490000
C	7.548619000	1.213948000	-2.512288000
C	8.119505000	2.423281000	-2.075690000
H	5.587980000	3.399251000	0.051799000
H	7.843671000	4.184031000	-0.795542000
H	8.067188000	0.560940000	-3.235400000
H	9.107554000	2.725361000	-2.461633000
N	4.208503000	-2.347643000	-2.864436000
N	6.303746000	0.768755000	-2.056192000
Mn	5.431080000	-0.874345000	-2.588459000
O	6.719092000	-1.887344000	-2.185564000
O	6.021956000	-1.756015000	-0.897336000
C	5.925108000	-0.687390000	-4.432053000
H	6.729357000	-1.294411000	-0.303046000
H	6.905541000	-1.158278000	-4.605889000
H	6.029185000	0.357242000	-4.751387000
H	5.230547000	-1.172489000	-5.126840000
C	2.391198000	0.927958000	-2.266662000
N	1.630680000	1.678068000	-1.385700000
C	1.078005000	3.041649000	-1.842168000
C	1.133090000	1.215939000	0.003502000
C	1.402772000	4.120337000	-0.757498000
C	0.236013000	2.305320000	0.665502000
C	0.926434000	3.699909000	0.678946000
H	-0.015127000	2.95342000	-1.998432000
H	0.542199000	0.289333000	-0.150978000
H	0.892010000	5.043898000	-1.084205000
H	-0.732931000	2.353479000	0.140797000
H	0.211722000	4.441606000	1.072062000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

N	2.068712000	0.875698000	-3.594329000
C	3.069368000	0.671179000	-4.734715000
C	0.602035000	1.071355000	-4.045490000
C	2.538877000	1.336445000	-6.041747000
C	0.342012000	0.195290000	-5.306600000
C	1.204944000	0.676019000	-6.521084000
H	4.023848000	1.126369000	-4.417161000
H	0.434556000	2.140762000	-4.281470000
H	2.403368000	2.416755000	-5.862363000
H	-0.734803000	0.276634000	-5.539933000
H	0.641790000	1.411817000	-7.118833000
H	1.998561000	0.986254000	0.652475000
H	0.035041000	1.968864000	1.698383000
H	1.787352000	3.679035000	1.367854000
H	2.486358000	4.325535000	-0.768156000
H	1.570276000	3.295544000	-2.797506000
H	3.198289000	-0.418373000	-4.883768000
H	3.324269000	1.225122000	-6.809997000
H	1.419595000	-0.185973000	-7.174130000
H	0.549018000	-0.860648000	-5.063183000
H	-0.035414000	0.777874000	-3.190481000

Cr(II)LK8 ³1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	3.330601000	0.214905000	-1.471333000
C	4.286331000	0.703066000	-0.361316000
H	4.769513000	-0.201063000	0.036778000
H	3.750727000	1.158611000	0.468560000
C	2.574915000	-1.077056000	-1.076944000
H	2.748337000	-1.259575000	-0.009494000
H	1.500751000	-0.904881000	-1.198080000
C	2.958156000	-2.315783000	-1.879985000
C	2.261747000	-3.517089000	-1.686695000
C	4.346116000	-3.338735000	-3.506473000
C	2.629409000	-4.656437000	-2.428711000
C	3.687165000	-4.562098000	-3.356516000
H	1.447715000	-3.572013000	-0.969304000
H	5.163279000	-3.234996000	-4.212669000
H	2.102254000	-5.595382000	-2.287396000
H	3.996476000	-5.416855000	-3.948369000
C	5.338976000	1.651452000	-0.912828000
C	5.831748000	2.750821000	-0.204407000
C	6.880131000	3.515079000	-0.764955000
C	6.853678000	2.053224000	-2.694706000
C	7.393277000	3.162959000	-2.028226000
H	5.430009000	3.005355000	0.771634000
H	7.286305000	4.365506000	-0.225159000
H	7.224209000	1.754559000	-3.670144000
H	8.196553000	3.729537000	-2.487169000
N	3.992632000	-2.230696000	-2.777382000
N	5.852754000	1.305353000	-2.142778000
Cr	4.954387000	-0.430553000	-2.781743000
O	6.715770000	-1.041412000	-4.124901000
O	7.863704000	-1.567434000	-4.135443000
C	7.354108000	-4.370120000	-5.816090000
H	7.312460000	-4.546045000	-4.732692000
H	7.369060000	-5.338500000	-6.324454000
H	8.275853000	-3.836955000	-6.071263000
H	6.484460000	-3.801251000	-6.173767000
C	2.355688000	1.240668000	-1.957888000
N	1.787263000	2.106329000	-1.097403000
C	1.330349000	3.485088000	-1.569451000
C	1.454290000	1.812882000	0.356119000
C	1.287542000	4.460737000	-0.383003000
C	0.112408000	2.477064000	0.730440000

C	0.221312000	4.026284000	0.660224000
H	0.330653000	3.416502000	-2.007228000
H	1.407156000	0.731493000	0.504685000
H	1.049465000	5.454419000	-0.779443000
H	-0.681634000	2.101516000	0.072092000
H	-0.755639000	4.447727000	0.401650000
N	2.020913000	1.216953000	-3.267339000
C	2.961992000	0.840080000	-4.383659000
C	0.601745000	1.537347000	-3.718552000
C	2.486961000	1.426864000	-5.733126000
C	0.212219000	0.617372000	-4.889344000
C	1.098248000	0.870491000	-6.139956000
H	3.950195000	1.268088000	-4.157521000
H	0.534395000	2.586140000	-4.024294000
H	2.466538000	2.521123000	-5.657744000
H	-0.841835000	0.807339000	-5.121750000
H	0.614390000	1.585493000	-6.812980000
H	2.235152000	2.231858000	1.001782000
H	-0.149374000	2.154635000	1.744728000
H	0.484640000	4.435199000	1.641231000
H	2.282798000	4.544371000	0.073297000
H	2.032053000	3.808357000	-2.345830000
H	3.005971000	-0.256206000	-4.477072000
H	3.237782000	1.183690000	-6.494058000
H	1.208832000	-0.060182000	-6.707074000
H	0.270302000	-0.431281000	-4.567226000
H	-0.057413000	1.376612000	-2.860407000

Cr(II)LK8 ³TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	0.086975000	-0.067831000	-0.778724000
C	0.206663000	1.324097000	-1.415339000
H	-0.698788000	1.451421000	-2.024188000
H	1.055287000	1.399076000	-2.091765000
C	-0.454454000	-1.114647000	-1.773866000
H	-0.100221000	-0.879523000	-2.783243000
H	-0.031510000	-2.086436000	-1.494230000
C	-1.966884000	-1.204242000	-1.744757000
C	-2.688072000	-1.832772000	-2.764403000
C	-3.953491000	-0.837059000	-0.498806000
C	-4.085914000	-1.973614000	-2.631656000
C	-4.722706000	-1.474051000	-1.477802000
H	-2.180285000	-2.214723000	-3.645239000
H	-4.416434000	-0.429577000	0.391869000
H	-4.662942000	-2.460918000	-3.412237000
H	-5.794658000	-1.567026000	-1.340009000
C	0.262021000	2.380775000	-0.330962000
C	0.924627000	3.603555000	-0.460710000
C	0.845871000	4.540553000	0.593647000
C	-0.531275000	2.975913000	1.827006000
C	0.115586000	4.216391000	1.754516000
H	1.479997000	3.838609000	-1.363588000
H	1.344895000	5.501689000	0.510107000
H	-1.102550000	2.699987000	2.706313000
H	0.040002000	4.911251000	2.584211000
N	-2.594141000	-0.702097000	-0.628328000
N	-0.467088000	2.078029000	0.797081000
Cr	-1.440779000	0.375713000	0.537760000
O	-1.831086000	1.762142000	-0.365276000
O	-3.011289000	2.148020000	0.019716000
C	-2.998934000	0.378301000	1.673187000
H	-3.473262000	1.572306000	1.089825000
H	-3.982872000	-0.044059000	1.450853000
H	-3.142103000	1.336430000	2.183088000
H	-2.462674000	-0.316773000	2.333788000
C	1.328339000	-0.601067000	-0.118440000
N	2.552089000	-0.329462000	-0.596298000
C	3.760398000	-0.309892000	0.341499000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	2.904375000	-0.119809000	-2.061324000
C	4.869371000	0.573996000	-0.249896000
C	4.281951000	-0.746930000	-2.363139000
C	5.410087000	-0.019448000	-1.580109000
H	4.144814000	-1.325412000	0.472341000
H	2.128408000	-0.574230000	-2.682797000
H	5.672639000	0.637445000	0.493206000
H	4.258177000	-1.818821000	-2.128019000
H	6.223302000	-0.724251000	-1.378352000
N	1.140166000	-1.419443000	0.942934000
C	0.003887000	-1.277586000	1.916473000
C	2.039469000	-2.627193000	1.176912000
C	0.288619000	-2.041476000	3.234022000
C	1.183793000	-3.824971000	1.629764000
C	0.477631000	-3.559487000	2.988115000
H	-0.096097000	-0.211313000	2.183058000
H	2.795660000	-2.387951000	1.931233000
H	1.179044000	-1.604998000	3.703226000
H	1.848603000	-4.692841000	1.707245000
H	1.064871000	-3.975509000	3.812873000
H	2.959644000	0.954964000	-2.270239000
H	4.452196000	-0.672313000	-3.443310000
H	5.840627000	0.783242000	-2.187687000
H	4.500950000	1.598768000	-0.389487000
H	3.407921000	0.059971000	1.310335000
H	-0.925687000	-1.692170000	1.482492000
H	-0.545815000	-1.861521000	3.921528000
H	-0.489065000	-4.074330000	3.007985000
H	0.453546000	-4.070291000	0.846457000
H	2.540300000	-2.848964000	0.230351000

Cr(II)LK8 ⁵2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
N	3.646020000	0.082145000	-1.497145000
C	4.554898000	0.820086000	-0.459635000
H	5.017878000	0.030656000	0.168997000
H	3.982406000	1.494341000	0.197529000
C	2.985261000	-1.206334000	-0.883433000
H	3.648299000	-1.543789000	-0.058980000
H	1.987323000	-0.994152000	-0.458042000
C	2.873565000	-2.304768000	-1.961593000
C	1.914037000	-3.328833000	-1.879854000
C	3.786519000	-3.249634000	-3.949426000
C	1.904075000	-4.350406000	-2.861324000
C	2.851230000	-4.300102000	-3.910738000
H	1.187395000	-3.339723000	-1.052591000
H	4.533542000	-3.185690000	-4.757373000
H	1.165178000	-5.169658000	-2.807391000
H	2.872106000	-5.071544000	-4.697909000
C	5.646425000	1.595523000	-1.226570000
C	6.227797000	2.776673000	-0.737288000
C	7.266997000	3.395800000	-1.476548000
C	7.062233000	1.631575000	-3.145977000
C	7.678412000	2.815806000	-2.698898000
H	5.886366000	3.207253000	0.216732000
H	7.743998000	4.319344000	-1.102989000
H	7.364589000	1.156651000	-4.093924000
H	8.477401000	3.271826000	-3.306283000
N	3.833336000	-2.240016000	-2.982635000
N	6.049821000	0.989429000	-2.427683000
Cr	5.120009000	-0.723025000	-2.854049000
O	6.009833000	-1.600240000	-1.354177000
O	7.139626000	-2.352855000	-1.588050000
C	6.391511000	-1.334644000	-4.268522000
H	7.303638000	-2.282681000	-2.634867000
H	6.451816000	-2.422593000	-4.435535000

