

**BAZI 4,4' OXYBİS- (N-BENZİLİDEANİLİN) TÜREVİ
BİLEŐİKLERİ İLE TEORİK HESAPLAMALAR**

Özgür ALGÜL CANAVAR
Yüksek Lisans Tezi

Kimya Anabilim Dalı
Ocak-2012

JÜRİ VE ENSTİTÜ ONAYI

Özgür ALGÜL CANAVAR'ın “ **Bazı 4,4' Oxybis-(N-Benzilideanilin) Türevi Bileşikleri İle Teorik Hesaplamalar**” başlıklı **Kimya** Anabilim Dalındaki, Yüksek Lisans Tezi 26.12.2011 tarihinde, aşağıdaki jüri tarafından Anadolu Üniversitesi Lisansüstü Eğitim-Öğretim ve Sınav Yönetmeliğinin ilgili maddeleri uyarınca değerlendirilerek kabul edilmiştir.

	Adı Soyadı	İmza
Üye (Tez Danışmanı) :	Yard. Doç. Dr. Halil BERBER
Üye	: Prof. Dr. Alaattin GÜVEN
Üye	: Yard. Doç. Dr. Erol AÇIKKALP

Anadolu Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun **tarih ve** **sayılı kararıyla onaylanmıştır.**

Enstitü Müdürü

ÖZET

Yüksek Lisans tezi

BAZI 4,4' OXYBİS- (N-BENZİLİDEANİLİN) TÜREVİ BİLEŞİKLERİ İLE TEORİK HESAPLAMALAR

Özgür ALGÜL CANAVAR

Anadolu Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Kimya Anabilim Dalı

Danışman : Yard. Doç. Dr. Halil BERBER

2012, 192 sayfa

Bu çalışmada, tarafımdan sentezi yapılan bazı 4,4'-Oxybis(N-benzilideanilin) bileşiklerin termodinamik ve termokinetik özellikleri MOPAC2009 paket programında AM1, PM3 ve PM6 semi-empirik yöntemleri ile teorik olarak su ve DMF fazında hesaplandı.

Hesaplanan oluşum ısı (ΔH_f), entalpi (ΔH) ve entropi (ΔS) değerleri verileri kullanılarak, Gibbs serbest enerji değişim değerleri (ΔG_f ve ΔG) ve bu değerler kullanılarak kinetik asitlik sabitleri ($pK_{a(k)}$) ve termodinamik asitlik sabitleri ($pK_{a(t)}$) teorik olarak hesaplandı. Ayrıca moleküllere ait nükleofilik özellikleri (η) ve proton afiniteleri (PA) değerleri hesaplandı.

Yapılan hesaplamalar sonucu sentezlenen Schiff bazlarının ürün ve reaksiyon kararlılıkları incelendi ve bu moleküllerin termodinamik çalışmalarının daha kararlı olduğu görüldü.

Anahtar Kelimeler: Schiff bazı, 4,4'-Oxybis (N-benzilideanilin), semi-empirik, asitlik sabiti, pK_a .

ABSTRACT**Master of Science Thesis****THEORETICAL CALCULATIONS WITH SOME 4,4'- OXYBIS (N-BENZYLDEANILINE) DERIVATIVE COMPOUNDS****Özgür ALGÜL CANAVAR****Anadolu University****Graduate School of Science****Chemistry Program****Supervisor : Assist.Prof. Dr. Halil BERBER****2012, 192 pages**

In this study, thermodynamic properties of some 4,4'-oxybis(N-Benzylydeaniline) derivatives, synthesized by us, were calculated theoretically using AM1, PM3 and PM6 semi-empirical methods.

Gibbs free energy change (ΔG_f , ΔG), the kinetic acidity constants, ($pK_{a(k)}$), and thermodynamic acidity constants, ($pK_{a(t)}$) were calculated in aqueous and DMF phase by using their heat of formation (ΔH_f), enthalpy (ΔH) and the entropy change (ΔS) values. Nucleophilic properties (η) and proton affinities (PA) were calculated using by (HOMO) and LUMO values of similiated molecules.

The result of calculations made to the product and the reaction of the resolve and synthesized Schiff sequence this is the more stable thermodynamic studies of molecules.

Keywords: Schiff base, 4,4'-Oxybis (N-Benzlydeaniline), semi-empirical, acidity constant, pK_a .

TEŞEKKÜRLER

Bu tez çalışması boyunca bilgisi ve emeğiyle beni yönlendiren, bana karşı her zaman anlayışlı davranan ve her konuda destek veren danışman hocam Sayın Yard. Doç. Dr. Halil BERBER'e teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmam süresince bana sorunların aşılmasında yol gösterip, yardımlarını esirgemeyen hocam Sayın Yard. Doç. Dr. Emel ERMİŞ'e ve doktora öğrencisi Gülşen TÜRKOĞLU'na teşekkür ederim.

En önemlisi benim çalışmamın ana nedeni olan, bana karşı her zaman anlayışlı davranan, sonsuz destek veren ve sevgileriyle her zaman yanımda olan annem, babam, abim, ablam ve eşime özellikle de bana pozitif enerji veren yeğenim Ahmet KEREM'e çok teşekkür ederim.

Manevi destekleriyle varlıklarını hep hissettiren dostlarıma teşekkür ederim.

Özgür ALGÜL CANAVAR

Ocak-2012

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	i
ABSTRACT	ii
TEŞEKKÜR	iii
İÇİNDEKİLER	iv
ŞEKİLLER DİZİNİ	vi
ÇİZİLGELER DİZİNİ	vii
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	xvii
1. GİRİŞ	1
2. SCHIFF BAZLARI	4
2.1. Schiff Bazlarının Özellikleri.....	4
2.2. Schiff Bazlarının Oluşum Mekanizması.....	6
2.3. Schiff Bazlarının Kullanım Alanları ve Önemi.....	8
3. MADDELERİN PROTON ALMA VE VERME DAVRANIŞLARI	11
3.1. Asitlik ve Bazlık Tanımları.....	11
3.1.1. Arrhenius Asit-Baz Tanımı.....	11
3.1.2. Lowry–Bronsted Asit-Baz Tanımı.....	12
3.1.3. Lewis Asit-Baz Tanımı.....	13
3.1.4. Moleküler Orbital Kuramında Asit-Baz Tanımı.....	14
3.2. Asit ve Bazların Kuvvetliliği : K_a ve pK_a	15
3.2.1. Asitlik Sabitleri.....	15
4. TEORİK KİMYADA KULLANILAN HESAPLAMA YÖNTEMLERİ VE BİLGİSAYAR PROGRAMLARI	18
4.1. Teorik Hesaplama Yöntemleri.....	19
4.2. Bilgisayarlı Kimya Hesaplamaları.....	20
4.2.1. Moleküler Mekanik.....	20

4.2.2. Elektronik Yapı Yöntemleri (Kuantum Mekanikği).....	21
4.2.2.1. Ab-initio Yöntemler.....	21
4.2.2.2. Yarı Deneysel (semi-empirik) Yöntemler.....	23
4.2.2.3. DFT (Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi).....	29
4.3. Mopac7 Paket Programının Özellikleri.....	29
4.4. Mopac 2002 Paket Programının Özellikleri.....	30
4.4.1. Geometri Optimizasyonu.....	31
4.4.2. Tepkime Yolları.....	31
5. DENEYSEL ÇALIŞMALAR	33
5.1. Sentezlenen Bileşikler.....	33
5.2. Yöntem.....	40
6. HESAPLAMALAR ve BULGULAR	44
6.1. 4,4'-Oxydianilin ve Türevlerinin Semiempirik Yöntemlerle Hesaplanması.....	44
6.2. Bilgisayar Hesaplamaları Sonucunda Elde Edilen Değerler.....	57
7. SONUÇLAR VE TARTIŞMA	72
7.1. Bazı 4,4'-Oxydianilin ve Türevi Moleküllerinin Termodinamik Hesaplamaları.....	72
7.1.1. ΔG_f (Kinetik) Hesaplamaları.....	72
7.1.2. ΔG (Termodinamik) Hesaplamaları.....	90
7.1.3. pK_a Hesapları.....	109
7.1.3.1. Kinetik $pK_{a(k)}$ Hesapları.....	109
7.1.3.2. Termodinamik $pK_{a(t)}$ Hesapları.....	112
7.1.4. PA Hesapları.....	132
7.1.5. E_{HOMO} - E_{LUMO} Değerleri.....	152
7.1.6. Ürün Kararlılıkları.....	159
7.1.7. Asitlik-Bazlık Sonuçları.....	174
8. KAYNAKLAR	186

ŞEKİLLER DİZİNİ

2.1. Schiff baz oluşumuna ait genel reaksiyon.....	4
2.2. Schiff baz oluşumuna ait genel reaksiyon.....	6
2.3. İmin oluşum mekanizması.....	7
5.1. İki ucu aynı schiff bazları (SB1) sentezi için örnek bir reaksiyon.....	40
5.2. Tek uçlu schiff bazları (TSB) sentezi için örnek bir reaksiyon.....	40
5.3. İki ucu farklı schiff bazları (SB2) sentezi için örnek bir reaksiyon.....	40
6.1. Çalışılan 4,4'-oxydianilin türevlerinden iki ucu aynı moleküller (SB1) için genel protonlanma şeması.....	45
6.2. Çalışılan schiff bazlarından iki ucu aynı olan SB1-7N molekülü için protonlanma merkezleri.....	48
6.3. Çalışılan schiff bazlarından iki ucu aynı olan SB1-8N molekülü için protonlanma merkezleri.....	49
6.4. Çalışılan schiff bazlarından iki ucu aynı olan SB1-9N molekülü için protonlanma merkezleri.....	50
6.5. Çalışılan schiff bazlarından iki ucu aynı olan SB1-14N molekülü için protonlanma merkezleri.....	51
6.6. Çalışılan 4,4'-oxydianilin türevlerinden tek uçlu moleküllerin genel protonlanma şemaları.....	52
6.7. Çalışılan 4,4'-oxydianilin türevleri için deprotonlanma şeması genel şeması.....	54
6.8. Çalışılan 4,4'-oxydianilin türevlerinden tek uçlu moleküllerin genel deprotonlanma şeması.....	56
7.1. SB1-1N molekülünün oluşum reaksiyonu.....	166
7.2. SB2-1N molekülünün oluşum reaksiyonu.....	166
7.3. TSB-1N molekülünün oluşum reaksiyonu.....	167

ÇİZELGELER DİZİNİ

4.1.	Semi-empirik metottaki yöntem çeşitlerinin zaman içerisinde farklı sayıdaki bileşikler üzerindeki kullanımı	28
4.2.	Sadece C, H, O, N, F, Cl, S, P ve Br içeren 1,373 bileşik için kullanılan yöntemlerle hata kıyaslamaları.....	28
4.3.	Yarı deneysel hesaplamalarda kullanılan yöntemler.....	28
5.1.	Sentezlenen bileşiklerin formülleri ve adlandırılması.....	33
6.1.	Yapılan çalışmada kullanılan bazı Schiff bazı türevleri.....	45
6.2.	Yapılan çalışmada kullanılan bazı tek uçlu Schiff bazı türevleri...	53
6.3.	Yapılan çalışmada kullanılan bazı Schiff bazı türevlerinin deprotonlanması	54
6.4.	Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) AM1 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri.....	57
6.5.	Protonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) AM1 yöntemiyle hesaplanmış olan ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri.....	58
6.6.	Deprotonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298$) AM1 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri.....	59
6.7.	Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF çözeltisinde ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) AM1 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri.....	59
6.8.	Protonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) AM1 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri.....	60
6.9.	Deprotonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) AM1 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri.....	61

- 6.10. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298$) PM3 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri..... 62
- 6.11. Protonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) PM3 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri..... 62
- 6.12. Deprotonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon = 78.4$, $T=298K$) PM3 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri..... 64
- 6.13. Nötr 4,4'-oxydianilin ve türevlerinin DMF fazında ($\epsilon =36.71$, $T=298K$) PM3 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri..... 64
- 6.14. Protonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) PM3 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri..... 64
- 6.15. Deprotonlanmış 4,4'-oxydianilin ve türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T= 298K$) PM3 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri..... 66
- 6.16. Nötr 4,4'-oxydianilin ve türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) PM6 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri..... 66
- 6.17. Protonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) PM6 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri..... 67
- 6.18. Deprotonlanmış 4,4'-oxydianilin ve türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon =78.4$, $T=298K$) PM6 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri..... 68
- 6.19. Nötr 4,4'-oxydianilin ve türevlerinin DMF fazında ($\epsilon =36.71$, $T=298K$) PM6 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) ve değerleri..... 69

- 6.20. Protonlanmış 4,4'-oxydianilin ve türevlerinin DMF fazında ($\epsilon = 36.71$, $T=298K$) PM6 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri..... 69
- 6.21. Deprotonlanmış 4,4'-oxydianilin ve türevlerinin DMF fazında ($\epsilon = 36.71$, $T=298K$) PM6 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri..... 70
- 7.1. Bazı 4,4'-oxydianilin ve türevi moleküllerinin termodinamik özelliklerinin sulu çözeltide ($\epsilon = 78.4$, $T=298K$) AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 72
- 7.2. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon = 78.4$, $T=298K$) bir proton almış hallerinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 73
- 7.3. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon = 78.4$, $T=298K$) iki proton almış hallerinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 74
- 7.4. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon = 78.4$, $T=298K$) bir proton vermiş hallerinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 74
- 7.5. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon = 78.4$, $T=298K$) iki proton vermiş hallerinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 75
- 7.6. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF çözeltisinde ($\epsilon = 36.71$, $T=298K$) AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 75
- 7.7. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon = 36.71$, $T=298K$) bir proton almış hallerinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 76
- 7.8. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon = 36.71$, $T=298K$) iki proton almış hallerinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 77

- 7.9. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) bir proton vermiş hallerinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 78
- 7.10. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) iki proton vermiş hallerinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 78
- 7.11. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 78
- 7.12. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) bir proton almış hallerinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 79
- 7.13. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) iki proton almış hallerinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 80
- 7.14. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) bir proton vermiş hallerinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 81
- 7.15. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) iki proton vermiş hallerinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 81
- 7.16. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 81
- 7.17. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) bir proton almış hallerinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 82
- 7.18. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) iki proton almış hallerinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 83

- 7.19. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) bir proton vermiş hallerinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 83
- 7.20. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) iki proton vermiş hallerinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 84
- 7.21. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 84
- 7.22. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) bir proton almış halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 85
- 7.23. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) iki proton almış halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 86
- 7.24. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) bir proton vermiş halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 86
- 7.25. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) iki proton vermiş halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 87
- 7.26. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 87
- 7.27. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) bir proton almış halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 88
- 7.28. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) iki proton almış halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 89

- 7.29. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) bir proton vermiş halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 89
- 7.30. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) iki proton vermiş halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f 90
- 7.31. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 91
- 7.32. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) bir proton almış haliyle AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 92
- 7.33. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) iki proton almış haliyle AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 92
- 7.34. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) bir proton vermiş haliyle AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 93
- 7.35. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) iki proton vermiş haliyle AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 94
- 7.36. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 94
- 7.37. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) bir proton almış halinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 94
- 7.38. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) iki proton almış halinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 95

- 7.39. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) bir proton vermiş halinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 96
- 7.40. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) iki proton vermiş halinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 96
- 7.41. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 97
- 7.42. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) bir proton almış haliyle PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 97
- 7.43. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) iki proton almış haliyle PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 98
- 7.44. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) bir proton vermiş haliyle PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 99
- 7.45. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) iki proton vermiş haliyle PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 99
- 7.46. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 100
- 7.47. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) bir proton almış halinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 100
- 7.48. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) iki proton almış halinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 101

- 7.49. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) bir proton vermiş halinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 102
- 7.50. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) iki proton vermiş halinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 102
- 7.51. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 103
- 7.52. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) bir proton almış halinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 103
- 7.53. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) iki proton almış halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 104
- 7.54. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) bir proton vermiş halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 105
- 7.55. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) iki proton vermiş halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 105
- 7.56. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 106
- 7.57. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) bir proton almış halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 106
- 7.58. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) iki proton almış halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG 107

7.59.	4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) bir proton vermiş halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG	108
7.60.	4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) iki proton vermiş halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG	108
7.61.	AM1 yöntemiyle su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri.....	115
7.62.	AM1 yöntemiyle DMF fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri.....	117
7.63.	PM3 yöntemiyle su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri.....	120
7.64.	PM3 yöntemiyle DMF fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri.....	123
7.65.	PM6 yöntemiyle su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri.....	126
7.66.	PM6 yöntemiyle DMF fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri.....	129
7.67.	Birinci ve ikinci protonlanma merkezlerine göre AM1 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen PA değerleri.....	133
7.68.	Birinci ve ikinci deprotonlanma merkezlerine göre AM1 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen ve PA değerleri.....	138
7.69.	Birinci ve ikinci protonlanma merkezlerine göre PM3 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen PA değerleri.....	140
7.70.	Birinci ve ikinci deprotonlanma merkezlerine göre PM3 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen ve PA değerleri.....	144

7.71.	Birinci ve ikinci protonlanma merkezlerine göre PM6 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen ve PA değerleri.....	146
7.72.	Birinci ve ikinci deprotonlanma merkezlerine göre PM6 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen ve PA değerleri.....	150
7.73.	Sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) AM1, PM3 ve PM6 yöntemleri ile yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen nükleofilik değerleri.....	152
7.74.	DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) AM1, PM3 ve PM6 yöntemleri ile yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen nükleofilik değerleri.....	155
7.75.	Oluşan ürünlerin AM1, PM3 ve PM6 yöntemleriyle sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) ve DMF fazında ($\epsilon=36.71$, $T=298K$) $E_{HOMO} - E_{LUMO}$ sıralaması.....	157
7.76.	Oluşan ürünlerin kararlılıkları.....	159
7.77.	Gerçekleşen reaksiyonların kararlılıkları.....	168
7.78.	AM1 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri sıralaması....	174
7.79.	PM3 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri sıralaması....	177
7.80.	PM6 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri sıralaması....	180

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

K_a	: Asitlik Denge Sabiti
pK_a	: Asitlik Sabiti
ΔG	: Termodinamik Standart Gibbs Serbest Enerjisi (kcal/mol)
ΔG_f	: Kinetik Standart Gibbs Serbest Enerjisi (kcal/mol)
$\delta \Delta G$: Dengeye ilişkin Termodinamik Gibbs Serbest Enerjisi (kcal/mol)
$\delta \Delta G_f$: Dengeye ilişkin Kinetik Gibbs Serbest Enerjisi (kcal/mol)
ΔH_f	: Oluşum Isısı (kcal/mol)
ΔH	: Entalpi (cal/mol)
$\delta \Delta H$: Dengeye İlişkin Oluşum Isısı (kcal/mol)
ΔS	: Entropi (cal/mol)
T	: Sıcaklık (K)
R	: 1.987×10^{-3} kcal/mol. K
HOMO	: En Yüksek Dolu Moleküler Orbital
LUMO	: En Düşük Boş Moleküler Orbital
PA	: Proton Afinitesi
$\epsilon=78.4$: Suyun Dielektrik Sabiti
$\epsilon=36.71$: DMF'nin Dielektrik Sabiti
UV-vis	: Ultraviyole Görünür Spektroskopisi
AM1	: Austin Model 1
PM3	: MNDO Yönteminin Üçüncü Parametrizasyonu
PM6	: MNDO Yönteminin Altıncı Parametrizasyonu
CNDO	: Complete Neglect of Differential Overlap (Diferansiyel Örtüşmenin Tamamen İhmali)
INDO	: Intermediate Neglect of Differential Overlap (Diferansiyel Örtüşmenin Kısmen İhmali)

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ (devam)

- NDDO : Neglect of Diatomic Differential Overlap
(İki Atomlu Diferansiyel Örtüşmenin İhmali)
- MOPAC : General-Purpose Semi-Empirical Molecular Orbital Package
- HF : Hartree- Fock Teori
- DFT : Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi

1. GİRİŞ

İlk organik imin, Laurent ve Gerhard tarafından anilin ve benzaldehitin kondenzasyonu ile sentezlenmiştir (Laurent ve Gerhard 1850). Schiff bazları olarak da bilinen bu tür bileşiklerle ilgili birçok araştırma yapılmıştır (Schiff 1864; Haas 1997). Schiff bazları koordinasyon kimyası alanına ilk kez 1932 yılında girmiştir (Pfeiffer 1932).

Schiff bazları azometin grubunu (RHC=N-) içeren bileşiklerdir ve genellikle birincil aminin aktif bir karbonil bileşiği ile kondenzasyonu sonucu oluşurlar (Vaghasiya ve ark. 2004; Sönmez ve ark. 2003).

Bu tür bileşikler farklı alanlarda geniş uygulamaları olan ve koordinasyon kimyasında önemli sınıf ligandlarıdır. Schiff bazı komplekslerinin birçok uygulama alanları bulunmaktadır. Örneğin, Rutenyumlu komplekslerinin, oksijen atomları yardımıyla alkollerin oksidasyonunu katalizlediği (Thronback and Wilkinson 1978), heterosiklik monomerlerin polimerizasyonunda (Munoz-Hernandez, et al., 2002), koordinasyon kimyasında salen- ve benzilidin- tipi ligandlar, geçiş ve temel grup metaller ile kompleks oluşturmada yaygın olarak kullanılan ligandları oluşturduğu bilinmektedir (Dubay 1993; Mohand 1995; Campbell 2001). Ayrıca Schiff bazları triptofan, transaminaz, transketolaz gibi birçok enzimde de gözlenmiştir (Wojciechowski, et al., 2003).

Schiff bazlarının bazı toksin metallerle kompleks oluşturmaları, elektrokimyasal elektron transferi (Rahaman ve ark. 2005) ve fotokromik özellikleri (Kunkely ve Vogler 2001) bulunması nedeniyle pek çok alanda çalışmaları yapılmaktadır.

Aromatik halkada bir veya daha fazla halojen atomları olan salisilaldehit türevlerinin Schiff bazları, antifungal ve antibakteriyel aktiflikler göstermektedirler (Shi ve ark., 2006).

Schiff bazları iletken polimerler ve optik maddeleri elde etmede kullanılabilir. Böylece, bu tür bileşikler ile yeni optik ve iletken maddeler sentezlenebilmektedir (Palys 1997; Aly 2004).

Schiff bazlarının La(III) ve Eu(III) kompleksleri antitümör etkisi nedeniyle kanser araştırmalarında kullanılmaktadır (Yang ve ark., 2000).

Schiff bazları ile oluşan Cu (II) ve Zn (II) metal kompleksleri özellikle mononükleer ve dinükleer komplekslerinin böceklerde SOD (Superoxide Dismutase) enziminin aktif alanında kullanıldığı bilinmektedir (Vanco ve ark.2004; Li ve ark. 2006).

Son yıllarda, sıvı kristal teknolojisinde de kullanım alanlarının yaygınlaşması, bu konuda yapılan çalışmaların artmasına sebep olmuştur. Sentezlenen Schiff bazlarının yapı aydınlatması ile ilgili çalışmalar 1940'lı yıllarda başlamış, 1970'li yıllarda da asitlik sabitlerinin belirlenmesine yönelik çalışmalar başlamıştır. 1971 yılında anilin, o-, m- ve p- toluidinlerin salisilaldehid ile oluşturdukları Schiff bazlarının dissosiyasyon sabitleri potansiyometrik olarak tayin edilmiştir (Shori ve ark., 1971).

1979'da yapılan bir çalışmada 2-aminopiridin, anilin, antranilik asit, o-aminofenol ve m-aminofenol' un salisilaldehit ile oluşturdukları Schiff bazlarının asitlik sabitleri % 50 (v/v) alkol-su ortamında ve 30 °C' de ölçülmüştür. Söz konusu Schiff bazlarının oluşum eğrilerinden yararlanılarak imin protonunun ve fenolik protonun basamaklı olarak dissosiyasyon oldukları bulunmuştur (Bera, C.R., 1979).

Bilgisayar kullanılarak yapılan hesaplamalar, araştırmacılara, teorik veya deneysel yöntemler kullanılarak çözümü mümkün olmayan çalışmaları yapmaları için inanılmaz olanaklar sağlar. Bu hesaplama yöntemleri, yeni maddelerin sentez öncesi tasarımında veya çalışılması zor olan (toksisitesinden, maliyetin yüksek olmasından veya kısa ömürlü olmasından dolayı) kimyasal bileşiklerle yapılan çalışmalarda kullanılabilir. Bilgisayarlı hesaplama modelleri, bilgisayarlardaki ve sayısal hesaplama teorilerindeki sürekli gelişmelerle paralel olarak madde bilimlerinde önem kazanmıştır. Kesin sonuçlar, oldukça büyük ve kompleks sistemler için bile makul zaman içinde elde edilebilir (Sillanpää, et al., 2008).

6-Metil-1,2,3,4-Tetrahydroquinolin molekülünün karakterizesi için, bağ uzunluklarını ve açılarını içeren temel haldeki optimize moleküler yapısı, 6-311G (d,p) temel setli yoğunluk fonksiyon metodu (B3LYP), ab initio Hartree-Fock (HF) ve yarı ampirik AM1, PM3, PM6 ve RM1 yöntemleri ile incelenmiştir (Zalaoğlu ve ark., 2010).

2-amino piridin ile 2-nitro benzaldehit ve furan 2-karbaldehit schiff bazlarıyla teorik çalışmalar yapılmış ve kuantum kimyasal semi-empirik hesaplamaları, daha aktif ligand yapımı için daha başarılı bir model olarak kullanıldığı görülmüştür (Arora ve ark., 2010).

Bis(o-aminofenol) eter ile 5-klor ve 5-brom salisilaldehitin kondenzasyonu ile yeni schiff bazları hazırlanarak bunların elementel analizleri yapılmış ve PM6 metoduyla teorik hesaplamaları üzerinde çalışılmıştır (Berber ve ark. 2011).

β -siklodextrin ile 3-amino-5-nitrobenzisotiazol kompleksleriyle teorik çalışmalar yapılmış ve semi empirik yöntemden AM1 ve PM3 metodları kullanılmıştır (Leila ve ark. 2011).

8-hidroksi quinolin-5- karbaldehit schiff bazı üzerinde floresans bir sensör sentezlenerek bu sensörün zayıf asit çözeltisi ortamında Al^{3+} ve diğer metal iyonlarına karşı yüksek oranda seçicilik sergilediği belirtilmiştir (Yang ve ark., 2011).

4-nitrobenzilidin-2-hidroksianilin ve 4-nitrobenzilidin-2-hidroksi-3-naptilamin asimetrik schiff bazları yeni iki basamaklı bir metodla sentezlenerek elementel analizleri yapılmıştır (Gürkan ve Güngör, 2010).

6-[(5-brompiridin-2-yl)iminmetil]fenol schiff bazı bileşikleri sentezlenerek elementel analizleri ve teorik hesaplamaları yapılmıştır (Khalaji ve ark., 2009).

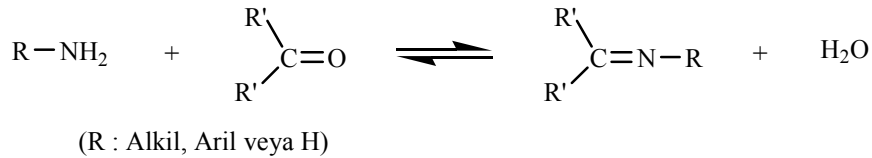
2. SCHIFF BAZLARI

2.1. Schiff Bazlarının Özellikleri

Aldehit ve ketonların uygun reaksiyon şartlarında primer aminlerle kondensasyonu sonucu meydana gelen ve yapılarında karbon-azot çift bağı bulunan bileşikler 'Schiff bazları' dır. Genel olarak yapılarında karbon-azot çift bağı (C=N) bulunan bileşiklere 'Azometin ya da imin bileşikleri' denir (Schiff,1869). Karbonil bileşiği aldehit ise oluşan bağ azometin veya aldimin, keton ise oluşan bağa imin veya ketimin adı verilir (Brown 1995; Beyer 1980; Atakol 1986). Schiff bazları ilk kez 1864 yılında Alman kimyager H.Schiff tarafından sentezlenmiştir (Schiff, 1869). 1930 yılında Pfeiffer tarafından ligand olarak kullanılmıştır (Pfeiffer,1932).

Schiff bazları genellikle, karbonil bileşikleri ile primer aminlerin kondenzasyonu ile oluşmaktadır (Şekil 2.1). Schiff bazlarının oluşumunda reaksiyon şartlarının etkisi kadar kullanılan aldehit miktarının da önemli olduğu bulunmuştur. Schiff bazı oluşumunda en fazla kullanılan karbonil bileşikleri, salisilaldehit, β diketonlar, fenoller, pridoksal, o-hidroksi naftaldehit, piridin-2-aldehit, diasetil pridin, 4-propanoil, prazolen, diformil fenol ve pürüvik asittir. Kullanılan amin bileşikleri ise diaminler, alkil aminler, aminoasitlerdir.

Schiff baz oluşumuna ait genel reaksiyon Şekil 2.1.'de verilmiştir.



Şekil 2.1. Schiff baz oluşumuna ait genel reaksiyon

R' ve R grubu bir aromatik ya da alifatik grup olabilir. Etkin konjuge sisteme sahip olan aromatik aldehitlerden oluşan Schiff bazları daha kararlı ve hidrolize karşı dirençli iken, alifatik aldehitlerden oluşan Schiff bazları hızlı bir şekilde polimerleşebilir ve kararsızdır (Bukhari, 2002).

Şekil 2.1.'deki reaksiyon iki yönlüdür ve denge genel olarak hissedilir bir hızla gerçekleşmektedir.

Reaksiyon, azot atomunda en az bir tane ortaklanmamış elektron içeren elektronegatif atom bulunan aminlerle (örneğin: hidrazin) yapıldığı takdirde, tam olarak tamamlanır. Bu durumda reaksiyon ürünü kolay hidrolize uğramaz ve yüksek verimle izole edilebilir.

Hidrolize yatkın olmaları sebebiyle Schiff bazlarının elde edilmesinde, daha çok susuz ortamda çalışılır. Reaksiyon sonucu meydana gelen su azeotrop oluşturan bir çözücü ile uzaklaştırılır (Pratt, 1961).

Aromatik aldehitler düşük sıcaklıkta ve uygun çözücü ortamında aminlerle reaksiyona girerler. Aromatik aldehitlerin aromatik aminlerle kondenzasyonunda, para konumunda elektron çekici bir substitüentin aldehitte bulunması halinde reaksiyon hızının azaldığı anlaşılmıştır (Pratt, 1961).

Azometin bağındaki azot atomunun ortaklanmamış bir çift elektron (bağ yapmamış ya da ortaklaşmamış elektron çifti) taşıması, bu grubun elektron verici olmasına, yani bazik karakterde olmasına neden olur. Böylece Lewis bazı durumundaki azometin grubu ortaklanmamış elektronunu metale vererek koordinasyon bileşikleri oluşturur (Demirhan, 1997). Bu tür bileşiklerde bulunan bazik merkezden dolayı katalizör destek madde olarak kullanımını sağlayan Brönsted ya da Lewis asitlere kolayca bağlanabilmektedirler (Iwan ve ark., 2007).

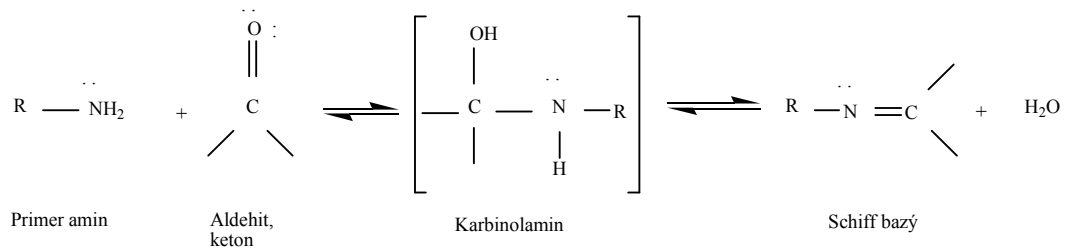
Aldehitler primer aminlerle kolayca schiff bazı verdikleri halde, ketonlardan schiff bazı elde edilmesi oldukça zordur. Ketonlardan schiff bazı elde edebilmek için reaksiyon sırasında açığa çıkan su ile azeotrop oluşturan bir çözücü seçilmesi, katalizör seçimi, uygun pH aralığı ve uygun reaksiyon sıcaklığının seçimi gibi çok sayıda faktörün dikkate alınması gerekir. Özellikle aromatik ketonlardan schiff bazı elde edebilmek için yüksek sıcaklık, uzun reaksiyon süresi ve katalizör gereklidir (Bilman, 1958, Patai, 1970).

2.2. Schiff Bazlarının Oluşum Mekanizması

Aldehitler ve ketonlar primer aminler ile (RNH₂) tepkime vererek iminler (RCH=NR veya R₂C=NR) diye adlandırılan karbon-azot ikili bağına sahip bazik bileşikler oluştururlar (Şekil 2.2) (Wade 1999).

Schiff bazlarının oluşum mekanizmaları aldol reaksiyonlarına çok benzer. İmin oluşumu, küçük molekül veya suyun ayrılması ile iki veya daha fazla organik bileşikler birleştiren kondenzasyon reaksiyonlarına örnektir (Wade 1999). Yapıda bulunan R grupları ne kadar çok elektron çekici ve rezonans özelliği gösterirse imin bileşiği de o kadar kararlı olur.

Schiff bazı oluşumuna ait genel reaksiyon Şekil 2.2’de verilmiştir.