H	7.432108000	-0.988068000	-4.157865000
H	6.086518000	-0.936069000	-5.250710000
C	2.515912000	1.011745000	-2.022024000
N	1.801333000	1.832573000	-1.182693000
C	1.098865000	3.091617000	-1.752386000
C	1.575332000	1.635355000	0.332637000
C	0.935058000	4.160000000	-0.632234000
C	0.138232000	2.108836000	0.711562000
C	-0.018021000	3.651639000	0.498543000
H	0.102500000	2.801876000	-2.139126000
H	1.733807000	0.573285000	0.582654000
H	0.517081000	5.063693000	-1.111072000
H	-0.598120000	1.545134000	0.113408000
H	-1.066443000	3.873823000	0.239398000
N	2.261313000	0.961008000	-3.381076000
C	3.366390000	0.737699000	-4.406182000
C	0.840843000	1.098464000	-3.959656000
C	2.943728000	1.311745000	-5.802396000
C	0.708332000	0.162243000	-5.198758000
C	1.668212000	0.597200000	-6.355338000
H	4.275797000	1.271928000	-4.056696000
H	0.655922000	2.151135000	-4.251634000
H	2.771855000	2.395837000	-5.686068000
H	-0.343466000	0.211244000	-5.532692000
H	1.150730000	1.292136000	-7.037632000
H	2.320309000	2.254211000	0.873505000
H	-0.021430000	1.843207000	1.771840000
H	0.214985000	4.190655000	1.431790000
H	1.926771000	4.428694000	-0.230582000
H	1.730788000	3.453306000	-2.585744000
H	3.550636000	-0.359663000	-4.527879000
H	3.796362000	1.181551000	-6.492181000
H	1.953762000	-0.290716000	-6.943461000
H	0.907540000	-0.877209000	-4.887319000
H	0.137370000	0.804494000	-3.158659000

Fe(II)LK9 ⁷1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	0.342628000	-0.313673000	1.994061000
C	0.535730000	-0.849799000	3.271701000
C	-0.064368000	-2.084488000	3.587281000
C	-0.835580000	-2.746135000	2.610812000
C	-0.983712000	-2.168538000	1.343917000
N	-0.400554000	-0.960520000	1.045256000
C	-1.720544000	-2.880630000	2.193670000
N	-2.344342000	-1.886631000	-0.742571000
C	-2.401200000	-2.358500000	-2.184078000
C	-2.287375000	-1.186720000	-3.147239000
N	-1.513396000	-0.123158000	-2.748939000
C	-1.310621000	0.925317000	-3.603181000
C	-1.866188000	0.948508000	-4.887039000
C	-2.665084000	-0.135472000	-5.300473000
C	-2.879359000	-1.211593000	-4.415765000
H	0.779085000	0.639838000	1.718726000
H	1.134912000	-0.311912000	3.998121000
H	0.062176000	-2.521712000	4.573135000
H	-1.307292000	-3.698147000	2.834124000
H	-2.467833000	-3.570593000	0.622461000
H	-1.002266000	-3.483207000	-0.350774000
H	-3.308879000	-2.936572000	-2.380958000
H	-1.550435000	-3.033339000	-2.341305000
H	-0.700076000	1.746817000	-3.245481000
H	-1.681186000	1.794159000	-5.540251000
H	-3.114959000	-0.141825000	-6.288717000
H	-3.493333000	-2.055879000	-4.713973000
Fe	-0.862383000	-0.228387000	-0.810294000
O	1.151150000	-1.379948000	-1.666540000
O	2.293846000	-1.731323000	-2.072812000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	-3.634938000	-1.378353000	-0.266677000
C	-4.769637000	-2.201403000	-0.132907000
C	-5.999650000	-1.710601000	0.323137000
C	-6.123451000	-0.352161000	0.663008000
C	-5.013803000	0.500941000	0.541911000
C	-3.807994000	-0.032209000	0.083106000
F	-2.697639000	0.837834000	-0.036313000
F	-5.107680000	1.826790000	0.864782000
F	-7.314163000	0.137710000	1.107940000
F	-7.072621000	-2.547525000	0.436832000
F	-4.654093000	-3.540149000	-0.466288000
C	0.548974000	2.234034000	-0.669876000
H	1.166396000	2.573280000	0.166249000
H	0.650042000	2.943930000	-1.495129000
H	-0.501632000	2.223792000	-0.344859000
H	0.945636000	1.258998000	-1.008850000

Fe(II)LK9⁵TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	0.050226000	-0.014411000	2.034327000
C	0.245869000	-0.509123000	3.328331000
C	-0.183843000	-1.815343000	3.632911000
C	-0.813928000	-2.585573000	2.633852000
C	-0.980086000	-2.045741000	1.355229000
N	-0.538692000	-0.771276000	1.062545000
C	-1.600971000	-2.817730000	0.208973000
N	-2.264503000	-1.831244000	-0.754241000
C	-2.288626000	-2.299307000	-2.211197000
C	-2.271567000	-1.084241000	-3.115642000
N	-1.611995000	0.026021000	-2.628475000
C	-1.533511000	1.158745000	-3.386110000
C	-2.086820000	1.219643000	-4.669930000
C	-2.745951000	0.086276000	-5.184313000
C	-2.846576000	-1.074302000	-4.389491000
H	0.359884000	0.988918000	1.771879000
H	0.722259000	0.116867000	4.074868000
H	-0.040919000	-2.223156000	4.629135000
H	-1.166165000	-3.589289000	2.850634000
H	-2.317802000	-3.562350000	0.565045000
H	-0.818875000	-3.345540000	-0.349097000
H	-3.155117000	-2.936735000	-2.405393000
H	-1.386133000	-2.898586000	-2.377659000
H	-1.029705000	2.015695000	-2.957968000
H	-2.001804000	2.133748000	-5.247310000
H	-3.181585000	0.107317000	-6.178764000
H	-3.363239000	-1.954204000	-4.759918000
Fe	-0.878929000	-0.255999000	-0.814501000
O	0.595793000	-1.623262000	-1.539352000
O	1.714831000	-0.864535000	-1.694047000
C	-3.592038000	-1.399435000	-0.284710000
C	-4.674115000	-2.292461000	-0.174690000
C	-5.935633000	-1.879216000	0.272275000
C	-6.142874000	-0.533881000	0.624834000
C	-5.084364000	0.385192000	0.525491000
C	-3.843262000	-0.068532000	0.075496000
F	-2.782672000	0.856071000	-0.026140000
F	-5.260515000	1.698627000	0.860603000
F	-7.364335000	-0.120793000	1.060650000
F	-6.957203000	-2.779091000	0.364257000
F	-4.475129000	-3.617453000	-0.521677000
C	0.596248000	1.390638000	-0.887182000
H	1.354053000	1.575077000	-0.114855000
H	0.853151000	1.934595000	-1.804981000
H	-0.332016000	1.860606000	-0.510254000
H	1.231879000	0.234127000	-1.315515000

Fe(II)LK9⁵2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	-0.001600000	-0.161550000	2.191001000
C	0.082121000	-0.648089000	3.500714000
C	-0.424588000	-1.930640000	3.784725000
C	-1.012931000	-2.682415000	2.748267000
C	-1.065608000	-2.147774000	1.456106000
N	-0.552935000	-0.900193000	1.183350000
C	-1.647768000	-2.911162000	0.279827000
N	-2.238747000	-1.922873000	-0.709278000
C	-2.277858000	-2.408812000	-2.147308000
C	-2.293334000	-1.208356000	-3.075714000
N	-1.607432000	-0.095513000	-2.647140000
C	-1.563647000	1.015474000	-3.437980000
C	-2.182652000	1.052180000	-4.693302000
C	-2.874343000	-0.087364000	-5.145473000
C	-2.935372000	-1.226956000	-4.318767000
H	0.367668000	0.826931000	1.946563000
H	0.529985000	-0.033850000	4.274195000
H	-0.372941000	-2.332856000	4.791952000
H	-1.423715000	-3.667764000	2.945542000
H	-2.390933000	-3.642368000	0.611196000
H	-0.851553000	-3.458840000	-0.239329000
H	-3.136441000	-3.061796000	-2.328564000
H	-1.368649000	-2.998283000	-2.317430000
H	-1.034223000	1.881555000	-3.060413000
H	-2.123398000	1.952447000	-5.295087000
H	-3.363900000	-0.086530000	-6.114626000
H	-3.474924000	-2.113180000	-4.638210000
Fe	-0.691443000	-0.383136000	-0.811533000
O	0.832599000	-1.398148000	-1.365058000
O	1.278239000	-1.379544000	-2.718154000
C	-3.530870000	-1.388918000	-0.262153000
C	-4.674891000	-2.200258000	-0.138959000
C	-5.907781000	-1.693192000	0.289500000
C	-6.023687000	-0.329755000	0.610419000
C	-4.903451000	0.509655000	0.497935000
C	-3.692013000	-0.035852000	0.067064000
F	-2.578585000	0.820029000	-0.041088000
F	-4.991131000	1.840960000	0.803391000
F	-7.217019000	0.177550000	1.028822000
F	-6.990508000	-2.519120000	0.394775000
F	-4.567599000	-3.544707000	-0.453672000
C	0.463011000	1.393700000	-0.803995000
H	1.240172000	1.185567000	-0.068262000
H	0.832603000	1.419276000	-1.830438000
H	-0.287685000	2.138451000	-0.527836000
H	2.165286000	-1.830897000	-2.688445000

Ni(II)LK9³1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	0.226233000	-0.196048000	1.993673000
C	0.436994000	-0.710953000	3.279197000
C	-0.082020000	-1.980117000	3.597790000
C	-0.797640000	-2.696743000	2.617738000
C	-0.966492000	-2.134801000	1.346554000
N	-0.456539000	-0.896869000	1.043568000
C	-1.654964000	-2.882831000	0.216045000
N	-2.286911000	-1.898348000	-0.757006000
C	-2.329618000	-2.366159000	-2.204785000
C	-2.258054000	-1.170460000	-3.140532000
N	-1.543831000	-0.086229000	-2.693988000
C	-1.386802000	0.999661000	-3.503376000
C	-1.926037000	1.038901000	-4.795883000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	-2.659044000	-0.068911000	-5.261645000
C	-2.830313000	-1.185063000	-4.417924000
H	0.599850000	0.782056000	1.717235000
H	0.988755000	-0.128179000	4.008597000
H	0.061816000	-2.401280000	4.588144000
H	-1.210775000	-3.675452000	2.841795000
H	-2.396891000	-3.588050000	0.601293000
H	-0.913244000	-3.465580000	-0.343826000
H	-3.219530000	-2.971490000	-2.398747000
H	-1.456094000	-3.010011000	-2.364402000
H	-0.828639000	1.838438000	-3.106474000
H	-1.777629000	1.917161000	-5.414516000
H	-3.092930000	-0.063308000	-6.256916000
H	-3.395773000	-2.049026000	-4.753430000
Ni	-0.935328000	-0.297724000	-0.801583000
O	0.978636000	-1.583179000	-1.637911000
O	2.157481000	-1.823281000	-2.019022000
C	-3.647659313	-1.597132610	-0.290756180
C	-4.653859437	-2.577830947	-0.217491447
C	-5.948257101	-2.282400606	0.229563790
C	-6.267690395	-0.969894049	0.620065149
C	-5.287845515	0.035915913	0.558744264
C	-4.012346595	-0.304598527	0.107052356
F	-3.025993484	0.710334503	0.044111382
F	-5.572713633	1.319956099	0.931182719
F	-7.522433172	-0.671436300	1.056379341
F	-6.894067030	-3.264779350	0.285446886
F	-4.343595035	-3.870649439	-0.601213306
C	0.550348000	2.073258000	-0.720115000
H	1.197282000	2.394620000	0.100311000
H	0.697191000	2.744910000	-1.569813000
H	-0.496302000	2.141477000	-0.391284000
H	0.874285000	1.061682000	-1.028158000

Ni(II)LK9 ¹TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	0.048332000	-0.020591000	1.950443000
C	0.264033000	-0.496626000	3.250097000
C	-0.131652000	-1.807621000	3.575086000
C	-0.755299000	-2.601165000	2.591832000
C	-0.940135000	-2.077588000	1.308091000
N	-0.524353000	-0.805866000	0.996365000
C	-1.566487000	-2.849479000	0.171200000
N	-2.219032000	-1.844227000	-0.781754000
C	-2.274830000	-2.322885000	-2.235032000
C	-2.282103000	-1.103985000	-3.128321000
N	-1.639515000	0.002058000	-2.625473000
C	-1.589229000	1.152355000	-3.348357000
C	-2.156726000	1.232336000	-4.627875000
C	-2.795985000	0.100635000	-5.166171000
C	-2.869625000	-1.078180000	-4.396744000
H	0.327683000	0.987862000	1.677237000
H	0.728485000	0.151964000	3.984927000
H	0.029631000	-2.199765000	4.574591000
H	-1.089165000	-3.608288000	2.821640000
H	-2.297020000	-3.581717000	0.524064000
H	-0.795399000	-3.382456000	-0.394841000
H	-3.149078000	-2.958603000	-2.398361000
H	-1.378264000	-2.924777000	-2.417216000
H	-1.104228000	2.011778000	-2.905525000
H	-2.095441000	2.163764000	-5.180084000
H	-3.238176000	0.136600000	-6.157144000
H	-3.375484000	-1.959251000	-4.779378000
Ni	-0.918214000	-0.308951000	-0.847275000
O	0.468870000	-1.458762000	-1.623509000

O	1.574173000	-1.035114000	-0.970175000
C	-3.536260000	-1.379836000	-0.294277000
C	-4.626849000	-2.263206000	-0.177385000
C	-5.880893000	-1.840554000	0.279559000
C	-6.073551000	-0.493738000	0.633757000
C	-5.007944000	0.414698000	0.523017000
C	-3.771170000	-0.044819000	0.064024000
F	-2.716561000	0.879753000	-0.048353000
F	-5.171406000	1.730404000	0.855667000
F	-7.287467000	-0.069817000	1.078861000
F	-6.908803000	-2.732277000	0.377795000
F	-4.445230000	-3.589938000	-0.530548000
C	0.506191000	1.373045000	-0.918454000
H	1.266346000	1.693122000	-0.184238000
H	0.766290000	1.726464000	-1.920799000
H	-0.410024000	1.885285000	-0.593673000
H	1.214260000	0.193312000	-0.959369000

Ni(II)LK9 ³2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	0.013938000	-0.091233000	2.097635000
C	0.125877000	-0.557087000	3.414595000
C	-0.360573000	-1.839031000	3.728739000
C	-0.961468000	-2.610509000	2.714498000
C	-1.043075000	-2.095648000	1.415225000
N	-0.544778000	-0.848572000	1.113089000
C	-1.651575000	-2.878033000	0.265773000
N	-2.277766000	-1.904118000	-0.717995000
C	-2.320679000	-2.374797000	-2.160985000
C	-2.286673000	-1.164337000	-3.076503000
N	-1.573095000	-0.076119000	-2.627698000
C	-1.498191000	1.043414000	-3.398916000
C	-2.106684000	1.114289000	-4.659667000
C	-2.822329000	0.000868000	-5.135517000
C	-2.918592000	-1.148287000	-4.325513000
H	0.365640000	0.897956000	1.833729000
H	0.578992000	0.076081000	4.169523000
H	-0.286434000	-2.225136000	4.740750000
H	-1.361768000	-3.595535000	2.933818000
H	-2.379067000	-3.610833000	0.626378000
H	-0.868583000	-3.428719000	-0.269226000
H	-3.198821000	-2.996480000	-2.357573000
H	-1.434611000	-2.999348000	-2.327774000
H	-0.953903000	1.891456000	-3.003168000
H	-2.021826000	2.023573000	-5.244558000
H	-3.304978000	0.028787000	-6.107645000
H	-3.480179000	-2.014935000	-4.660574000
Ni	-0.868921000	-0.354249000	-0.788581000
O	0.725100000	-1.701480000	-1.377508000
O	1.499676000	-1.291258000	-2.438689000
C	-3.578350000	-1.402500000	-0.256532000
C	-4.700580000	-2.241530000	-0.123430000
C	-5.940308000	-1.763741000	0.318189000
C	-6.084459000	-0.403428000	0.641850000
C	-4.986064000	0.463191000	0.518695000
C	-3.767015000	-0.053917000	0.074791000
F	-2.671585000	0.822510000	-0.048242000
F	-5.102707000	1.791367000	0.826277000
F	-7.285311000	0.074746000	1.073119000
F	-7.002740000	-2.614587000	0.433356000
F	-4.563022000	-3.582242000	-0.443057000
C	0.421435000	1.195341000	-0.826353000
H	1.218632000	0.928212000	-0.133655000
H	0.760950000	1.246325000	-1.859976000
H	-0.219468000	2.019688000	-0.500000000
H	2.231470000	-1.967029000	-2.543562000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

Co(II)LK9 ⁶1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	0.459517000	-0.366918000	1.879373000
C	0.713912000	-0.901012000	3.147358000
C	0.082388000	-2.104577000	3.516876000
C	-0.776410000	-2.741402000	2.599236000
C	-0.983911000	-2.165273000	1.339578000
N	-0.378225000	-0.984170000	0.992330000
C	-1.792739000	-2.865620000	0.261962000
N	-2.400228000	-1.868433000	-0.711854000
C	-2.443794000	-2.360922000	-2.150185000
C	-2.269379000	-1.212811000	-3.127403000
N	-1.471310000	-0.173611000	-2.719560000
C	-1.177884000	0.837065000	-3.591896000
C	-1.678602000	0.850934000	-4.898790000
C	-2.510666000	-0.204707000	-5.319220000
C	-2.807887000	-1.247847000	-4.419464000
H	0.920483000	0.561879000	1.564099000
H	1.384713000	-0.384841000	3.825332000
H	0.255643000	-2.538819000	4.496879000
H	-1.266950000	-3.674255000	2.859761000
H	-2.560567000	-3.507246000	0.703471000
H	-1.122371000	-3.518503000	-0.310401000
H	-3.363362000	-2.916826000	-2.353412000
H	-1.609853000	-3.061636000	-2.280060000
H	-0.540815000	1.636443000	-3.231532000
H	-1.424963000	1.668383000	-5.564757000
H	-2.918351000	-0.216830000	-6.325515000
H	-3.440598000	-2.075714000	-4.724414000
Co	-0.971991000	-0.201858000	-0.766487000
O	1.287981000	-1.130750000	-1.639603000
O	2.431608000	-1.489487000	-2.035821000
C	-3.703541000	-1.371514000	-0.255242000
C	-4.838912000	-2.195621000	-0.138414000
C	-6.074141000	-1.702389000	0.302311000
C	-6.201689000	-0.344151000	0.643374000
C	-5.090039000	0.509457000	0.539783000
C	-3.882147000	-0.029043000	0.095746000
F	-2.757324000	0.826959000	-0.011713000
F	-5.184722000	1.834253000	0.863724000
F	-7.397844000	0.145075000	1.072987000
F	-7.149209000	-2.537878000	0.400526000
F	-4.719986000	-3.533840000	-0.470294000
C	0.292317000	2.305565000	-0.582105000
H	0.921776000	2.653052000	0.241501000
H	0.362833000	3.017404000	-1.408684000
H	-0.749191000	2.276698000	-0.234473000
H	0.698745000	1.336178000	-0.930267000

Co(II)LK9 ²TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	0.055062000	-0.170769000	1.983830000
C	0.261000000	-0.665365000	3.278269000
C	-0.167768000	-1.968390000	3.591372000
C	-0.810882000	-2.735053000	2.599412000
C	-0.983712000	-2.192557000	1.321973000
N	-0.541714000	-0.926160000	1.019917000
C	-1.625218000	-2.951468000	0.182035000
N	-2.238239000	-1.939159000	-0.785427000
C	-2.308661000	-2.435387000	-2.229588000
C	-2.267738000	-1.233193000	-3.145761000
N	-1.602837000	-0.134184000	-2.654854000
C	-1.511850000	0.994310000	-3.412035000
C	-2.054355000	1.055807000	-4.702489000
C	-2.716826000	-0.071187000	-5.222727000