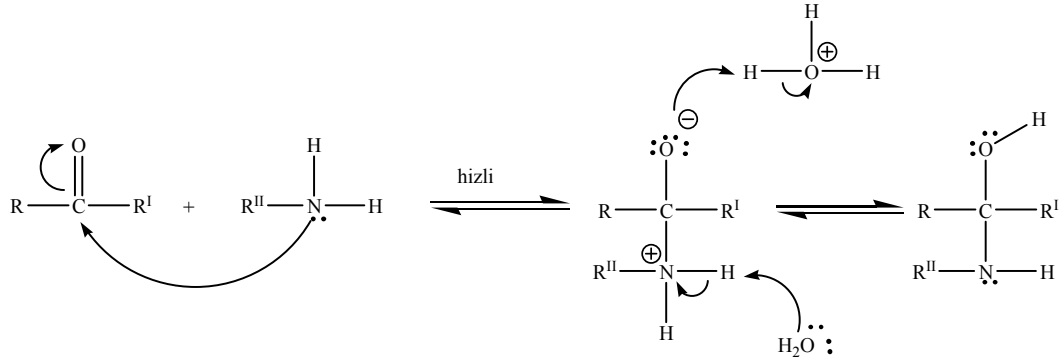


Şekil 2.2. Schiff bazı oluşumuna ait genel reaksiyon

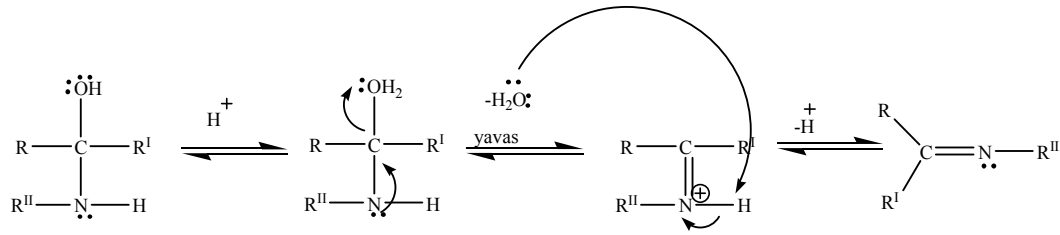
İmin oluşumu, pH’ a bağımlı bir reaksiyondur; çok düşük ve çok yüksek pH’ da reaksiyon yavaş gerçekleşmektedir. Şekil 2.3’ de gösterildiği gibi, önerilen mekanizma bir karbinolamin ara ürünü varlığında gerçekleşmektedir. İmin oluşmasının mekanizması iki basamaklı bir işlemdir. İlk basamakta, nükleofilik amin kısmi elektronca yoksun karbonil karbonuna katılır, oksijen azot üzerindeki protonu koparır ve karbinolamin ara ürünü oluşur. Mekanizmanın ikinci basamağında, karbinolamindeki, -OH grubu asit tarafından protonlanarak, zayıf bir ayrılan grubu (-OH grubu) iyi bir ayrılan gruba (-OH₂ grubu) çevirir. Suyun ayrılması ile azotta pozitif yük ve okteti tamamlanmış kararlı rezonans yapıda imin oluşmaktadır (Wade 1999).

İmin oluşum mekanizması Şekil 2.3’ de verilmiştir.

1. Basamak:



2. Basamak:



Şekil 2.3. İmin oluşum mekanizması

Birinci basamak, genellikle asidik çözeltilerde hız belirleyen basamaktır. İkinci basamak bazik ve nötral çözeltilerde meydana gelir. Bu nedenle imin eldesi ortam pH' sına bağımlı bir reaksiyondur. Çözelti çok asidik olursa, amin derişimi ihmal edilecek kadar azalır. Böyle olduğunda, normalde hızlı olan katılma basamağı yavaşlar ve tepkime dizisinde hız belirleyen basamak haline gelir (Fesseden, 1990).

Reaksiyonda hidronyum iyonu derişimi çok yüksek ise reaksiyon daha yavaş ilerler, çünkü amin önemli oranda protonlanır ve bu da ilk basamakta gerekli nükleofil derişimini azaltacak bir etkidir. Asitliğin yüksek olması, ikinci basamağın daha hızlı fakat birinci basamağın daha yavaş yürümesine neden olur. Buna karşılık asitliğin azalmasıyla birinci basamak daha hızlı, ikinci basamak daha yavaş yürür, çünkü hidronyum iyonu derişimi azalması ile protonlanmış aminoalkol derişimi azalmaktadır (Solomon 2002).

İminlerin sentezi için kullanılan bazı metotlar birkaç avantaja sahiptir. Sulu çözeltilerde en iyi şartlar altında dengenin yönü genellikle amin ve karbonil yönüne kayabilmektedir.

Bu nedenle, iminler bazı uygun susuz çözücülerde ya da sıvı aldehit ve aminlerin direkt reaksiyonu ile hazırlanmaktadır. Bu yöntemle sulu çözeltide gerçekleşen reaksiyonlarda oluşan suyu uzaklaştırmak için aletlere ya da herhangi bir kurutucu maddenin kullanımına gerek kalmamaktadır (Pesek ve Frost, 1974).

İmin oluşumu, birçok biyokimyasal reaksiyonda da meydana gelmektedir, çünkü enzimler genellikle bir aldehit veya keton ile olan reaksiyonlarında $-NH_2$ gruplarını kullanırlar. Bir imin bağının oluşumu, biyokimyasal bir reaksiyon olan görme süreci sırasında ara ürün olarak oluştuğundan dolayı önemlidir (Solomon, 2002).

2.3. Schiff Bazlarının Kullanım Alanları ve Önemi

Bu tarihe kadar ligand olarak sadece (CN^- , NH_3 , $C_2O_4^{2-}$) gibi küçük moleküller kullanılıyordu. Büyük moleküllerin de ligand olarak kullanılmaya başlanması ile, pek çok Schiff bazının metal kompleksleri hazırlanmıştır. Günümüzde ise, Schiff bazlarının koordinasyon bileşikleri kimyacılar tarafından çok çalışılan bir konu haline gelmiştir. Yüklü veya yüksüz grupların meydana getirdiği ligandlar merkez atomuna donör atomlarla bağlanarak koordinasyon bileşiklerini meydana getirirler, ve Schiff bazı ligandları, yapılarında bulunan donör atomların sayısına bağlı olarak etkin bir şelat grubu oluştururlar. Bu özellikler kompleks bileşikleri vermelerini kolaylaştırmaktadır. Bunun yanında, Schiff bazları hazırlanırken, ligand olarak azometin başına komşu, orto pozisyonunda $-OH$, $-SH$, $-NH_2$ gibi grupların bulunmasına dikkat edilir. Bu gruplar katyonla birlikte altılı halkalar oluşturdukları için dayanıklı kompleksler meydana getirirler (Patai, 1970).

Piridin halkası içeren Schiff bazları biyolojik sistemlerdeki önemli rollerinden dolayı çok ilgi gören bileşiklerdir (Kalen, R.G., et. al., 1985). Ayrıca bu bileşikler metaller için analitiksel reaktif ve ateş düşürücü olarak kullanılır (Geary, W.J., et. al., 1962; Parashar, R.K., et. al., 1988).

Fareler üzerinde yapılan in vivo araştırmalar ise Schiff bazlarının Ascites Carcinoma Virüsüne karşı antikanser aktivitesinin oldukça yüksek olduğunu göstermiştir (Patel *et al.* 1989).

Schiff bazları biyolojik olaylarda önemli rol oynayan gruplar içeren bileşiklerdir. Örneğin rodopsin, halorodopsin de bir Schiff bazı oluşturan lizin NH₂ grubuyla peptit bağı oluşturur. Bu yüzden Schiff bazları triptofan sentaz, transaminaz ve transketolaz gibi çeşitli enzimlerde gözlenirler (Streyer, L., 1995; Rajakantoania, V., et. al., 2000).

Bu bileşiklerin metal kompleksleri renkli maddeler olduklarından, boya endüstrisinde özellikle tekstil boyacılığında pigment boyar maddesi olarak kullanılmaktadır (Serin vd. 1988).

Boyar madde ve polimer teknolojisinde, ilaç sanayinde, tıpta, tarım alanında, roket yakıtı hazırlanmasında, biyolojik olayların açıklanmasında ve daha bir çok alanda bu bileşiklerden büyük ölçüde yararlanılmakta ve yeni sentezlerin yapılması yönündeki çalışmalar yoğun bir şekilde devam etmektedir (Zeishen 1987, Dıđrak 1997).

Schiff bazları yapılarındaki donör atom sayısına bağılı olarak multidentat ligand olarak davranış gösterebilirler. Eđer azometin bağına orto konumunda OH veya SH grupları varsa metallerle 6 üyeli halka oluştururlar (Huili, C. and Chang, T.C., 1991).

Schiff bazı geçiş metal kompleksleri ucuz, kolayca sentezlenmesi, kimyasal ve termal kararlılıklarından dolayı organik maddeler için ilginç oksidasyon katalizör ailesidir. Bu tür bileşikler sentetik ve ticari olarak basit organik maddeleri fonksiyonlu türevlerine dönüştürmek için katalizör olarak kullanılmıştır (Yamada ve ark. 1990; Grasselli 1999; Sheldon ve ark. 1998). Ayrıca yaygın olarak polimerizasyon inhibitörleri, antioksidantlar, fotoğraf kimyasalları olarak, ilaçlar, tatlandırıcı ayıraçlar ve pestisitler de kullanılır (Abbo ve ark. 2005). Schiff bazları biyolojik aktivitelerinden dolayı birçok kimyasal olayda önemli rol oynamaktadır (Walsh ve ark. 1987).

Biyolojik aktivitelerinden başka, fotokromik özelliğı, görüntü sistemleri ve optikal bilgisayarlarda radyasyon yoğunluğunun ölçülmesi ve kontrolü (Elmalı ve ark. 2000), elektronik, optoelektronik ve fotonikler (Iwan ve ark., 2007) gibi çeşitli alanlarda uygulanması bu maddelere duyulan ilgiyi her geçen gün arttırmaktadır.

Koordinasyon kimyası ve diğ er madde bilimleri tarafından Schiff bazı bileşikleri farklı birçok özellikleri ile dikkat çekmektedir (Ziessel, 2001). UV-vis spektrumuna bağı lı çözücülere sahip olan Schiff bazları uygun NLO (optikçe aktif) maddeler olabilirler (Alemi, 2000).

Koordinasyon kimyasında çoğ unlukla ligant olarak kullanılan Schiff bazlarının O ve N atomları arasındaki intramoleküler hidrojen bağı ları, metal komplekslerinin oluşmasında önemli bir role sahiptir (Eleman ve ark., 2002).

Birçok sayıdaki Schiff bazları ve bunların kompleksleri sahip oldukları ilginç ve önemli özellikleri sebebiyle incelenmiştir. Bu özellikler arasında oksijeni ters yönde bağlama yetenekleri, olefinlerin hidrojenlenmelerindeki katalitik aktivitesi, hidroksilden (O) imin (N) atomlarına proton transferi ile katı halde fotokromizm ve termokromizm özelliğ i göstermesi, bazı toksik metallere karşı kompleksleşme yetenekleri sayılabilir. Ayrıca, Schiff bazlarından elde edilen komplekslerin biyolojik aktivitelere katılma yatkınlıkları biyolojik modeling uygulamaları açısından umut vericidir (Khalil ve ark., 2005; Chantarasiri ve ark., 2004; Soliman ve ark., 2004; Taş ve ark., 2004; Soliman 2001).

3. MADDELERİN PROTON ALMA VE VERME DAVRANIŞLARI

3.1. Asitlik ve bazlık tanımları

Asitler ve bazlar kimyanın en önemli konularından biridir, çünkü kimyasal reaksiyonların çoğu asit baz reaksiyonudur. Asit-baz kimyasının temel prensipleri gözden geçirilirse kimyasal reaksiyonlar hakkında daha detaylı bilgiler elde edilebilir. Özellikle organik kimyada meydana gelen reaksiyonların büyük bölümü direkt olarak asit-baz reaksiyonunun bir kısmında asit-baz etkileşmesi görülebilir. Dolayısıyla asit-baz reaksiyonları, kimyacıların bir reaksiyonun mekanizmasını anlayabilmesi için büyük önem taşır. Bir kimyager bu reaksiyonları inceleyerek bağ kırılmalarının ya da yeni bağ oluşumlarının mekanizması hakkında fikir yürütebilirler.

Reaksiyon dengeye ulaşırken ne kadar ürün oluştuğunu ya da oluşabileceğini tahmin etmede bazı termodinamik özelliklerin nasıl kullanılabileceği hakkındaki ipuçları, asit-baz reaksiyonlarının, molekül yapısı ile molekül reaktifliği arasında nasıl bir ilişki bulunduğunun açıklanmasıyla elde edilebilir. Ayrıca asit-baz reaksiyonları çözücülerin kimyasal tepkimelerde ne gibi rollere sahip olduğunu da ortaya koyar, organik sentezler hakkında detaylı bilgiler verir (Solomons, 1996).

Asit ve baz teorileri olarak ileri sürülen birkaç teori vardır. Aslında bunlar teoriden daha çok asit ve bazın ne olduğunu açıklayan tanımlardır. Bu tanımlamalardan herhangi birinin diğerine göre daha doğru veya yanlış olduğu iddia edilemez. Asit ve bazlarla ilgili herhangi bir olay için hangisi en uygun ise o kullanılır (Ölmez ve Yılmaz, 1998).

3.1.1. Arrhenius Asit-Baz Tanımı

Arrhenius, asit-baz tanımını 1883 yılında suyun iyonlaşma dengesini temel alarak yapmıştır (Ebbing, 1993).

Suyun iyonlaşması aşağıdaki şekildedir.



Suyun iyonlaşması için denge bağıntısı $K_{su} = [H^+].[OH^-]$ biçiminde yazılabilir. 25°C için $K_{su}=1.01 \times 10^{-14}$ 'tür.

Eğer ortamda;

$[H^+] > [OH^-]$ ise çözelti asidik,

$[H^+] = [OH^-]$ ise çözelti nötr,

$[H^+] < [OH^-]$ ise çözelti baziktir.

Arrhenius tanımı, hidroksit grubu veren her maddeyi baz, sulu çözeltiliye proton veren her maddeyi ise asit olarak sınıflandırmıştır. Bu tanıma göre asit molekülü kesinlikle hidrojen, baz molekülü ise hidroksit taşımakta olup HCl, HNO₃, H₂SO₄, H₃PO₃ gibi maddeler asit; NH₄OH ve NaOH gibi maddeler ise baz özelliği gösterir (Tunalı ve Özkar, 1999).

Arrhenius asit-baz tepkimesi şu şekilde yazılabilir:



Bu açıklama sulu çözeltiler için geçerlidir, buna karşılık H⁺ ve OH⁻ iyonlarının mevcut olmadığı katı ve gaz fazı tepkimeleri ile susuz çözeltiler için uygun değildir. Brønsted ve Lewis tarafından yapılan tanımlar genel kullanım için daha uygundur (Miessler and Tarr, 2002).

3.1.2. Lowry-Bronsted Asit-Baz Tanımı

1923 yılında Brønsted ve Lowry birbirinden bağımsız olarak asitlerin H⁺ verebilen, bazların da H⁺ alabilen maddeler olduğunu söylemişlerdir (Miessler ve Tarr, 2002). Brønsted-Lowry'nin asit baz tanımı yalnızca sudaki çözeltiler için değil, proton içeren diğer çözücülerdeki veya gaz fazındaki tepkimeler için de geçerlidir (Tunalı ve Özkar, 1999). Bu tanım ayrıca, farkları sadece bir proton fazlalığı veya eksikliği olan eşlenik (konjuge) asitler ve bazlar kavramını da geliştirmiştir.



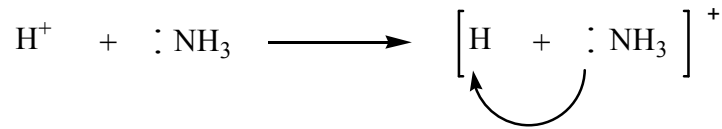
Bu denge tepkimesinde HA asidi, B ise bazı göstermektedir. Geri tepkime düşünüldüğünde HB⁺'nın bir asit, A⁻'nin bir baz olduğu kolaylıkla görülür.

Tepkimede HA ile A^- arasındaki fark yalnızca protonlanmış olma veya olmamadır. Aynı maddenin protonlanmış haline asit, protonlanmamış haline de baz denir. Böylece oluşan HA ve A^- çiftine konjuge asit-baz çifti denir. Benzer şekilde B ve HB^+ da konjuge asit-baz çiftidir (Tunalı ve Özkar, 1999).

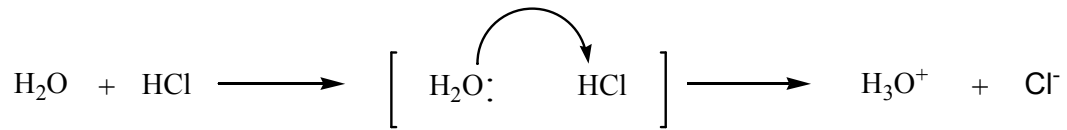
Yukarıdaki örneklerde de olduğu gibi asitler ve bazlar pozitif, negatif yüklü veya nötr olabilirler. Bir molekül ya da iyon, herhangi bir reaksiyonda asit ya da baz olarak yer alabilir (Solomons, 1996).

3.1.3. Lewis Asit-Baz Tanımı

1923'de Lewis, çözücüdeki protona, iyonlara ve çözücü reaksiyonlarına bağlı olmayan bir asit-baz tanımı önerdi. Bu tanıma göre; elektron çifti alan maddeler asit, elektron çifti veren maddeler bazdır. Lewis tanımı, basitliği ve özellikle organik reaksiyonlara uygulanabilirliği açısından, asit-baz tanımlarının en geneli ve yaygın olarak kullanılanıdır. Bu tanımda proton bir Lewis asidi ve amonyak da bir Lewis bazıdır; çünkü ortaklaşa kullanılmak üzere, NH_3 elektron çifti sağlayıcıdır, H^+ da elektron çifti alıcıdır:



Benzer şekilde HCl bir Lewis asitidir; çünkü su gibi bir bazdan bir elektron çifti alır ve iyonlaşır.



(Ölmez ve Yılmaz, 1998).

Lewis' in baz kavramı, Lowry-Bronsted teorisine çok benzer. Çünkü Lewis 'e göre de bir bazın proton alabilmesi için elektron vermesi gerekir (Solomons, 1996).

3.1.4. Molekül Orbitali Kuramında Asit-Baz Kavramı

Bütün bu tanımlarda artı veya eksi yüklü taneciklerin alınıp verilmesi esas alınmıştır. Artı yükün alınmasının elektron verilmesine, artı yükün verilmesinin de elektron alınmasına karşı geldiği düşünülürse asitler elektron alan, bazlarda elektron veren maddeler olarak tanımlanabilir.

Bu tanımı molekül orbitali kuramı rahat bir şekilde açıklayabilmektedir. Bir maddenin asit olarak davranabilmesi için aldığı elektronları koyabileceği düşük enerjili boş bir orbitale sahip olması gerekir. Yani LUMO'su düşük enerjili maddeler asit olarak davranırlar.

Benzer şekilde bir maddenin baz olarak davranabilmesi için kolaylıkla verebileceği elektronlara sahip olması gerekir. Madde ancak yüksek enerjili dolu molekül orbitalinden elektron verebileceğine göre, yüksek enerji dolu molekül orbitaline sahip olan maddeler baz olarak davranırlar. Yani HOMO' su yüksek enerjili maddeler bazdır. Örneğin BH_3 molekülünde LUMO (Bor atomu üzerindeki bağ yapmayan boş molekül orbitali) düşük enerjili olduğu için, molekül elektron alabilir ve dolayısıyla asit olarak davranabilir. NH_3 molekülü ise yüksek enerjili HOMO' ya (azot atomu üzerindeki bağ yapmayan dolu molekül orbitali) sahiptir ve gerektiğinde bu orbitaldeki elektronlarını vererek baz olarak davranır. Amonyak molekülünde LUMO bağa karşı σ^* molekül orbitalidir ve enerjisi çok yüksektir. Amonyagın bu yüksek enerjili molekül orbitaline elektron alması çok fazla enerji gerektiren bir olay olduğundan, asit olarak etkimesi zordur. Maddelerin asitliği ve bazlığı HOMO ve LUMO orbitallerinin enerjisine bağlıdır. Bir maddenin HOMO'su ne kadar yüksek enerjili ise, madde o kadar kuvvetli bazdır. LUMO ne kadar düşük enerjili ise, madde o kadar kuvvetli asittir.

Bütün maddelerde HOMO ve LUMO'nun bulunması, onların hem asit hem de baz olarak davranabilecekleri sonucunu doğurmaktadır. Gerçekten de maddeler ortama ve koşullara göre asit veya baz olarak etki edebilirler.

Bir madde kuvvetli asit karşısında baz olarak davrandığı halde, kuvvetli baz karşısında asit olarak davranabilir. Örneğin $SnCl_2$ molekülü Cl^- iyonuna karşı asit, BH_3 molekülüne karşı baz olarak davranır.

İlkinde kalay üzerindeki bağ yapmayan boş molekül orbitali (kalay atomunun molekül düzlemine dik 5p orbitali), ikincisinde de yine kalay üzerindeki bağ yapmayan dolu molekül orbitali (sp^3 hibrit orbitali) kullanılır. Bir molekül bir maddeye karşı aynı anda hem asit, hem de baz olarak etkiyebilir. Buna en güzel örnek karbon monoksitin geçiş metallerine bağlanmasıdır. Karbon monoksit aynı geçiş metal atomuna hem asit hem de baz olarak bağlanmaktadır. İlkinde metale elektron verirken, ikincisinde metalden elektron almaktadır (Tunalı ve Özkar, 1999).

3.2. Asit ve Bazların Kuvvetliliği: K_a ve pK_a

3.2.1. Asitlik Sabitleri

Asitlik sabiti ile maddenin yapısı, özellikleri, tautomerik durumu, elde edilmesi ve oluşabilecek reaksiyonlar arasında yakın bir ilgi vardır. Asidik veya bazik özelliğe sahip bir molekülün stereokimyasal yapısının belirlenmesinde ve konformasyonel analizlerde asitlik sabitleri kullanılmaktadır. Ayrıca organik reaksiyonlarda elektrofilik ve nükleofilik atağın yönü, kuvveti, ara ürünlerinin kararlılığı ve gerekli aktivasyon enerjisinin büyüklüğü hakkında bilgiler verirler (Brown ve ark. 1985; Chilton ve ark. 1962).

Kimyasal reaksiyonların gerçekleşmesi sırasında ürünler ve reaktifler arasında bir denge söz konusudur. Bir tepkimenin ne ölçüde yürüdüğünü ortaya koyan bir denge sabiti vardır ve "K" ile gösterilir. Denge sabiti, konsantrasyon değerlerinin molarite, "M" olarak ifade edildiği eşitlik aşağıdaki şekilde hesaplanır.

$$K = \frac{\text{Ürünlerin konsantrasyonları, M}}{\text{Tepkimeye giren bileşiklerin konsantrasyonları, M}}$$

(3.1.)

HCl, H_2SO_4 gibi kuvvetli asitlerin sulu çözeltilerinde tamamen iyonlaştığı düşünülmesine karşın, asetik asit gibi zayıf asitlerin sulu çözeltilerinde meydana gelen tepkime bir denge tepkimesi olduğundan dolayı onu denge sabitiyle tanımlayabiliriz.

Yapılan deneylerde, 25°C’de 0,1 M’lik asetik asit çözeltisinde, asetik asit moleküllerinin sadece %1’inin protonlarını suya transfer ettiği gözlemlenmiştir. Asetik asit suda tam olarak iyonlaşmadığından bir denge sabiti yazılması gerekir.

$$K_{\text{denge}} = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+][\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}][\text{H}_2\text{O}]} \quad (3.2.)$$

Suyun konsantrasyonu sabit olacağından yeni bir denge sabitinin yazılması gerekir. Bu yeni denge sabitine K_a (asitlik sabiti) denir.

$$K_a = K [\text{H}_2\text{O}] = \frac{[\text{H}_3\text{O}^+][\text{CH}_3\text{COO}^-]}{[\text{CH}_3\text{COOH}]} \quad (3.3.)$$

Asetik asit için 25°C’deki $K_a = 1,76 \times 10^{-5}$ ’tir (Solomons, 2002). Suda çözünen zayıf asitler için bu denge;



yazılabilir.

Denklemden ürün derişimleri payda, ayrışmamış asit derişimi ise paydadadır. Bu nedenle K_a ’nın büyük değerleri asidin kuvvetli olduğunu, küçük K_a değerleri ise asidin zayıf olduğunu belirtir. Kimyacılar genelde asitlik sabitini, K_a ’nın negatif logaritması olarak, $\text{p}K_a$ ile ifade ederler.

$$\text{p}K_a = -\log K_a$$

Çözeltideki bulunan hidronyum iyon konsantrasyonunun negatif logaritması alınır,

$$\text{pH} = -\log [\text{H}_3\text{O}^+] \quad (3.4.)$$

eşitliği elde edilir.

Asetik asit için literatürdeki $\text{p}K_a$ değeri 4,75 olarak verilmistir ($-\log 1,76 \times 10^{-5}$). Bu eşitlikten de anlaşılacağı üzere yüksek bir $\text{p}K_a$ değeri olması o asidin zayıf bir asit olduğunu ifade eder (Fessenden, 1990).

Bazların kuvvetlerinin belirlenmesindeki ilke ise basitçe; asit ne kadar kuvvetli ise onun konjuge bazı o kadar zayıftır.

Bu nedenle, bir bazın kuvveti onun konjuge asitinin $\text{p}K_a$ ’sıyla ilişkilendirilebilir. Konjuge asitin $\text{p}K_a$ ’sı ne kadar büyükse baz o oranda kuvvetlidir (Solomons and Fryhle, 2002).

Bazı azo türevleri, 2,3,4,6'-tetrahidroksi-3'-sülfoazobenzen, sentezlenerek UV-visible spektroskopik tekniđi kullanılarak bu bileşiklerin K_a değeri belirlendi. Protonlanma ve deprotonlanma davranışları süper asit ve süper bazik bölgede incelendi (Öğretir ve ark., 2008.2010).

4. TEORİK KİMYADA KULLANILAN HESAPLAMA YÖNTEMLERİ VE BİLGİSAYAR PROGRAMLARI

Kimyasal üretimlerin gerçekleştirildiği tesislerde ve laboratuarlarda özellikle analitik kimya açısından bakıldığında verilerin işlenmesi ve istatistiksel değerlendirilmesi ile bu verilerin sağlandığı deney faktörlerinin araştırılması, optimize edilmesi, zaman tasarrufunun sağlanması ve kantitatif ölçümler ile kalibrasyonların gerçekleştirilmesi için gerekli olan deneysel tasarımların hazırlanması kimyanın belki de en çok hesaplama ve modelleme çalışmalarına ihtiyaç duyulduğu alanlardır (Akpolat ve Kartal, 2009).

Günümüzde, kimya biliminde kuantum mekaniği ve bilgisayara dayalı teorik hesaplamalar arasındaki sınır çizgisi ortadan kalkmaya başlamıştır, çünkü yapılan son çalışmalar sonucunda deneyler, hesaplamalar ve bilgisayara dayalı hesaplamalar ile ilgili yeni fikirler ortaya çıkmıştır. Bilgisayar biliminin gelişmesiyle birlikte, kuantum kimyasal hesaplamalardaki yetersizlik ve başarısızlık ortadan kalkmış, böylece bilgisayar hesaplamaları (computational chemistry) popüler hale gelmiştir (Schaefer, 2001).

Bir bileşiğin yapısı ve kimyası denel yöntemlerle belirlenebilir, ancak hesaplama yolu ile öngörünün yapılabilmesi çok yararlıdır ve pek çok uygulama alanı bulmuştur. Örneğin; farmakolojide yeni ilaçların geliştirilmesinde yaygın olarak kullanılmaktadır. Kimyacılar bilgisayar kullanarak sentezden önce ilaçların yapıları hakkında ön bilgiye sahip olurlar, ilaçta istenen özellikleri belirlerler, sonra bu özelliklere uygun sentezleri gerçekleştirirler. Bu da para ve zaman kaybını önler.

Molekül modelleme yazılımları, kimyacılar için çok yardımcıdır. Bu programlar vasıtasıyla moleküller bilgisayar ekranında döndürerek değişik açılardan görülebilir, geometrileri ve izomerik yapıları belirlenebilir, enerjileri tayin edilebilir, IR, UV, NMR spektrumları çizilebilir, MO diyagramları elde edilebilir (<http://w3.gazi.edu.tr/web/nkaracan/inorglab/mm.pdf>).

John Pople, bazı deneysel hataların da bilgisayar hesaplamaları sayesinde önceden tahmin edilebileceğine ilişkin bir tespitte bulunmuştur.

Bu görüşe göre önce tahmini bir model oluşturulur. Bu modelin parametreleri gerçek modellerle karşılaştırılarak birbiri ile olan uyumu araştırılır.

Eğer bir uyum söz konusuysa tahmini modelin parametrelerine güven duyulabilir ve bu parametreler deneysel sonuçları olmayan diğer moleküller için de kullanılabilir (Hargittai, 2001).

4.1. Teorik Hesaplama Yöntemleri

Günümüzde kimyasal araştırmalarda moleküllerin yapısı, enerjisi ve diğer özelliklerin kuramsal incelenmesinde yaygın olarak kullanılan teorik hesaplama yöntemleri ile moleküllerin birçok özelliği deney yapmaya gerek kalmadan hesaplanmaya başlanmıştır. Deneysel verileri bilinen sistemlerle ilgili teorik inceleme ile teorik yaklaşımın eksikleri belirlenebilmekte ve daha iyi teorik yaklaşımlar türetilmektedir. Hatta bu yaklaşımlar ile şimdiye kadar elde edilmemiş veya edilememiş ve gerçek koşullarda var olamayacak bileşiklerle ilgili uygun sonuçlar alınabilmektedir.

Moleküler yapı, termodinamik değerler, dipol moment, iyonlaşma potansiyeli, elektron yükleri, elektron yoğunlukları, bağ uzunlukları gibi birçok bilgiyi elde etmek bir tek deneyle mümkün değildir. Ancak teorik hesaplama yöntemleri ile bu bilgilere çok daha kısa sürede ve az maliyetle ulaşmak mümkün olmaktadır. Bu tür verilerin deneysel yöntemler ile hesaplanmasında sonuçların güvenilirliği de göz önünde bulundurulursa, yaygınlaşmakta olan birçok hesaplama yöntemi sonuçlarının, deneysel sonuçlara göre ne kadar güvenilir olduğu görülebilir. Kısaca, çalışmayı yürüten kişinin gözlemleri ve titizliği, çalışma ne kadar hassas olursa olsun, elde edilen doğruluğunu doğrudan belirler. Ayrıca reaksiyon ortamında oluşabilecek yan ürünlerin varlığı da sonuçların güvenilirliğini azaltacaktır.

Ancak tüm bu olumlu özelliklerine rağmen hiçbir zaman teorik hesaplamalar deneysel hesaplamaların yerini alamaz. Sonuçta önemli olan, elde edilen sonuçların güncel yaşamda kullanılabilirliği olduğundan, her kimyager için en gerçek ve güvenilir sonuç deneysel veriler olacaktır.

Bunun yanında teorik veriler her zaman deneysel çalışmayı yönlendirici ve aydınlatıcı olmakta ve birkaç istisna dışında teorik çalışma ile deneysel çalışma kıyaslama olarak kullanılmakta ve yorumlanmaktadır. Böylece deneysel çalışmaların veya bulguların güvenilirliği artmakta veya yöntem desteklenmektedir (Yarlıgan, 2001).

4.2.Bilgisayarlı Kimya Hesaplamaları

Modeller, kimya eğitiminde moleküllerin yapılarını anlamak için uzun yıllar kullanılmış ancak son zamanlarda bu modellerin yerini bilgisayarlarda kimyasal çizim programları almaya başlamıştır. Bunun yanında fiziğin temel kanunlarının bir kısmını veya tümünü esas alarak, kimyasal yapıları ve reaksiyonları taklit ederek bilgisayarla kimya hesaplamaları adı verilen bir yöntem geliştirilmiştir. Bilgisayarla kimya hesaplamaları, reaksiyonları ve bileşikleri deneysel olarak inceleme yerine kimyasal olayları bilgisayarla çalışma olanağı sağlar. Bu amaçla kullanılan bazı yöntemler sadece kararlı molekülleri değil, aynı zamanda kısa ömürlü, kararsız ara ürünleri ve hatta geçiş hallerini modellemekte kullanılır (Hargittai vd., Schulz ve Hargittai, 2001).

Hem bağımsız bir araştırma alanı hem de deneysel çalışmalara çok önemli katkıları olan teorik kimya, bilgisayarla kimya hesaplamaları sayesinde elde edilir (Yarlıgan, 2001).

Moleküler orbital hesaplama yöntemleri iki alanda incelenir (Bingham, 1975). Bilgisayarla kimya hesaplamalarının, moleküllerin yapılarını ve bunların reaktivitelerini inceleyen “moleküler mekanik” ve “elektronik yapı kuramı” adlı alanları vardır (Yarlıgan, 2001).

4.2.1. Moleküler Mekanik

Moleküler mekanikte benzer moleküllerin özelliklerini ve yapısını tahmin etmek için klasik fiziğin kanunları kullanılır. Moleküler mekanik yöntemler bir çok bilgisayar programında mevcuttur. Örneğin, HYPERCHEM, QUANTA, SYBYL, ALCHEM, MACMIMIC, PCMODEL, CHEM3D, MACROMODEL.

Birçok farklı moleküler mekanik yöntem bulunmaktadır. Her biri kendine özgü 'güç alanı' karakterize edilir. Bir güç alanı şunlardan oluşmuştur.

a) Molekülü meydana getiren atomların yerleşimi ile bu molekülün potansiyel enerjisinin nasıl değiştiğini tanımlayan eşitlikler verir.

b) Kendine özgü kimyasal şartlar içinde bir elementin karakteristik özelliğini tanımlar, bir karbon atomuna üç hidrojene bağlı bulunan bir karbon atomundan farklı işlem yapar. Atom tiplerini, hibritleşmeye, yüke ve atomun bağlı olduğu diğer atomların tipine bağlı olarak oluşturur.

c) Bir veya daha fazla parametre seti. Bu, bağ uzunluğu, bağ açıları, enerji bileşenleri ile ilişkili eşitliklerde kullanılan kuvvet sabitlerini tayin eder.