C	-2.834444000	-1.226209000	-4.424151000
H	0.361092000	0.832577000	1.722704000
H	0.744648000	-0.036955000	4.018168000
H	-0.015472000	-2.375233000	4.586370000
H	-1.166880000	-3.737127000	2.817834000
H	-2.379465000	-3.660671000	0.533713000
H	-0.865664000	-3.513553000	-0.372214000
H	-3.202558000	-3.044160000	-2.389779000
H	-1.431944000	-3.069888000	-2.398937000
H	-1.012514000	1.851560000	-2.982876000
H	-1.957952000	1.969833000	-5.278241000
H	-3.142118000	-0.049323000	-6.221420000
H	-3.355567000	-2.104214000	-4.793143000
Co	-0.929324000	-0.409859000	-0.832181000
O	0.371402000	-1.609159000	-1.465611000
O	1.544359000	-0.926902000	-1.638663000
C	-3.532175000	-1.418911000	-0.306888000
C	-4.677768000	-2.218329000	-0.155391000
C	-5.889970000	-1.684842000	0.305718000
C	-5.977128000	-0.317939000	0.627482000
C	-4.848756000	0.510550000	0.485558000
C	-3.668524000	-0.068336000	0.024088000
F	-2.508251000	0.743993000	-0.130327000
F	-4.903838000	1.840902000	0.789332000
F	-7.150329000	0.205226000	1.075459000
F	-6.981388000	-2.490739000	0.441629000
F	-4.596894000	-3.561335000	-0.470826000
C	0.386441000	1.301386000	-0.842307000
H	1.170673000	1.462117000	-0.087069000
H	0.667055000	1.816991000	-1.772177000
H	-0.487082000	1.843989000	-0.462734000
H	1.085341000	0.164975000	-1.272390000

Co(II)LK9 ⁴2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	-0.045185000	-0.063241000	2.125080000
C	0.044321000	-0.523929000	3.444419000
C	-0.422434000	-1.816668000	3.748488000
C	-0.983118000	-2.603650000	2.722533000
C	-1.042817000	-2.093859000	1.420728000
N	-0.561695000	-0.837438000	1.127636000
C	-1.624156000	-2.879682000	0.258690000
N	-2.242021000	-1.904695000	-0.726666000
C	-2.293432000	-2.376193000	-2.167862000
C	-2.288666000	-1.160439000	-3.077534000
N	-1.594548000	-0.063354000	-2.620604000
C	-1.555567000	1.073245000	-3.372932000
C	-2.180113000	1.149859000	-4.624324000
C	-2.875101000	0.026055000	-5.109156000
C	-2.936679000	-1.138738000	-4.317407000
H	0.293437000	0.931174000	1.862854000
H	0.465399000	0.118855000	4.209696000
H	-0.365197000	-2.198912000	4.763160000
H	-1.370747000	-3.594947000	2.936142000
H	-2.350176000	-3.620031000	0.606881000
H	-0.827996000	-3.421746000	-0.266074000
H	-3.165521000	-3.008568000	-2.357264000
H	-1.401024000	-2.987923000	-2.347164000
H	-1.023479000	1.924563000	-2.966685000
H	-2.124138000	2.069320000	-5.196634000
H	-3.369960000	0.058535000	-6.075081000
H	-3.484757000	-2.011130000	-4.659705000
Co	-0.761781000	-0.352646000	-0.816803000
O	0.803136000	-1.756937000	-1.364766000
O	1.408740000	-1.538511000	-2.586163000
C	-3.541997000	-1.397517000	-0.264913000
C	-4.660233000	-2.244550000	-0.135732000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	-5.905860000	-1.781350000	0.302607000
C	-6.063340000	-0.423609000	0.628673000
C	-4.971573000	0.450535000	0.510249000
C	-3.742798000	-0.049397000	0.069104000
F	-2.669433000	0.849384000	-0.040677000
F	-5.101826000	1.777410000	0.820821000
F	-7.269613000	0.043810000	1.057258000
F	-6.960286000	-2.643389000	0.412008000
F	-4.512141000	-3.584643000	-0.457566000
C	0.517510000	1.225493000	-0.825015000
H	1.318630000	0.969998000	-0.129904000
H	0.859580000	1.268939000	-1.861735000
H	-0.117627000	2.058963000	-0.511297000
H	2.211812000	-2.135363000	-2.620237000

Mn(II)LK9 ⁴¹

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	0.435888000	-0.405447000	1.990263000
C	0.581999000	-0.936244000	3.276960000
C	-0.084023000	-2.135904000	3.594157000
C	-0.870317000	-2.768016000	2.610453000
C	-0.968697000	-2.197086000	1.334745000
N	-0.321861000	-1.022558000	1.033171000
C	-1.719329000	-2.893696000	0.207378000
N	-2.333105000	-1.895147000	-0.757919000
C	-2.401318000	-2.378619000	-2.196966000
C	-2.301927000	-1.220479000	-3.180184000
N	-1.487944000	-0.169320000	-2.833319000
C	-1.292172000	0.851912000	-3.720649000
C	-1.895822000	0.862772000	-4.983642000
C	-2.738048000	-0.207491000	-5.341280000
C	-2.943504000	-1.258138000	-4.424715000
H	0.924845000	0.523281000	1.714820000
H	1.195259000	-0.420864000	4.008012000
H	0.003963000	-2.568864000	4.586037000
H	-1.392008000	-3.693461000	2.834456000
H	-2.474771000	-3.573285000	0.612683000
H	-1.012673000	-3.510005000	-0.363577000
H	-3.307401000	-2.963650000	-2.379468000
H	-1.549167000	-3.052441000	-2.354859000
H	-0.644016000	1.664274000	-3.408882000
H	-1.712734000	1.687956000	-5.663088000
H	-3.225858000	-0.223982000	-6.311195000
H	-3.587573000	-2.093759000	-4.680883000
Mn	-0.756446000	-0.234666000	-0.865148000
O	1.254088000	-1.160655000	-1.735338000
O	2.360310000	-1.512934000	-1.231411000
C	-3.616091000	-1.372818000	-0.282374000
C	-4.760532000	-2.181407000	-0.140540000
C	-5.983369000	-1.672553000	0.315131000
C	-6.090257000	-0.310520000	0.646490000
C	-4.970731000	0.528344000	0.517780000
C	-3.773042000	-0.023305000	0.059731000
F	-2.650465000	0.829053000	-0.067313000
F	-5.047160000	1.857402000	0.832658000
F	-7.274183000	0.196361000	1.090938000
F	-7.066212000	-2.495702000	0.436992000
F	-4.662763000	-3.523811000	-0.464473000
C	0.453461000	2.365592000	-0.635444000
H	1.026162000	2.760029000	0.208211000
H	0.429592000	3.114512000	-1.431285000
H	-0.579658000	2.191946000	-0.294971000
H	0.981919000	1.474237000	-1.017505000

Mn(II)LK9 ⁶TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	0.150345000	-0.183472000	2.031962000
C	0.328074000	-0.692831000	3.322857000
C	-0.188688000	-1.965744000	3.631692000
C	-0.878841000	-2.690320000	2.638679000
C	-1.022739000	-2.139763000	1.361344000
N	-0.504708000	-0.895886000	1.067741000
C	-1.685689000	-2.881852000	0.218091000
N	-2.323320000	-1.879328000	-0.746044000
C	-2.363315000	-2.366660000	-2.196432000
C	-2.318202000	-1.175174000	-3.131666000
N	-1.599761000	-0.082197000	-2.694517000
C	-1.472954000	1.016804000	-3.495112000
C	-2.043760000	1.060635000	-4.772023000
C	-2.771156000	-0.053373000	-5.233075000
C	-2.914884000	-1.178964000	-4.396079000
H	0.527605000	0.795974000	1.765221000
H	0.857570000	-0.103325000	4.063307000
H	-0.063347000	-2.383891000	4.625948000
H	-1.292629000	-3.669782000	2.857722000
H	-2.424296000	-3.601554000	0.580848000
H	-0.925952000	-3.438084000	-0.344091000
H	-3.243689000	-2.988550000	-2.377871000
H	-1.474634000	-2.988936000	-2.355744000
H	-0.916027000	1.860510000	-3.106806000
H	-1.919777000	1.947104000	-5.384329000
H	-3.223512000	-0.044789000	-6.220188000
H	-3.479641000	-2.044873000	-4.727457000
Mn	-0.843895000	-0.304995000	-0.833544000
O	0.637536000	-1.763980000	-1.568715000
O	1.749936000	-0.988171000	-1.682262000
C	-3.633795000	-1.404403000	-0.276720000
C	-4.744327000	-2.260466000	-0.154144000
C	-5.990052000	-1.803484000	0.294530000
C	-6.152623000	-0.449335000	0.636343000
C	-5.065661000	0.434429000	0.524517000
C	-3.841875000	-0.062955000	0.073177000
F	-2.753197000	0.828422000	-0.039930000
F	-5.198288000	1.755698000	0.849081000
F	-7.358281000	0.006527000	1.073945000
F	-7.039608000	-2.669404000	0.398729000
F	-4.589778000	-3.594348000	-0.490083000
C	0.717599000	1.338397000	-0.929304000
H	1.513615000	1.515860000	-0.193406000
H	0.969482000	1.844185000	-1.869876000
H	-0.170687000	1.861940000	-0.529108000
H	1.283093000	0.132062000	-1.312550000

Mn(II)LK9 ⁴²

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	0.080656000	-0.173881000	2.134396000
C	0.191627000	-0.659261000	3.442291000
C	-0.339984000	-1.926342000	3.747477000
C	-0.980204000	-2.665411000	2.732945000
C	-1.060164000	-2.136377000	1.440059000
N	-0.523619000	-0.900499000	1.148171000
C	-1.689485000	-2.897893000	0.288302000
N	-2.298830000	-1.914304000	-0.697985000
C	-2.323053000	-2.404541000	-2.137559000
C	-2.290182000	-1.212495000	-3.074481000
N	-1.575616000	-0.112567000	-2.650424000
C	-1.483786000	0.987070000	-3.454673000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	-2.081342000	1.024354000	-4.719645000
C	-2.800525000	-0.099294000	-5.168532000
C	-2.911202000	-1.224787000	-4.328056000
H	0.469604000	0.801948000	1.873262000
H	0.680399000	-0.054285000	4.198093000
H	-0.266732000	-2.327059000	4.753987000
H	-1.409538000	-3.639297000	2.946899000
H	-2.431124000	-3.616685000	0.648320000
H	-0.915411000	-3.460567000	-0.247231000
H	-3.192628000	-3.038631000	-2.332001000
H	-1.424253000	-3.013707000	-2.289150000
H	-0.935852000	1.841375000	-3.078018000
H	-1.985419000	1.915082000	-5.330826000
H	-3.273037000	-0.096947000	-6.146140000
H	-3.471652000	-2.098577000	-4.645660000
Mn	-0.755300000	-0.332709000	-0.797737000
O	0.675641000	-1.559073000	-1.329468000
O	1.215608000	-1.458639000	-2.637638000
C	-3.597999000	-1.402730000	-0.253103000
C	-4.737746000	-2.218126000	-0.127817000
C	-5.970620000	-1.710293000	0.302023000
C	-6.088606000	-0.345972000	0.620877000
C	-4.971065000	0.498366000	0.505873000
C	-3.763050000	-0.050831000	0.073898000
F	-2.637338000	0.794709000	-0.044887000
F	-5.060830000	1.829213000	0.808792000
F	-7.282472000	0.158647000	1.040178000
F	-7.052236000	-2.536590000	0.410854000
F	-4.625763000	-3.561607000	-0.440706000
C	0.422083000	1.331617000	-0.787931000
H	1.256824000	1.135966000	-0.110772000
H	0.776771000	1.474452000	-1.811931000
H	-0.237084000	2.137095000	-0.442976000
H	2.190063000	-1.296836000	-2.504220000

Cr(II)LK9⁷1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	0.221638000	-0.156547000	2.106469000
C	0.372075000	-0.687358000	3.393535000
C	-0.184365000	-1.948839000	3.677784000
C	-0.873809000	-2.642223000	2.662338000
C	-0.980045000	-2.065861000	1.391436000
N	-0.436220000	-0.831882000	1.118737000
C	-1.627307000	-2.787297000	0.223328000
N	-2.264659000	-1.780106000	-0.738636000
C	-2.303056000	-2.270454000	-2.189495000
C	-2.283997000	-1.089933000	-3.142945000
N	-1.554221000	0.004049000	-2.738354000
C	-1.436827000	1.077133000	-3.574039000
C	-2.029150000	1.096251000	-4.843033000
C	-2.778697000	-0.019858000	-5.260364000
C	-2.910557000	-1.124161000	-4.393745000
H	0.625080000	0.818721000	1.858309000
H	0.905931000	-0.123252000	4.150408000
H	-0.088853000	-2.382299000	4.668682000
H	-1.313892000	-3.614719000	2.860271000
H	-2.359857000	-3.523451000	0.564161000
H	-0.859139000	-3.330814000	-0.340930000
H	-3.168372000	-2.914295000	-2.365511000
H	-1.405004000	-2.880933000	-2.345887000
H	-0.865992000	1.926381000	-3.215721000
H	-1.909190000	1.965054000	-5.480886000
H	-3.254841000	-0.029881000	-6.236099000
H	-3.487228000	-1.993979000	-4.692812000
Cr	-0.849776000	-0.169535000	-0.798311000
O	1.254091000	-1.735014000	-1.755113000
O	2.353781000	-2.197106000	-2.172755000
C	-3.597695000	-1.352052000	-0.273194000

C	-4.672554000	-2.257671000	-0.171593000
C	-5.942581000	-1.867712000	0.268461000
C	-6.172456000	-0.528234000	0.625761000
C	-5.125907000	0.403066000	0.536320000
C	-3.872126000	-0.025531000	0.092110000
F	-2.842210000	0.927189000	0.008949000
F	-5.323674000	1.713163000	0.876537000
F	-7.403278000	-0.134425000	1.056060000
F	-6.951085000	-2.785176000	0.349186000
F	-4.458915000	-3.581923000	-0.521492000
C	0.785365000	1.931568000	-0.817805000
H	1.441109000	2.243986000	-0.001469000
H	0.941639000	2.588266000	-1.676909000
H	-0.258641000	2.055259000	-0.478995000
H	1.097781000	0.913278000	-1.118107000

Cr(II)LK9³TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	0.015886000	-0.067508000	2.121406000
C	0.192212000	-0.596362000	3.405700000
C	-0.243809000	-1.908779000	3.669407000
C	-0.851306000	-2.654598000	2.638483000
C	-0.993498000	-2.079034000	1.371756000
N	-0.560236000	-0.796723000	1.121228000
C	-1.565043000	-2.832911000	0.185514000
N	-2.218052000	-1.840884000	-0.778078000
C	-2.247603000	-2.321463000	-2.230346000
C	-2.309909000	-1.117561000	-3.151164000
N	-1.691668000	0.024058000	-2.693293000
C	-1.665982000	1.141423000	-3.476698000
C	-2.241332000	1.155336000	-4.753378000
C	-2.867413000	-0.010884000	-5.232829000
C	-2.908365000	-1.158406000	-4.414380000
H	0.331734000	0.941480000	1.885959000
H	0.658342000	0.008489000	4.175806000
H	-0.118946000	-2.342147000	4.657115000
H	-1.199664000	-3.666546000	2.820736000
H	-2.275842000	-3.602705000	0.498003000
H	-0.754385000	-3.328103000	-0.362641000
H	-3.081982000	-3.007105000	-2.400468000
H	-1.316786000	-2.874722000	-2.404159000
H	-1.184037000	2.023615000	-3.073579000
H	-2.198161000	2.058976000	-5.351492000
H	-3.320373000	-0.026537000	-6.219511000
H	-3.393164000	-2.066329000	-4.759697000
Cr	-0.886458000	-0.174571000	-0.808970000
O	0.545462000	-1.295481000	-1.463645000
O	1.718639000	-0.585634000	-1.556634000
C	-3.542379000	-1.399951000	-0.310460000
C	-4.645288000	-2.263385000	-0.191734000
C	-5.893858000	-1.809600000	0.257460000
C	-6.065188000	-0.456814000	0.602328000
C	-4.983693000	0.436564000	0.494836000
C	-3.764387000	-0.064551000	0.043394000
F	-2.656990000	0.826203000	-0.074271000
F	-5.120273000	1.755732000	0.821106000
F	-7.273707000	-0.009507000	1.039117000
F	-6.939127000	-2.679572000	0.359010000
F	-4.484931000	-3.594110000	-0.529340000
C	0.422662000	1.603401000	-0.810188000
H	1.238047000	1.862963000	-0.113640000
H	0.597119000	2.142971000	-1.751552000
H	-0.455416000	2.095996000	-0.354672000
H	1.262092000	0.461418000	-1.199631000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

Cr(II)LK9 ³2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	0.285629000	-0.359688000	2.109834000
C	0.426020000	-0.882463000	3.401658000
C	-0.219229000	-2.090923000	3.723296000
C	-0.975262000	-2.750170000	2.732908000
C	-1.065083000	-2.187543000	1.455470000
N	-0.451831000	-0.994702000	1.153204000
C	-1.745521000	-2.895463000	0.302828000
N	-2.313848000	-1.872317000	-0.683997000
C	-2.379717000	-2.403971000	-2.115914000
C	-2.298914000	-1.251408000	-3.092834000
N	-1.520958000	-0.187250000	-2.701592000
C	-1.304523000	0.838075000	-3.576321000
C	-1.867589000	0.845920000	-4.858141000
C	-2.683145000	-0.229943000	-5.254390000
C	-2.899709000	-1.293219000	-4.354765000
H	0.773154000	0.566977000	1.835179000
H	1.025174000	-0.350539000	4.132493000
H	-0.133928000	-2.513797000	4.719670000
H	-1.473801000	-3.689242000	2.952392000
H	-2.529498000	-3.574800000	0.648657000
H	-1.005496000	-3.494005000	-0.242273000
H	-3.278692000	-3.006472000	-2.268689000
H	-1.512935000	-3.061380000	-2.256276000
H	-0.670359000	1.650187000	-3.248266000
H	-1.668802000	1.678101000	-5.524503000
H	-3.137878000	-0.244311000	-6.240220000
H	-3.516657000	-2.140455000	-4.637775000
Cr	-0.758743000	-0.367708000	-0.793937000
O	0.804673000	-1.077595000	-1.239975000
O	1.260063000	-1.020245000	-2.624030000
C	-3.612970000	-1.353734000	-0.230142000
C	-4.771213000	-2.142144000	-0.113945000
C	-5.984279000	-1.601458000	0.333745000
C	-6.058807000	-0.240183000	0.681150000
C	-4.916699000	0.573678000	0.578185000
C	-3.734270000	-0.010877000	0.126886000
F	-2.563859000	0.768855000	0.005953000
F	-4.960522000	1.898916000	0.908607000
F	-7.234487000	0.290112000	1.117264000
F	-7.089933000	-2.395420000	0.434085000
F	-4.703013000	-3.483605000	-0.446783000
C	-0.115651000	1.605243000	-0.701290000
H	0.103659000	1.818369000	0.346341000
H	0.774092000	1.632612000	-1.336442000
H	-0.940340000	2.220494000	-1.066194000
H	2.161225000	-1.437427000	-2.563983000

Fe (II)LK10 ⁷1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	2.391767000	-2.260696000	2.694435000
C	2.129309000	-3.220518000	1.696873000
C	1.936631000	-0.952020000	2.505250000
N	1.251210000	-0.583138000	1.380485000
C	1.415213000	-2.839988000	0.543693000
C	0.987727000	-1.514046000	0.405093000
C	0.270641000	-1.022476000	-0.845694000
N	-0.618220000	0.147737000	-0.531299000
C	-0.949035000	1.000480000	-1.732286000
C	-0.385379000	2.374368000	-1.506213000
O	-0.499768000	3.369858000	-2.418807000
N	0.265106000	2.781586000	-0.413178000
C	0.133494000	4.506273000	-1.856044000
C	0.603961000	4.144619000	-0.624655000

C	-1.792451000	-0.142385000	0.335107000
C	-2.333442000	0.940643000	1.069685000
C	-2.351904000	-1.426031000	0.456606000
C	-3.452353000	-1.623840000	1.313823000
C	-3.434693000	0.733483000	1.921942000
C	-3.994694000	-0.551635000	2.048110000
Fe	0.555613000	1.282340000	0.946170000
O	3.060719000	1.696644000	0.281866000
O	4.312102000	1.831327000	0.176768000
C	0.794212000	2.635899000	3.184927000
H	1.184257000	3.110336000	4.092265000
H	0.124580000	3.354677000	2.699932000
H	1.693365000	2.419011000	2.576703000
H	0.244539000	1.740327000	3.503418000
H	2.933888000	-2.519200000	3.597383000
H	2.469530000	-4.244694000	1.816802000
H	1.198331000	-3.565959000	-0.233939000
H	-0.278659000	-1.844022000	-1.319326000
H	1.019267000	-0.681070000	-1.572389000
H	-2.034223000	1.058268000	-1.874833000
H	-0.531066000	0.571322000	-2.650862000
H	0.138396000	5.404764000	-2.450932000
H	1.140574000	4.735921000	0.098596000
H	-1.969303000	1.960419000	0.928796000
H	-1.967337000	-2.272805000	-0.102410000
H	-3.890115000	-2.614217000	1.398923000
H	-3.859914000	1.570293000	2.468265000
H	-4.847387000	-0.713844000	2.699995000
H	2.116891000	-0.186901000	3.253177000