Moleküler mekanik hesaplamalar bir molekül sistemindeki elektronlar ile açıkça ilgilenmez. Bunun yerine, çekirdekler arası etkileşimleri göz önüne alan hesaplamaları yapar.

4.2.2. Elektronik Yapı Yöntemleri (Kuantum Mekanikliği)

Elektronik yapı yöntemleri hesaplamalarda klasik fizikten daha çok kuantum mekaniğinin kanunları kullanılır. Kuantum mekaniği; bir molekülün enerjisinin ve enerji ile ilişkili diğer özelliklerinin Schrödinger eşitliğinin çözülmesiyle elde edilebileceğini ifade eder.

$$H\Psi = E\Psi$$

Elektronik yapı yöntemleri (kuantum mekaniği) bu eşitliği çeşitli matematiksel yaklaşımlar ile çözümlenmeye çalışır ve bu yöntemler üç ana gruba ayrılır.

Ab-initio yöntemler

Yarı deneysel yöntemler

DFT (Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi)

4.2.2.1. Ab-initio yöntemler

Ab initio terimi latin kökenli olup "Başlangıçtan Beri" anlamındadır. Schrödinger denkleminin yazılarak çözülmesine dayanır.

Bu hesaplamalar, deneysel parametre içermeyen doğrudan teorik prensiplerden türetilmiştir (Hinchliffe, 1997).

Ab-initio moleküler orbital yöntemleri kuantum mekaniksel temellere dayanır ve bu yöntemler ile elektronik yapı ve buna bağlı özellikler hesaplanabilir (Foresman ve Frisch, 1996).

Teoride bir tepkime sistemi tam olarak modellenebilir. Hesaplama süresi moleküler mekanik yöntemlere göre oldukça uzundur. Hesaplama süresini kısaltmak için geometrilerde ve kullanılan parametrelerde bazı sadeleştirmeler yapılabilir. Ancak bu basitleştirmeler neticesinde sonuçlarda sapmalar gözlenilir (Richards and Cooper, 1983).

Ab-initio terimi temel prensiplerden türetilmiş ve parametreler kullanılmadan yapılan hesaplama uygulamaları demektir. Ancak bu tanım tamamen doğru değildir. Ab-initio teoride birçok basitleştirici yaklaşım ve ön kabuller vardır.

Bu yaklaşım tüm durumlara uygun bir yöntemdir. Ab initio hesapları genel olarak çok iyi nitel sonuçlar verir ve molekül küçüldükçe nitel sonuçların kesinliği artar (Young, 2001).

Ab-initio teoremden Born-Oppenheimer yaklaşımını kullanmaktadır. Bu yaklaşımda atom çekirdeğinin sabit olduğu ancak elektronların çekirdek etrafında hareket ettiği göz önüne alınmaktadır. Bu da elektronik dalga fonksiyonlarının nükleer hareketlerden etkilenmediği anlamına gelir. Bu yaklaşım tüm durumlara uygun bir yöntemdir.

Ab-initio teoreminde HF yöntemi de bulunmaktadır. HF dalga fonksiyonu, elektron korelasyonunu antisimetri nedeniyle kısmen göz önüne alan bir yöntemdir. Elektron-elektron itmesi özellikle hesaba katılmamıştır. Sadece onun ortalama etkisi hesaba katılır. Çok elektronlu Schrödinger denklemini basit tek elektronlu denklemlere dönüştürmesi gibi bir avantajı varken, moleküler bir sistem içindeki özellikle karşıt spinli elektronlar arasındaki korelasyonları tanımlamada yetersiz oluşu onun dezavantajıdır.

4.2.2.2. Yarı deneysel (semi-empirik) yöntemler

Yarı deneysel (semi-empirik) molekül orbital (SE-MO) yöntemleri ise bu eksterm durum arasında yer alır. Ab-initio moleküler orbital yöntemleri gibi SEMO yöntemleri de kuantum mekaniksel esaslara dayanır.

Bu yöntemlerde moleküler özelliklerin deneysel değerlerine yakın sonuçlar verecek parametreler mevcuttur. Etkileşim integralleri, için yaklaşık fonksiyonların kullanılmasıyla hesaplama süresi ab-initio yöntemlerin hesaplama süresiyle karşılaştırılmayacak kadar azdır. Çok küçük sistemler için kullanılabilen gibi büyük kimyasal sistemler içinde kullanılabilir. SE-MO yöntemlerin bazıları; AM1, PM3, MNDO, MINDO/3, CNDO' dur. Bunlar MOPAC, AMPAC, HYPERCHEM, EXTENDET HUCKEL, HONDO ve GAUSSIAN 92, MOPAC 2000 gibi programlar bulunmaktadır (CS ChemOffice) Hesaplamaları kolaylaştırmak için deneysel verilerden elde edilen parametreler SE-MO yöntemlerde kullanılmaktadır.

Bunlar Schrödinger eşitliğinin yaklaşık formunu çözmektedir. Moleküler mekanikte olduğu gibi incelenen sistem için tüm parametrelerin uygun olması gerekir.

Yıllar içinde, MNDO, AM1, PM3 gibi farklı kısaltmalarla geliştirilen yarı-deneysel yöntemler, yaklaşım detaylarında (örneğin; çekirdek-çekirdek itme fonksiyonları) ve özellikle parametre değerlerinde farklılık gösterir. Yarı-deneysel yöntemler farklı amaçlar için uygun hale getirilebilir.

MNDO, AM1 ve PM3 yöntemleri çok sayıda organik molekül yapılarını ve oluşum ısılarını göstermek için tasarlanmıştır. Diğer yarı-deneysel yöntemler spektroskopik özellikler için uygun hale getirilmiştir (örneğin; INDO/S ya da CNDO/S) (Gece, 2008).

LCAO-SCF (Linear Combinations of Atomic Orbitals-Self Consistan Field) molekül orbital yaklaşımına dayanan ilk semi-empirik molekül orbital yöntemi 1965 yılında Pople ve diğerleri tarafından geliştirilen CNDO' dur. Bundan sonra yine aynı kişiler tarafından INDO ve NDDO yaklaşımları geliştirilmiştir. Bu yöntem 1975 yılına kadar birçok organik bileşiğin hesaplamasında kullanılmıştır.

CNDO ve INDO yöntemleri moleküler özelliklerin hesaplanmalarında oldukça zayıftır. Dewar ve diğerleri 1975 de bu yaklaşımlara dayanarak MINDO/3 adlı yeni bir yöntem geliştirdiler (Bingham R.C ve ark.,1975). Sadece 10 element için geliştirilen bu yöntem, C, H, N ve O içeren moleküllerin oluşum ısılarında, bağ uzunluklarında ve iyonlaşma potansiyellerinde uygun sonuçlar vermesine rağmen yine de bazı yetersizliklere sahipti. Diatomik parametrelerin kullanılmasından dolayı diğer elementler için bu yöntemi geliştirmek oldukça zordu.

Dewar ve diğerleri 1977'de NDDO yaklaşımına dayanan MNDO yöntemini geliştirdi (Dewar ve Morita, 1977). Bu yöntemle C, H, N ve O içeren moleküllerin hesaplanan çeşitli değerlerindeki ortalama hatalar azaldı. Bu yöntemde sadece atomik parametreler kullanıldığı için, yöntemin diğer elementler içinde, gelişimini sağlamak oldukça kolaydı. Bundan sonraki sekiz yıl içinde C, H, N ve O elementlerine ek olarak 16 element için bu yöntem kullanılabilir hale geldi.

AM1 (Austin model1) MNDO integral yaklaşımının üzerine kurulmuştur. AM1, Michael Dewar ve birlikte çalıştığı arkadaşları tarafından geliştirilmiştir ve 1985'de yayınlanmıştır (Gece, 2008).

Bu yöntem esas olarak moleküldeki büyük itmeleri ortadan kaldırmak için MNDO yönteminin çekirdek-çekirdek itme fonksiyonlarında küçük bir değişiklik yapılmasıyla oluşturulmuştur.

MNDO-PM olarak adlandırılan ve MNDO'nun üçüncü parametrizasyonu olduğunu göstermek için PM3 şeklinde gösterilen program ise en son geliştirilen yöntemlerden birisidir (Stewarts, 1989). Çok sayıda element için parametreleri aynı anda optimize edebilen bir yaklaşımdır (Öztürk Yıldırım ve Akkurt, 2008).

MINDO/3, MNDO, AM1 ve PM3 gibi semi-empirik moleküler orbital yöntemlerindeki deneysel oluşum ısısını (heat of formation) ve deneysel olarak gözlenen geometrileri 25°C'de oluşturmak üzere optimize edilmişlerdir. Kesinlikle denge ve dengedeki geometrisini oluşturmak için değildir.

Bu yöntemler geliştirilmeden önce CNDO, INDO ve NDDO yöntemleri kullanılmaktaydı. Daha önceden kullanılan bu yöntemler moleküler geometri ve oluşum enerjisi hakkında bilgi vermiyordu. Sadece dipol moment hakkında bilgi veriyordu.

CNDO, atomik orbitalleri küresel simetri olarak kabul ediyor ve p orbitallerinin yönünü sadece bir elektron rezonans integrali içerdiğini savunuyordu.

Elektron rezonans integralinin büyüklüğünü orbitaller arası uzaklığa ve her bir çeşit bağ için belirlenmiş sabite bağlıdır. INDO yaklaşımında ise aynı atom üzerinde atomik orbitaller tek merkezli itme integrali içermektedir. NDDO, itme integrallerinin hesaplaması için de atomik orbitallerinin yönünü hesaba katan ilk yaklaşımdır. Bu durum aynı atom üzerinde atomik orbitaller arasında çakışan üç veya dört merkezli integralleri içermektedir.

MINDO/3, INDO yönteminin geliştirilmiş halidir. Analitik olarak bir merkezli itme integralini geliştirmekten ziyade bunlara yakın parametreler kullanılır. MINDO/3, MINDO yöntemlerinin sonuncusudur ve kimyada birçok hesaplamaların temsilcisidir. Otomatik geometri optimizasyonu ile kullanımı kolay olan ilk paket programdır. MINDO/3 birçok şekilde tartışıldığı halde, organik kimyasal araştırmalarda yapı ve enerji hesaplamaları inkar edilemez.

MNDO, MINDO/3 versiyonunun daha geliştirilmiş hali değildir, fakat NDDO yaklaşımından daha bağımsız bir metoddur. INDO'dan ziyade NDDO, moleküller için sistematik MINDO/3 hatalarından sakınmak için gereklidir.

Ab-initio hesaplamalarının yanında MINDO/3 ve MNDO'nun avantajı hızlı olmasının yanında (MINDO/3, MNDO' dan yaklaşık 1,5 kat hızlıdır) aynı zamanda büyük moleküllerin hesaplamalarını semi-empirik moleküler orbital yöntemlerle mümkün kılar.

MNDO' nun MINDO/3' den en önemli avantajı her bir element için özel parametrelere ihtiyaç duymasıdır.

Bunun anlamı, örneğin azot-lityum bağı bileşikleri hesaplamak için MNDO sadece lityum bileşik gruplarını ve azot bileşik gruplarını parametrize etmeye ihtiyaç duyar. MINDO/3 ikinci sıra elementleri için yanlış sonuç verir. Geniş uygulama alanlarında yapı ve enerji hesaplamalarında çıkan problemlerin yanı sıra, rezonans kapling sabitinde, polarizebiliteler ve doğrusal olmayan optik sabitlerde, titreşim frekanslarının hesaplanmasında problem çıkarır. Yayınlanmasından kısa bir süre sonra MINDO/3 ağır eleştirilere maruz kalmıştır. Çünkü ab-initio ile kıyaslandığında düşük performans göstermiştir.

İyi sonuç verdiği alanlar ise karbokatyonlar, karbonil bileşiklerinin proton ilgisi ve basit primer aminlerdir. MINDO/3 floropiridinlerin yarı deneysel moleküler orbital yöntemi ile hesaplamalarında MNDO'ya tercih edilir. MINDO/3 üçlü bağların kararlılığı ve aromatik bileşiklerin kararlılığının tahmininde yetersiz kalır. Diğer eksikliği ise MNDO ile ortak olmasıdır. Yeniden hidrojen bağı üretmede başarısızdır. Bu durum biyolojik sistemlerin modellendirilmesini imkansız kılar.

Sistematik MINDO/3 hatalarını düzeltebilmek için sonuçlara düzenleme faktörü uygulanarak çok dallanmış alkan sistemlerinin kararlılığı altında tahmin yapılır. Çünkü dallanma hataları molekülün yapısıyla yakın ilişkilidir. Bu yaklaşım bir çok kere iyi sonuç vermiştir.

MINDO/3 üzerinde en önemli gelişmeler doymamış moleküller bağ açıları hesaplaması ve moleküler orbitallerin sıralanması dikkate alınarak Dewar ve arkadaşları tarafından not edilmiştir. MINDO/3'ün problem teşkil ettiği ikili ve üçlü bağlanmış izomerlerde MNDO nisbi kararlılık gösterir. Dewar ve arkadaşları aynı zamanda bağ açısı hesaplamada MINDO/3'e kıyasla önemli gelişme kaydetmişlerdir. Bunun sebebi NDDO'da yönsel etkinin tanımlanmasıdır. MNDO moleküler orbital diziliminin tahmininde çok esnektir. Dallanma hataları MNDO'da daha azdır.

MNDO küresel moleküller için MINDO/3'den daha iyi performans gösterir. MINDO/3'ten en önemli avantajı daha polar moleküller için uygulanmasıdır.

Dewar'ın semi-empirik moleküler orbital yöntemleri MINDO/1, MINDO/2, MINDO/3, MNDO, AM1 ve PM3 organik kimyanın gelişmesinde çok önemli rol oynamıştır. PM3 yöntemi kuantum mekanik olarak AM1 ile aynıdır. Ancak parametrize edilmiştir.

Modern NDDO temelli AM1 ve PM3 yöntemleri daha evvelkilerin dezavantajlarını içermediklerinden ve bilgisayar teknolojisinin süratle gelişmesinin sonucu olarak büyük moleküllere uygulanabilme olanakları ortaya çıkmış, deneysel ve teorik olarak kimyacıların odak noktası haline gelmiştir.

NDDO yaklaşımı MNDO, AM1 ve PM3 yarı deneysel teorinin temelini oluşturmaktadırlar. Bu yaklaşımda farklı atomlardaki yükler arasındaki iki elektron integrali ihmal edilmektedir.

CNDO ve INDO'nun aksine NDDO-temelli yöntemler p orbitallerini içeren itme olayını doğru olarak hesaplama imkanı vermektedir. MNDO ise NDDO-temelli yöntem olup AM1 ve PM3'ün oluşmasını sağlamıştır. MNDO daha önceki INDO-temelli MINDO/3'ten birçok kimyasal problemlerin çözümünde ve özellikle moleküler geometri ve enerji hesaplamalarında daha başarılı uygulanmıştır.

AM1 metodunun MNDO'ya avantajı çekirdek-çekirdek itmesinin bir seri Gouss çekirdek itme fonksiyonu ile prodifiye edebilecek parametreler içermesidir.

AM1 yöntemi sadece C, H, N ve O elementleri içeren organik moleküller için ideal olmakla birlikte komşu atomdaki ortaklanmamış elektron problemi olan NDDO yöntemlerinin bu noksanlığını taşır. P ve S içeren moleküller için ise PM3 yöntemi daha uygundur.

PM3 ve AM1 yöntemleri MNDO ve MINDO/3 yöntemlerine göre daha güvenilir, fakat ab-initio SCF hesaplamalarına kıyasla oldukça az güvenilirdir. PM3 parametreleştirilmesi Stewart tarafından Dewar'ın AM1 için kullandığı parametrelerde farklı bir şekilde yapılmıştır (Stewart, 1989). PM3 yöntemi nitro türevleri ve yüksek değerli moleküller için AM1'dan çok başarılıdır.

PM6, gruplardaki ana elementler ve geçiş metalleri için yeni geliştirilen bir yöntemdir. AM1 ve PM3, 20 yıldan daha fazla bir zamandır kullanılan yöntemler olmakla birlikte PM6, Mopac'da son zamanlarda kullanılmaya başlanılan yeni bir yöntemdir.

Yeni elementler için PM3 ve AM1 kullanılırken, geçiş metalleri ve gruplardaki ana elementler için şimdi bu yeni yöntem olan PM6 kullanılıyor. Birçok semi-empirik yöntem (AM1, PM3) halkalar arasındaki doğru geometriyi koruyamazken PM6, DFT (Density Functional Theory) geometrileriyle korur. Ayrıca amin saldırılarında halkalar arası geometriyi doğru oluşturur.

Semi-empirik gaz fazı hesaplamalarında PM6 kullanıldığında daha düşük enerjili tautomer formu oluşturur.

Çizelge 4.1. PM6'yı geliştirmek için, 9.000'den fazla bileşiğin deneysel ve ab-initio dalarının kullanıldığını göstermektedir.

Çizelge 4.2. Sadece C, H, O, N, F, Cl, S, P ve Br içeren 1,373 bileşik için kullanılan yöntemlerle hata kıyaslamalarını gösterir.

Çizelge 4.1. Semi-empirik metottaki yöntem çeşitlerinin zaman içerisinde farklı sayıdaki bileşikler üzerindeki kullanımı

Yıl	Yöntem	Yöntemler için kullanılan bileşikler	Bileşik sayısı
1977	MNDO	Deneysel	~39
1985	AM1	Deneysel	~200
1989	PM3	Deneysel	~500
2007	PM6	Deneysel ve ab-inito	>9000

Çizelge 4.2. Sadece C, H, O, N, F, Cl, S, P ve Br içeren 1,373 bileşik için kullanılan yöntemlerle hata kıyaslamaları (Ref: CAChe Research LLC, USA).

(openmopac.net/MOPAC 2009 brochure)

Yöntem	Ulaşılan hata yüzdeleri (kcal/mol)	En fazla hata yüzdesi(kcal/mol)
PM6	4.79	-42.2
B3LYP 6-31G(d)	5.19	35.8
PM3	6.26	135.6
HF 6-31G(d)	7.37	72.5
AM1	10.01	111.9

Ab-inito ve yarı deneysel moleküler orbital yöntemlerinin her ikisi de, molekülleri gaz fazında, çözeltide, temel hal veya uyarılmış hallerde inceleme yapabilmektedir (Demirtaş, 2003; Richards and Cooper, 1983).

Çizelge 4.3.'de yarı deneysel hesaplamalarda kullanılan yöntemler verilmiştir.

Çizelge 4.3. Yarı deneysel hesaplamalarda kullanılan yöntemler (Ref: Yarlıgan, 2001).

Kısaltma	Tanım
CNDO	Complete Neglect of Differential Overlap
INDO	Intermediate Neglect of Dirfferential Overlap. Özellikle singlet ve triplet yarılımlarında iyi sonuçlar verir.
MINDO/3	Modified INDO. Oluşum ısılarında doğruya yakın sonuçlar verir.

Çizelge 4.3. (Devam) Yarı deneysel hesaplamalarda kullanılan yöntemler (Ref: Yarlıgan, 2001).

NDDO	Neglect of Diatomic Differential Overlap. Farklı atomlar üzerindeki orbitaller arasındaki örtüşmeyi ihmal eder.
MNDO	Modified Neglect of Diatomic Overlap. NDDO yaklaşımına benzer. Özellikle oluşum ısıları ve diğer moleküler özellikler hakkında iyi sonuçlar verir.
AM1	Austin Model 1. MNDO yönteminin çekirdek-çekirdek itme fonksiyonlarında yapılan küçük değişikliklerle oluşturulmuştur.
PM3	PM3 MNDO yönteminin üçüncü parametrizasyonudur. En son geliştirilen yarı deneysel moleküler orbital yöntemlerindedir.
PM5	Parametreler Metot 5
PM6	Gruplardaki ana elementler ve geçiş metalleri için yeni geliştirilen bir yöntemdir.

4.2.2.3. DFT (Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi)

Elektron yoğunluk fonksiyonu ile elektron korelasyon modelinin ilkelerine dayanır. Kuantum mekaniğinin kanunlarını kullanır. Deneysel parametreler kullanmaz. Molekül dalga fonksiyonları yerine, elektron ihtimaliyet yoğunluğu (ρ) hesaplanır.

4.3. MOPAC7 Paket Programının Özellikleri

MOPAC, AMPAC VE MNDO88 gibi paket programlar, moleküler orbital yöntemlerini yapısında bulundurmaktadır.

Bunlardan MOPAC, James J.P.Stewart tarafından geliştirilen son paket programlarından biridir. Ek olarak geliştirilen diğer paket programlar ise MOPAC6 ve MOPAC7'dir. Bu programların hepsi benzer özelliklere sahiptir.

Ancak MOPAC7 diğer paket programların önemli özelliklerini de bünyesinde bulundurmaktadır.

MOPAC7, kimyasal yapıları ve tepkimeleri çalışmak için geliştirilmiş ve MNDO, MINDO/3, AM1 ve PM3 gibi yarı deneysel moleküler orbital yöntemlerinden oluşmuş bir paket programdır. Böyle bir programla, molekülle, radikaller, iyonlar ve polimerler için termodinamik özellikler, titreşim frekansı, kuvvet sabitleri, bağ dereceleri vb. değerler hesaplanabilir. Tepkimeler için geçiş hali yapılan ve bu yapılara ait özellikler bulunabilir. Ayrıca MOPAC6'da hesaplanamayan sıvı faz hesaplamaları MOPAC7 ile hesaplanabilir (Yarlıgan, 2001).

4.4. MOPAC 2002 Paket Programının Özellikleri

MOPAC2002 paket programı; diğer paket programlardan daha gelişmiş olup diğer programlarda hesaplanması mümkün olmayan hesaplamaları mümkün kılar. MOPAC2002 (moleküler orbital paketi) moleküllerin elektronik özelliklerini ölçme seçeneklerini içeren James J.P Stewart tarafından oluşturulmuş bir pakettir. CAChe Windows donanımı ile MOPAC2002 kullanmayı sağlar. Böyle bir programla, bağ komutları, dipol hareketleri, dinamik haritalar, iyonizasyon potansiyelleri, moleküler orbital enerjileri, optimum geometri, potansiyel enerji haritaları, geçiş halleri, titreşim frekansı vb. değerler hesaplanabilir. CAChe MOPAC hem optimum geometriyi hem de elektronik özellikleri tanımlar. MOPAC2002 AM1, PM3, PM5 gibi yarı deneysel moleküler orbital yöntemlerinden oluşmuş bir paket programdır.

CAChe ayrıca MNDO ve MINDO/3 gibi daha eski parametrelerle MNDO-d gibi daha yeni parametreleri de destekler. Sonuç olarak CAChe AM1'dan AM/d'ye kadar uzanır. Moleküler orbitaller, oluşum ısı ve moleküler geometri türetici içerikler, titreşim spektrayı, moleküler geometriyi, kuvvet constantlarını, moleküllerin diğer özelliklerini, radikalleri ve iyonları ölçmede kullanılır.

Bu miktarlar reaksiyonel yörüngeleri ölçmede ve kimyasal tepkimeleri hal değişimlerini kullanarak ölçmede kullanılırlar.

MOPAC, Extended Hückel Teorisi ve ZINDO v.s. quantum kimyasal metodlarında olduğu gibi molekülü izole edilmiş atom ve elektronlarına parçalamak için gereken enerjiden çok, oluşum ısını ölçer. Bununla beraber MOPAC2002 detaylarının anlaşılmasına gerek bırakmadan quantum teorisinden, termodinamikten ve yüksek matematikten birçok veri kullanır. Şimdi bu tip bir paket programla nelerin yapılabileceğini açıklayalım (Cache help manuel).

4.4.1. Geometri optimizasyonu

Yarı deneysel moleküler orbital hesaplamaların en çok kullanılan fonksiyonu moleküler geometrileri optimize etmek ve bu optimize geometrilere karşı gelen ΔH_f (oluşum ısı) gibi nicelikleri hesaplamaktır.

Optimizasyondaki hesaplamalar molekülü tanımlayan kartezyen ya da internal koordinatlarla (bağ uzunlukları, bağ açıları ve dihedral açıları) verilmiş yaklaşık bir geometri optimize edilir ve enerji minimuma indirilir.

Geometri, enerji değeri değişmeyinceye kadar değiştirilir. Bunun ölçüsü de gradient norm değerinin sıfır olmasıdır. Gradient norm, atomik konumların fonksiyonu olarak moleküler sistemin enerjisinin değişim hızıdır.

Sıfır gradient değeri geometrinin minimum enerjide olduğunu gösterir. Gerçek gradient normu sıfıra düşürmek oldukça zordur. MOPAC7 ve MOPAC 2002 programı için önerilen gradient norm değeri 0,4 ve alt değerleridir. Program çalıştıktan sonra oluşum ısı, iyonlaşma enerjisi, yük dağılımı ve dipol momenti değerlerini vererek durur. Kullanıcının isteğine göre belirli opsiyonlar yazılarak istenilen özellikler hesaplanabilir (Bingham, et al., 1975).

4.4.2. Tepkime yolları

Geometri optimizasyonunun ve bu geometriye karşı gelen özelliklerin doğal sonucu tepkime şeklinin bulunmasıdır. Yaklaşık tepkime koordinatı olarak alınan belirli bir geometrik koordinat, belirli oranlarda değiştirilir ve sistemin enerjisindeki değişiklikler gözlenir.

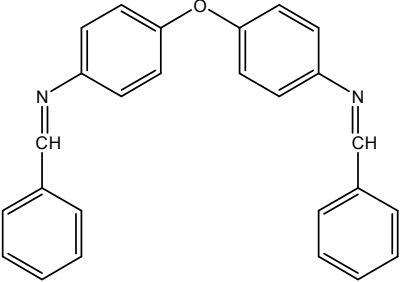
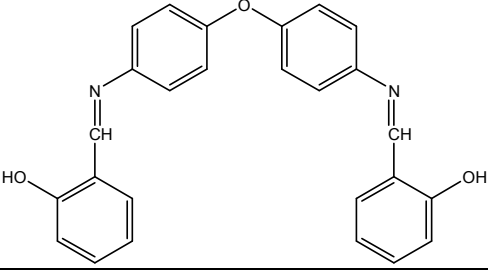
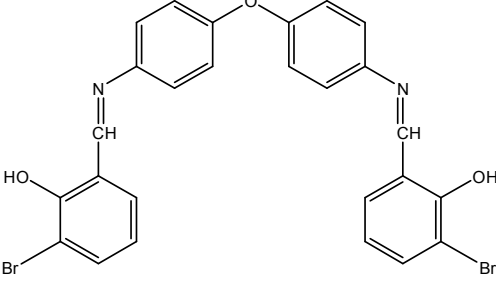
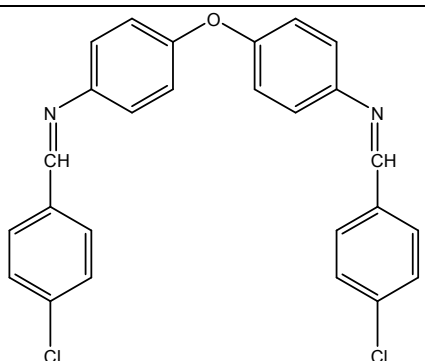
Her bir değere karşı gelen enerji değerlerinin tepkime koordinatına karşı grafiđi çizildiđinde yaklaşık bir tepkime profili elde edilir. Buradan aktivasyon enerjisi bulunabilir (Tasçı, 2004).

5. DENEYSEL ÇALIŞMALAR

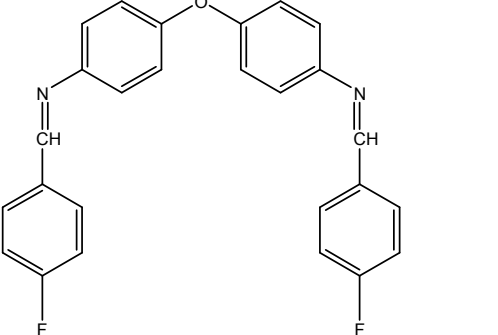
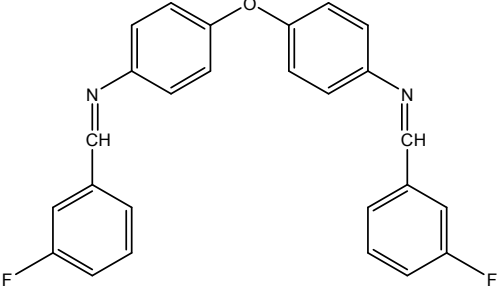
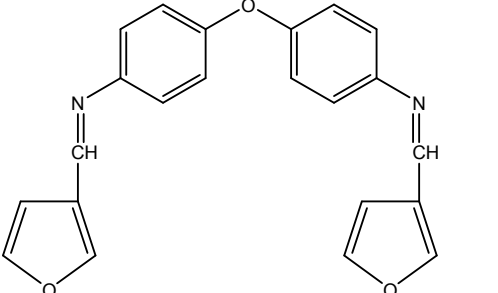
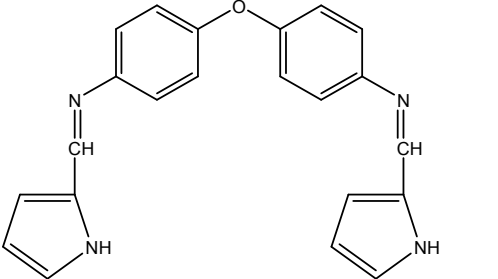
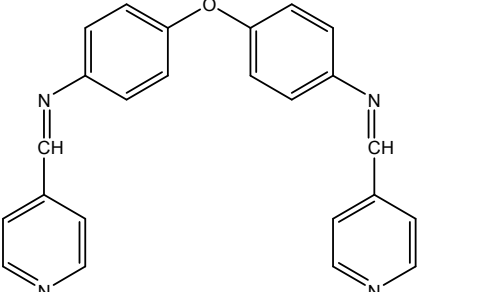
5.1. Sentezlenen Bileşikler

Sentezlenen tüm bileşiklerin yapıları ve isimleri Çizelge 5.1’de verilmiştir.