Fe (II)LK10 ⁷TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	1.634922000	-1.572548000	3.745868000
C	1.054527000	-2.643461000	3.047368000
C	1.766499000	-0.342422000	3.088637000
N	1.342114000	-0.140125000	1.804597000
C	0.594574000	-2.430523000	1.732792000
C	0.725954000	-1.168633000	1.130493000
C	0.277249000	-0.957389000	-0.320686000
N	-0.913984000	-0.050749000	-0.530590000
C	-0.639824000	1.272874000	-1.189912000
C	-0.616126000	2.438417000	-0.240250000
O	-1.633742000	3.358770000	-0.283279000
N	0.300148000	2.779717000	0.660091000
C	-1.314975000	4.353135000	0.660739000
C	-0.130084000	3.994601000	1.245772000
C	-2.209920000	-0.452744000	-0.282290000
C	-3.318408000	0.460843000	-0.471497000
C	-2.502410000	-1.800343000	0.152794000
C	-3.812666000	-2.204162000	0.366297000
C	-4.621860000	0.039311000	-0.247317000
C	-4.890276000	-1.294659000	0.169944000
Fe	2.030402000	1.662547000	0.992476000
O	2.463287000	1.221754000	-1.007234000
O	3.723921000	1.747288000	-1.211642000
C	3.978708000	2.406513000	1.383155000
H	4.799132000	3.054612000	1.031566000
H	3.495969000	3.067516000	2.134771000
H	3.934958000	2.131290000	-0.103496000
H	4.463327000	1.572736000	1.911897000
H	1.997338000	-1.685237000	4.761775000
H	0.964673000	-3.622216000	3.508716000
H	0.166121000	-3.258737000	1.177252000
H	0.049712000	-1.929853000	-0.765596000
H	1.102900000	-0.537210000	-0.900806000
H	-1.387648000	1.463811000	-1.963021000
H	0.330020000	1.205145000	-1.690510000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	-1.997954000	5.181052000	0.755441000
H	0.434500000	4.508476000	2.006509000
H	-3.154255000	1.486366000	-0.777585000
H	-1.708380000	-2.520519000	0.288743000
H	-4.020408000	-3.224405000	0.673288000
H	-5.444062000	0.732628000	-0.393978000
H	-5.914091000	-1.619762000	0.332078000
H	2.239869000	0.497243000	3.590303000

Fe (II)LK10 ⁵2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	2.011419000	-2.096694000	3.293923000
C	1.711368000	-3.174665000	2.438862000
C	1.775586000	-0.792731000	2.846508000
N	1.267548000	-0.542185000	1.603208000
C	1.174059000	-2.913401000	1.162850000
C	0.959403000	-1.590671000	0.762710000
C	0.408753000	-1.226328000	-0.607171000
N	-0.404796000	0.041559000	-0.471130000
C	-0.607741000	0.821075000	-1.752782000
C	-0.651965000	2.260437000	-1.335141000
O	-1.242817000	3.249752000	-2.041203000
N	-0.091251000	2.724475000	-0.213492000
C	-1.037751000	4.444771000	-1.305935000
C	-0.329466000	4.120140000	-0.182214000
C	-1.708426000	-0.200479000	0.226068000
C	-1.985956000	0.439850000	1.446662000
C	-2.657417000	-1.064485000	-0.355977000
C	-3.884218000	-1.287591000	0.293822000
C	-3.214797000	0.214156000	2.094102000
C	-4.164630000	-0.650159000	1.519054000
Fe	0.949705000	1.258440000	0.724625000
O	2.553018000	1.283224000	-0.321847000
O	2.824191000	2.349631000	-1.225202000
C	1.731554000	2.528837000	2.202841000
H	2.630784000	2.005246000	2.530155000
H	1.940822000	3.443197000	1.645746000
H	3.769537000	2.201955000	-1.501035000
H	0.912963000	2.589530000	2.925714000
H	2.416700000	-2.259009000	4.286631000
H	1.883072000	-4.197101000	2.761586000
H	0.921762000	-3.729153000	0.492885000
H	-0.189891000	-2.050502000	-1.006808000
H	1.235703000	-1.037489000	-1.304010000
H	-1.528731000	0.538206000	-2.272321000
H	0.235584000	0.653295000	-2.434725000
H	-1.448697000	5.348924000	-1.723900000
H	0.005702000	4.760795000	0.616164000
H	-1.273909000	1.123887000	1.909151000
H	-2.463039000	-1.561649000	-1.304704000
H	-4.617156000	-1.951469000	-0.154763000
H	-3.430414000	0.710295000	3.035787000
H	-5.113856000	-0.822923000	2.017028000
H	1.989510000	0.056878000	3.483526000

Ni(II)LK10 ⁵1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	2.307192000	-2.245406000	2.771540000
C	2.115221000	-3.212857000	1.766562000
C	1.838604000	-0.943449000	2.554529000
N	1.206214000	-0.595292000	1.398196000
C	1.450347000	-2.850884000	0.577903000
C	1.004208000	-1.533750000	0.419084000
C	0.323393000	-1.048307000	-0.856131000
N	-0.554008000	0.142320000	-0.562524000

C	-0.841132000	1.020457000	-1.764341000
C	-0.403916000	2.418075000	-1.431418000
O	-0.570435000	3.468747000	-2.273649000
N	0.180690000	2.783496000	-0.292639000
C	-0.041390000	4.599636000	-1.603361000
C	0.419775000	4.177623000	-0.385792000
C	-1.734279000	-0.113131000	0.298226000
C	-2.419429000	1.007408000	0.841685000
C	-2.170649000	-1.419843000	0.603382000
C	-3.280627000	-1.602472000	1.444503000
C	-3.525031000	0.809001000	1.688924000
C	-3.958784000	-0.493518000	1.994968000
Ni	0.568958000	1.198070000	0.848192000
O	2.935014000	1.469404000	-0.065230000
O	4.158579000	1.748523000	-0.201972000
C	0.898693000	2.550824000	3.108149000
H	1.321560000	2.333457000	4.093173000
H	0.607273000	3.602192000	3.056763000
H	1.698826000	2.365355000	2.366292000
H	-0.002349000	1.926435000	2.991812000
H	2.807751000	-2.490594000	3.701783000
H	2.470814000	-4.229148000	1.906691000
H	1.286761000	-3.583037000	-0.207134000
H	-0.238431000	-1.857693000	-1.335749000
H	1.087582000	-0.720089000	-1.571657000
H	-1.907799000	0.997158000	-2.012712000
H	-0.296165000	0.653044000	-2.641487000
H	-0.087316000	5.540194000	-2.127173000
H	0.887117000	4.747736000	0.399431000
H	-2.144203000	2.025024000	0.579585000
H	-1.684862000	-2.296123000	0.189791000
H	-3.625141000	-2.609288000	1.661606000
H	-4.052968000	1.668668000	2.090477000
H	-4.819873000	-0.646481000	2.638180000
H	1.965594000	-0.170375000	3.303760000

Ni(II)LK10 ³TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	2.056729000	-2.170054000	3.008624000
C	1.942809000	-3.157763000	2.013273000
C	1.645266000	-0.861674000	2.721226000
N	1.135126000	-0.534950000	1.502960000
C	1.392811000	-2.814856000	0.761467000
C	0.991779000	-1.496470000	0.529544000
C	0.410451000	-1.006346000	-0.780270000
N	-0.513008000	0.162713000	-0.483887000
C	-0.794900000	1.029353000	-1.708997000
C	-0.500785000	2.439778000	-1.311797000
O	-0.769002000	3.528334000	-2.066173000
N	0.084313000	2.771688000	-0.160954000
C	-0.306899000	4.647845000	-1.328577000
C	0.219276000	4.181368000	-0.155074000
C	-1.748237000	-0.172058000	0.281878000
C	-2.461956000	0.885444000	0.898517000
C	-2.215196000	-1.498268000	0.389195000
C	-3.395284000	-1.761702000	1.107200000
C	-3.635658000	0.607610000	1.619398000
C	-4.107383000	-0.715411000	1.726783000
Ni	0.627096000	1.212234000	0.838533000
O	2.439616000	1.241598000	-0.228650000
O	3.216431000	1.922356000	0.640777000
C	1.385517000	2.374062000	2.523527000
H	2.126544000	2.078093000	3.280737000
H	1.359196000	3.461465000	2.411951000
H	2.370869000	2.127673000	1.565919000
H	0.410700000	2.059107000	2.921761000
H	2.460700000	-2.399027000	3.988704000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

H	2.266940000	-4.175446000	2.208559000
H	1.280882000	-3.563128000	-0.017058000
H	-0.106143000	-1.801097000	-1.326755000
H	1.214755000	-0.631554000	-1.423738000
H	-1.833763000	0.911022000	-2.032625000
H	-0.146869000	0.724689000	-2.539226000
H	-0.436863000	5.616539000	-1.782681000
H	0.663893000	4.736429000	0.652719000
H	-2.141158000	1.919189000	0.809790000
H	-1.706058000	-2.328786000	-0.086345000
H	-3.762771000	-2.781493000	1.172850000
H	-4.182461000	1.420559000	2.087514000
H	-5.018926000	-0.927404000	2.277026000
H	1.721372000	-0.080711000	3.466047000

Ni(II)LK10³²

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	2.034529000	-2.023464000	3.275301000
C	1.775914000	-3.107286000	2.416547000
C	1.752267000	-0.724809000	2.833276000
N	1.239553000	-0.486272000	1.594126000
C	1.230152000	-2.857694000	1.142135000
C	0.969728000	-1.540110000	0.749916000
C	0.402001000	-1.187357000	-0.614587000
N	-0.440950000	0.060215000	-0.471199000
C	-0.656469000	0.852511000	-1.744707000
C	-0.628951000	2.292060000	-1.326808000
O	-1.170012000	3.314449000	-2.031827000
N	-0.052669000	2.722152000	-0.203700000
C	-0.912448000	4.491103000	-1.286341000
C	-0.225812000	4.124913000	-0.160776000
C	-1.739639000	-0.207828000	0.226244000
C	-2.052462000	0.484071000	1.410025000
C	-2.649276000	-1.135365000	-0.317766000
C	-3.870265000	-1.374643000	0.337864000
C	-3.273736000	0.240210000	2.064880000
C	-4.183240000	-0.690480000	1.529572000
Ni	0.747466000	1.234764000	0.781584000
O	2.557794000	1.168018000	-0.322556000
O	2.844912000	2.246960000	-1.133463000
C	1.668309000	2.403021000	2.142177000
H	2.611100000	1.908010000	2.373855000
H	1.801853000	3.372976000	1.665080000
H	3.774564000	2.105715000	-1.477957000
H	0.935693000	2.399215000	2.956480000
H	2.442187000	-2.174254000	4.268837000
H	1.983828000	-4.124410000	2.734333000
H	1.005806000	-3.677768000	0.467470000
H	-0.175834000	-2.024972000	-1.016523000
H	1.218070000	-0.976030000	-1.317691000
H	-1.606986000	0.603601000	-2.227264000
H	0.149483000	0.647520000	-2.460585000
H	-1.278824000	5.417126000	-1.697525000
H	0.130669000	4.743381000	0.645690000
H	-1.379629000	1.230521000	1.837314000
H	-2.431292000	-1.667432000	-1.241799000
H	-4.574341000	-2.087249000	-0.081271000
H	-3.515408000	0.774918000	2.978602000
H	-5.127764000	-0.877054000	2.031459000
H	1.931947000	0.126920000	3.476824000

Co(II)LK10⁶¹

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	2.680481000	-2.158082000	2.331924000
C	2.412994000	-3.128173000	1.345412000