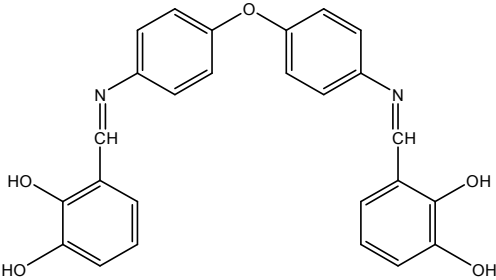
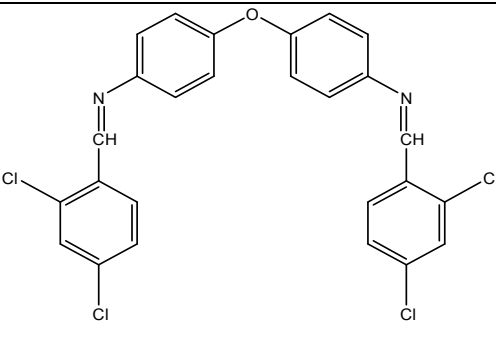
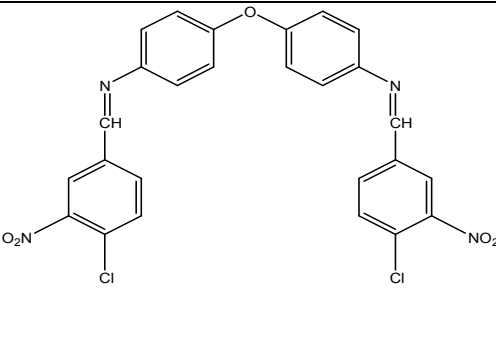
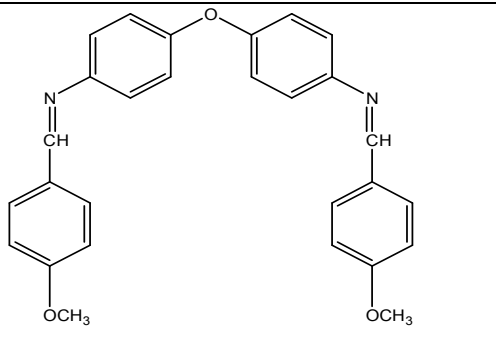
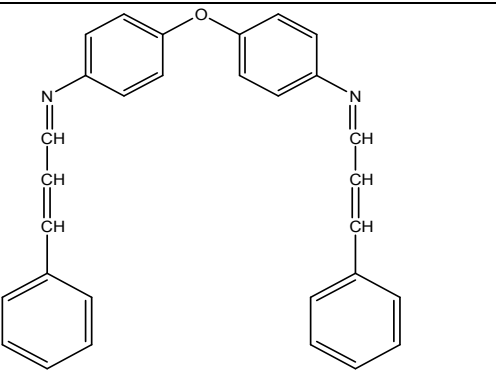
Çizelge 5.1. Sentezlenen bileşiklerin formülleri ve adlandırılması

Bileşik	Sentezlenen Bileşiklerin Formülleri	Sentezlenen Bileşiklerin Adları
SB1-1		N-benzilide-4-(4-(benzilideamino)-fenoksi)benzenamin
SB1-2		2-((4-(2-hidroksibenzilideamino)-fenoksi)fenilimino)metil)-fenol
SB1-3		2-[[4-(4-(3-brom-2-hidroksibenzilideamino)-fenoksi)fenilimino)metil]-fenol
SB1-4		N-(4-klorbenzilide)-4-(4-(4-klorbenzilideamino)-fenoksi)benzenamin

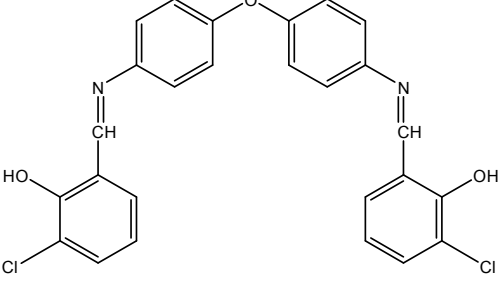
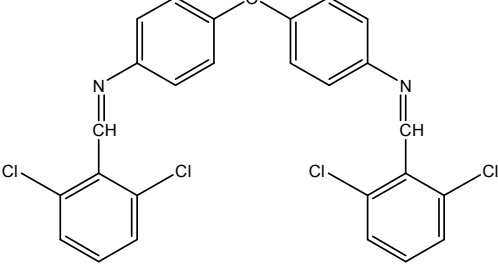
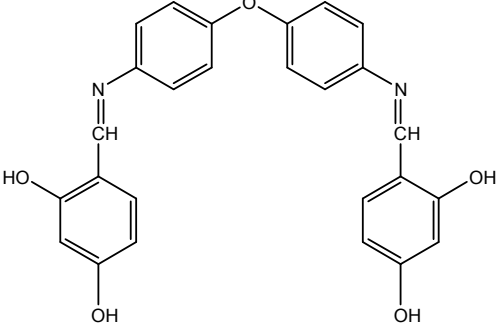
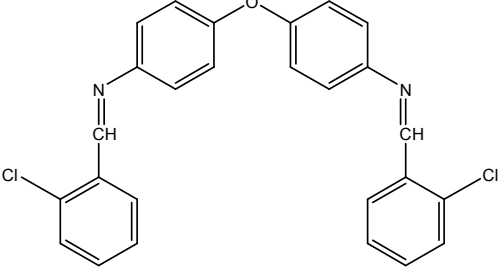
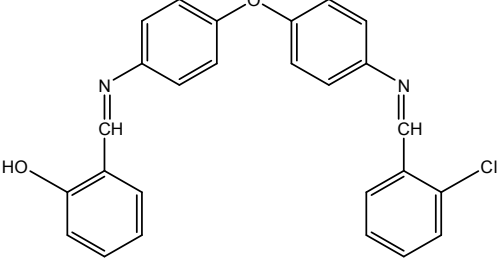
Çizelge 5.1. (Devam) Sentezlenen bileşiklerin formülleri ve adlandırılması

SB1-5		N-(4-florbenzilide)-4-(4-(4-Florbenzilideamino)-fenoksi)benzenamin
SB1-6		N-(3-florbenzilide)-4-(4-(3-florbenzilideamino)-fenoksi)benzenamin
SB1-7		N-(furan-3-ylmetilen)-4-(4-(furan-3-ylmetilenamino)fenoksi)-benzenamin
SB1-8		N-((1H-pirol-2-yl)metilen)-4-(4-((1H-pirol-3-yl)metilenamino)fenoksi)-benzenamin
SB1-9		N-(piridin-4-ylmetilen)-4-(4-(piridin-4-ylmetilenamino)fenoksi)-benzenamin

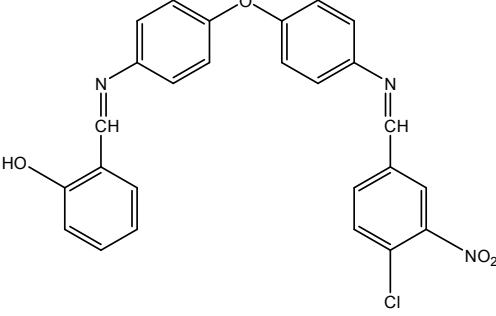
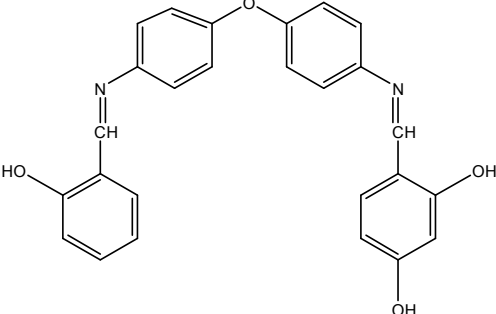
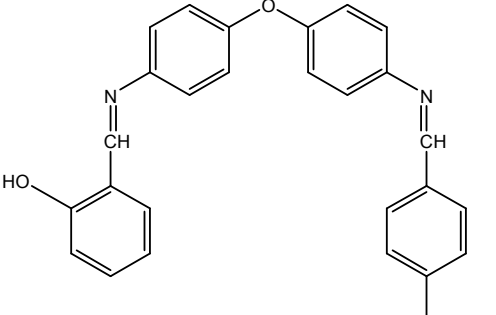
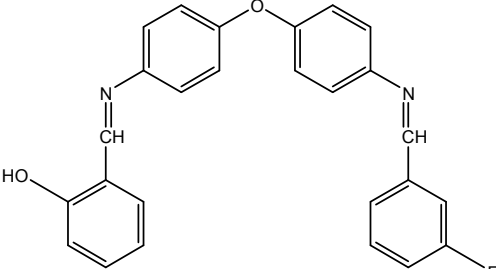
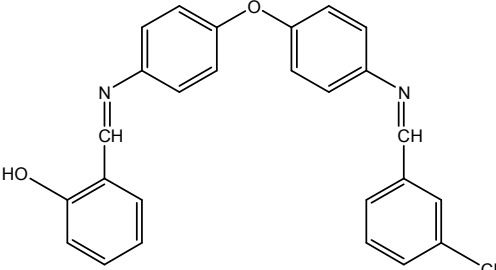
Çizelge 5.1. (Devam) Sentezlenen bileşiklerin formülleri ve adlandırılması

SB1-10		3-(((4-(4-(2,3-dihidroksibenzilideamino)fenoksi)fenilimino)metil)]-benzen-1,2-diol
SB1-11		N-(2,4-diklorbenzilide)-4-(4-(2,4-diklorbenzilideamino)-fenoksi)benzenamin
SB1-12		N-(4-klor-3-nitrobenzilide)-4-(4-(4-klor-3-nitrobenzilideamino)-fenoksi)benzenamin
SB1-13		N-(4-metoksibenzilide)-4-(4-(4-metoksibenzilideamino)-fenoksi)benzenamin
SB1-14		N-(3-fenilallilide)-4-(4-(3-fenilallilideamino)-fenoksi)benzenamin

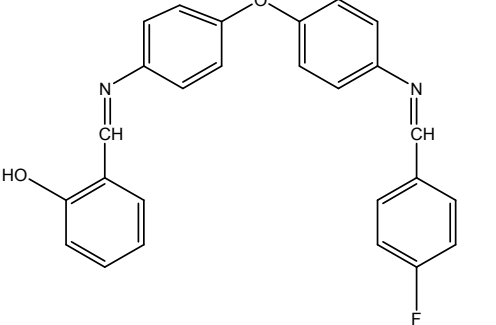
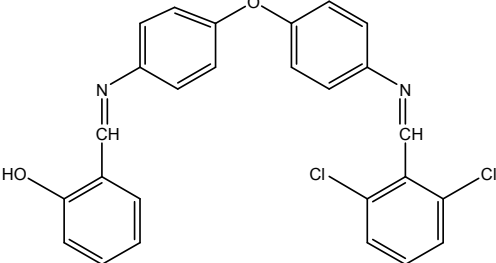
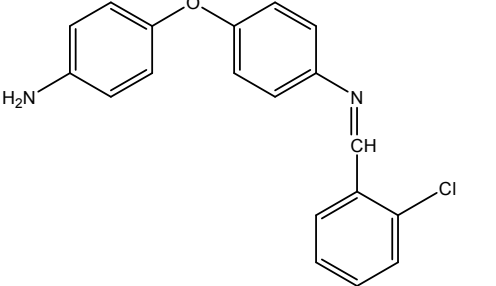
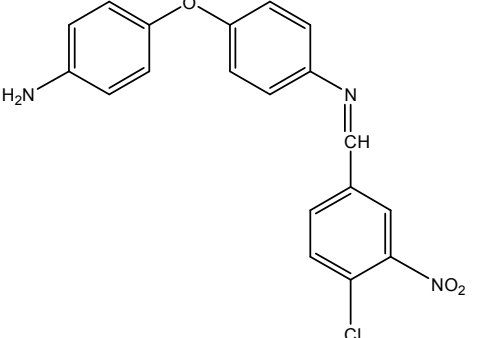
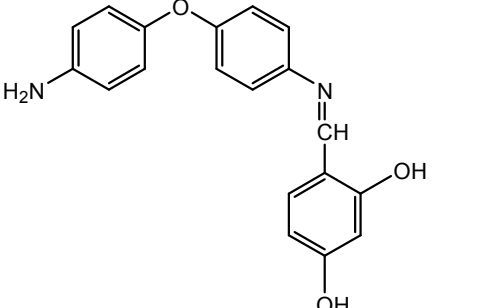
Çizelge 5.1. (Devam) Sentezlenen bileşiklerin formülleri ve adlandırılması

SB1-15		2-[[4-(4-(3-klor-2-hidroksibenzilideamino)-fenoksi)fenilimino)metil]-6-klorfenol
SB1-16		N-(2,6-diklorbenzilide)-4-(4-(2,6-diklorbenzilideamino)-fenoksi)benzenamin
SB1-17		4-[[4-(4-(2,4-dihidroksibenzilideamino)-fenoksi)fenilimino)metil]-benzen-1,3-diol
SB1-18		N-(2-klorbenziliden)-4-(4-(2-klorbenzilideamino)-fenoksi)benzenamin
SB2-1		2-[[4-(4-(2-klorbenzilideamino)-fenoksi)fenilimino)metil]-fenol

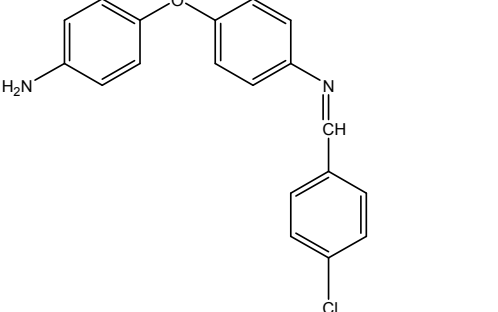
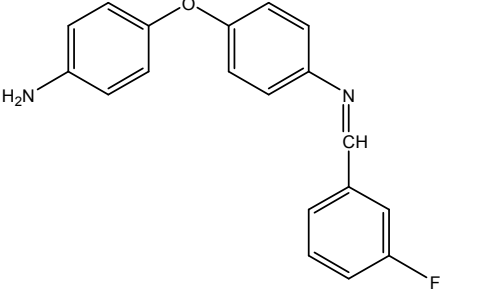
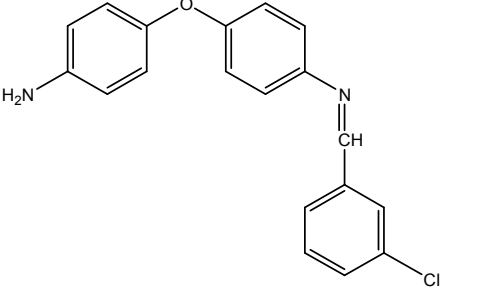
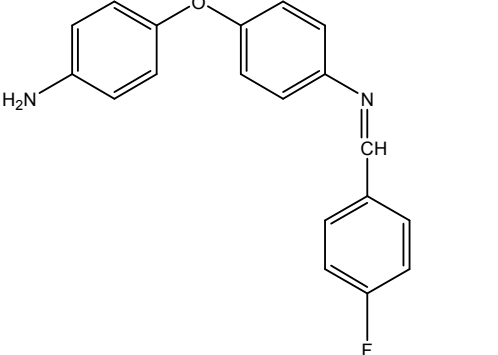
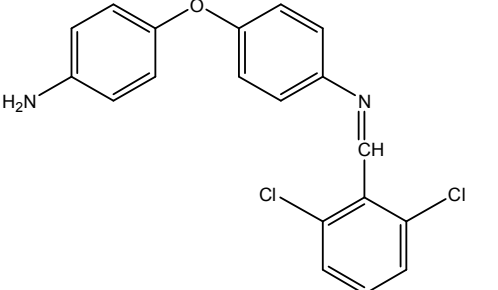
Çizelge 5.1. (Devam) Sentezlenen bileşiklerin formülleri ve adlandırılması

SB2-2		2-[[[(4-(4-(4-klor-3-nitrobenzildeamino)-fenoksi)fenilimino)metil)]-fenol
SB2-3		4-[[[(4-(4-(2-hidroksibenzildeamino)-fenoksi)fenilimino)metil)]-benzen-1,3-diol
SB2-4		2-[[[(4-(4-(4-klorbenzildeamino)-fenoksi)fenilimino)metil)]-fenol
SB2-5		2-[[[(4-(4-(3-florbenzildeamino)-fenoksi)fenilimino)metil)]-fenol
SB2-6		2-[[[(4-(4-(3-klorbenzildeamino)-fenoksi)fenilimino)metil)]-fenol

Çizelge 5.1. (Devam) Sentezlenen bileşiklerin formülleri ve adlandırılması

SB2-7		2-(((4-(4-(4-florbenzildeamino)-fenoksi)fenilimino)metil)]-fenol
SB2-8		2-(((4-(4-(2,6-diklorbenzildeamino)-fenoksi)fenilimino)metil)]-fenol
TSB-1		4-(4-(2-klorbenzildeamino)-fenoksi)benzenamin
TSB-2		4-(4-(4-klor-3-nitrobenzildeamino)-fenoksi)benzenamin
TSB-3		4-((4-(4-aminfenoksi)fenilimino)-metil)benzen-1,3-diol

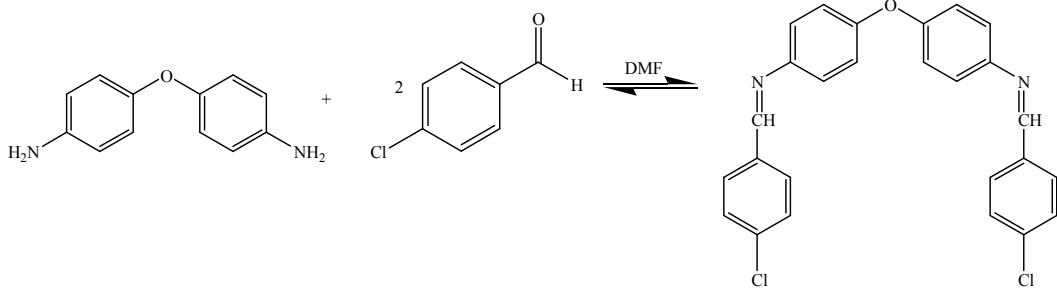
Çizelge 5.1. (Devam) Sentezlenen bileşiklerin formülleri ve adlandırılması

TSB-4		4-(4-(4-klorbenzilideamino)-fenoksi)benzenamin
TSB-5		4-(4-(3-florbenzilideamino)-fenoksi)benzenamin
TSB-6		4-(4-(3-klorbenzilideamino)-fenoksi)benzenamin
TSB-7		4-(4-(4-florbenzilideamino)-fenoksi)benzenamin
TSB-8		4-(4-(2,6-diklorbenzilideamino)-fenoksi)benzenamin

5.2. Yöntem

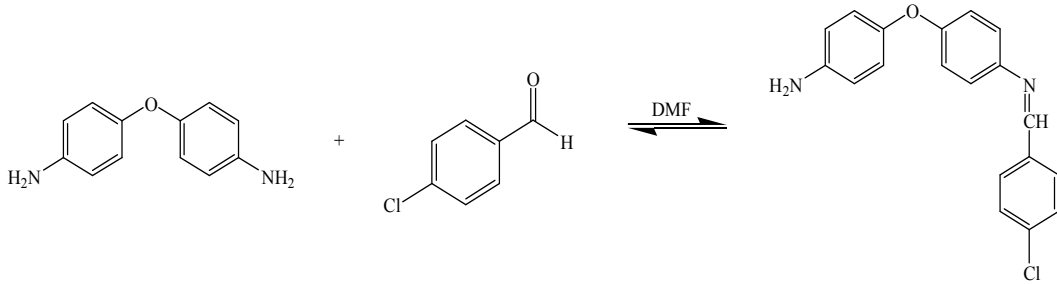
Schiff bazları Sawich ve çalışma arkadaşlarının (1956) yöntemine göre sentezlenmiştir. 4,4'-oxydianiline ile çeşitli aldehitler kullanılarak schiff bazları elde edilmiştir.

İki ucu aynı schiff bazları (SB1) sentezi için örnek bir reaksiyon Şekil 5.1.'de verilmiştir.



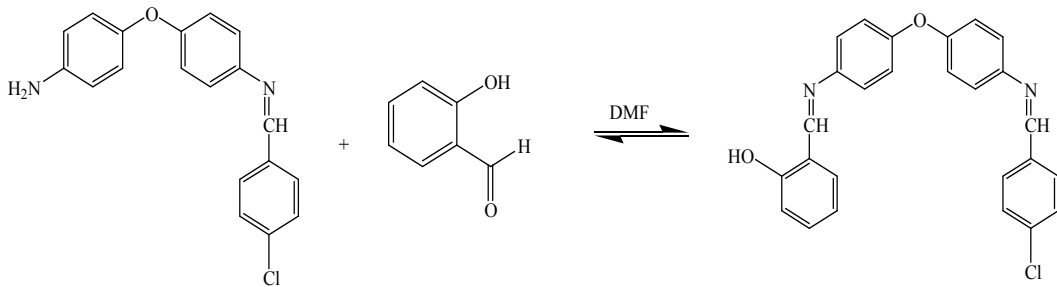
Şekil 5.1. İki ucu aynı schiff bazları (SB1) sentezi için örnek bir reaksiyon

Tek uçlu schiff bazları (TSB) sentezi için örnek bir reaksiyon Şekil 5.2'de verilmiştir.



Şekil 5.2. Tek uçlu schiff bazları (TSB) sentezi için örnek bir reaksiyon

İki ucu farklı schiff bazları (SB2) sentezi için örnek bir reaksiyon Şekil 5.3'de verilmiştir.



Şekil 5.3. İki ucu farklı schiff bazları (SB2) sentezi için örnek bir reaksiyon

İki ucu aynı schiff bazları (SB1) sentezinde; 0,0049 mol (1g amin) 4,4'-oxydianiline bir miktar DMF'de hafifçe ısıtılarak tamamen çözünmesi sağlandı. Bu çözelti üzerine aldehit çeşitlerinden SB1-1N için benzaldehitten (BA-1) 0,0098 mol (1 ml), SB1-2N için salisilaldehitten (BA-2) 0,0098 mol (1,06 ml), SB1-3N 0.00144 mol amin ile 3-Br-salisilaldehit'ten (BA-3) 0,0028 mol, SB1-4N için 0,0149 mol amin ile 4-klor-benzaldehit'ten (BA-4) 0,0299 mol, SB1-5N için 0,0149 mol amin ile 4-Flor-benzaldehit'ten (BA-5) 0,0299 mol, SB1-6N için 0,0149 mol amin ile 3-Flor-benzaldehit'ten (BA-6) 0,0299 mol, SB1-7N için 0,0149 mol amin ile Furan-3-karboksialdehit'ten (BA-7) 0,0299 mol , SB1-8N için 0,0041 mol amin ile Pirel-2-karboksialdehit'ten (BA-8) 0,0082 mol alınmıştır.

SB1-9N için 0,00499 mol amin ile Pridin-4-karboksialdehit'ten (BA-9) 0,0099 mol (0,95 ml), SB1-10N için 0,0149 mol amin ile 2,3-Dihidroksibenzaldehit'ten (BA-10) 0,0299 mol, SB1-11N için 0,0149 mol amin ile 2,4-Diklorbenzaldehit'ten (BA-11) 0,0299 mol alınmıştır. SB1-12N için 0,0149 mol amin ile 4-Klor-3-Nitrobenzaldehit'ten (BA-12) 0,0299 mol, SB1-13N için 0,0149 mol amin ile Anisaldehit'ten (BA-13) 0,0299 mol, SB1-14N için 0,0149 mol amin ile Cinnamaldehit'ten (BA-14) 0,0299 mol, SB1-15N için 0,0149 mol amin ile 3-Klor-salisilaldehit'ten (BA-15) 0,0299 mol, SB1-16N için 0,0149 mol amin ile 2,6-Diklorbenzaldehit'ten (BA-16) 0,0299 mol, SB1-17N için 0,0149 mol amin ile 2,4-Dihidroksibenzaldehit'ten (BA-17) 0,0299 mol , SB1-18N için 0,0149 mol amin ile 2-Klorbenzaldehit'ten (BA-18) 0,0299 mol (3,36ml) alınarak bir miktar DMF içindeki çözeltisi yavaş yavaş karıştırılarak eklendi çökelek oluşuncaya kadar karıştırıcıda karıştırıldı. Oluşan maddeler etanolde çözülüp süzülerek tekrar kristallendirildi.

Tek uçlu schiff bazlarının (TSB) sentezinde; 0,0149 mol (3g amin) 4,4'-oxydianiline bir miktar DMF'de hafifçe ısıtılarak tamamen çözünmesi sağlandı. Bu çözelti üzerine aldehit çeşitlerinden TSB-1N için 0,0149 mol amin ile 2-klorbenzaldehit'ten 0,0149 mol (1,68 ml), TSB-2N için 0,0149 mol amin ile 4-Cl-3-Nitrobenzaldehit'ten 0,0149 mol, TSB-3N için 0,0149 mol amin ile 2,4-Dihidroksibenzaldehit'ten 0,0149 mol, TSB-4N için 0,0149 mol amin ile 4-Klorbenzaehit'ten 0,0149 mol, TSB-5N için 0,0149 mol amin ile 3-Florbenzaldehit'ten 0,0149 mol (1,567 ml) alınmıştır.

TSB-6N için 0,0149 mol amin ile 3-Klorbenzaldehit'ten 0,0149 mol (1,69 ml), TSB-7N için 0,0149 mol amin ile 4-Florbenzaldehit'ten 0,0149 mol (1,57 ml)., TSB-8N için 0,0149 mol amin ile 2,6-Diklorbenzaldehit'ten 0,0149 mol alınarak bir miktar DMF içindeki çözeltisi yavaş yavaş karıştırılarak eklendi çökelek oluşuncaya kadar karıştırıcıda karıştırıldı. Oluşan maddeler etanolde çözülüp süzülerek tekrar kristallendirildi.

İki ucu farklı schiff bazları (SB2) sentezinde; tek uçlu schiff bazlarından genel olarak 0,0025 mol (miktarları aşağıda belirtilmiştir) alınarak 0,0025 mol olan salisilaldehit ile reaksiyona sokulmuştur. SB2-1N için TSB-1N'den 0,0025 mol alınıp bir miktar DMF'de hafifçe ısıtılarak tamamen çözünmesi sağlandı. Bu çözelti üzerine 0,0025 mol (0,27 ml) salisilaldehit alınarak bir miktar DMF içindeki çözeltisi yavaş yavaş karıştırılarak eklendi çökelek oluşuncaya kadar karıştırıcıda karıştırıldı. Oluşan maddeler etanolde çözülüp süzülerek tekrar kristallendirildi.

Aynı işlem diğer SB2 türevleri için de devam etti. SB2-2N için TSB-2N'den 0,0025 mol, salisilaldehitten 0,0025 mol (0,27 ml)., SB2-3N için TSB-3N'den 0,00125 mol, salisilaldehitten 0,00125 mol (0,065 ml), SB2-4N için TSB-4N'den 0,00125 mol, salisilaldehitten 0,00125 mol (0,13 ml), SB2-5N için TSB-5N'den 0,0025 mol, salisilaldehitten 0,0025 mol (0,27 ml), SB2-6N için TSB-6N'den 0,000625 mol, salisilaldehitten 0,000625 mol (0,135 ml), SB2-7N için TSB-7N'den 0,00125 mol, salisilaldehitten 0,00125 mol (0,13 ml), SB2-8N için TSB-8N'den 0,00125 mol, salisilaldehitten 0,00125 mol (0,13 ml)., alınıp tek uçlu schiff bazlarının bir miktar DMF'de hafifçe ısıtılarak tamamen çözünmesi sağlandı. Bu çözelti üzerine belirtilen miktarlarda salisilaldehit alınarak bir miktar DMF içindeki çözeltisi yavaş yavaş karıştırılarak eklendi çökelek oluşuncaya kadar karıştırıcıda karıştırıldı. Oluşan maddeler etanolde çözülüp süzülerek tekrar kristallendirildi.

Sentez sonucunda iki ucu aynı schiff bazlarından; SB1-1N molekülünden 1,560g parlak sedef renkli, SB1-2N molekülünden 1,8920g parlak sarı renkli, SB1-3N molekülünden 0,7434g mat açık sarı renkli, SB1-4N molekülünden 7,5449g parlak açık kahve renkli, SB1-5N molekülünden 6,0608g parlak beyaz renkli ürün elde edilmiştir.

SB1-6N molekülünden 6,0824g parlak açık kahve renkli, SB1-7N molekülünden 10,2625g mat kahve renkli, SB1-8N molekülünden 0,4649g mat açık kahve renkli, SB1-9N molekülünden 1,1673g mat açık sarı renkli, SB1-10N molekülünden 6,3373g mat turuncu renkli, SB1-11N molekülünden 7,3790g parlak açık sarı renkli, SB1-12 N molekülünden 7,7021g açık turuncu renkli, SB1-13N molekülünden 6,1512g parlak beyaz renkli, SB1-14 N molekülünden 6,1340g açık sarı renkli, Sb1-15 N molekülünden 6,7348g parlak açık sarı renkli, SB1-16N molekülünden 7,2162g parlak beyaz renkli, SB1-17N molekülünden 6,8243g parlak sarı renkli, SB1-18N molekülünden 5,3974g parlak sedef renkli ürünler elde edilmiştir.

Sentez sonucunda tek uçlu schiff bazlarından; TSB-1N molekülünden 1,8461g mat açık sarı renkli, TSB-2N molekülünden 1,5687g açık sarı, TSB-3N molekülünden 1,3582g açık turuncu renkli, TSB-4N molekülünden 2,8213g parlak açık sarı ve 0,0980g parlak beyaz renkli, TSB-5N molekülünden 1,7245g parlak beyaz renkli ürün elde edilmiştir.

TSB-6N molekülünden 2,5832g parlak açık sarı renkli, TSB-7N molekülünden 2,2019g parlak beyaz renkli ve 0,2583g beyaz renkli, TSB-8N molekülünden 1,4662g mat açık sarı renkli ürünler elde edilmiştir.

Elde edilen schiff bazlarının hepsinin erime noktalarına ve çoğunun ince tabakalarına bakılmıştır. Büyük bir çoğunluğunun saf olduğu anlaşılmaktadır. Bu bileşiklerin yapıları aydınlatılmak istenmiş fakat görev yerimin değişikliği sebebiyle çalışmaya bu maddelerin teorik hesabıyla devam edilmiştir.

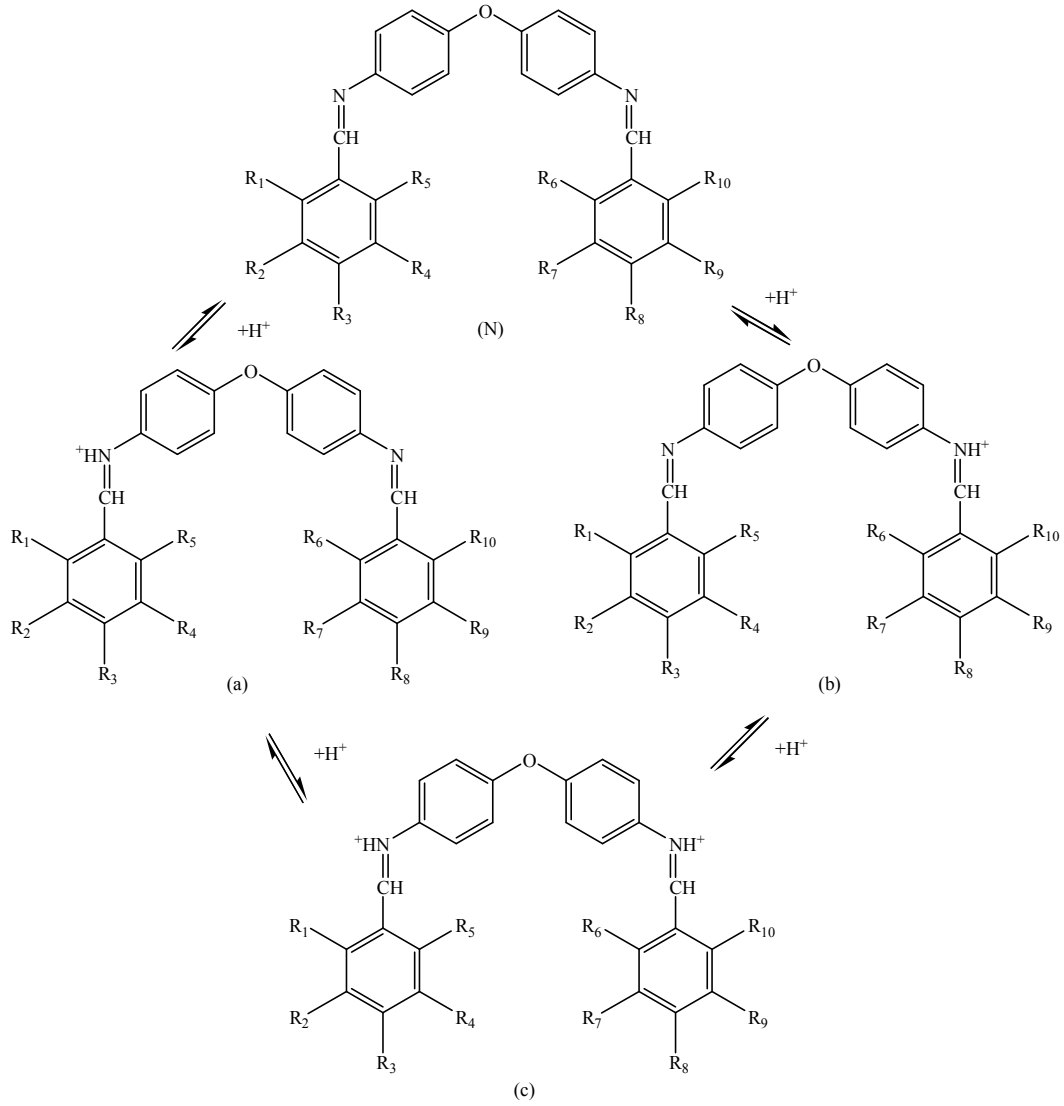
6. HESAPLAMALAR VE BULGULAR

6.1. 4,4'-Oxydianilin ve Türevlerinin Semiempirik Yöntemlerle Hesaplanması

4,4'-Oxydianilin türevlerinin ana ve model formlarının teorik yöntemlerle fizikokimyasal özelliklerinin hesaplanması Intel(R) Core(TM)2 Duo 1.83 GHZ 256 MB RAM bilgisayarda CS ChemOffice paket programı kullanılarak yapılmıştır. (Cs Chem Office Pro programı Cs Chem Draw, Cs Chem 3D Pro ve MOPAC Pro paket programlarını içermektedir) (Ref: ChemOffice, 1997).

4,4'-Oxydianilin türevlerinin fizikokimyasal özelliklerinin hesaplanması için ilk önce her bir molekülün ana ve model yapıları CS ChemDraw programında çizilmiş ve CS Chem3D programında MM2 yöntemiyle minimize edilmiştir. Minimize edilmiş moleküllerin, molekül enerjilerinin en küçük olduğu durum yani en kararlı geometrik yapıları tespit edilecek şekilde optimize edilerek hesaplamalarında kullanılacak verileri elde edildi. Elde edilen bu veriler Mopac pro programına aktararak hesaplama işlemi tamamlandı. MOPAC 2009 paket programı içerisinde yer alan AM1, PM3 ve yeni bir yöntem olan PM6 ile su ve DMF fazında hesaplamaları yapıldı. Çalışmalar sırasında Mopac'taki AM1, PM3 ve PM6 hesaplama yöntemi ile hesaplamalar sulu fazda ($\epsilon=78,4$) ve $T=298$ K'de; DMF fazda ($\epsilon=36,71$) ve $T=298$ K'de yapıldı. Hesaplama sonuçlarından moleküllerin nötr, protonlanma ve deprotonlanma halleri için entalpi (ΔH), oluşum ısıları (ΔH_f), entropi (ΔS), en yüksek dolu orbital (HOMO), en düşük boş orbital (LUMO) değerleri okunmuştur. Bu değerlerden yararlanılarak moleküllerin nötr, protonlanma ve deprotonlanma halleri için pK_a 'ları, proton affiniteleri (PA), sınır moleküler orbital enerji aralığı (HOMO-LUMO enerji farkı, η), Gibbs Serbert Enerjisi (ΔG ve ΔG_f) değerleri, ürün ve reaksiyon kararlılıkları hesaplanmıştır.

Çalışılan 4,4'-oxydianilin türevlerinden iki ucu aynı moleküller için genel protonlanma şeması Şekil 6.1'de verilmiştir.



Şekil 6.1. Çalışılan 4,4'-oxydianilin türevlerinden iki ucu aynı moleküller (SB1) için genel protonlanma şeması

Yapılan çalışmada kullanılan bazı Schiff bazı türevleri Çizelge 6.1'de verilmiştir.

Çizelge 6.1. Yapılan çalışmada kullanılan bazı Schiff bazı türevleri.

Molekül	R ₁	R ₂	R ₃	R ₄	R ₅	R ₆	R ₇	R ₈	R ₉	R ₁₀
SB1-1a	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
SB1-2a	OH	H	H	H	H	H	H	H	H	OH
SB1-3a	OH	Br	H	H	H	H	H	H	Br	OH
SB1-4a	H	H	Cl	H	H	H	H	Cl	H	H

Çizelge 6.1. (Devam) Yapılan çalışmada kullanılan bazı Schiff bazı türevleri.

SB1-5a	H	H	F	H	H	H	H	F	H	H
SB1-6a	H	F	H	H	H	H	H	H	F	H
SB1-7a	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
SB1-8a	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
SB1-9a	H	H	N	H	H	H	H	N	H	H
SB1-10a	OH	OH	H	H	H	H	H	H	OH	OH
SB1-11a	Cl	H	Cl	H	H	H	H	Cl	H	Cl
SB1-12a	H	NO ₂	Cl	H	H	H	H	Cl	NO ₂	H
SB1-13a	H	H	OCH ₃	H	H	H	H	OCH ₃	H	H
SB1-14a	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
SB1-15a	OH	Cl	H	H	H	H	H	H	Cl	OH
SB1-16a	Cl	H	H	H	Cl	Cl	H	H	H	Cl
SB1-17a	OH	H	OH	H	H	H	H	OH	H	OH
SB1-18a	Cl	H	H	H	H	H	H	H	H	Cl
SB2-1a	OH	H	H	H	H	H	H	H	H	Cl
SB2-2a	OH	H	H	H	H	H	H	Cl	NO ₂	H
SB2-3a	OH	H	H	H	H	H	H	OH	H	OH
SB2-4a	OH	H	H	H	H	H	H	Cl	H	H
SB2-5a	OH	H	H	H	H	H	H	H	F	H
SB2-6a	OH	H	H	H	H	H	H	H	Cl	H
SB2-7a	OH	H	H	H	H	H	H	F	H	H
SB2-8a	OH	H	H	H	H	Cl	H	H	H	Cl
SB1-1b	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
SB1-2b	OH	H	H	H	H	H	H	H	H	OH
SB1-3b	OH	Br	H	H	H	H	H	H	Br	OH
SB1-4b	H	H	Cl	H	H	H	H	Cl	H	H
SB1-5b	H	H	F	H	H	H	H	F	H	H
SB1-6b	H	F	H	H	H	H	H	H	F	H
SB1-7b	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
SB1-8b	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
SB1-9b	H	H	N	H	H	H	H	N	H	H
SB1-10b	OH	OH	H	H	H	H	H	H	OH	OH
SB1-11b	Cl	H	Cl	H	H	H	H	Cl	H	Cl
SB1-12b	H	NO ₂	Cl	H	H	H	H	Cl	NO ₂	H
SB1-13b	H	H	OCH ₃	H	H	H	H	OCH ₃	H	H

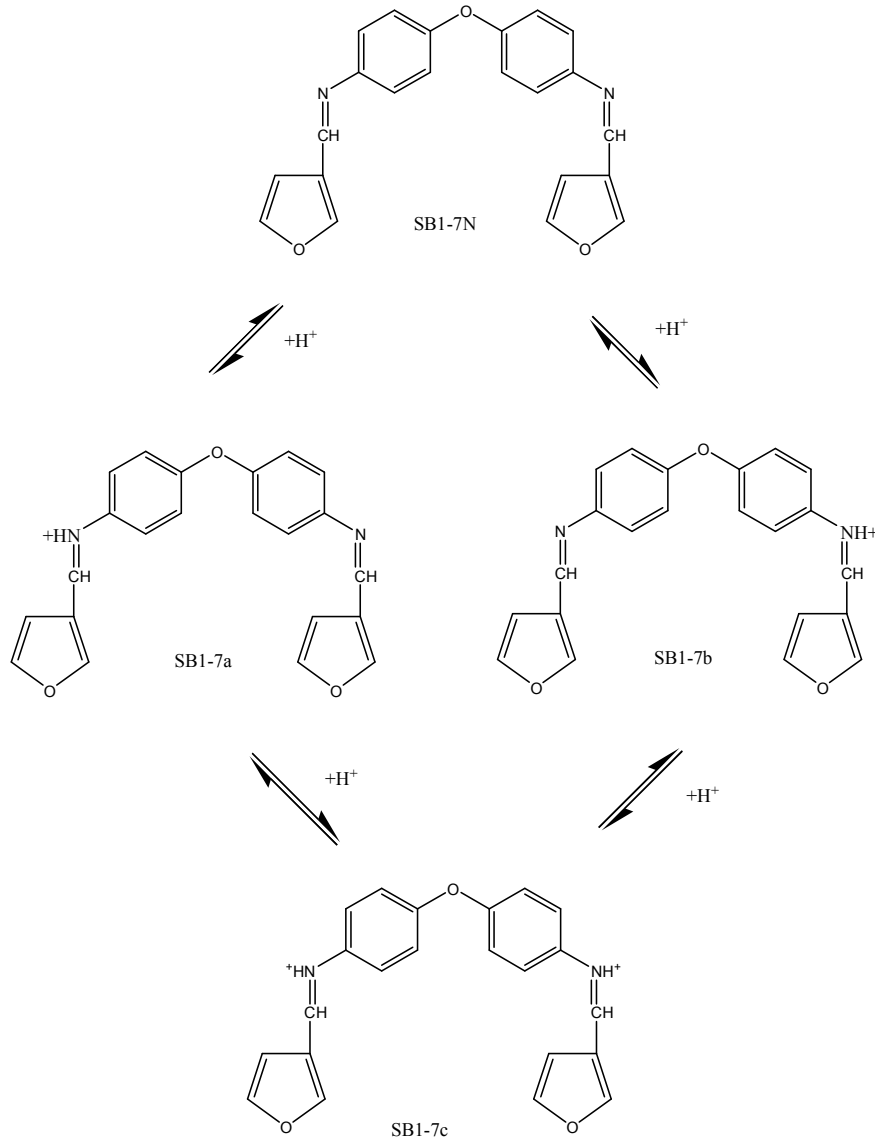
Çizelge 6.1. (Devam) Yapılan çalışmada kullanılan bazı Schiff bazı türevleri.

SB1-14b	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
SB1-15b	OH	Cl	H	H	H	H	H	H	Cl	OH
SB1-16b	Cl	H	H	H	Cl	Cl	H	H	H	Cl
SB1-17b	OH	H	OH	H	H	H	H	OH	H	OH
SB1-18b	Cl	H	H	H	H	H	H	H	H	Cl
SB2-1b	OH	H	H	H	H	H	H	H	H	Cl
SB2-2b	OH	H	H	H	H	H	H	Cl	NO ₂	H
SB2-3b	OH	H	H	H	H	H	H	OH	H	OH
SB2-4b	OH	H	H	H	H	H	H	Cl	H	H
SB2-5b	OH	H	H	H	H	H	H	H	F	H
SB2-6b	OH	H	H	H	H	H	H	H	Cl	H
SB2-7b	OH	H	H	H	H	H	H	F	H	H
SB2-8b	OH	H	H	H	H	Cl	H	H	H	Cl
SB1-1c	H	H	H	H	H	H	H	H	H	H
SB1-2c	OH	H	H	H	H	H	H	H	H	OH
SB1-3c	OH	Br	H	H	H	H	H	H	Br	OH
SB1-4c	H	H	Cl	H	H	H	H	Cl	H	H
SB1-5c	H	H	F	H	H	H	H	F	H	H
SB1-6c	H	F	H	H	H	H	H	H	F	H
SB1-7c	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
SB1-8c	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
SB1-9c	H	H	N	H	H	H	H	N	H	H
SB1-10c	OH	OH	H	H	H	H	H	H	OH	OH
SB1-11c	Cl	H	Cl	H	H	H	H	Cl	H	Cl
SB1-12c	H	NO ₂	Cl	H	H	H	H	Cl	NO ₂	H
SB1-13c	H	H	OCH ₃	H	H	H	H	OCH ₃	H	H
SB1-14c	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—
SB1-15c	OH	Cl	H	H	H	H	H	H	Cl	OH
SB1-16c	Cl	H	H	H	Cl	Cl	H	H	H	Cl
SB1-17c	OH	H	OH	H	H	H	H	OH	H	OH
SB1-18c	Cl	H	H	H	H	H	H	H	H	Cl
SB2-1c	OH	H	H	H	H	H	H	H	H	Cl
SB2-2c	OH	H	H	H	H	H	H	Cl	NO ₂	H
SB2-3c	OH	H	H	H	H	H	H	OH	H	OH
SB2-4c	OH	H	H	H	H	H	H	Cl	H	H

Çizelge 6.1. (Devam) Yapılan çalışmada kullanılan bazı Schiff bazı türevleri.

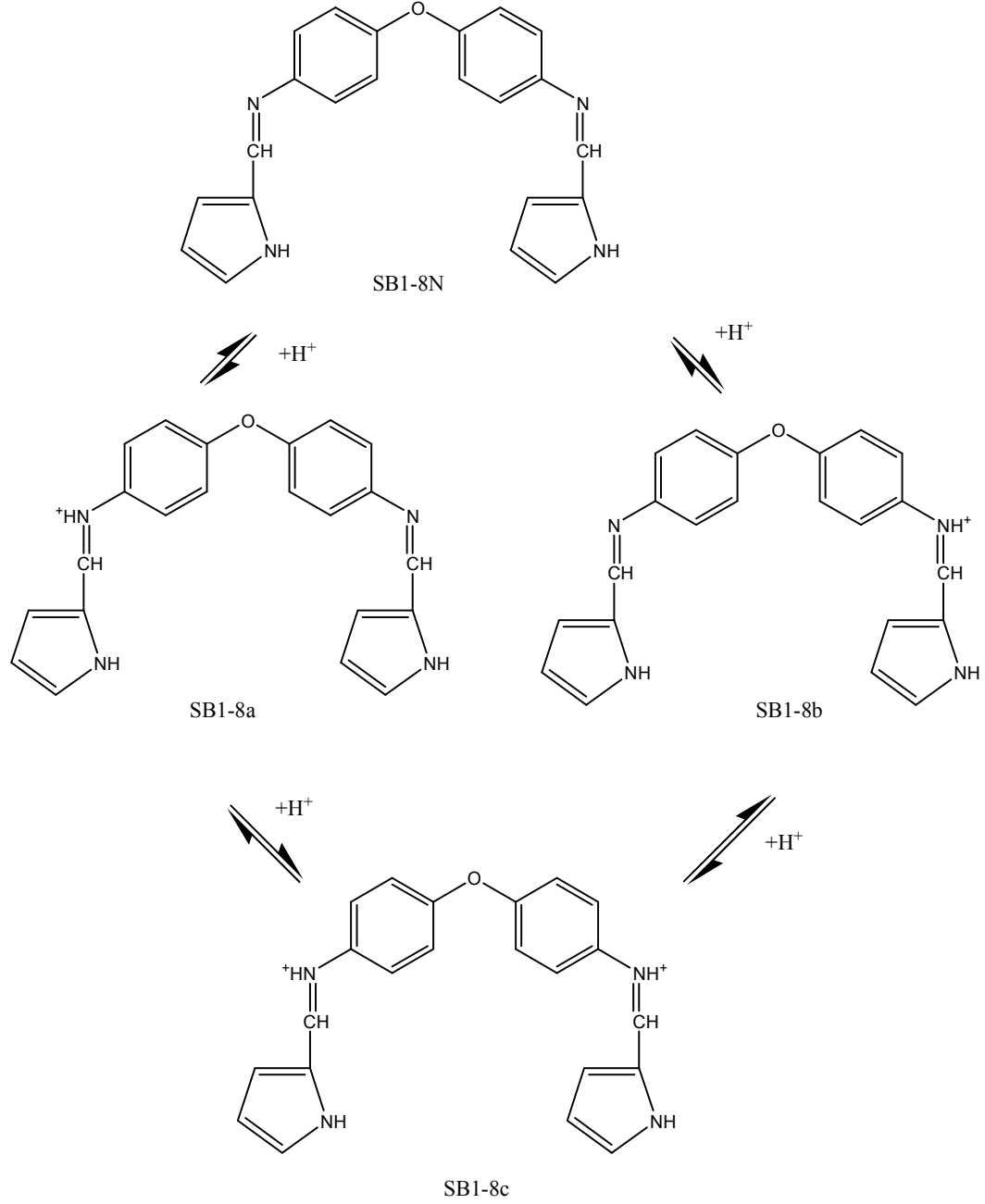
SB2-5c	OH	H	H	H	H	H	H	H	F	H
SB2-6c	OH	H	H	H	H	H	H	H	Cl	H
SB2-7c	OH	H	H	H	H	H	H	F	H	H
SB2-8c	OH	H	H	H	H	Cl	H	H	H	Cl

Çalışılan Schiff bazlarından iki ucu aynı olan SB1-7N molekülü için protonlanma merkezleri Şekil 6.2’de verilmiştir.



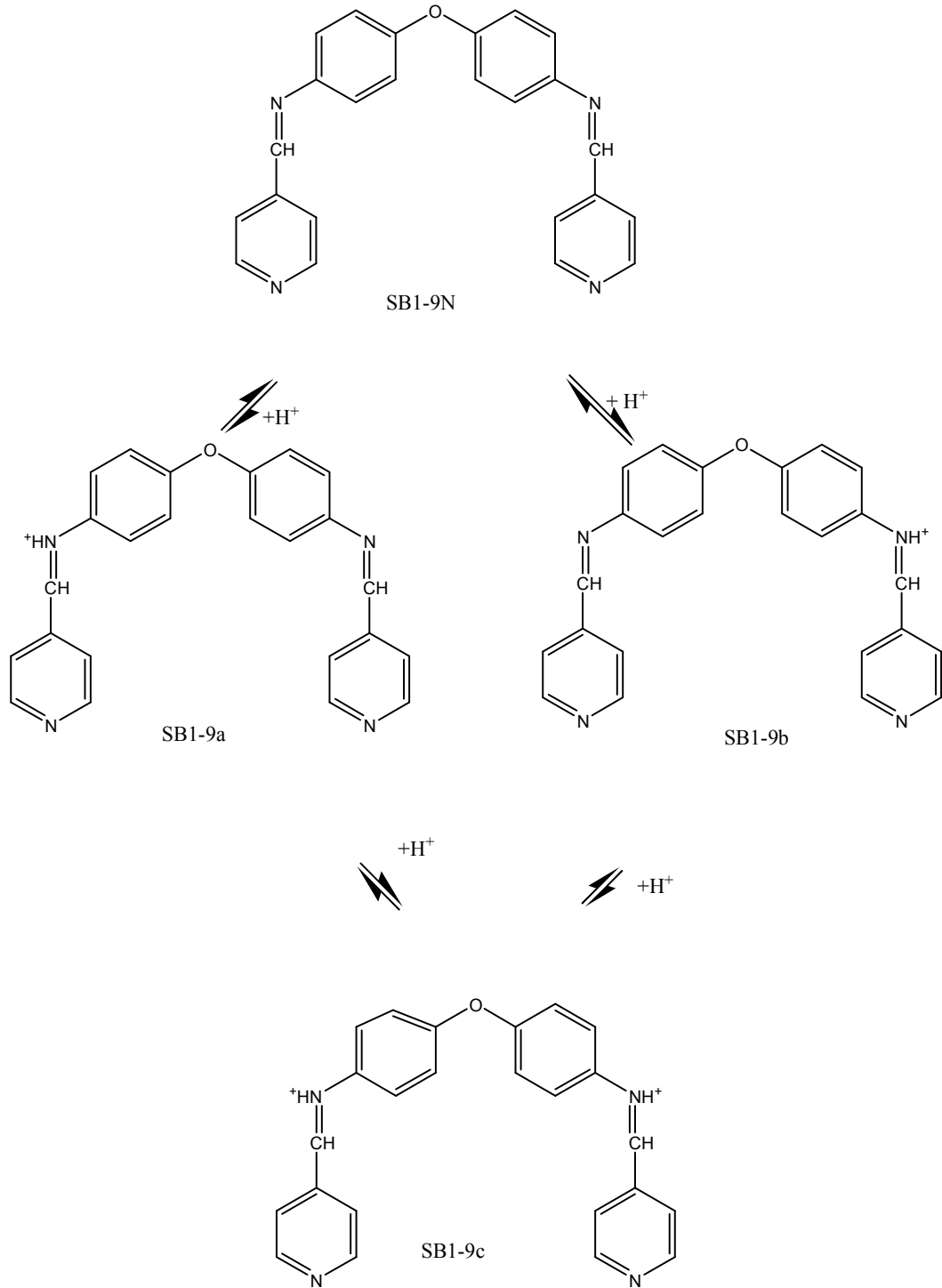
Şekil 6.2. Çalışılan Schiff bazlarından iki ucu aynı olan SB1-7N molekülü için protonlanma merkezleri

Çalışılan Schiff bazlarından iki ucu aynı olan SB1-8N molekülü için protonlanma merkezleri Şekil 6.3’de verilmiştir.



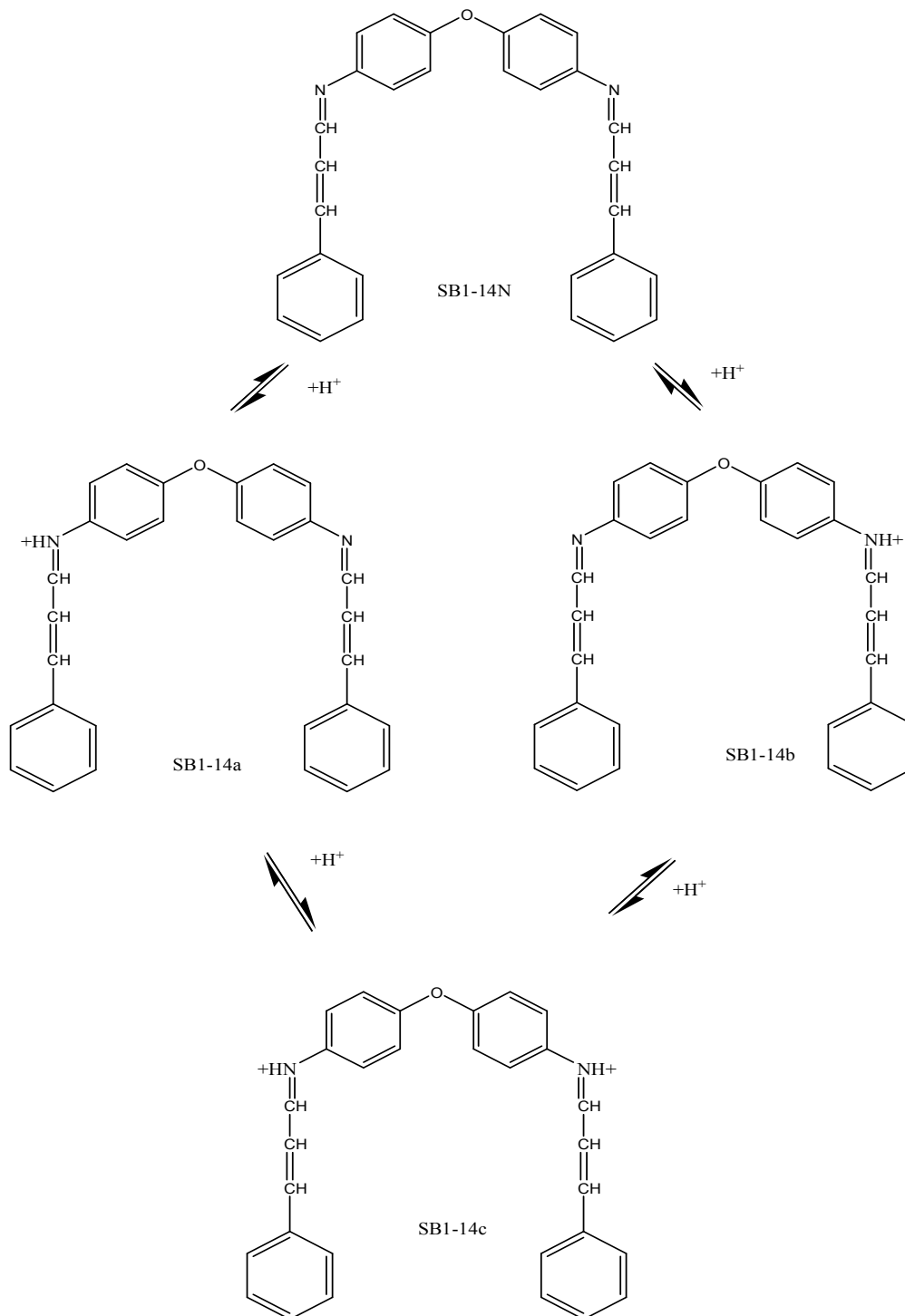
Şekil 6.3. Çalışılan Schiff bazlarından iki ucu aynı olan SB1-8N molekülü için protonlanma merkezleri

Çalışılan Schiff bazlarından iki ucu aynı olan SB1-9N molekülü için protonlanma merkezleri Şekil 6.4’de verilmiştir.



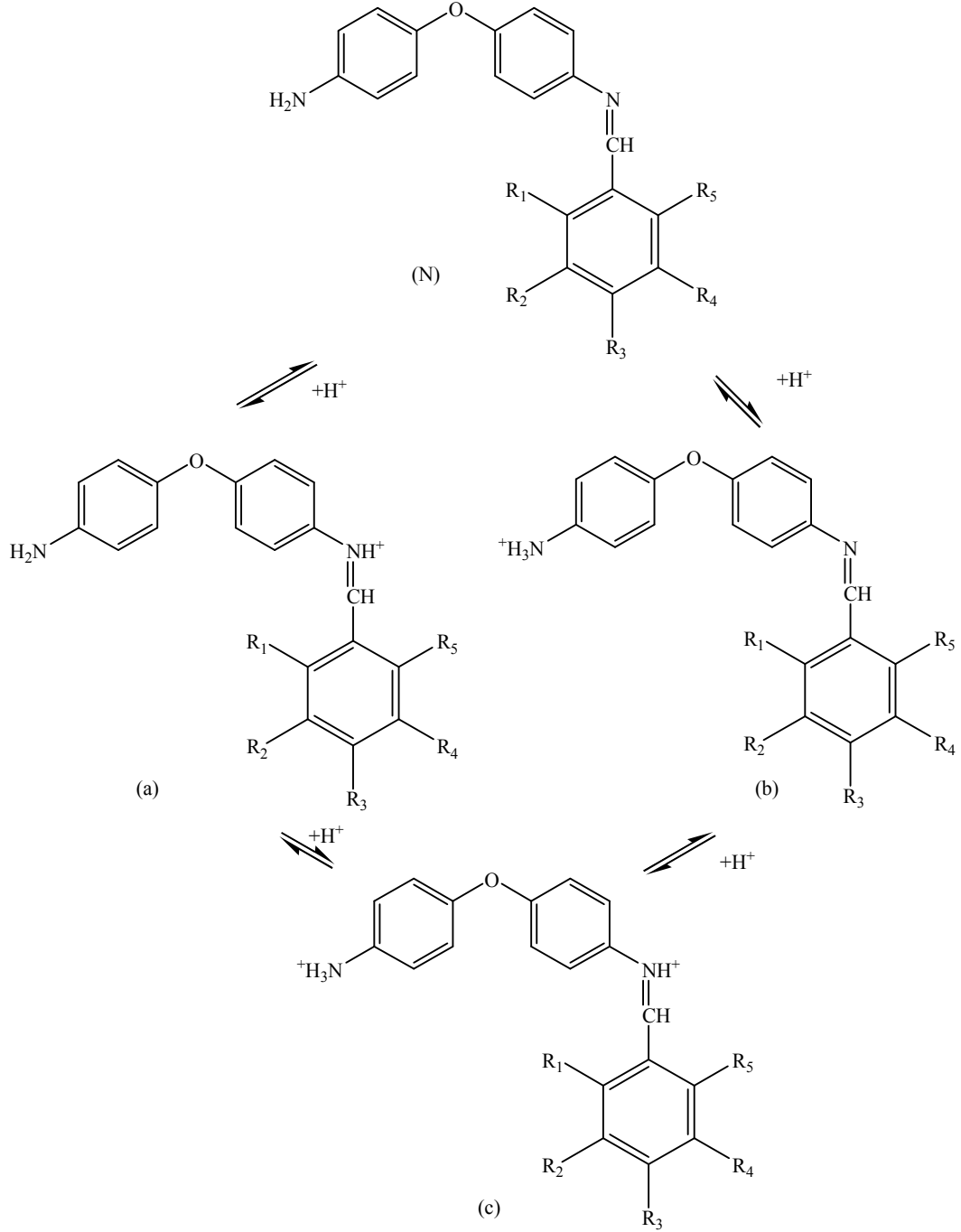
Şekil 6.4. Çalışılan Schiff bazlarından iki ucu aynı olan SB1-9N molekülü için protonlanma merkezleri

Çalışılan Schiff bazlarından iki ucu aynı olan SB1-14N molekülü için protonlanma merkezleri Şekil 6.5’de verilmiştir.



Şekil 6.5. Çalışılan Schiff bazlarından iki ucu aynı olan SB1-14N molekülü için protonlanma merkezleri

Çalışılan 4,4'-oxydianilin türevlerinden tek uçlu moleküllerin genel protonlanma şemaları Şekil 6.6.'da verilmiştir.



Şekil 6.6. Çalışılan 4,4'-oxydianilin türevlerinden tek uçlu moleküllerin genel protonlanma şemaları

Yapılan çalışmada kullanılan bazı tek uçlu Schiff bazı türevleri Çizelge 6.2'de verilmiştir.

Çizelge 6.2. Yapılan çalışmada kullanılan bazı tek uçlu Schiff bazı türevleri.

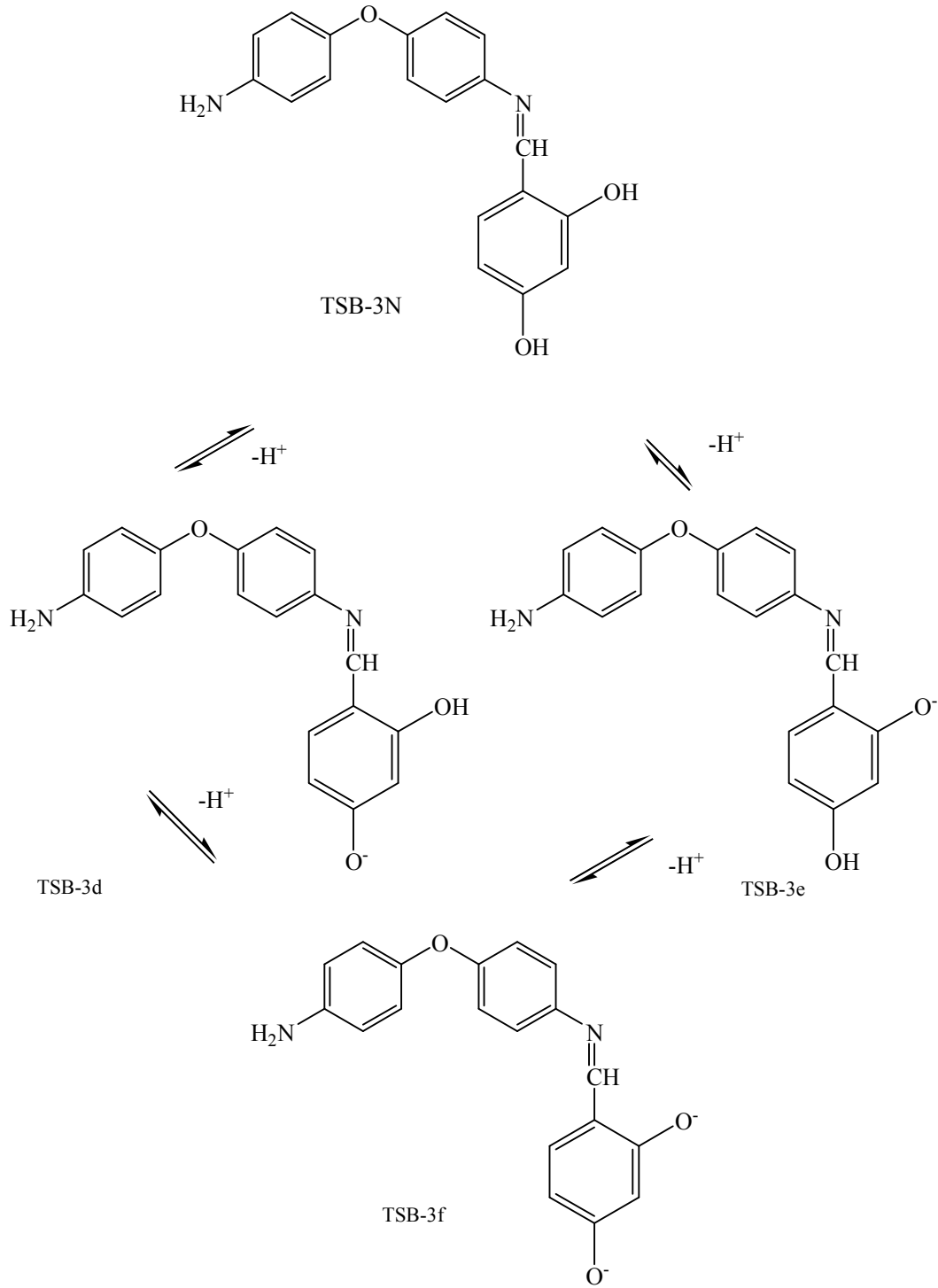
Molekül	R ₁	R ₂	R ₃	R ₄	R ₅
TSB-1a	H	H	H	H	Cl
TSB-2a	H	H	Cl	NO ₂	H
TSB-3a	H	H	OH	H	OH
TSB-4a	H	H	Cl	H	H
TSB-5a	H	H	H	F	H
TSB-6a	H	H	H	Cl	H
TSB-7a	H	H	F	H	H
TSB-8a	Cl	H	H	H	Cl
TSB-1b	H	H	H	H	Cl
TSB-2b	H	H	Cl	NO ₂	H
TSB-3b	H	H	OH	H	OH
TSB-4b	H	H	Cl	H	H
TSB-5b	H	H	H	F	H
TSB-6b	H	H	H	Cl	H
TSB-7b	H	H	F	H	H
TSB-8b	Cl	H	H	H	Cl
TSB-1c	H	H	H	H	Cl
TSB-2c	H	H	Cl	NO ₂	H
TSB-3c	H	H	OH	H	OH
TSB-4c	H	H	Cl	H	H
TSB-5c	H	H	H	F	H
TSB-6c	H	H	H	Cl	H
TSB-7c	H	H	F	H	H
TSB-8c	Cl	H	H	H	Cl

Çalışılan 4,4'-oxydianilin türevleri için deprotonlanma şeması genel şeması Şekil 6.7'de verilmiştir.

Çizelge 6.3. (Devam) Yapılan çalışmada kullanılan bazı Schiff bazı türevlerinin deprotonlanması

SB1-17d	OH	H	OH	H	H	H	H	OH	H	OH
SB2-1d	OH	H	H	H	H	H	H	H	H	Cl
SB2-2d	OH	H	H	H	H	H	H	Cl	NO ₂	H
SB2-3d	OH	H	H	H	H	H	H	OH	H	OH
SB2-4d	OH	H	H	H	H	H	H	Cl	H	H
SB2-5d	OH	H	H	H	H	H	H	H	F	H
SB2-6d	OH	H	H	H	H	H	H	H	Cl	H
SB2-7d	OH	H	H	H	H	H	H	F	H	H
SB2-8d	OH	H	H	H	H	Cl	H	H	H	Cl
SB1-2e	OH	H	H	H	H	H	H	H	H	OH
SB1-3e	OH	Br	H	H	H	H	H	H	Br	OH
SB1-10e	OH	OH	H	H	H	H	H	H	OH	OH
SB1-15e	OH	Cl	H	H	H	H	H	H	Cl	OH
SB1-17e	OH	H	OH	H	H	H	H	OH	H	OH
SB2-3e	OH	H	H	H	H	H	H	OH	H	OH
SB1-2f	OH	H	H	H	H	H	H	H	H	OH
SB1-3f	OH	Br	H	H	H	H	H	H	Br	OH
SB1-10f	OH	OH	H	H	H	H	H	H	OH	OH
SB1-15f	OH	Cl	H	H	H	H	H	H	Cl	OH
SB1-17f	OH	H	OH	H	H	H	H	OH	H	OH

Çalışılan 4,4'-oxydianilin türevlerinden tek uçlu moleküllerin genel deprotonlanma şeması Şekil 6.8'de verilmiştir.



Şekil 6.8. Çalışılan 4,4'-oxydianilin türevlerinden tek uçlu moleküllerin genel deprotonlanma şeması

6.2. Bilgisayar Hesaplamaları Sonucunda Elde Edilen Değerler

4,4'-oxydianilin türevlerinin nötr, protonlanmış ve deprotonlanmış hallerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) AM1 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri Çizelge 6.4-6.6'da verilmiştir.

4,4'-oxydianilin türevlerinin nötr, protonlanmış ve deprotonlanmış hallerinin DMF çözeltisinde ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) AM1 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri Çizelge 6.7-6.9'da verilmiştir.

4,4'-oxydianilin türevlerinin nötr, protonlanmış ve deprotonlanmış hallerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) PM3 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri Çizelge 6.10-6.12'de verilmiştir.

4,4'-oxydianilin türevlerinin nötr, protonlanmış ve deprotonlanmış hallerinin DMF çözeltisinde ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) PM3 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri Çizelge 6.13-6.15'te verilmiştir.

4,4'-oxydianilin türevlerinin nötr, protonlanmış ve deprotonlanmış hallerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) PM6 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri Çizelge 6.16-6.18'de verilmiştir.

4,4'-oxydianilin türevlerinin nötr, protonlanmış ve deprotonlanmış hallerinin DMF çözeltisinde ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) PM6 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri Çizelge 6.19-6.21'de verilmiştir.