C	2.068610000	-0.905168000	2.226562000
N	1.224362000	-0.598975000	1.195084000
C	1.541020000	-2.811138000	0.286566000
C	0.960811000	-1.536492000	0.232453000
C	0.075294000	-1.111683000	-0.930713000
N	-0.744825000	0.095676000	-0.599492000
C	-1.021330000	0.994608000	-1.775551000
C	-0.290528000	2.284910000	-1.543368000
O	-0.197428000	3.269068000	-2.471081000
N	0.327753000	2.612704000	-0.409725000
C	0.547014000	4.314315000	-1.867801000
C	0.871176000	3.909216000	-0.602282000
C	-1.852549000	-0.070586000	0.360377000
C	-2.538726000	1.099136000	0.793717000
C	-2.203483000	-1.328889000	0.899957000
C	-3.232354000	-1.414497000	1.852301000
C	-3.567267000	0.995218000	1.751421000
C	-3.916047000	-0.257935000	2.284387000
Co	0.273300000	1.159977000	0.987096000
O	3.171371000	2.085241000	1.035334000
O	4.429379000	2.177314000	0.952138000
C	0.234033000	2.289122000	3.222485000
H	0.455479000	2.756530000	4.188885000
H	-0.508294000	2.923344000	2.724162000
H	1.207881000	2.276459000	2.698713000
H	-0.170336000	1.292382000	3.446946000
H	3.344701000	-2.367037000	3.163271000
H	2.873284000	-4.110064000	1.400431000
H	1.322410000	-3.543132000	-0.485277000
H	-0.551420000	-1.946397000	-1.268769000
H	0.726741000	-0.842883000	-1.770762000
H	-2.097202000	1.174139000	-1.883448000
H	-0.686126000	0.531335000	-2.709832000
H	0.722477000	5.193403000	-2.465663000
H	1.430996000	4.429880000	0.156415000
H	-2.346525000	2.070791000	0.343135000
H	-1.709795000	-2.240205000	0.581590000
H	-3.510476000	-2.386713000	2.248531000
H	-4.105077000	1.887944000	2.056724000
H	-4.718172000	-0.339164000	3.011294000
H	2.247776000	-0.134387000	2.968672000

Co(II)LK10²TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	1.913260000	-2.200059000	2.997528000
C	1.901393000	-3.172887000	1.981279000
C	1.464591000	-0.904556000	2.707054000
N	1.016750000	-0.572998000	1.465963000
C	1.418446000	-2.827208000	0.702898000
C	0.981829000	-1.520241000	0.470612000
C	0.466551000	-1.033716000	-0.871907000
N	-0.437645000	0.155291000	-0.621517000
C	-0.703676000	1.009496000	-1.853701000
C	-0.455537000	2.426738000	-1.441830000
O	-0.659920000	3.510103000	-2.225812000
N	0.024979000	2.763273000	-0.246872000
C	-0.264273000	4.633144000	-1.456108000
C	0.158396000	4.172585000	-0.238384000
C	-1.637767000	-0.128399000	0.207096000
C	-2.151026000	0.938122000	1.000716000
C	-2.191338000	-1.418489000	0.307306000
C	-3.261796000	-1.643329000	1.188966000
C	-3.204589000	0.683775000	1.908482000
C	-3.761671000	-0.599805000	2.003231000
Co	0.500970000	1.184766000	0.804330000
O	2.195869000	1.252453000	-0.052672000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

O	3.030538000	1.879160000	0.831019000
C	1.018662000	2.283438000	2.536256000
H	1.796477000	2.136487000	3.309079000
H	0.850509000	3.356734000	2.413212000
H	2.196733000	2.072554000	1.695590000
H	0.118634000	1.857421000	3.001192000
H	2.266633000	-2.431552000	3.996385000
H	2.254314000	-4.180362000	2.179218000
H	1.388464000	-3.563051000	-0.094766000
H	-0.044198000	-1.826804000	-1.427136000
H	1.301287000	-0.680955000	-1.488848000
H	-1.727977000	0.863200000	-2.212035000
H	-0.020880000	0.720480000	-2.660759000
H	-0.354542000	5.599273000	-1.924946000
H	0.533015000	4.730424000	0.602651000
H	-1.851673000	1.970732000	0.852598000
H	-1.826418000	-2.243727000	-0.294565000
H	-3.711558000	-2.630714000	1.241100000
H	-3.606898000	1.500163000	2.500725000
H	-4.588716000	-0.789344000	2.680475000
H	1.461426000	-0.133748000	3.466052000

Co(II)LK10 ⁴2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	1.986579000	-2.009404000	3.356298000
C	1.719532000	-3.099388000	2.506180000
C	1.740526000	-0.712572000	2.892023000
N	1.257653000	-0.480987000	1.636414000
C	1.202205000	-2.857749000	1.217843000
C	0.978668000	-1.541471000	0.801484000
C	0.430838000	-1.191679000	-0.572169000
N	-0.396077000	0.067279000	-0.442101000
C	-0.580449000	0.864313000	-1.716589000
C	-0.623537000	2.296985000	-1.276132000
O	-1.241098000	3.298286000	-1.942925000
N	-0.065852000	2.732917000	-0.143139000
C	-1.056654000	4.469965000	-1.164818000
C	-0.337943000	4.118959000	-0.055199000
C	-1.716332000	-0.199553000	0.217384000
C	-2.034719000	0.408923000	1.444169000
C	-2.641484000	-1.056710000	-0.412688000
C	-3.884506000	-1.305695000	0.194930000
C	-3.280947000	0.157692000	2.048579000
C	-4.206297000	-0.699956000	1.426125000
Co	0.873356000	1.272860000	0.801529000
O	2.571746000	1.128315000	-0.527138000
O	2.744156000	2.086660000	-1.507337000
C	1.816646000	2.471565000	2.129315000
H	2.747376000	1.953917000	2.371399000
H	1.983407000	3.421100000	1.618314000
H	3.683248000	1.989765000	-1.839829000
H	1.099720000	2.531435000	2.955493000
H	2.373522000	-2.156384000	4.358639000
H	1.898892000	-4.116191000	2.842218000
H	0.970192000	-3.683320000	0.552625000
H	-0.156241000	-2.024426000	-0.971284000
H	1.257836000	-0.999387000	-1.268192000
H	-1.497210000	0.594601000	-2.250122000
H	0.267310000	0.700531000	-2.393205000
H	-1.487042000	5.380119000	-1.548629000
H	-0.014082000	4.735069000	0.766879000
H	-1.341953000	1.083749000	1.946330000
H	-2.415179000	-1.529370000	-1.366962000
H	-4.597841000	-1.964915000	-0.290663000
H	-3.527415000	0.629376000	2.995221000
H	-5.168051000	-0.892394000	1.891823000
H	1.929317000	0.147040000	3.523157000

Mn(II)LK10 ⁶1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	2.262905000	-2.238204000	2.862462000
C	2.061137000	-3.207429000	1.860873000
C	1.830545000	-0.926958000	2.631562000
N	1.217262000	-0.565232000	1.466578000
C	1.422513000	-2.836799000	0.660147000
C	1.008542000	-1.511860000	0.490154000
C	0.361250000	-1.001254000	-0.785815000
N	-0.521421000	0.190747000	-0.465679000
C	-0.850926000	1.023509000	-1.702178000
C	-0.467201000	2.438017000	-1.393420000
O	-0.685582000	3.478893000	-1.722017000
N	0.137572000	2.823305000	-0.266199000
C	-0.173798000	4.629128000	-1.577415000
C	0.330983000	4.225286000	-0.372529000
C	-1.754182000	-0.135364000	0.333680000
C	-2.429190000	0.937530000	0.961831000
C	-2.239390000	-1.449272000	0.461456000
C	-3.399615000	-1.687725000	1.223308000
C	-3.586214000	0.686198000	1.722017000
C	-4.073706000	-0.627161000	1.856903000
Mn	0.562241000	1.251983000	0.914030000
O	3.070617000	1.541067000	-0.093946000
O	4.276308000	1.743408000	-0.411131000
C	1.171877000	2.602156000	2.979681000
H	1.652062000	2.332010000	3.924062000
H	0.995765000	3.678963000	2.950472000
H	1.891659000	2.341030000	2.177198000
H	0.194173000	2.087161000	2.960006000
H	2.745736000	-2.489836000	3.800337000
H	2.390194000	-4.231047000	2.012216000
H	1.253673000	-3.569297000	-0.123198000
H	-0.193291000	-1.789889000	-1.304402000
H	1.140291000	-0.650285000	-1.474748000
H	-1.916471000	0.947753000	-1.942873000
H	-0.291954000	0.657619000	-2.571529000
H	-0.262960000	5.565354000	-2.103325000
H	0.800549000	4.813928000	0.397513000
H	-2.108766000	1.969447000	0.831097000
H	-1.755090000	-2.292909000	-0.017286000
H	-3.778010000	-2.701769000	1.312750000
H	-4.109136000	1.513550000	2.192546000
H	-4.969956000	-0.820224000	2.438167000
H	1.970384000	-0.154421000	3.378828000

Mn(II)LK10 ⁴TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	2.155738000	-2.328391000	2.757987000
C	2.079708000	-3.261116000	1.706616000
C	1.637880000	-1.041674000	2.564760000
N	1.053243000	-0.678169000	1.388540000
C	1.475741000	-2.880364000	0.492012000
C	0.972094000	-1.582291000	0.359776000
C	0.364912000	-1.060652000	-0.930768000
N	-0.491346000	0.152313000	-0.629124000
C	-0.801974000	0.997873000	-1.858705000
C	-0.428172000	2.405089000	-1.512192000
O	-0.496706000	3.455354000	-2.363556000
N	0.062018000	2.756818000	-0.325943000
C	0.001138000	4.573940000	-1.647267000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

C	0.351331000	4.141698000	-0.396896000
C	-1.647228000	-0.080620000	0.273297000
C	-2.255830000	1.056412000	0.881681000
C	-2.103655000	-1.380647000	0.589754000
C	-3.150592000	-1.542107000	1.506889000
C	-3.292013000	0.869714000	1.824587000
C	-3.738636000	-0.421032000	2.141128000
Mn	0.455056000	1.179098000	0.874026000
O	2.290103000	1.433183000	0.324628000
O	2.923360000	2.088523000	1.363852000
C	0.633957000	2.203716000	2.739656000
H	1.311214000	2.504505000	3.562679000
H	0.022671000	3.088389000	2.524849000
H	1.921123000	2.166503000	2.110828000
H	0.001559000	1.436036000	3.213844000
H	2.613291000	-2.584605000	3.707271000
H	2.482695000	-4.261922000	1.827726000
H	1.408464000	-3.580830000	-0.334961000
H	-0.206921000	-1.832586000	-1.458013000
H	1.165357000	-0.725149000	-1.601344000
H	-1.859571000	0.909307000	-2.128903000
H	-0.211263000	0.643824000	-2.710658000
H	0.022852000	5.515164000	-2.171722000
H	0.775668000	4.699261000	0.421436000
H	-2.033246000	2.069763000	0.567324000
H	-1.678797000	-2.261186000	0.121882000
H	-3.519291000	-2.540111000	1.725349000
H	-3.765494000	1.738407000	2.271921000
H	-4.550018000	-0.561963000	2.848620000
H	1.689335000	-0.298526000	3.350807000