Çizelge 6.4. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) AM1 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)
SB1-1N	115,020	15210,285	179,261	SB1-18N	103,886	16662,273	192,252
SB1-2N	24,982	16997,254	189,760	SB2-1N	64,579	16809,688	194,071
SB1-3N	39,621	18673,671	207,970	SB2-2N	68,865	18341,472	204,911
SB1-4N	100,858	16613,777	190,816	SB2-3N	-23,716	17537,339	193,121
SB1-5N	24,096	16126,629	185,765	SB2-4N	62,962	16832,851	191,693
SB1-6N	25,423	16174,069	188,661	SB2-5N	25,346	16657,744	193,683
SB1-7N	72,363	14161,592	166,346	SB2-6N	49,267	16456,077	188,176
SB1-8N	139,695	14345,281	167,048	SB2-7N	24,628	16426,896	188,719
SB1-9N	132,961	15060,520	177,222	SB2-8N	59,253	17585,089	200,609
SB1-10N	-63,872	18786,113	209,040	TSB-1N	56,460	12640,144	153,259
SB1-11N	91,445	18178,876	208,438	TSB-2N	61,005	14229,552	167,033
SB1-12N	110,770	19808,881	220,287	TSB-3N	-30,673	13480,549	154,684

Çizelge 6.4. (Devam) Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) AM1 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

SB1-13N	34,609	18552,587	205,831	TSB-4N	55,192	12633,962	152,338
SB1-14N	138,594	18038,115	202,361	TSB-5N	17,374	12412,960	152,906
SB1-15N	15,755	18297,811	201,966	TSB-6N	55,375	12673,840	156,075
SB1-16N	93,524	18044,583	196,861	TSB-7N	16,773	12359,049	149,542
SB1-17N	-70,219	18400,403	197,601	TSB-8N	51,366	13422,242	162,299

Çizelge 6.5. Protonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) AM1 yöntemiyle hesaplanmış olan ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)
SB1-1a	217,994	15178,848	174,955	SB1-18a	209,449	16688,741	190,821
SB1-1b	217,811	15206,340	178,055	SB1-18b	209,183	16719,222	189,369
SB1-1c	322,417	15274,652	173,758	SB1-18c	317,100	16698,675	188,616
SB1-2a	127,698	16766,160	191,350	SB2-1a	168,682	16822,869	189,594
SB1-2b	127,472	16855,564	187,214	SB2-1b	169,560	16832,720	189,508
SB1-2c	233,933	16784,689	185,487	SB2-1c	276,601	16833,958	185,883
SB1-3a	141,709	18581,620	204,273	SB2-2a	172,721	17982,777	193,467
SB1-3b	145,116	18417,385	204,086	SB2-2b	174,708	18369,838	201,371
SB1-3c	252,214	18608,136	204,035	SB2-2c	280,905	18285,795	194,365
SB1-4a	205,034	16727,300	191,121	SB2-3a	79,790	17589,775	193,329
SB1-4b	204,786	16716,715	189,708	SB2-3b	79,704	17574,835	195,441
SB1-4c	311,199	16608,498	181,852	SB2-3c	187,167	17594,897	189,976
SB1-5a	128,049	16143,489	183,690	SB2-4a	166,860	16754,350	188,876
SB1-5b	127,762	16154,753	185,386	SB2-4b	166,887	16871,409	188,388
SB1-5c	233,532	16244,125	177,642	SB2-4c	273,419	16787,077	184,813
SB1-6a	129,914	16173,850	184,413	SB2-5a	129,219	16529,603	188,160
SB1-6b	129,941	16158,477	184,285	SB2-5b	129,510	16598,669	188,787
SB1-6c	236,325	16174,084	181,444	SB2-5c	236,011	16512,049	182,228
SB1-7a	174,301	14228,091	168,255	SB2-6a	167,246	16793,782	189,224
SB1-7b	174,382	14291,307	171,605	SB2-6b	167,451	16731,164	186,473
SB1-7c	277,443	14435,400	169,912	SB2-6c	273,802	16890,510	189,131
SB1-8a	240,057	14454,627	162,687	SB2-7a	128,539	16524,839	186,721
SB1-8b	239,888	14498,876	172,566	SB2-7b	128,092	16530,161	185,239
SB1-8c	340,658	14508,803	165,999	SB2-7c	234,723	16509,447	182,667
SB1-9a	237,980	15026,419	175,351	SB2-8a	163,343	17589,866	199,051
SB1-9b	238,026	14927,781	173,667	SB2-8b	166,238	17449,257	195,001
SB1-9c	345,152	14833,234	167,137	SB2-8c	272,912	17568,994	192,369
SB1-10a	36,738	18550,371	199,752	TSB-1a	161,638	12724,583	151,439
SB1-10b	39,618	18962,572	207,152	TSB-1b	152,615	12750,039	154,029
SB1-10c	142,691	18746,161	202,487	TSB-1c	259,483	12583,132	147,731
SB1-11a	197,983	18249,524	203,888	TSB-2a	168,304	14465,296	170,500
SB1-11b	197,624	18152,817	201,248	TSB-2b	158,449	14226,020	164,043
SB1-11c	307,047	18192,255	202,904	TSB-2c	268,039	14285,065	164,921
SB1-12a	218,831	19688,046	213,412	TSB-3a	71,934	13488,365	155,432

Çizelge 6.5. (Devam) Protonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) AM1 yöntemiyle hesaplanmış olan ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

SB1-12b	218,062	19850,600	216,228	TSB-3b	65,288	13619,083	156,797
SB1-12c	326,569	19854,085	215,140	TSB-3c	169,628	13469,982	155,402
SB1-13a	136,996	18575,002	205,106	TSB-4a	159,113	12830,607	155,143
SB1-13b	136,788	18450,282	201,326	TSB-4b	150,897	12684,072	152,684
SB1-13c	241,848	18491,989	195,981	TSB-4c	256,570	12605,060	149,164
SB1-14a	239,703	18090,185	199,359	TSB-5a	121,724	12490,449	150,497
SB1-14b	239,527	18059,082	198,909	TSB-5b	113,273	12317,756	149,047
SB1-14c	342,097	18081,350	195,947	TSB-5c	218,796	12365,128	146,267
SB1-15a	117,788	18273,283	201,207	TSB-6a	159,534	12793,013	151,222
SB1-15b	120,346	18303,601	201,533	TSB-6b	151,143	12623,696	152,646
SB1-15c	224,087	18149,833	198,621	TSB-6c	256,867	12716,331	151,983
SB1-16a	200,791	18165,916	202,627	TSB-7a	120,346	12489,161	148,284
SB1-16b	200,978	18161,194	199,902	TSB-7b	112,532	12537,453	153,159
SB1-16c	309,903	18180,806	195,914	TSB-7c	217,735	12398,120	147,323
SB1-17a	33,446	18477,299	199,225	TSB-8a	158,312	13512,702	160,004
SB1-17b	33,398	18268,883	196,834	TSB-8b	147,314	13438,806	159,100
SB1-17c	139,432	18210,360	191,663	TSB-8c	256,184	13448,112	156,341

Çizelge 6.6. Deprotonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298$) AM1 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)
SB1-2d	-58,255	16618,324	190,162	SB1-17f	-220,474	17928,404	195,770
SB1-2e	-51,295	16488,753	185,489	SB2-1d	-18,669	16421,544	191,251
SB1-2f	-141,921	16143,320	183,786	SB2-2d	-15,562	18010,797	203,143
SB1-3d	-48,671	18363,331	208,464	SB2-3d	-107,344	17349,122	194,968
SB1-3e	-44,199	18217,441	200,669	SB2-3e	-102,040	17284,669	191,017
SB1-3f	-136,416	17992,646	206,591	SB2-4d	-20,234	16420,181	189,162
SB1-10d	-145,275	18392,026	203,646	SB2-5d	-58,147	16168,866	185,160
SB1-10e	-139,710	17693,562	190,669	SB2-6d	-20,134	16448,842	190,646
SB1-10f	-226,864	17716,188	196,292	SB2-7d	-58,505	16167,201	185,199
SB1-15d	-72,179	17996,475	203,297	SB2-8d	-24,205	17144,196	192,945
SB1-15e	-62,411	17793,182	194,966	TSB-3d	-109,677	13217,978	154,757
SB1-15f	-158,542	17568,242	194,973	TSB-3e	-108,989	13300,419	155,878
SB1-17d	-154,559	18345,126	198,693	TSB-3f	-177,355	12777,625	148,825
SB1-17e	-150,897	18061,148	197,603				

Çizelge 6.7. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF çözeltisinde ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) AM1 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)
SB1-1N	115,392	15212,239	179,883	SB1-18N	104,178	16657,417	191,875

Çizelge 6.7. (Devam) Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF çözeltisinde ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) AM1 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

SB1-2N	25,374	17004,893	190,196	SB2-1N	64,909	16805,880	194,307
SB1-3N	40,008	18674,316	208,596	SB2-2N	69,316	18334,165	205,100
SB1-4N	101,155	16613,485	191,276	SB2-3N	-23,250	17531,281	193,317
SB1-5N	24,397	16126,074	186,032	SB2-4N	63,293	16828,588	191,624
SB1-6N	25,727	16177,498	190,008	SB2-5N	25,681	16657,624	194,004
SB1-7N	72,689	14161,482	166,440	SB2-6N	49,605	16367,445	187,561
SB1-8N	140,044	14345,836	167,201	SB2-7N	24,964	16431,041	187,879
SB1-9N	133,351	15056,439	176,606	SB2-8N	59,583	17587,543	202,054
SB1-10N	-63,472	18778,067	208,051	TSB-1N	56,751	12640,886	153,445
SB1-11N	91,725	18176,948	207,965	TSB-2N	61,005	14229,552	167,033
SB1-12N	111,329	19800,733	219,798	TSB-3N	-30,238	13485,458	154,877
SB1-13N	34,979	18557,129	206,706	TSB-4N	55,478	12631,792	152,284
SB1-14N	138,922	18037,992	202,563	TSB-5N	17,666	12411,529	152,967
SB1-15N	16,119	18287,012	201,677	TSB-6N	55,665	12679,054	157,780
SB1-16N	93,807	18041,420	196,929	TSB-7N	17,064	12360,550	149,667
SB1-17N	-69,659	18396,040	197,371	TSB-8N	51,651	13425,155	162,765

Çizelge 6.8. Protonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) AM1 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)
SB1-1a	219,256	15179,416	174,995	SB1-18a	210,682	16689,502	192,591
SB1-1b	219,079	15206,939	178,461	SB1-18b	210,486	16722,937	189,727
SB1-1c	325,393	15274,324	173,763	SB1-18c	320,116	16696,173	188,527
SB1-2a	129,127	16765,713	191,107	SB2-1a	170,039	16817,482	188,865
SB1-2b	128,799	16862,592	187,586	SB2-1b	170,910	16829,107	189,648
SB1-2c	237,016	16792,502	186,281	SB2-1c	279,725	16833,570	185,841
SB1-3a	142,958	18573,711	204,064	SB2-2a	174,096	17982,525	193,635
SB1-3b	146,447	18419,252	204,593	SB2-2b	176,320	18371,834	201,024
SB1-3c	255,443	18608,423	204,325	SB2-2c	284,234	18290,767	194,601
SB1-4a	206,353	16719,344	190,854	SB2-3a	81,287	17598,722	196,916
SB1-4b	206,086	16715,677	189,892	SB2-3b	81,083	17576,315	195,090
SB1-4c	314,305	16612,090	182,095	SB2-3c	190,331	17582,382	189,576
SB1-5a	129,377	16139,300	183,656	SB2-4a	168,238	16755,151	189,209
SB1-5b	129,074	16156,255	185,447	SB2-4b	168,250	16863,388	188,349
SB1-5c	236,654	16250,328	177,885	SB2-4c	276,571	16785,469	184,897
SB1-6a	131,231	16174,180	184,349	SB2-5a	130,572	16529,092	186,578
SB1-6b	131,292	16155,413	184,221	SB2-5b	130,894	16592,062	188,512
SB1-6c	239,462	16173,710	181,455	SB2-5c	239,161	16512,035	182,423
SB1-7a	175,612	14230,290	168,343	SB2-6a	168,602	16787,380	188,885
SB1-7b	175,692	14290,552	171,295	SB2-6b	168,817	16730,010	186,636
SB1-7c	280,499	14437,298	170,482	SB2-6c	276,942	16891,665	188,721
SB1-8a	241,379	14459,459	163,462	SB2-7a	129,923	16517,820	186,674

Çizelge 6.8. (Devam) Protonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) AM1 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

SB1-8b	241,164	14499,121	172,469	SB2-7b	129,439	16525,101	185,247
SB1-8c	343,634	14512,814	166,321	SB2-7c	237,881	16505,116	182,707
SB1-9a	239,461	15023,854	175,349	SB2-8a	164,680	17592,295	197,033
SB1-9b	239,506	14927,450	173,767	SB2-8b	167,544	17453,346	194,829
SB1-9c	348,526	14831,514	166,624	SB2-8c	276,012	17565,799	192,373
SB1-10a	38,032	18558,386	199,399	TSB-1a	162,875	12723,291	151,538
SB1-10b	41,054	18966,115	207,345	TSB-1b	154,255	12754,032	154,155
SB1-10c	145,661	18769,124	203,845	TSB-1c	262,947	12586,501	147,763
SB1-11a	199,253	18240,040	203,485	TSB-2a	168,304	14465,296	170,500
SB1-11b	198,964	18153,102	201,486	TSB-2b	158,449	14226,020	164,043
SB1-11c	310,135	18184,809	201,027	TSB-2c	268,039	14285,065	164,921
SB1-12a	220,415	19687,147	213,257	TSB-3a	73,229	13482,945	155,411
SB1-12b	219,766	19849,769	216,351	TSB-3b	67,070	13617,590	156,982
SB1-12c	330,173	19844,308	214,503	TSB-3c	173,100	13465,126	155,406
SB1-13a	138,309	18573,915	205,507	TSB-4a	160,362	12818,972	154,731
SB1-13b	138,064	18445,886	201,260	TSB-4b	152,569	12682,728	152,508
SB1-13c	244,823	18485,918	194,918	TSB-4c	260,070	12609,525	149,276
SB1-14a	241,001	18096,918	199,856	TSB-5a	122,994	12486,142	150,521
SB1-14b	240,782	18056,617	198,540	TSB-5b	114,918	12328,212	150,158
SB1-14c	345,002	18083,991	198,896	TSB-5c	222,302	12370,143	146,358
SB1-15a	119,025	18271,400	204,086	TSB-6a	160,789	12787,416	151,319
SB1-15b	121,686	18300,964	202,498	TSB-6b	152,794	12626,813	152,773
SB1-15c	227,060	18147,962	198,716	TSB-6c	260,356	12722,238	151,766
SB1-16a	202,012	18162,564	202,782	TSB-7a	121,602	12485,490	148,300
SB1-16b	202,223	18160,010	199,998	TSB-7b	114,211	12551,857	153,894
SB1-16c	312,891	18184,242	196,164	TSB-7c	221,244	12404,983	147,441
SB1-17a	34,978	18464,677	198,417	TSB-8a	159,507	13508,080	159,913
SB1-17b	34,848	18258,928	196,563	TSB-8b	148,945	13437,493	158,959
SB1-17c	142,637	18205,045	191,706	TSB-8c	259,617	13446,699	156,363

Çizelge 6.9. Deprotonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) AM1 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)
SB1-2d	-56,794	16613,712	190,188	SB1-17f	-216,463	17906,399	195,416
SB1-2e	-49,929	16492,887	185,845	SB2-1d	-17,309	16420,870	191,458
SB1-2f	-138,823	16144,284	184,316	SB2-2d	-14,074	18008,625	202,807
SB1-3d	-47,279	8358,480	206,559	SB2-3d	-105,776	17347,825	195,545
SB1-3e	-42,794	18212,043	200,836	SB2-3e	-100,583	17281,013	190,944
SB1-3f	-133,428	17987,561	205,638	SB2-4d	-18,846	16416,351	188,804
SB1-10d	-143,809	18398,744	202,572	SB2-5d	-56,763	16170,085	185,508
SB1-10e	-138,436	17700,475	190,006	SB2-6d	-18,748	16453,124	191,286
SB1-10f	-223,798	17703,236	195,146	SB2-7d	-57,115	16160,652	185,043

Çizelge 6.9. (Devam) Deprotonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) AM1 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

SB1-15d	-70,815	17985,168	202,197	SB2-8d	-22,830	17144,285	192,981
SB1-15e	-61,133	17798,846	195,669	TSB-3d	-108,225	13218,120	154,843
SB1-15f	-155,549	17568,250	195,083	TSB-3e	-107,521	13296,505	156,008
SB1-17d	-153,054	18322,291	197,545	TSB-3f	-173,216	12848,486	150,217
SB1-17e	-149,375	18060,945	200,143				

Çizelge 6.10. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298$) PM3 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)
SB1-1N	104,118	15718,864	184,690	SB1-18N	93,276	17179,636	195,335
SB1-2N	11,466	17178,196	191,740	SB2-1N	52,872	17275,907	195,033
SB1-3N	29,516	19010,312	212,770	SB2-2N	39,067	18867,327	204,933
SB1-4N	90,843	17165,469	193,388	SB2-3N	-36,316	18166,667	197,165
SB1-5N	16,355	16630,158	190,775	SB2-4N	51,847	17126,188	195,050
SB1-6N	16,994	16644,189	194,911	SB2-5N	14,277	16968,064	192,186
SB1-7N	45,505	14719,309	179,332	SB2-6N	38,806	16977,647	192,627
SB1-8N	101,006	14850,250	172,989	SB2-7N	13,978	16815,515	187,966
SB1-9N	115,036	15551,374	182,805	SB2-8N	48,092	18039,482	202,571
SB1-10N	-76,940	19085,571	207,952	TSB-1N	50,967	12970,713	157,068
SB1-11N	80,860	18780,714	211,328	TSB-2N	36,989	14631,951	170,095
SB1-12N	65,686	20220,206	216,361	TSB-3N	-37,895	13958,610	160,467
SB1-13N	24,789	19151,926	210,118	TSB-4N	49,839	12999,021	157,382
SB1-14N	128,721	18486,266	203,862	TSB-5N	12,872	12728,076	155,145
SB1-15N	1,757	18910,099	208,801	TSB-6N	50,009	13006,563	158,024
SB1-16N	83,901	18784,455	201,587	TSB-7N	12,582	12708,571	153,304
SB1-17N	-85,136	18599,716	200,263	TSB-8N	46,486	13793,741	161,985

Çizelge 6.11. Protonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) PM3 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)
SB1-1a	211,036	15671,091	178,504	SB1-18a	200,984	17203,279	193,791
SB1-1b	210,780	15700,254	176,382	SB1-18b	201,737	17246,748	193,425
SB1-1c	319,882	15600,488	173,228	SB1-18c	312,680	17141,617	188,323
SB1-2a	118,474	17163,570	190,288	SB2-1a	159,644	17085,875	189,684
SB1-2b	117,651	17267,214	189,805	SB2-1b	161,000	17197,093	189,393
SB1-2c	227,216	16997,487	183,925	SB2-1c	270,907	17108,871	186,626
SB1-3a	136,936	19131,173	211,825	SB2-2a	146,414	18654,083	198,007
SB1-3b	136,333	18983,669	209,219	SB2-2b	147,432	18712,314	203,979

Çizelge 6.11. (Devam) Protonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) PM3 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

SB1-3c	247,785	18922,732	204,056	SB2-2c	256,714	18610,662	195,665
SB1-4a	198,070	17249,658	193,725	SB2-3a	70,071	17985,727	195,280
SB1-4b	198,127	17214,645	191,850	SB2-3b	69,135	17897,913	195,534
SB1-4c	308,499	17190,437	187,907	SB2-3c	180,022	17926,733	190,826
SB1-5a	123,437	16623,623	188,563	SB2-4a	158,066	17152,823	188,513
SB1-5b	123,223	16602,004	185,910	SB2-4b	159,070	17213,676	189,888
SB1-5c	233,760	16590,237	182,081	SB2-4c	269,593	17032,080	186,420
SB1-6a	124,371	16582,354	186,049	SB2-5a	121,263	16802,718	185,823
SB1-6b	124,678	16624,865	188,993	SB2-5b	121,653	16834,438	186,333
SB1-6c	235,894	16592,119	180,139	SB2-5c	232,733	16812,744	185,249
SB1-7a	150,820	14654,593	170,298	SB2-6a	161,021	16594,045	177,191
SB1-7b	150,708	14691,115	171,787	SB2-6b	161,319	16645,364	180,841
SB1-7c	257,502	14775,409	168,268	SB2-6c	270,896	16489,254	174,973
SB1-8a	205,577	14780,547	167,197	SB2-7a	120,788	16799,454	186,784
SB1-8b	205,106	14837,791	168,579	SB2-7b	120,805	16799,793	185,499
SB1-8c	311,159	14847,594	168,888	SB2-7c	231,107	16755,023	183,779
SB1-9a	222,787	15559,212	180,663	SB2-8a	154,593	18074,507	196,051
SB1-9b	222,762	15560,177	182,102	SB2-8b	157,798	17971,219	198,898
SB1-9c	333,931	15443,035	171,875	SB2-8c	267,196	17801,051	191,164
SB1-10a	28,933	19081,816	202,806	TSB-1a	159,044	13050,075	155,033
SB1-10b	29,276	19040,617	206,613	TSB-1b	142,605	13069,988	154,888
SB1-10c	139,402	19141,896	206,440	TSB-1c	254,051	12700,181	147,114
SB1-11a	189,314	18803,541	206,225	TSB-2a	145,778	14612,221	166,613
SB1-11b	189,653	18794,022	207,201	TSB-2b	129,947	14238,560	159,833
SB1-11c	302,033	18754,413	204,375	TSB-2c	239,773	14375,459	164,186
SB1-12a	174,596	20456,791	219,988	TSB-3a	67,711	13777,496	157,757
SB1-12b	174,842	20447,456	219,593	TSB-3b	53,551	13863,619	160,056
SB1-12c	285,390	20432,094	214,538	TSB-3c	163,005	13728,487	156,248
SB1-13a	131,242	19136,031	205,949	TSB-4a	156,884	13017,577	155,500
SB1-13b	131,114	19141,958	208,814	TSB-4b	141,534	12863,996	153,681
SB1-13c	240,838	19027,677	196,649	TSB-4c	251,166	12804,045	152,275
SB1-14a	232,849	18490,284	203,673	TSB-5a	120,031	12773,421	152,326
SB1-14b	232,780	18429,190	203,025	TSB-5b	104,686	12555,872	150,762
SB1-14c	339,464	18237,761	193,510	TSB-5c	213,943	12553,964	145,439
SB1-15a	108,853	18790,546	203,730	TSB-6a	157,020	13004,878	153,925
SB1-15b	108,117	18908,580	203,538	TSB-6b	141,665	12889,972	153,266
SB1-15c	218,537	18800,976	199,986	TSB-6c	251,156	12798,727	148,592
SB1-16a	193,617	18841,228	208,946	TSB-7a	119,441	12697,134	150,031
SB1-16b	193,882	18788,511	203,844	TSB-7b	104,264	12632,497	149,953
SB1-16c	305,997	18727,443	202,305	TSB-7c	213,705	12546,436	147,407
SB1-17a	21,186	18763,758	201,376	TSB-8a	155,930	13788,455	160,388
SB1-17b	24,810	18804,909	197,398	TSB-8b	137,967	13532,011	157,052
SB1-17c	131,160	18603,264	194,934	TSB-8c	250,592	13549,277	155,186

Çizelge 6.12. Deprotonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) PM3 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)
SB1-2d	-73,635	16979,580	190,279	SB1-17f	-239,340	18594,364	200,765
SB1-2e	-70,905	16552,081	185,414	SB2-1d	-32,899	16972,994	193,126
SB1-2f	-159,757	16668,670	186,103	SB2-2d	-47,950	18578,646	204,251
SB1-3d	-58,746	18922,854	210,777	SB2-3d	-122,464	17809,583	193,120
SB1-3e	-57,298	18467,374	206,382	SB2-3e	-117,934	17773,494	193,579
SB1-3f	-148,790	18690,205	204,591	SB2-4d	-34,710	16954,452	190,921
SB1-10d	-158,911	18746,357	206,756	SB2-5d	-71,378	16659,776	188,522
SB1-10e	-159,135	18093,654	189,371	SB2-6d	-34,103	17001,904	196,186
SB1-10f	-244,038	18696,960	206,539	SB2-7d	-71,898	16568,692	184,638
SB1-15d	-87,029	18511,881	199,792	SB2-8d	-37,830	17751,135	196,269
SB1-15e	-80,697	18173,410	196,129	TSB-3d	-119,733	13564,465	160,592
SB1-15f	-172,980	18281,874	200,934	TSB-3e	-119,836	13589,859	161,631
SB1-17d	-174,485	18233,016	195,300	TSB-3f	-190,099	13549,071	159,683
SB1-17e	-169,685	18584,432	199,266				

Çizelge 6.13. Nötr 4,4'-oxydianilin ve türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) PM3 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)
SB1-1N	104,118	15718,864	184,690	SB1-18N	93,276	17179,636	195,335
SB1-2N	11,466	17178,196	191,740	SB2-1N	52,872	17275,907	195,033
SB1-3N	29,516	19010,312	212,770	SB2-2N	39,067	18867,327	204,933
SB1-4N	90,843	17165,469	193,388	SB2-3N	-36,316	18166,667	197,165
SB1-5N	16,355	16630,158	190,775	SB2-4N	51,847	17126,188	195,050
SB1-6N	16,994	16644,189	194,911	SB2-5N	14,277	16968,064	192,186
SB1-7N	45,505	14719,309	179,332	SB2-6N	38,806	16977,647	192,627
SB1-8N	101,318	14848,625	172,719	SB2-7N	13,978	16815,515	187,966
SB1-9N	115,036	15551,374	182,805	SB2-8N	48,092	18039,482	202,571
SB1-10N	-76,940	19085,571	207,952	TSB-1N	50,967	12970,713	157,068
SB1-11N	80,860	18780,714	211,328	TSB-2N	36,989	14631,951	170,095
SB1-12N	65,686	20220,206	216,361	TSB-3N	-37,895	13958,610	160,467
SB1-13N	24,789	19151,926	210,118	TSB-4N	49,839	12999,021	157,382
SB1-14N	128,721	18486,266	203,862	TSB-5N	12,872	12728,076	155,145
SB1-15N	1,757	18910,099	208,801	TSB-6N	50,009	13006,563	158,024
SB1-16N	83,901	18784,455	201,587	TSB-7N	12,582	12708,571	153,304
SB1-17N	-85,136	18599,716	200,263	TSB-8N	46,486	13793,741	161,985

Çizelge 6.14. Protonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) PM3 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)
SB1-1a	212,260	15672,140	178,161	SB1-18a	202,211	17204,505	194,383

Çizelge 6.14. (Devam) Protonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) PM3 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

SB1-1b	212,008	15704,939	176,648	SB1-18b	202,980	17247,052	193,738
SB1-1c	322,889	15609,118	173,406	SB1-18c	315,717	17145,923	188,766
SB1-2a	119,850	17161,539	189,983	SB2-1a	160,967	17089,015	189,984
SB1-2b	118,920	17249,793	189,387	SB2-1b	162,281	17196,197	189,480
SB1-2c	230,320	17003,172	183,987	SB2-1c	274,037	17113,185	186,755
SB1-3a	138,329	19125,540	212,157	SB2-2a	147,813	18654,921	198,161
SB1-3b	137,672	18982,970	210,038	SB2-2b	149,028	18710,114	203,925
SB1-3c	250,974	18915,929	203,990	SB2-2c	260,082	18617,705	195,927
SB1-4a	199,331	17248,548	193,821	SB2-3a	71,508	17988,298	193,839
SB1-4b	199,365	17215,883	192,161	SB2-3b	70,459	17886,536	194,944
SB1-4c	311,581	17190,979	188,586	SB2-3c	183,185	17923,680	190,821
SB1-5a	124,754	16622,425	188,546	SB2-4a	159,394	17151,780	188,678
SB1-5b	124,526	16600,960	185,905	SB2-4b	160,361	17211,612	189,962
SB1-5c	236,935	16588,359	181,210	SB2-4c	272,708	17035,334	186,412
SB1-6a	125,670	16580,599	186,019	SB2-5a	122,574	16800,029	185,768
SB1-6b	125,960	16630,931	191,036	SB2-5b	123,007	16833,870	186,546
SB1-6c	239,057	16592,450	180,219	SB2-5c	235,881	16814,530	185,250
SB1-7a	152,077	14654,712	170,207	SB2-6a	159,625	17087,473	188,673
SB1-7b	151,965	14688,297	171,608	SB2-6b	159,963	17092,851	188,472
SB1-7c	260,558	14776,384	168,337	SB2-6c	271,693	17042,475	184,469
SB1-8a	206,911	14787,169	167,446	SB2-7a	122,128	16799,668	186,992
SB1-8b	206,397	14841,992	168,849	SB2-7b	122,137	16802,789	185,848
SB1-8c	314,222	14848,838	168,622	SB2-7c	234,291	16762,811	184,279
SB1-9a	224,236	15558,425	180,713	SB2-8a	155,887	18074,130	195,995
SB1-9b	224,213	15561,787	182,189	SB2-8b	159,036	17973,229	199,351
SB1-9c	337,324	15446,003	172,545	SB2-8c	270,307	17804,011	191,326
SB1-10a	30,219	19084,673	203,345	TSB-1a	160,226	13046,856	154,817
SB1-10b	30,636	19033,271	207,587	TSB-1b	144,162	13068,841	154,882
SB1-10c	142,596	19119,045	202,137	TSB-1c	257,489	12705,828	147,173
SB1-11a	190,548	18805,001	206,468	TSB-2a	147,292	14617,470	167,566
SB1-11b	190,921	18796,947	207,693	TSB-2b	131,587	14244,603	159,953
SB1-11c	305,103	18758,961	204,652	TSB-2c	243,426	14380,639	164,311
SB1-12a	176,273	20452,876	219,410	TSB-3a	68,951	13775,040	158,121
SB1-12b	176,588	20446,779	219,552	TSB-3b	55,242	13861,948	159,861
SB1-12c	289,083	20432,354	214,389	TSB-3c	166,452	13731,844	156,590
SB1-13a	132,495	19130,706	205,668	TSB-4a	158,085	13015,396	155,375
SB1-13b	132,332	19137,229	209,186	TSB-4b	143,119	12872,251	154,065
SB1-13c	243,814	19036,635	197,198	TSB-4c	254,614	12811,676	152,705
SB1-14a	234,094	18483,708	204,219	TSB-5a	122,574	16800,029	185,768
SB1-14b	233,985	18428,563	203,383	TSB-5b	123,007	16833,870	186,546
SB1-14c	342,405	18240,471	193,737	TSB-5c	235,881	16814,530	185,250
SB1-15a	110,225	18794,081	203,494	TSB-6a	159,625	17087,473	188,673
SB1-15b	109,404	18904,686	203,677	TSB-6b	159,963	17092,851	188,472
SB1-15c	221,526	18798,747	200,102	TSB-6c	271,693	17042,475	184,469
SB1-16a	194,782	18838,573	209,858	TSB-7a	122,128	16799,668	186,992

Çizelge 6.14. (Devam) Protonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) PM3 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

SB1-16b	195,074	18786,432	203,628	TSB-7b	122,137	16802,789	185,848
SB1-16c	309,001	18731,663	202,437	TSB-7c	234,291	16762,811	184,279
SB1-17a	22,650	18757,925	201,370	TSB-8a	155,887	18074,130	195,995
SB1-17b	26,114	18792,207	197,402	TSB-8b	159,036	17973,229	199,351
SB1-17c	134,354	18598,808	194,886	TSB-8c	270,307	17804,011	191,326

Çizelge 6.15. Deprotonlanmış 4,4'-oxydianilin ve türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) PM3 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)
SB1-2d	-72,223	16978,683	190,442	SB1-17f	-210,667	17777,664	193,409
SB1-2e	-69,532	16548,314	185,088	SB1-1d	-31,575	16975,057	193,993
SB1-2f	-156,694	16673,135	186,525	SB1-2d	-46,414	18576,190	204,495
SB1-3d	-57,397	18923,974	211,190	SB2-3d	-120,954	17802,915	193,114
SB1-3e	-55,944	18463,995	205,805	SB2-3e	-116,512	17771,417	194,022
SB1-3f	-145,822	18693,628	204,665	SB2-4d	-33,360	16958,180	191,567
SB1-10d	-157,494	18732,424	207,358	SB2-5d	-70,039	16659,418	188,718
SB1-10e	-157,937	18088,321	189,594	SB2-6d	-32,762	16999,743	195,335
SB1-10f	-240,973	18684,654	205,881	SB2-7d	-70,542	16569,852	184,745
SB1-15d	-85,697	18503,478	199,517	SB2-8d	-36,507	17749,581	196,635
SB1-15e	-79,441	18168,805	195,682	TSB-3d	-118,352	13567,065	161,023
SB1-15f	-172,980	18281,874	200,934	TSB-3e	-118,447	13583,786	161,423
SB1-17d	-173,041	18225,708	195,311	TSB-3f	-186,065	13543,871	159,693
SB1-17e	-168,214	18579,015	199,265				

Çizelge 6.16. Nötr 4,4'-oxydianilin ve türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) PM6 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)
SB1-1N	96,571	16059,036	182,312	SB1-18N	77,689	17557,126	201,878
SB1-2N	2,112	17639,430	190,067	SB2-1N	40,458	17605,506	194,266
SB1-3N	9,514	19540,666	211,035	SB2-2N	34,543	19280,707	207,782
SB1-4N	75,955	17570,389	195,939	SB2-3N	-49,991	18515,354	194,914
SB1-5N	0,009	17121,570	194,924	SB2-4N	39,415	17562,692	193,607
SB1-6N	0,939	17180,615	192,363	SB2-5N	1,810	17312,298	193,413
SB1-7N	29,713	15054,925	177,698	SB2-6N	28,801	17310,216	193,001
SB1-8N	93,007	15191,305	176,512	SB2-7N	1,420	17398,255	193,108
SB1-9N	111,434	15949,370	179,021	SB2-8N	31,599	18498,016	198,692
SB1-10N	-81,136	19553,871	203,748	TSB-1N	38,397	13459,070	160,950

Çizelge 6.16. (Devam) Nötr 4,4'-oxydianilin ve türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) PM6 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

SB1-11N	59,615	19039,157	207,215	TSB-2N	32,318	15006,423	169,611
SB1-12N	65,642	20848,925	225,114	TSB-3N	-51,158	14424,575	161,924
SB1-13N	7,410	19803,630	212,404	TSB-4N	37,583	13393,951	157,657
SB1-14N	119,507	19102,453	207,608	TSB-5N	-0,082	13224,087	156,327
SB1-15N	-12,462	19423,960	210,405	TSB-6N	50,009	13006,563	158,024
SB1-16N	60,481	19059,762	202,983	TSB-7N	-0,489	13185,563	155,502
SB1-17N	-97,784	18880,606	197,269	TSB-8N	29,947	14179,377	164,558