Mn(II)LK10 ⁶2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	2.178564000	-2.213224000	2.900501000
C	1.913384000	-3.214001000	1.946506000
C	1.803068000	-0.894218000	2.620098000
N	1.190478000	-0.557985000	1.447470000
C	1.273893000	-2.865046000	0.739929000
C	0.921988000	-1.530930000	0.509788000
C	0.278379000	-1.064423000	-0.788399000
N	-0.623035000	0.117311000	-0.518189000
C	-0.971878000	0.913618000	-1.759322000
C	-0.661850000	2.354162000	-1.474408000
O	-1.004408000	3.368967000	-2.303487000
N	-0.013487000	2.800792000	-0.393649000
C	-0.532307000	4.560573000	-1.696156000
C	0.076227000	4.210047000	-0.522999000
C	-1.826687000	-0.191708000	0.314969000
C	-2.409796000	0.862657000	1.054598000
C	-2.387088000	-1.481711000	0.365253000
C	-3.525936000	-1.714530000	1.159202000
C	-3.548124000	0.619516000	1.845583000
C	-4.108232000	-0.669755000	1.902064000
Mn	0.627119000	1.307032000	0.838247000
O	2.633456000	1.304033000	-0.487116000
O	3.682317000	1.979031000	0.093874000
C	1.109916000	2.378312000	2.491938000
H	2.202654000	2.342721000	2.569336000
H	0.746650000	3.401747000	2.359587000
H	4.458693000	1.918882000	-0.534902000
H	0.607550000	1.886631000	3.33358000
H	2.662782000	-2.445548000	3.842622000
H	2.192643000	-4.245457000	2.139239000

H	1.053493000	-3.622403000	-0.005929000
H	-0.250806000	-1.887689000	-1.278398000
H	1.060562000	-0.729572000	-1.482328000
H	-2.029117000	0.791492000	-2.018627000
H	-0.383481000	0.567924000	-2.618397000
H	-0.721863000	5.481569000	-2.222416000
H	0.552701000	4.837729000	0.211475000
H	-2.029438000	1.880862000	0.997652000
H	-1.976937000	-2.308990000	-0.204360000
H	-3.961796000	-2.708917000	1.187738000
H	-3.997681000	1.434713000	2.404769000
H	-4.989397000	-0.856590000	2.507981000
H	1.988645000	-0.097755000	3.330553000

Cr(II)LK10 ⁷1

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	2.193390000	-2.137706000	3.210685000
C	1.881052000	-3.175508000	2.311646000
C	1.891626000	-0.818960000	2.850978000
N	1.314219000	-0.514343000	1.651736000
C	1.277548000	-2.861396000	1.077053000
C	1.009771000	-1.523597000	0.768230000
C	0.430727000	-1.084763000	-0.565325000
N	-0.436628000	0.154778000	-0.367638000
C	-0.650499000	0.938638000	-1.659629000
C	-0.581441000	2.392083000	-1.303671000
O	-1.072594000	3.382802000	-2.087972000
N	-0.005825000	2.871209000	-0.198774000
C	-0.781281000	4.597488000	-1.420403000
C	-0.128546000	4.282846000	-0.260053000
C	-1.757410000	-0.179046000	0.272499000
C	-2.158232000	0.481164000	1.447815000
C	-2.605490000	-1.128026000	-0.332261000
C	-3.848371000	-1.422683000	0.255303000
C	-3.403084000	0.183177000	2.033144000
C	-4.248517000	-0.771265000	1.439249000
Cr	0.728652000	1.332183000	0.963707000
O	3.028241000	1.435341000	-0.586363000
O	4.158841000	1.633624000	-1.114669000
C	1.903105000	2.879911000	2.750496000
H	2.471083000	2.660923000	3.658612000
H	1.870339000	3.959713000	2.591055000
H	2.458779000	2.422612000	1.910305000
H	0.871276000	2.520689000	2.921707000
H	2.655202000	-2.343255000	4.170111000
H	2.097659000	-4.208205000	2.567570000
H	1.023004000	-3.646530000	0.372250000
H	-0.137815000	-1.895671000	-1.028420000
H	1.247631000	-0.817669000	-1.248802000
H	-1.614271000	0.695073000	-2.116637000
H	0.136754000	0.692138000	-2.383146000
H	-1.102701000	5.505975000	-1.902315000
H	0.243531000	4.940445000	0.507500000
H	-1.537932000	1.245253000	1.920669000
H	-2.325739000	-1.634264000	-1.253874000
H	-4.502369000	-2.153079000	-0.211572000
H	-3.710528000	0.695393000	2.939893000
H	-5.209798000	-1.000914000	1.888508000
H	2.108024000	0.004533000	3.523023000

EK-12. (devam) Kartezyen koordinatlar

Cr(II)LK10 ³TS1/2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	1.979248000	-2.332195000	2.929922000
C	1.909951000	-3.273285000	1.885233000
C	1.538295000	-1.024323000	2.694681000
N	1.043382000	-0.645958000	1.480953000
C	1.388407000	-2.880800000	0.635627000
C	0.963148000	-1.561001000	0.457480000
C	0.434750000	-1.036580000	-0.868805000
N	-0.463500000	0.155757000	-0.612868000
C	-0.763935000	0.975882000	-1.855616000
C	-0.494651000	2.409861000	-1.510968000
O	-0.697405000	3.442230000	-2.362568000
N	-0.001594000	2.821352000	-0.341510000
C	-0.290520000	4.612272000	-1.672107000
C	0.138441000	4.229558000	-0.430827000
C	-1.657584000	-0.127976000	0.232485000
C	-2.142286000	0.933050000	1.046403000
C	-2.235484000	-1.406805000	0.317042000
C	-3.301509000	-1.625841000	1.208349000
C	-3.196339000	0.689292000	1.955786000
C	-3.774748000	-0.587067000	2.039693000
Cr	0.528346000	1.252476000	0.899288000
O	2.339617000	1.409671000	0.172800000
O	3.147554000	2.006571000	1.110250000
C	1.010237000	2.378806000	2.685996000
H	1.802457000	2.573190000	3.435076000
H	0.548152000	3.354624000	2.488110000
H	2.326050000	2.196455000	1.931057000
H	0.292881000	1.768163000	3.261454000
H	2.369718000	-2.600067000	3.905549000
H	2.251541000	-4.292346000	2.039315000
H	1.321221000	-3.591968000	-0.181953000
H	-0.080031000	-1.821151000	-1.433352000
H	1.271269000	-0.684396000	-1.485875000
H	-1.801314000	0.829998000	-2.176053000
H	-0.115623000	0.658496000	-2.680777000
H	-0.379299000	5.545362000	-2.203987000
H	0.525346000	4.835621000	0.371401000
H	-1.840434000	1.968517000	0.895345000
H	-1.890423000	-2.229506000	-0.300464000
H	-3.765835000	-2.606816000	1.253084000
H	-3.580186000	1.504998000	2.561348000
H	-4.596908000	-0.770983000	2.724258000
H	1.579348000	-0.272191000	3.473417000

C	-1.908296000	-0.943883000	1.317148000
C	-3.013620000	-0.899702000	2.181747000
C	-3.805908000	1.121266000	1.083019000
C	-3.963735000	0.133464000	2.077087000
Cr	0.770782000	1.034655000	0.749614000
O	2.487710000	1.491157000	0.867093000
O	2.860216000	2.896619000	0.726828000
C	0.184715000	1.797631000	2.529325000
H	0.845057000	2.649281000	2.715952000
H	-0.859463000	2.095535000	2.393895000
H	3.848866000	2.843999000	0.645448000
H	0.304531000	1.002523000	3.271147000
H	3.313652000	-2.774572000	3.171076000
H	2.526834000	-4.552586000	1.564060000
H	0.972582000	-3.913481000	-0.296812000
H	-0.807767000	-2.064432000	-1.013895000
H	0.608222000	-1.313662000	-1.760510000
H	-1.728083000	0.708041000	-2.271629000
H	-0.009517000	0.465046000	-2.605901000
H	-0.392007000	5.412757000	-2.095241000
H	0.804207000	4.596782000	0.335963000
H	-2.649125000	1.860662000	-0.546031000
H	-1.217901000	-1.771087000	1.422033000
H	-3.136449000	-1.679420000	2.927255000
H	-4.545823000	1.908719000	0.976205000
H	-4.819681000	0.161221000	2.744425000
H	2.526406000	-0.419327000	2.840646000

Cr(II)LK10 ³2

Atom	x(Å)	y(Å)	z(Å)
C	2.639170000	-2.534262000	2.356704000
C	2.196713000	-3.523807000	1.455891000
C	2.198029000	-1.217806000	2.185089000
N	1.348388000	-0.877988000	1.171455000
C	1.322741000	-3.166944000	0.409801000
C	0.913523000	-1.833170000	0.290777000
C	0.014904000	-1.361773000	-0.840615000
N	-0.543146000	0.030123000	-0.575589000
C	-0.721541000	0.827771000	-1.857087000
C	-0.417204000	2.253782000	-1.519851000
O	-0.720239000	3.313953000	-2.305175000
N	0.199157000	2.622118000	-0.400113000
C	-0.242922000	4.460923000	-1.612789000
C	0.322161000	4.031816000	-0.443255000
C	-1.737475000	0.058532000	0.327067000
C	-2.706845000	1.089395000	0.212992000

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : OCAK, Yıldız
 Uyuğu : T.C.
 Doğum tarihi ve yeri : 02.01.1994, Bursa
 Medeni hali : Bekar
 Telefon : 0(534)286 44 09
 e-mail : yldzocakk@gmail.com



Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet Tarihi
Yüksek lisans	Gazi Üniversitesi/ Kimya Ana Bilim Dalı	Devam ediyor
Lisans	Gazi Üniversitesi / Kimya	2016
Lise	Gemlik Lisesi	2011

İş Deneyimi

Yıl	Yer	Görev
2015	Asil Çelik	Stajyer
2015	Sağlık Bakanlığı/Halk Sağlığı	Stajyer
2017	Gazi Üniversitesi	TÜBİTAK-1001 117Z337 Bursiyeri

Yabancı Dil

İngilizce

Yayınlar

1. Ocak, Y. (2018, Ekim). *Oxidative methane activation with cationic ligand-metal complexes*. CPC-XII 12TH Chemical Physics Congress, Safranbolu/Karabük.

Hobiler

Sinema, tiyatro, teknoloji, bilim, dans (tango), voleybol, yüzmek, kitap okumak, resim çizmek.



GAZİ GELECEKTİR..