Çizelge 6.17. Protonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) PM6 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)
SB1-1a	199,464	16140,727	181,885	SB1-18a	180,706	17534,391	192,293
SB1-1b	198,422	16067,265	183,337	SB1-18b	180,871	17640,246	196,217
SB1-1c	302,312	16161,191	179,922	SB1-18c	286,571	17628,880	190,579
SB1-2a	103,749	17910,852	190,209	SB2-1a	143,104	17835,208	197,488
SB1-2b	103,469	17688,146	192,677	SB2-1b	143,725	17747,528	191,154
SB1-2c	208,156	17734,985	187,905	SB2-1c	248,758	17586,458	187,814
SB1-3a	112,315	19617,787	208,943	SB2-2a	137,054	19270,085	203,294
SB1-3b	111,732	19623,702	211,724	SB2-2b	138,888	19507,492	209,969
SB1-3c	217,353	19684,107	211,531	SB2-2c	244,453	19247,600	202,893
SB1-4a	178,806	17518,757	194,233	SB2-3a	52,042	18677,790	198,224
SB1-4b	178,576	17571,118	196,416	SB2-3b	51,572	18513,127	199,322
SB1-4c	284,274	17576,275	189,451	SB2-3c	157,598	18440,087	192,528
SB1-5a	102,727	17187,104	193,251	SB2-4a	141,813	17711,068	196,340
SB1-5b	102,485	17180,409	192,544	SB2-4b	142,098	17690,461	194,139
SB1-5c	207,462	17201,642	187,294	SB2-4c	247,153	17627,051	189,427
SB1-6a	104,292	17144,567	189,375	SB2-5a	104,418	17529,629	194,807
SB1-6b	104,436	17157,638	191,204	SB2-5b	105,250	17563,518	191,632
SB1-6c	209,804	17264,856	188,754	SB2-5c	210,426	17519,203	187,257
SB1-7a	131,201	15091,686	173,076	SB2-6a	142,400	17684,820	194,195
SB1-7b	131,149	15123,583	175,470	SB2-6b	142,684	17815,156	195,926
SB1-7c	233,789	15032,950	171,061	SB2-6c	247,779	17620,713	190,044
SB1-8a	193,988	15107,115	170,399	SB2-7a	103,904	17550,066	192,392
SB1-8b	193,478	15270,368	173,887	SB2-7b	103,634	17444,803	190,245
SB1-8c	295,708	15310,816	173,476	SB2-7c	209,189	17511,235	188,227
SB1-9a	215,409	15953,997	180,802	SB2-8a	133,957	18574,821	200,571
SB1-9b	215,625	15921,981	176,886	SB2-8b	136,429	18499,589	202,052
SB1-9c	321,055	15935,518	178,688	SB2-8c	240,879	18409,857	195,732
SB1-10a	17,916	19737,260	205,839	TSB-1a	141,273	13688,115	158,452
SB1-10b	20,432	19800,766	207,188	TSB-1b	131,050	13436,797	155,529
SB1-10c	127,200	19721,171	207,530	TSB-1c	235,219	13374,301	153,750
SB1-11a	163,804	19037,222	206,799	TSB-2a	137,084	15156,217	169,804
SB1-11b	163,654	19114,950	209,247	TSB-2b	125,560	15061,367	175,592

Çizelge 6.17. (Devam) Protonlanmış 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) PM6 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

SB1-11c	270,283	19092,145	207,197	TSB-2c	231,718	15058,642	168,628
SB1-12a	170,873	20757,817	220,163	TSB-3a	49,755	14535,083	162,657
SB1-12b	172,089	20863,892	220,414	TSB-3b	41,632	14394,397	160,970
SB1-12c	278,379	20827,890	217,407	TSB-3c	144,176	14224,573	159,684
SB1-13a	109,305	19759,786	210,390	TSB-4a	139,683	13570,393	159,875
SB1-13b	109,152	19861,712	210,055	TSB-4b	130,050	13486,821	159,571
SB1-13c	213,038	19601,996	202,6752	TSB-4c	235,387	13317,462	153,815
SB1-14a	220,191	19140,346	208,540	TSB-5a	102,771	13381,241	154,128
SB1-14b	219,977	19090,860	205,531	TSB-5b	92,680	13196,990	154,466
SB1-14c	322,378	19097,682	205,777	TSB-5c	197,057	13172,724	153,175
SB1-15a	90,586	19416,892	208,797	TSB-6a	157,020	13004,878	153,925
SB1-15b	90,426	19143,141	204,094	TSB-6b	141,665	12889,972	153,266
SB1-15c	193,820	19169,584	202,591	TSB-6c	251,156	12798,727	148,592
SB1-16a	165,335	19141,059	208,273	TSB-7a	101,662	13443,273	155,622
SB1-16b	165,502	19053,099	205,680	TSB-7b	92,203	13293,490	157,739
SB1-16c	271,371	18958,628	202,033	TSB-7c	196,164	13182,581	152,277
SB1-17a	1,270	19467,700	201,419	TSB-8a	134,991	14040,623	160,877
SB1-17b	0,790	19285,017	201,604	TSB-8b	122,243	14236,131	166,482
SB1-17c	109,120	19346,326	200,508	TSB-8c	228,079	14130,513	160,762

Çizelge 6.18. Deprotonlanmış 4,4'-oxydianilin ve türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) PM6 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)
SB1-2d	-93,651	17478,010	189,415	SB1-17f	-279,722	18946,851	199,272
SB1-2e	-85,945	17514,557	191,136	SB2-1d	-56,145	17350,013	193,548
SB1-2f	-190,421	17108,993	191,755	SB2-2d	-62,187	19051,468	208,112
SB1-3d	-90,544	19454,489	209,887	SB2-3d	-146,638	18238,067	196,561
SB1-3e	-86,994	19300,994	208,142	SB2-3e	-143,984	18235,074	193,975
SB1-3f	-190,709	18989,984	208,365	SB2-4d	-56,957	17308,228	190,673
SB1-10d	-177,184	19248,401	206,590	SB2-5d	-94,496	17153,720	192,161
SB1-10e	-177,519	18633,065	191,644	SB2-6d	-56,616	17347,258	195,656
SB1-10f	-273,101	18672,555	200,767	SB2-7d	-94,848	17175,484	192,452
SB1-15d	-112,636	19082,087	207,467	SB2-8d	-64,330	18152,896	198,964
SB1-15e	-103,319	18646,106	196,315	TSB-3d	-144,794	14082,426	159,285
SB1-15f	-208,692	18645,276	202,507	TSB-3e	-143,610	14149,513	164,258
SB1-17d	-199,774	19386,909	203,028	TSB-3f	-228,789	13659,333	157,339
SB1-17e	-196,180	19109,114	202,349				

Çizelge 6.19. Nötr 4,4'-oxydianilin ve türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) PM6 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) ve değerleri

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	Bileşik	ΔH (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)
SB1-1N	96,919	16053,231	180,592	SB1-18N	78,062	17556,203	200,685
SB1-2N	2,618	17643,782	190,398	SB2-1N	40,885	17612,589	194,338
SB1-3N	10,018	19551,603	211,235	SB2-2N	35,087	19275,623	208,030
SB1-4N	76,318	17570,369	196,156	SB2-3N	-49,396	18510,406	195,339
SB1-5N	0,366	17117,502	194,387	SB2-4N	39,830	17559,967	193,558
SB1-6N	1,290	17177,017	192,350	SB2-5N	2,222	17317,316	194,775
SB1-7N	30,084	15056,166	178,418	SB2-6N	29,259	17039,187	183,705
SB1-8N	93,416	15192,694	176,712	SB2-7N	1,833	17404,616	193,183
SB1-9N	111,946	15948,689	179,183	SB2-8N	32,020	18502,570	198,719
SB1-10N	-80,537	19561,926	204,096	TSB-1N	38,760	13453,200	160,159
SB1-11N	59,976	19039,032	207,500	TSB-2N	32,808	15001,123	169,706
SB1-12N	66,287	20844,944	225,699	TSB-3N	-50,614	14410,647	161,926
SB1-13N	7,892	19797,619	212,396	TSB-4N	37,924	13387,571	157,846
SB1-14N	119,918	19101,750	207,875	TSB-5N	0,258	13215,558	156,173
SB1-15N	-11,991	19429,461	212,979	TSB-6N	38,042	13420,338	158,223
SB1-16N	60,845	19054,619	202,926	TSB-7N	-0,145	13184,599	155,703
SB1-17N	-97,201	18876,920	197,036	TSB-8N	29,947	14179,377	164,558

Çizelge 6.20. Protonlanmış 4,4'-oxydianilin ve türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) PM6 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)
SB1-1a	200,742	16137,845	181,833	SB1-18a	182,002	17533,824	192,421
SB1-1b	199,711	16065,146	182,263	SB1-18b	182,152	17640,765	196,737
SB1-1c	305,342	16165,617	180,743	SB1-18c	289,646	17628,994	190,684
SB1-2a	105,226	17898,795	190,338	SB2-1a	144,498	17828,231	198,701
SB1-2b	104,830	17685,772	192,334	SB2-1b	145,103	17743,385	191,231
SB1-2c	211,276	17731,002	187,902	SB2-1c	251,908	17589,587	188,072
SB1-3a	113,834	19610,435	208,280	SB2-2a	138,478	19262,834	203,219
SB1-3b	113,164	19629,456	212,037	SB2-2b	140,536	19504,376	210,127
SB1-3c	220,624	19687,823	211,743	SB2-2c	247,807	19242,614	203,038
SB1-4a	180,181	17517,058	194,404	SB2-3a	53,606	18668,803	198,539
SB1-4b	179,936	17571,094	196,212	SB2-3b	53,008	18498,472	196,421
SB1-4c	287,467	17573,011	189,469	SB2-3c	160,800	18442,376	192,902
SB1-5a	104,087	17187,363	193,319	SB2-4a	143,226	17706,389	194,293
SB1-5b	103,827	17184,820	194,008	SB2-4b	143,532	17681,370	193,718
SB1-5c	210,641	17194,553	186,743	SB2-4c	250,371	17630,957	189,306
SB1-6a	105,636	17143,292	189,306	SB2-5a	105,802	17521,817	194,085
SB1-6b	105,772	17157,872	191,435	SB2-5b	106,672	17558,956	192,184
SB1-6c	213,008	17262,238	188,744	SB2-5c	213,623	17513,814	187,229
SB1-7a	132,509	15090,042	173,161	SB2-6a	143,781	17679,068	194,135
SB1-7b	132,458	15118,768	174,460	SB2-6b	144,116	17810,997	196,661

Çizelge 6.20. (Devam) Protonlanmış 4,4'-oxydianilin ve türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) PM6 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

SB1-7c	236,850	15033,879	170,953	SB2-6c	250,978	17621,595	191,252
SB1-8a	195,348	15108,648	170,583	SB2-7a	105,312	17546,879	192,431
SB1-8b	194,794	15275,293	174,648	SB2-7b	105,034	17456,751	190,768
SB1-8c	298,758	15307,655	172,862	SB2-7c	212,386	17510,415	188,328
SB1-9a	216,997	15955,990	181,307	SB2-8a	135,327	18570,894	200,517
SB1-9b	217,209	15922,450	177,043	SB2-8b	137,773	18499,787	202,899
SB1-9c	324,589	15939,368	178,746	SB2-8c	244,021	18405,624	195,680
SB1-10a	19,289	19723,820	205,456	TSB-1a	142,516	13694,343	157,894
SB1-10b	21,946	19817,625	207,714	TSB-1b	132,681	13438,642	155,717
SB1-10c	130,478	19716,114	205,298	TSB-1c	238,696	13377,354	153,763
SB1-11a	165,141	19031,040	206,389	TSB-2a	138,608	15151,502	170,196
SB1-11b	165,028	19116,136	209,638	TSB-2b	127,223	15062,203	176,765
SB1-11c	273,460	19090,817	208,444	TSB-2c	235,380	15062,303	168,688
SB1-12a	172,507	20752,493	220,149	TSB-3a	51,081	14490,047	161,562
SB1-12b	173,817	20863,277	220,592	TSB-3b	43,451	14390,419	161,234
SB1-12c	282,017	20827,752	217,688	TSB-3c	147,662	14220,062	159,481
SB1-13a	110,647	19755,930	210,447	TSB-4a	140,980	13586,358	160,543
SB1-13b	110,453	19865,971	210,592	TSB-4b	131,722	13488,663	159,892
SB1-13c	215,979	19603,115	202,791	TSB-4c	238,906	13324,947	154,040
SB1-14a	221,502	19145,678	210,632	TSB-5a	104,057	13394,449	153,999
SB1-14b	221,245	19090,301	205,493	TSB-5b	94,319	13198,680	154,288
SB1-14c	325,307	19096,230	205,781	TSB-5c	200,581	13176,858	154,315
SB1-15a	92,082	19406,497	209,132	TSB-6a	141,646	13694,743	159,322
SB1-15b	91,817	19138,836	204,097	TSB-6b	132,187	13486,579	159,322
SB1-15c	196,847	19176,386	202,929	TSB-6c	238,452	13401,353	155,578
SB1-16a	166,575	19141,460	208,619	TSB-7a	102,943	13455,028	155,306
SB1-16b	166,780	19050,653	205,423	TSB-7b	93,869	13294,963	157,559
SB1-16c	274,402	18955,913	201,556	TSB-7c	199,690	13185,914	152,310
SB1-17a	3,267	19554,669	203,789	TSB-8a	136,191	14043,294	160,997
SB1-17b	2,391	19272,308	202,181	TSB-8b	123,869	14235,545	164,851
SB1-17c	109,120	19346,326	200,508	TSB-8c	231,528	14135,785	160,928

Çizelge 6.21. Deprotonlanmış 4,4'-oxydianilin ve türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) PM6 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)
SB1-2d	-92,056	17478,138	189,549	SB1-17f	-275,576	18938,984	200,369
SB1-2e	-84,481	17510,888	191,491	SB2-1d	-54,667	17344,256	193,898
SB1-2f	-187,142	17103,525	189,760	SB2-2d	-60,579	19049,710	208,456
SB1-3d	-89,017	19450,963	209,957	SB2-3d	-144,909	18231,126	196,165
SB1-3e	-85,444	19295,418	210,856	SB2-3e	-142,359	18238,365	193,871

Çizelge 6.21. (Devam) Deprotonlanmış 4,4'-oxydianilin ve türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) PM6 yöntemiyle hesaplanmış ΔH_f (oluşum ısı), ΔH (entalpi) ve ΔS (entropi) değerleri

SB1-3f	-187,552	18986,055	208,176	SB2-4d	-55,452	17299,751	190,662
SB1-10d	-175,597	19245,155	209,152	SB2-5d	-93,004	17145,269	191,928
SB1-10e	-176,181	18620,352	191,704	SB2-6d	-55,118	17344,554	195,706
SB1-10f	-269,869	18661,307	200,624	SB2-7d	-93,347	17164,533	191,691
SB1-15d	-111,150	19071,519	207,582	SB2-8d	-62,843	18152,663	199,186
SB1-15e	-101,966	18650,347	196,553	TSB-3d	-143,215	14077,708	159,212
SB1-15f	-208,692	18645,276	202,507	TSB-3e	-142,015	14139,149	162,728
SB1-17d	-198,116	19372,296	203,280	TSB-3f	-224,481	13657,620	157,482
SB1-17e	-194,474	19095,447	202,686				

7. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

7.1. Bazı 4,4'-Oxydianilin Ve Türevi Moleküllerinin Termodinamik Hesaplamaları

7.1.1. ΔG_f (Kinetik) Hesaplamaları

Bilgisayar hesaplamalarından elde edilen ΔH_f , ΔS değerlerinden ΔG_f aşağıdaki şekilde hesaplandı.

SB1-1 molekülü için AM1 yöntemiyle hesaplamalar sonucu elde edilen ΔH_f , ΔS değerleri kullanılarak ΔG_f hesapları aşağıdaki şekilde görüldüğü gibi örneklendirilmiştir.

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S \quad (7.1.)$$

$$\Delta G_f = 115.02(\text{kcal/mol}) - (298 \text{ K} \times 179.261 \text{ cal/molK} \times 10^{-3})$$

$$\Delta G_f = 61.600 \text{ kcal/mol}$$

Eşitlik (7.1.)'in kullanılması sonucu hesaplanan ΔG_f değerleri Çizelge 7.1-7.30'da verildi.

Eşitlik 7.1.kullanılarak elde edilen ΔG_f değerleri sulu çözeltilerde ($\epsilon=78,4$, $T=298\text{K}$) AM1 metodu için Çizelge 7.1-7.5 arasında, DMF çözeltilerinde ($\epsilon=36,71$, $T=298\text{K}$) ise Çizelge 7.6-7.10 arasında verilmiştir.

Eşitlik 7.1.kullanılarak elde edilen ΔG_f değerleri sulu çözeltilerde ($\epsilon=78,4$, $T=298\text{K}$) PM3 metodu için Çizelge 7.11-7.15 arasında, DMF çözeltilerinde ($\epsilon=36,71$, $T=298\text{K}$) ise Çizelge 7.16-7.20 arasında verilmiştir.

Eşitlik 7.1.kullanılarak elde edilen ΔG_f değerleri sulu çözeltilerde ($\epsilon=78,4$, $T=298\text{K}$) PM6 metodu için Çizelge 7.21-7.25 arasında, DMF çözeltilerinde ($\epsilon=36,71$, $T=298\text{K}$) ise Çizelge 7.26-7.30 arasında verilmiştir.

Çizelge 7.1. Bazı 4,4'-oxydianilin ve türevi moleküllerinin termodinamik özelliklerinin sulu çözeltilerde ($\epsilon=78,4$, $T=298\text{K}$) AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-1N	115,020	179,261	61,600	SB1-18N	103,886	192,252	46,595

Çizelge 7.1. (Devam) Bazı 4,4'-oxydianilin ve türevi moleküllerinin termodinamik özelliklerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

SB1-2N	24,982	189,760	-31,567	SB2-1N	64,579	194,071	6,746
SB1-3N	39,621	207,970	-22,354	SB2-2N	68,865	204,911	7,801
SB1-4N	100,858	190,816	43,995	SB2-3N	-23,716	193,121	-81,266
SB1-5N	24,096	185,765	-31,262	SB2-4N	62,962	191,693	5,837
SB1-6N	25,423	188,661	-30,798	SB2-5N	25,346	193,683	-32,372
SB1-7N	72,363	166,346	22,792	SB2-6N	49,267	188,176	-6,810
SB1-8N	139,695	167,048	89,915	SB2-7N	24,628	188,719	-31,610
SB1-9N	132,961	177,222	80,149	SB2-8N	59,253	200,609	-0,528
SB1-10N	-63,872	209,040	-126,166	TSB-1N	56,460	153,259	10,789
SB1-11N	91,445	208,438	29,331	TSB-2N	61,005	167,033	10,872
SB1-12N	110,770	220,287	45,124	TSB-3N	-30,673	154,684	-76,769
SB1-13N	34,609	205,831	-26,729	TSB-4N	55,192	152,338	9,795
SB1-14N	138,594	202,361	78,291	TSB-5N	17,374	152,906	-28,192
SB1-15N	15,755	201,966	-44,431	TSB-6N	55,375	156,075	8,865
SB1-16N	93,524	196,861	34,859	TSB-7N	16,773	149,542	-27,791
SB1-17N	-70,219	197,601	-129,104	TSB-8N	51,366	162,299	3,001

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.2. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) bir proton almış hallerinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-1a	217,994	174,955	165,857	SB1-18a	209,449	190,821	152,584
SB1-1b	217,811	178,055	164,751	SB1-18b	209,183	189,369	152,751
SB1-2a	127,698	191,350	70,676	SB2-1a	168,682	189,594	112,183
SB1-2b	127,472	187,214	71,682	SB2-1b	169,560	189,508	113,087
SB1-3a	141,709	204,273	80,836	SB2-2a	172,721	193,467	115,068
SB1-3b	145,116	204,086	84,298	SB2-2b	174,708	201,371	114,699
SB1-4a	205,034	191,121	148,08	SB2-3a	79,790	193,329	22,178
SB1-4b	204,786	189,708	148,253	SB2-3b	79,704	195,441	21,463
SB1-5a	128,049	183,690	73,309	SB2-4a	166,86	188,876	110,575
SB1-5b	127,762	185,386	72,517	SB2-4b	166,887	188,388	110,748
SB1-6a	129,914	184,413	74,959	SB2-5a	129,219	188,160	73,147
SB1-6b	129,941	184,285	75,024	SB2-5b	129,51	188,787	73,252
SB1-7a	174,301	168,255	124,161	SB2-6a	167,246	189,224	110,857
SB1-7b	174,382	171,605	123,244	SB2-6b	167,451	186,473	111,882
SB1-8a	240,057	162,687	191,576	SB2-7a	128,539	186,721	72,896
SB1-8b	239,888	172,566	188,463	SB2-7b	128,092	185,239	72,891
SB1-9a	237,980	175,351	185,725	SB2-8a	163,343	199,051	104,026
SB1-9b	238,026	173,667	186,273	SB2-8b	166,238	195,001	108,128
SB1-10a	36,738	199,752	-22,788	TSB-1a	161,638	151,439	116,509
SB1-10b	39,618	207,152	-22,113	TSB-1b	152,615	154,029	106,714

Çizelge 7.2. (Devam) 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) bir proton almış hallerinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

SB1-11a	197,983	203,888	137,224	TSB-2a	168,304	170,500	116,378
SB1-11b	197,624	201,248	137,652	TSB-2b	158,449	164,043	107,922
SB1-12a	218,831	213,412	155,234	TSB-3a	71,934	155,432	25,615
SB1-12b	218,062	216,228	153,626	TSB-3b	65,288	156,797	18,562
SB1-13a	136,996	205,106	75,874	TSB-4a	159,113	155,143	112,880
SB1-13b	136,788	201,326	76,793	TSB-4b	150,897	152,684	105,397
SB1-14a	239,703	199,359	180,294	TSB-5a	121,724	150,497	76,876
SB1-14b	239,527	198,909	180,252	TSB-5b	113,273	149,047	68,857
SB1-15a	117,788	201,207	57,828	TSB-6a	159,534	151,222	114,470
SB1-15b	120,346	201,533	60,289	TSB-6b	151,143	152,646	105,654
SB1-16a	200,791	202,627	140,408	TSB-7a	120,346	148,284	76,157
SB1-16b	200,978	199,902	141,407	TSB-7b	112,532	153,159	66,891
SB1-17a	33,446	199,225	-25,923	TSB-8a	158,312	160,004	110,631
SB1-17b	33,398	196,834	-25,258	TSB-8b	147,314	159,100	99,902

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.3. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) iki proton almış hallerinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-1c	322,417	173,758	270,637	SB1-18c	317,100	188,616	260,892
SB1-2c	233,933	185,487	178,658	SB2-1c	276,601	185,883	221,208
SB1-3c	252,214	204,035	191,412	SB2-2c	280,905	194,365	222,984
SB1-4c	311,199	181,852	257,007	SB2-3c	187,167	189,976	130,554
SB1-5c	233,532	177,642	180,595	SB2-4c	273,419	184,813	218,345
SB1-6c	236,325	181,444	182,255	SB2-5c	236,011	182,228	181,707
SB1-7c	277,443	169,912	226,809	SB2-6c	273,802	189,131	217,441
SB1-8c	340,658	165,999	291,190	SB2-7c	234,723	182,667	180,288
SB1-9c	345,152	167,137	295,345	SB2-8c	272,912	192,369	215,586
SB1-10c	142,691	202,487	82,350	TSB-1c	259,483	147,731	215,459
SB1-11c	307,047	202,904	246,582	TSB-2c	268,039	164,921	215,405
SB1-12c	326,569	215,140	262,457	TSB-3c	169,628	155,402	123,318
SB1-13c	241,848	195,981	183,446	TSB-4c	256,570	149,164	212,119
SB1-14c	342,097	195,947	283,705	TSB-5c	218,796	146,267	175,209
SB1-15c	224,087	198,621	164,898	TSB-6c	256,867	151,983	211,576
SB1-16c	309,903	195,914	251,521	TSB-7c	217,735	147,323	173,833
SB1-17c	139,432	191,663	82,316	TSB-8c	256,184	156,341	209,594

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.4. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) bir proton vermiş hallerinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-2d	-58,255	190,162	-114,923

Çizelge 7.4. (Devam) 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) bir proton vermiş hallerinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

SB1-2e	-51,295	185,489	-106,571
SB1-3d	-48,671	208,464	-110,793
SB1-3e	-44,199	200,669	-103,998
SB1-10d	-145,275	203,646	-205,962
SB1-10e	-139,710	190,669	-196,529
SB1-15d	-72,179	203,297	-132,761
SB1-15e	-62,411	194,966	-120,511
SB1-17d	-154,559	198,693	-213,769
SB1-17e	-150,897	197,603	-209,783
SB2-1d	-18,669	191,251	-75,662
SB2-2d	-15,562	203,143	-76,099
SB2-3d	-107,344	194,968	-165,444
SB2-3e	-102,04	191,017	-158,963
SB2-4d	-20,234	189,162	-76,604
SB2-5d	-58,147	185,160	-113,325
SB2-6d	-20,134	190,646	-76,947
SB2-7d	-58,505	185,199	-113,694
SB2-8d	-24,205	192,945	-81,703
TSB-3d	-109,677	154,757	25,615
TSB-3e	-108,989	155,878	18,562

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.5. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) iki proton vermiş hallerinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-2f	-141,921	183,786	-196,689
SB1-3f	-136,416	206,591	-197,980
SB1-10f	-226,864	196,292	-285,359
SB1-15f	-158,542	194,973	-216,644
SB1-17f	-220,474	195,770	-278,813
TSB-3f	-177,355	148,825	123,318

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.6. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF çözeltisinde ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-1N	115,392	179,883	61,787	SB1-18N	104,178	191,875	46,999
SB1-2N	25,374	190,196	-31,304	SB2-1N	64,909	194,307	7,006
SB1-3N	40,008	208,596	-22,154	SB2-2N	69,316	205,100	8,196

Çizelge 7.6. (Devam) Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF çözeltisinde ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

SB1-4N	101,155	191,276	44,155	SB2-3N	-23,250	193,317	-80,858
SB1-5N	24,397	186,032	-31,040	SB2-4N	63,293	191,624	6,189
SB1-6N	25,727	190,008	-30,895	SB2-5N	25,681	194,004	-32,132
SB1-7N	72,689	166,440	23,090	SB2-6N	49,605	187,561	-6,288
SB1-8N	140,044	167,201	90,218	SB2-7N	24,964	187,879	-31,024
SB1-9N	133,351	176,606	80,722	SB2-8N	59,583	202,054	-0,629
SB1-10N	-63,472	208,051	-125,471	TSB-1N	56,751	153,445	11,024
SB1-11N	91,725	207,965	29,751	TSB-2N	61,005	167,033	11,229
SB1-12N	111,329	219,798	45,829	TSB-3N	-30,238	154,877	-76,391
SB1-13N	34,979	206,706	-26,620	TSB-4N	55,478	152,284	10,097
SB1-14N	138,922	202,563	78,558	TSB-5N	17,666	152,967	-27,918
SB1-15N	16,119	201,677	-43,981	TSB-6N	55,665	157,780	8,647
SB1-16N	93,807	196,929	35,122	TSB-7N	17,064	149,667	-27,537
SB1-17N	-69,659	197,371	-128,475	TSB-8N	51,651	162,765	3,147

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.7. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) bir proton almış hallerinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-1a	219,256	174,995	167,108	SB1-18a	210,682	192,591	153,290
SB1-1b	219,079	178,461	165,898	SB1-18b	210,486	189,727	153,947
SB1-2a	129,127	191,107	72,177	SB2-1a	170,039	188,865	113,757
SB1-2b	128,799	187,586	72,898	SB2-1b	170,910	189,648	114,395
SB1-3a	142,958	204,064	82,147	SB2-2a	174,096	193,635	116,393
SB1-3b	146,447	204,593	85,478	SB2-2b	176,320	201,024	116,415
SB1-4a	206,353	190,854	149,479	SB2-3a	81,287	196,916	22,606
SB1-4b	206,086	189,892	149,498	SB2-3b	81,083	195,090	22,946
SB1-5a	129,377	183,656	74,648	SB2-4a	168,238	189,209	111,854
SB1-5b	129,074	185,447	73,811	SB2-4b	168,250	188,349	112,122
SB1-6a	131,231	184,349	76,295	SB2-5a	130,572	186,578	74,972
SB1-6b	131,292	184,221	76,394	SB2-5b	130,894	188,512	74,718
SB1-7a	175,612	168,343	125,446	SB2-6a	168,602	188,885	112,314
SB1-7b	175,692	171,295	124,646	SB2-6b	168,817	186,636	113,199
SB1-8a	241,379	163,462	192,667	SB2-7a	129,923	186,674	74,294
SB1-8b	241,164	172,469	189,768	SB2-7b	129,439	185,247	74,235
SB1-9a	239,461	175,349	187,207	SB2-8a	164,680	197,033	105,964
SB1-9b	239,506	173,767	187,723	SB2-8b	167,544	194,829	109,485
SB1-10a	38,032	199,399	-21,389	TSB-1a	162,875	151,538	117,717

Çizelge 7.7. (Devam) 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) bir proton almış hallerinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

SB1-10b	41,054	207,345	-20,735	TSB-1b	154,255	154,155	108,317
SB1-11a	199,253	203,485	138,614	TSB-2a	168,304	170,500	117,495
SB1-11b	198,964	201,486	138,921	TSB-2b	158,449	164,043	109,564
SB1-12a	220,415	213,257	156,864	TSB-3a	73,229	155,411	26,917
SB1-12b	219,766	216,351	155,293	TSB-3b	67,070	156,982	20,289
SB1-13a	138,309	205,507	77,068	TSB-4a	160,362	154,731	114,252
SB1-13b	138,064	201,260	78,089	TSB-4b	152,569	152,508	107,122
SB1-14a	241,001	199,856	181,444	TSB-5a	122,994	150,521	78,139
SB1-14b	240,782	198,540	181,617	TSB-5b	114,918	150,158	70,171
SB1-15a	119,025	204,086	58,207	TSB-6a	160,789	151,319	115,696
SB1-15b	121,686	202,498	61,342	TSB-6b	152,794	152,773	107,268
SB1-16a	202,012	202,782	141,583	TSB-7a	121,602	148,300	77,409
SB1-16b	202,223	199,998	142,624	TSB-7b	114,211	153,894	68,351
SB1-17a	34,978	198,417	-24,150	TSB-8a	159,507	159,913	111,853
SB1-17b	34,848	196,563	-23,728	TSB-8b	148,945	158,959	101,575

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.8. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) iki proton almış hallerinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-1c	325,393	173,763	273,612	SB1-18c	320,116	188,527	263,935
SB1-2c	237,016	186,281	181,504	SB2-1c	279,725	185,841	224,345
SB1-3c	255,443	204,325	194,554	SB2-2c	284,234	194,601	226,243
SB1-4c	314,305	182,095	260,041	SB2-3c	190,331	189,576	133,837
SB1-5c	236,654	177,885	183,644	SB2-4c	276,571	184,897	221,472
SB1-6c	239,462	181,455	185,388	SB2-5c	239,161	182,423	184,799
SB1-7c	280,499	170,482	229,695	SB2-6c	276,942	188,721	220,703
SB1-8c	343,634	166,321	294,070	SB2-7c	237,881	182,707	183,434
SB1-9c	348,526	166,624	298,872	SB2-8c	276,012	192,373	218,685
SB1-10c	145,661	203,845	84,915	TSB-1c	262,947	147,763	218,914
SB1-11c	310,135	201,027	250,229	TSB-2c	268,039	164,921	218,893
SB1-12c	330,173	214,503	266,251	TSB-3c	173,100	155,406	126,789
SB1-13c	244,823	194,918	186,738	TSB-4c	260,070	149,276	215,586
SB1-14c	345,002	198,896	285,731	TSB-5c	222,302	146,358	178,687
SB1-15c	227,060	198,716	167,843	TSB-6c	260,356	151,766	215,130
SB1-16c	312,891	196,164	254,434	TSB-7c	221,244	147,441	177,307
SB1-17c	142,637	191,706	85,509	TSB-8c	259,617	156,363	213,021

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.9. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) bir proton vermiş hallerinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-2d	-56,794	190,188	-113,470
SB1-2e	-49,929	185,845	-105,311
SB1-3d	-47,279	206,559	-108,834
SB1-3e	-42,794	200,836	-102,643
SB1-10d	-143,809	202,572	-204,176
SB1-10e	-138,436	190,006	-195,058
SB1-15d	-70,815	202,197	-131,070
SB1-15e	-61,133	195,669	-119,442
SB1-17d	-153,054	197,545	-211,923
SB1-17e	-149,375	200,143	-209,017
SB2-1d	-17,309	191,458	-74,364
SB2-2d	-14,074	202,807	-74,510
SB2-3d	-105,776	195,545	-164,049
SB2-3e	-100,583	190,944	-157,484
SB2-4d	-18,846	188,804	-75,110
SB2-5d	-56,763	185,508	-112,044
SB2-6d	-18,748	191,286	-75,751
SB2-7d	-57,115	185,043	-112,258
SB2-8d	-22,830	192,981	-80,338
TSB-3d	-108,225	154,843	26,917
TSB-3e	-107,521	156,008	20,289

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.10. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) iki proton vermiş hallerinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB-2f	-138,823	184,316	-193,749
SB-3f	-133,428	205,638	-194,708
SB-10f	-223,798	195,146	-281,952
SB-15f	-155,549	195,083	-213,684
SB-17f	-216,463	195,416	-274,697
TSB-3f	-173,216	150,217	126,789

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.11. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-1N	104,118	184,690	49,080	SB1-18N	93,276	195,335	35,066

Çizelge 7.11. (Devam) Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

SB1-2N	11,466	191,740	-45,672	SB2-1N	52,872	195,033	-5,248
SB1-3N	29,516	212,77	-33,889	SB2-2N	39,067	204,933	-22,003
SB1-4N	90,843	193,388	33,213	SB2-3N	-36,316	197,165	-95,071
SB1-5N	16,355	190,775	-40,496	SB2-4N	51,847	195,050	-6,278
SB1-6N	16,994	194,911	-41,089	SB2-5N	14,277	192,186	-42,994
SB1-7N	45,505	179,332	-7,936	SB2-6N	38,806	192,627	-18,597
SB1-8N	101,006	172,989	49,455	SB2-7N	13,978	187,966	-42,036
SB1-9N	115,036	182,805	60,560	SB2-8N	48,092	202,571	-12,274
SB1-10N	-76,940	207,952	-138,910	TSB-1N	50,967	157,068	4,161
SB1-11N	80,860	211,328	17,884	TSB-2N	36,989	170,095	-13,699
SB1-12N	65,686	216,361	1,210	TSB-3N	-37,895	160,467	-85,714
SB1-13N	24,789	210,118	-37,826	TSB-4N	49,839	157,382	2,939
SB1-14N	128,721	203,862	67,970	TSB-5N	12,872	155,145	-33,361
SB1-15N	1,757	208,801	-60,466	TSB-6N	50,009	158,024	2,918
SB1-16N	83,901	201,587	23,828	TSB-7N	12,582	153,304	-33,103
SB1-17N	-85,136	200,263	-144,814	TSB-8N	46,486	161,985	-1,785

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.12. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) bir proton almış hallerinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-1a	211,036	178,504	157,842	SB1-18a	200,984	193,791	143,234
SB1-1b	210,780	176,382	158,218	SB1-18b	201,737	193,425	144,096
SB1-2a	118,474	190,288	61,768	SB2-1a	159,644	189,684	103,118
SB1-2b	117,651	189,805	61,089	SB2-1b	161,000	189,393	104,561
SB1-3a	136,936	211,825	73,812	SB2-2a	146,414	198,007	87,408
SB1-3b	136,333	209,219	73,986	SB2-2b	147,432	203,979	86,646
SB1-4a	198,070	193,725	140,340	SB2-3a	70,071	195,280	11,878
SB1-4b	198,127	191,850	140,956	SB2-3b	69,135	195,534	10,866
SB1-5a	123,437	188,563	67,245	SB2-4a	158,066	188,513	101,889
SB1-5b	123,223	185,910	67,822	SB2-4b	159,070	189,888	102,483
SB1-6a	124,371	186,049	68,929	SB2-5a	121,263	185,823	65,888
SB1-6b	124,678	188,993	68,358	SB2-5b	121,653	186,333	66,126
SB1-7a	150,820	170,298	100,071	SB2-6a	161,021	177,191	108,218
SB1-7b	150,708	171,787	99,515	SB2-6b	161,319	180,841	107,428
SB1-8a	205,577	167,197	155,752	SB2-7a	120,788	186,784	65,126
SB1-8b	205,106	168,579	154,870	SB2-7b	120,805	185,499	65,526
SB1-9a	222,787	180,663	168,949	SB2-8a	154,593	196,051	96,17

Çizelge 7.12. (Devam) Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) bir proton almış hallerinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

SB1-9b	222,762	182,102	168,496	SB2-8b	157,798	198,898	98,527
SB1-10a	28,933	202,806	-31,503	TSB-1a	159,044	155,033	112,844
SB1-10b	29,276	206,613	-32,295	TSB-1b	142,605	154,888	96,449
SB1-11a	189,314	206,225	127,859	TSB-2a	145,778	166,613	96,127
SB1-11b	189,653	207,201	127,907	TSB-2b	129,947	159,833	82,317
SB1-12a	174,596	219,988	109,040	TSB-3a	67,711	157,757	20,700
SB1-12b	174,842	219,593	109,403	TSB-3b	53,551	160,056	5,854
SB1-13a	131,242	205,949	69,869	TSB-4a	156,884	155,500	110,545
SB1-13b	131,114	208,814	68,887	TSB-4b	141,534	153,681	95,737
SB1-14a	232,849	203,673	172,154	TSB-5a	120,031	152,326	74,638
SB1-14b	232,780	203,025	172,278	TSB-5b	104,686	150,762	59,759
SB1-15a	108,853	203,730	48,142	TSB-6a	157,020	153,925	111,150
SB1-15b	108,117	203,538	47,463	TSB-6b	141,665	153,266	95,992
SB1-16a	193,617	208,946	131,351	TSB-7a	119,441	150,031	74,732
SB1-16b	193,882	203,844	133,136	TSB-7b	104,264	149,953	59,578
SB1-17a	21,186	201,376	-38,824	TSB-8a	155,930	160,388	108,134
SB1-17b	24,810	197,398	-34,015	TSB-8b	137,967	157,052	91,165

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.13. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) iki proton almış hallerinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-1c	319,882	173,228	268,260	SB1-18c	312,680	188,323	256,560
SB1-2c	227,216	183,925	172,406	SB2-1c	270,907	186,626	215,293
SB1-3c	247,785	204,056	186,976	SB2-2c	256,714	195,665	198,406
SB1-4c	308,499	187,907	252,503	SB2-3c	180,022	190,826	123,156
SB1-5c	233,760	182,081	179,500	SB2-4c	269,593	186,42	214,040
SB1-6c	235,894	180,139	182,213	SB2-5c	232,733	185,249	177,529
SB1-7c	257,502	168,268	207,358	SB2-6c	270,896	174,973	218,754
SB1-8c	311,159	168,888	260,830	SB2-7c	231,107	183,779	176,341
SB1-9c	333,931	171,875	282,712	SB2-8c	267,196	191,164	210,229
SB1-10c	139,402	206,440	77,883	TSB-1c	254,051	147,114	210,211
SB1-11c	302,033	204,375	241,129	TSB-2c	239,773	164,186	190,845
SB1-12c	285,390	214,538	221,458	TSB-3c	163,005	156,248	116,443
SB1-13c	240,838	196,649	182,237	TSB-4c	251,166	152,275	205,788
SB1-14c	339,464	193,510	281,798	TSB-5c	213,943	145,439	170,602
SB1-15c	218,537	199,986	158,941	TSB-6c	251,156	148,592	206,876
SB1-16c	305,997	202,305	245,710	TSB-7c	213,705	147,407	169,778
SB1-17c	131,160	194,934	73,070	TSB-8c	250,592	155,186	204,347

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.14. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) bir proton vermiş hallerinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-2d	-73,635	190,279	-130,338
SB1-2e	-70,905	185,414	-126,158
SB1-3d	-58,746	210,777	-121,558
SB1-3e	-57,298	206,382	-118,800
SB1-10d	-158,911	206,756	-220,524
SB1-10e	-159,135	189,371	-215,567
SB1-15d	-87,029	199,792	-146,567
SB1-15e	-80,697	196,129	-139,143
SB1-17d	-174,485	195,300	-232,684
SB1-17e	-169,685	199,266	-229,066
SB2-1d	-32,899	193,126	-90,451
SB2-2d	-47,950	204,251	-108,817
SB2-3d	-122,464	193,120	-180,014
SB2-3e	-117,934	193,579	-175,621
SB2-4d	-34,710	190,921	-91,605
SB2-5d	-71,378	188,522	-127,557
SB2-6d	-34,103	196,186	-92,566
SB2-7d	-71,898	184,638	-126,920
SB2-8d	-37,830	196,269	-96,318
TSB-3d	-119,733	160,592	-167,590
TSB-3e	-119,836	161,631	-168,002

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.15. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) iki proton vermiş hallerinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-2f	-159,757	186,103	-215,216
SB1-3f	-148,790	204,591	-209,758
SB1-10f	-244,038	206,539	-305,587
SB1-15f	-172,980	200,934	-232,858
SB1-17f	-239,340	200,765	-299,168
TSB-3f	-190,099	159,683	-237,685

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.16. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-1N	104,118	184,690	49,097	SB1-18N	93,276	195,335	35,312

Çizelge 7.16. (Devam) Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

SB1-2N	11,466	191,740	-45,589	SB2-1N	52,872	195,033	-5,289
SB1-3N	29,516	212,770	-33,575	SB2-2N	39,067	204,933	-21,523
SB1-4N	90,843	193,388	33,388	SB2-3N	-36,316	197,165	-94,787
SB1-5N	16,355	190,775	-40,206	SB2-4N	51,847	195,05	-6,151
SB1-6N	16,994	194,911	-40,156	SB2-5N	14,277	192,186	-42,886
SB1-7N	45,505	179,332	-7,605	SB2-6N	38,806	192,627	-18,442
SB1-8N	101,318	172,719	49,848	SB2-7N	13,978	187,966	-41,808
SB1-9N	115,036	182,805	60,818	SB2-8N	48,092	202,571	-11,788
SB1-10N	-76,940	207,952	-138,804	TSB-1N	50,967	157,068	4,684
SB1-11N	80,860	211,328	18,303	TSB-2N	36,989	170,095	-13,286
SB1-12N	65,686	216,361	1,528	TSB-3N	-37,895	160,467	-85,506
SB1-13N	24,789	210,118	-37,948	TSB-4N	49,839	157,382	3,112
SB1-14N	128,721	203,862	68,078	TSB-5N	12,872	155,145	-33,449
SB1-15N	1,757	208,801	-60,196	TSB-6N	50,009	158,024	3,219
SB1-16N	83,901	201,587	23,523	TSB-7N	12,582	153,304	-32,889
SB1-17N	-85,136	200,263	-144,309	TSB-8N	46,486	161,985	-1,785

Çizelge 7.17. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) bir proton almış hallerinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-1a	212,260	178,161	159,168	SB1-18a	202,211	194,383	144,285
SB1-1b	212,008	176,648	159,367	SB1-18b	202,980	193,738	145,246
SB1-2a	119,850	189,983	63,235	SB2-1a	160,967	189,984	104,352
SB1-2b	118,920	189,387	62,483	SB2-1b	162,281	189,48	105,816
SB1-3a	138,329	212,157	75,106	SB2-2a	147,813	198,161	88,761
SB1-3b	137,672	210,038	75,081	SB2-2b	149,028	203,925	88,258
SB1-4a	199,331	193,821	141,572	SB2-3a	71,508	193,839	13,744
SB1-4b	199,365	192,161	142,101	SB2-3b	70,459	194,944	12,366
SB1-5a	124,754	188,546	68,567	SB2-4a	159,394	188,678	103,168
SB1-5b	124,526	185,905	69,126	SB2-4b	160,361	189,962	103,752
SB1-6a	125,670	186,019	70,236	SB2-5a	122,574	185,768	67,215
SB1-6b	125,960	191,036	69,031	SB2-5b	123,007	186,546	67,416
SB1-7a	152,077	170,207	101,355	SB2-6a	159,625	188,673	103,401
SB1-7b	151,965	171,608	100,826	SB2-6b	159,963	188,472	103,798
SB1-8a	204,906	168,414	154,719	SB2-7a	122,128	186,992	66,404
SB1-8b	202,758	170,485	151,953	SB2-7b	122,137	185,848	66,754
SB1-9a	224,236	180,713	170,384	SB2-8a	155,887	195,995	97,480
SB1-9b	224,213	182,189	169,921	SB2-8b	159,036	199,351	99,629
SB1-10a	30,219	203,345	-30,378	TSB-1a	160,226	154,817	114,09
SB1-10b	30,636	207,587	-31,225	TSB-1b	144,162	154,882	98,007
SB1-11a	190,548	206,468	129,021	TSB-2a	147,292	167,566	97,357
SB1-11b	190,921	207,693	129,029	TSB-2b	131,587	159,953	83,921
SB1-12a	176,273	219,410	110,889	TSB-3a	68,951	158,121	21,831

Çizelge 7.17. (Devam) 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) bir proton almış hallerinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

SB1-12b	176,588	219,552	111,161	TSB-3b	55,242	159,861	7,604
SB1-13a	132,495	205,668	71,206	TSB-4a	158,085	155,375	111,783
SB1-13b	132,332	209,186	69,994	TSB-4b	143,119	154,065	97,208
SB1-14a	234,094	204,219	173,237	TSB-5a	122,574	185,768	75,965
SB1-14b	233,985	203,383	173,377	TSB-5b	123,007	186,546	61,190
SB1-15a	110,225	203,494	49,584	TSB-6a	159,625	188,673	112,382
SB1-15b	109,404	203,677	48,708	TSB-6b	159,963	188,472	97,525
SB1-16a	194,782	209,858	132,244	TSB-7a	122,128	186,992	75,984
SB1-16b	195,074	203,628	134,393	TSB-7b	122,137	185,848	61,153
SB1-17a	22,650	201,370	-37,358	TSB-8a	155,887	195,995	109,268
SB1-17b	26,114	197,402	-32,712	TSB-8b	159,036	199,351	92,653

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.18. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) iki proton almış hallerinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-1c	322,889	173,406	271,214	SB1-18c	315,717	188,766	259,465
SB1-2c	230,320	183,987	175,492	SB2-1c	274,037	186,755	218,384
SB1-3c	250,974	203,990	190,185	SB2-2c	260,082	195,927	201,696
SB1-4c	311,581	188,586	255,382	SB2-3c	183,185	190,821	126,320
SB1-5c	236,935	181,210	182,935	SB2-4c	272,708	186,412	217,157
SB1-6c	239,057	180,219	185,352	SB2-5c	235,881	185,250	180,676
SB1-7c	260,558	168,337	210,393	SB2-6c	271,693	184,469	216,721
SB1-8c	314,222	168,622	263,973	SB2-7c	234,291	184,279	179,376
SB1-9c	337,324	172,545	285,906	SB2-8c	270,307	191,326	213,292
SB1-10c	142,596	202,137	82,359	TSB-1c	257,489	147,173	213,631
SB1-11c	305,103	204,652	244,117	TSB-2c	243,426	164,311	194,461
SB1-12c	289,083	214,389	225,195	TSB-3c	166,452	156,590	119,788
SB1-13c	243,814	197,198	185,049	TSB-4c	254,614	152,705	209,108
SB1-14c	342,405	193,737	284,672	TSB-5c	235,881	185,250	174,070
SB1-15c	221,526	200,102	161,896	TSB-6c	271,693	184,469	210,323
SB1-16c	309,001	202,437	248,675	TSB-7c	234,291	184,279	173,291
SB1-17c	134,354	194,886	76,278	TSB-8c	270,307	191,326	207,678

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.19. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) bir proton vermiş hallerinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-2d	-72,223	190,442	-128,975
SB1-2e	-69,532	185,088	-124,688

Çizelge 7.19. (Devam) 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) bir proton vermiş hallerinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

SB1-3d	-57,397	211,190	-120,332
SB1-3e	-55,944	205,805	-117,274
SB1-10d	-157,494	207,358	-219,287
SB1-10e	-157,937	189,594	-214,436
SB1-15d	-85,697	199,517	-145,153
SB1-15e	-79,441	195,682	-137,754
SB1-17d	-173,041	195,311	-231,244
SB1-17e	-168,214	199,265	-227,595
SB2-1d	-31,575	193,993	-89,385
SB2-2d	-46,414	204,495	-107,353
SB2-3d	-120,954	193,114	-178,502
SB2-3e	-116,512	194,022	-174,331
SB2-4d	-33,360	191,567	-90,447
SB2-5d	-70,039	188,718	-126,277
SB2-6d	-32,762	195,335	-90,972
SB2-7d	-70,542	184,745	-125,596
SB2-8d	-36,507	196,635	-95,104
TSB-3d	-118,352	161,023	-166,337
TSB-3e	-118,447	161,423	-166,551

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.20. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) iki proton vermiş hallerinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-2f	-156,694	186,525	-212,278
SB1-3f	-145,822	204,665	-206,812
SB1-10f	-240,973	205,881	-302,325
SB1-15f	-172,980	200,934	-232,858
SB1-17f	-210,667	193,409	-268,303
TSB-3f	-186,065	159,693	-233,654

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.21. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-1N	96,571	182,312	42,242	SB1-18N	77,689	201,878	17,529
SB1-2N	2,112	190,067	-54,528	SB2-1N	40,458	194,266	-17,433
SB1-3N	9,514	211,035	-53,375	SB2-2N	34,543	207,782	-27,376
SB1-4N	75,955	195,939	17,565	SB2-3N	-49,991	194,914	-108,075

Çizelge 7.21. (Devam) Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

SB1-5N	0,009	194,924	-58,078	SB2-4N	39,415	193,607	-18,280
SB1-6N	0,939	192,363	-56,385	SB2-5N	1,810	193,413	-55,827
SB1-7N	29,713	177,698	-23,241	SB2-6N	28,801	193,001	-28,713
SB1-8N	93,007	176,512	40,407	SB2-7N	1,420	193,108	-56,126
SB1-9N	111,434	179,021	58,086	SB2-8N	31,599	198,692	-27,611
SB1-10N	-81,136	203,748	-141,853	TSB-1N	38,397	160,950	-9,566
SB1-11N	59,615	207,215	-2,135	TSB-2N	32,318	169,611	-18,226
SB1-12N	65,642	225,114	-1,442	TSB-3N	-51,158	161,924	-99,411
SB1-13N	7,410	212,404	-55,886	TSB-4N	37,583	157,657	-9,399
SB1-14N	119,507	207,608	57,640	TSB-5N	-0,082	156,327	-46,668
SB1-15N	-12,462	210,405	-75,163	TSB-6N	50,009	158,024	2,918
SB1-16N	60,481	202,983	-0,008	TSB-7N	-0,489	155,502	-46,829
SB1-17N	-97,784	197,269	-156,570	TSB-8N	29,947	164,558	-19,091

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.22. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) bir proton almış halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-1a	199,464	181,885	145,262	SB1-18a	180,706	192,293	123,403
SB1-1b	198,422	183,337	143,788	SB1-18b	180,871	196,217	122,398
SB1-2a	103,749	190,209	47,067	SB2-1a	143,104	197,488	84,253
SB1-2b	103,469	192,677	46,051	SB2-1b	143,725	191,154	86,761
SB1-3a	112,315	208,943	50,050	SB2-2a	137,054	203,294	76,472
SB1-3b	111,732	211,724	48,638	SB2-2b	138,888	209,969	76,317
SB1-4a	178,806	194,233	120,925	SB2-3a	52,042	198,224	-7,029
SB1-4b	178,576	196,416	120,044	SB2-3b	51,572	199,322	-7,826
SB1-5a	102,727	193,251	45,138	SB2-4a	141,813	196,340	83,304
SB1-5b	102,485	192,544	45,107	SB2-4b	142,098	194,139	84,244
SB1-6a	104,292	189,375	47,858	SB2-5a	104,418	194,807	46,365
SB1-6b	104,436	191,204	47,457	SB2-5b	105,250	191,632	48,144
SB1-7a	131,201	173,076	79,624	SB2-6a	142,400	194,195	84,530
SB1-7b	131,149	175,470	78,859	SB2-6b	142,684	195,926	84,298
SB1-8a	193,988	170,399	143,209	SB2-7a	103,904	192,392	46,571
SB1-8b	193,478	173,887	141,660	SB2-7b	103,634	190,245	46,941
SB1-9a	215,409	180,802	161,530	SB2-8a	133,957	200,571	74,187
SB1-9b	215,625	176,886	162,913	SB2-8b	136,429	202,052	76,218
SB1-10a	17,916	205,839	-43,424	TSB-1a	141,273	158,452	94,054
SB1-10b	20,432	207,188	-41,310	TSB-1b	131,050	155,529	84,702
SB1-11a	163,804	206,799	102,178	TSB-2a	137,084	169,804	86,482
SB1-11b	163,654	209,247	101,298	TSB-2b	125,560	175,592	73,234
SB1-12a	170,873	220,163	105,264	TSB-3a	49,755	162,657	1,283
SB1-12b	172,089	220,414	106,406	TSB-3b	41,632	160,970	-6,337

Çizelge 7.22. (Devam) 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) bir proton almış halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

SB1-13a	109,305	210,390	46,609	TSB-4a	139,683	159,875	92,040
SB1-13b	109,152	210,055	46,556	TSB-4b	130,050	159,571	82,498
SB1-14a	220,191	208,540	158,046	TSB-5a	102,771	154,128	56,841
SB1-14b	219,977	205,531	158,729	TSB-5b	92,680	154,466	46,649
SB1-15a	90,586	208,797	28,364	TSB-6a	157,020	153,925	111,150
SB1-15b	90,426	204,094	29,606	TSB-6b	141,665	153,266	95,992
SB1-16a	165,335	208,273	103,270	TSB-7a	101,662	155,622	55,287
SB1-16b	165,502	205,68	104,209	TSB-7b	92,203	157,739	45,197
SB1-17a	1,270	201,419	-58,753	TSB-8a	134,991	160,877	87,050
SB1-17b	0,790	201,604	-59,288	TSB-8b	122,243	166,482	72,632

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.23. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) iki proton almış halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-1c	302,312	179,922	248,695	SB1-18c	286,571	190,579	229,778
SB1-2c	208,156	187,905	152,160	SB2-1c	248,758	187,814	192,789
SB1-3c	217,353	211,531	154,317	SB2-2c	244,453	202,893	183,991
SB1-4c	284,274	189,451	227,818	SB2-3c	157,598	192,528	100,225
SB1-5c	207,462	187,294	151,648	SB2-4c	247,153	189,427	190,704
SB1-6c	209,804	188,754	153,555	SB2-5c	210,426	187,257	154,624
SB1-7c	233,789	171,061	182,813	SB2-6c	247,779	190,044	191,146
SB1-8c	295,708	173,476	244,012	SB2-7c	209,189	188,227	153,097
SB1-9c	321,055	178,688	267,806	SB2-8c	240,879	195,732	182,551
SB1-10c	127,200	207,530	65,356	TSB-1c	235,219	153,750	189,402
SB1-11c	270,283	207,197	208,538	TSB-2c	231,718	168,628	181,467
SB1-12c	278,379	217,407	213,592	TSB-3c	144,176	159,684	96,590
SB1-13c	213,038	202,6752	152,641	TSB-4c	235,387	153,815	189,55
SB1-14c	322,378	205,777	261,056	TSB-5c	197,057	153,175	151,411
SB1-15c	193,82	202,591	133,448	TSB-6c	251,156	148,592	206,876
SB1-16c	271,371	202,033	211,165	TSB-7c	196,164	152,277	150,786
SB1-17c	109,12	200,508	49,369	TSB-8c	228,079	160,762	180,172

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.24. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) bir proton vermiş halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-2d	-93,651	189,415	-150,097
SB1-2e	-85,945	191,136	-142,903
SB1-3d	-90,544	209,887	-153,090
SB1-3e	-86,994	208,142	-149,020

Çizelge 7.24. (Devam) 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) bir proton vermiş halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

SB1-10d	-177,184	206,590	-238,748
SB1-10e	-177,519	191,644	-234,629
SB1-15d	-112,636	207,467	-174,461
SB1-15e	-103,319	196,315	-161,821
SB1-17d	-199,774	203,028	-260,276
SB1-17e	-196,180	202,349	-256,480
SB2-1d	-56,145	193,548	-113,822
SB2-2d	-62,187	208,112	-124,204
SB2-3d	-146,638	196,561	-205,213
SB2-3e	-143,984	193,975	-201,789
SB2-4d	-56,957	190,673	-113,778
SB2-5d	-94,496	192,161	-151,760
SB2-6d	-56,616	195,656	-114,921
SB2-7d	-94,848	192,452	-152,199
SB2-8d	-64,330	198,964	-123,621
TSB-3d	-144,794	159,285	-192,261
TSB-3e	-143,610	164,258	-192,559

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.25. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) iki proton vermiş halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-2f	-190,421	191,755	-247,564
SB1-3f	-190,709	208,365	-252,802
SB1-10f	-273,101	200,767	-332,929
SB1-15f	-208,692	202,507	-269,039
SB1-17f	-279,722	199,272	-339,105
TSB-3f	-228,789	157,339	-275,676

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.26. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-1N	96,919	180,592	43,102	SB1-18N	78,062	200,685	18,258
SB1-2N	2,618	190,398	-54,121	SB2-1N	40,885	194,338	-17,028
SB1-3N	10,018	211,235	-52,930	SB2-2N	35,087	208,030	-26,906
SB1-4N	76,318	196,156	17,864	SB2-3N	-49,396	195,339	-107,607
SB1-5N	0,366	194,387	-57,561	SB2-4N	39,830	193,558	-17,850
SB1-6N	1,290	192,350	-56,030	SB2-5N	2,222	194,775	-55,821
SB1-7N	30,084	178,418	-23,085	SB2-6N	29,259	183,705	-25,485

Çizelge 7.26. (Devam) Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

SB1-8N	93,416	176,712	40,756	SB2-7N	1,833	193,183	-55,735
SB1-9N	111,946	179,183	58,549	SB2-8N	32,020	198,719	-27,198
SB1-10N	-80,537	204,096	-141,357	TSB-1N	38,760	160,159	-8,967
SB1-11N	59,976	207,500	-1,859	TSB-2N	32,808	169,706	-17,764
SB1-12N	66,287	225,699	-0,971	TSB-3N	-50,614	161,926	-98,868
SB1-13N	7,892	212,396	-55,402	TSB-4N	37,924	157,846	-9,114
SB1-14N	119,918	207,875	57,971	TSB-5N	0,258	156,173	-46,281
SB1-15N	-11,991	212,979	-75,459	TSB-6N	38,042	158,223	-9,109
SB1-16N	60,845	202,926	0,373	TSB-7N	-0,145	155,703	-46,544
SB1-17N	-97,201	197,036	-155,918	TSB-8N	29,947	164,558	-19,091

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.27. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) bir proton almış halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-1a	200,742	181,833	146,556	SB1-18a	182,002	192,421	124,660
SB1-1b	199,711	182,263	145,397	SB1-18b	182,152	196,737	123,524
SB1-2a	105,226	190,338	48,505	SB2-1a	144,498	198,701	85,285
SB1-2b	104,830	192,334	47,514	SB2-1b	145,103	191,231	88,116
SB1-3a	113,834	208,280	51,767	SB2-2a	138,478	203,219	77,919
SB1-3b	113,164	212,037	49,977	SB2-2b	140,536	210,127	77,918
SB1-4a	180,181	194,404	122,249	SB2-3a	53,606	198,539	-5,559
SB1-4b	179,936	196,212	121,465	SB2-3b	53,008	196,421	-5,525
SB1-5a	104,087	193,319	46,478	SB2-4a	143,226	194,293	85,327
SB1-5b	103,827	194,008	46,013	SB2-4b	143,532	193,718	85,804
SB1-6a	105,636	189,306	49,223	SB2-5a	105,802	194,085	47,965
SB1-6b	105,772	191,435	48,724	SB2-5b	106,672	192,184	49,401
SB1-7a	132,509	173,161	80,907	SB2-6a	143,781	194,135	85,929
SB1-7b	132,458	174,460	80,469	SB2-6b	144,116	196,661	85,511
SB1-8a	195,348	170,583	144,514	SB2-7a	105,312	192,431	47,968
SB1-8b	194,794	174,648	142,749	SB2-7b	105,034	190,768	48,185
SB1-9a	216,997	181,307	162,968	SB2-8a	135,327	200,517	75,573
SB1-9b	217,209	177,043	164,45	SB2-8b	137,773	202,899	77,309
SB1-10a	19,289	205,456	-41,937	TSB-1a	142,516	157,894	95,464
SB1-10b	21,946	207,714	-39,953	TSB-1b	132,681	155,717	86,277
SB1-11a	165,141	206,389	103,637	TSB-2a	138,608	170,196	87,890
SB1-11b	165,028	209,638	102,556	TSB-2b	127,223	176,765	74,547
SB1-12a	172,507	220,149	106,903	TSB-3a	51,081	161,562	2,935
SB1-12b	173,817	220,592	108,081	TSB-3b	43,451	161,234	-4,597
SB1-13a	110,647	210,447	47,934	TSB-4a	140,98	160,543	93,138
SB1-13b	110,453	210,592	47,697	TSB-4b	131,722	159,892	84,074
SB1-14a	221,502	210,632	158,734	TSB-5a	104,057	153,999	58,165
SB1-14b	221,245	205,493	160,008	TSB-5b	94,319	154,288	48,341

Çizelge 7.27. (Devam) 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) bir proton almış halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

SB1-15a	92,082	209,132	29,761	TSB-6a	141,646	159,322	94,168
SB1-15b	91,817	204,097	30,996	TSB-6b	132,187	159,322	84,709
SB1-16a	166,575	208,619	104,407	TSB-7a	102,943	155,306	56,662
SB1-16b	166,78	205,423	105,564	TSB-7b	93,869	157,559	46,916
SB1-17a	3,267	203,789	-57,462	TSB-8a	136,191	160,997	88,214
SB1-17b	2,391	202,181	-57,859	TSB-8b	123,869	164,851	74,743

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.28. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) iki proton almış halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-1c	305,342	180,743	251,481	SB1-18c	289,646	190,684	232,822
SB1-2c	211,276	187,902	155,281	SB2-1c	251,908	188,072	195,863
SB1-3c	220,624	211,743	157,525	SB2-2c	247,807	203,038	187,302
SB1-4c	287,467	189,469	231,005	SB2-3c	160,800	192,902	103,315
SB1-5c	210,641	186,743	154,992	SB2-4c	250,371	189,306	193,958
SB1-6c	213,008	188,744	156,762	SB2-5c	213,623	187,229	157,829
SB1-7c	236,850	170,953	185,906	SB2-6c	250,978	191,252	193,985
SB1-8c	298,758	172,862	247,245	SB2-7c	212,386	188,328	156,264
SB1-9c	324,589	178,746	271,323	SB2-8c	244,021	195,680	185,708
SB1-10c	130,478	205,298	69,299	TSB-1c	238,696	153,763	192,875
SB1-11c	273,460	208,444	211,344	TSB-2c	235,380	168,688	185,111
SB1-12c	282,017	217,688	217,146	TSB-3c	147,662	159,481	100,137
SB1-13c	215,979	202,791	155,547	TSB-4c	238,906	154,040	193,002
SB1-14c	325,307	205,781	263,984	TSB-5c	200,581	154,315	154,595
SB1-15c	196,847	202,929	136,374	TSB-6c	238,452	155,578	192,090
SB1-16c	274,402	201,556	214,338	TSB-7c	199,690	152,310	154,302
SB1-17c	109,120	200,508	49,369	TSB-8c	231,528	160,928	183,572

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.29. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) bir proton vermiş halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-2d	-92,056	189,549	-148,542
SB1-2e	-84,481	191,491	-141,545
SB1-3d	-89,017	209,957	-151,584
SB1-3e	-85,444	210,856	-148,279
SB1-10d	-175,597	209,152	-237,924
SB1-10e	-176,181	191,704	-233,309

Çizelge 7.29. (Devam) 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) bir proton vermiş halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

SB1-15d	-111,150	207,582	-173,009
SB1-15e	-101,966	196,553	-160,539
SB1-17d	-198,116	203,280	-258,694
SB1-17e	-194,474	202,686	-254,874
SB2-1d	-54,667	193,898	-112,449
SB2-2d	-60,579	208,456	-122,699
SB2-3d	-144,909	196,165	-203,366
SB2-3e	-142,359	193,871	-200,133
SB2-4d	-55,452	190,662	-112,269
SB2-5d	-93,004	191,928	-150,199
SB2-6d	-55,118	195,706	-113,438
SB2-7d	-93,347	191,691	-150,471
SB2-8d	-62,843	199,186	-122,201
TSB-3d	-143,215	159,212	-190,660
TSB-3e	-142,015	162,728	-190,508

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

Çizelge 7.30. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) iki proton vermiş halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG_f

Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG_f (kcal/mol)
SB1-2f	-187,142	189,760	-243,690
SB1-3f	-187,552	208,176	-249,588
SB1-10f	-269,869	200,624	-329,655
SB1-15f	-208,692	202,507	-269,039
SB1-17f	-275,576	200,369	-335,286
TSB-3f	-224,481	157,482	-271,411

$$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$$

7.1.2. ΔG (Termodinamik) Hesaplamaları

Bilgisayar hesaplamaları sonucu elde edilen ΔH ve ΔS değerlerinden yararlanılarak Eşitlik (7.2.) yardımıyla ΔG aşağıdaki şekilde hesaplanmıştır.

SB1-1 molekülü için AM1 yöntemiyle hesaplamalar sonucu elde edilen ΔH , ΔS değerleri kullanılarak ΔG hesapları aşağıdaki şekilde görüldüğü gibi örneklendirilmiştir.

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S \quad (7.2)$$

$$\Delta G = 15210.285 \text{ (cal/mol)} - (298\text{K} \times 179.261 \text{ cal/mol})$$

$$\Delta G = -38209.493 \text{ cal/mol}$$

$$\Delta G = -38,210 \text{ kcal/mol}$$

Eşitlik 7.2. kullanılarak elde edilen bu değerler Çizelge 7.31-7.60 arasında verilmiştir.

Eşitlik 7.2. kullanılarak elde edilen ΔG değerleri sulu çözeltilerde ($\epsilon=78,4$, $T=298\text{K}$) AM1 metodu için Çizelge 7.31-7.35 arasında, DMF çözeltilerinde ($\epsilon=36,71$, $T=298\text{K}$) ise Çizelge 7.36-7.40 arasında verilmiştir.

Eşitlik 7.2. kullanılarak elde edilen ΔG değerleri sulu çözeltilerde ($\epsilon=78,4$, $T=298\text{K}$) PM3 metodu için Çizelge 7.41-7.45 arasında, DMF çözeltilerinde ($\epsilon=36,71$, $T=298\text{K}$) ise Çizelge 7.46-7.50 arasında verilmiştir.

Eşitlik 7.2. kullanılarak elde edilen ΔG değerleri sulu çözeltilerde ($\epsilon=78,4$, $T=298\text{K}$) PM6 metodu için Çizelge 7.51-7.55 arasında, DMF çözeltilerinde ($\epsilon=36,71$, $T=298\text{K}$) ise Çizelge 7.56-7.60 arasında verilmiştir.

Çizelge 7.31. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltilerde ($\epsilon=78,4$, $T=298\text{K}$) AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)
SB1-1N	15210,285	179,261	-38,210	SB1-18N	16662,273	192,252	-40,629
SB1-2N	16997,254	189,760	-39,551	SB2-1N	16809,688	194,071	-41,024
SB1-3N	18673,671	207,970	-43,302	SB2-2N	18341,472	204,911	-42,722
SB1-4N	16613,777	190,816	-40,249	SB2-3N	17537,339	193,121	-40,013
SB1-5N	16126,629	185,765	-39,231	SB2-4N	16832,851	191,693	-40,292
SB1-6N	16174,069	188,661	-40,047	SB2-5N	16657,744	193,683	-41,060
SB1-7N	14161,592	166,346	-35,409	SB2-6N	16456,077	188,176	-39,620
SB1-8N	14345,281	167,048	-35,435	SB2-7N	16426,896	188,719	-39,811
SB1-9N	15060,520	177,222	-37,752	SB2-8N	17585,089	200,609	-42,196
SB1-10N	18786,113	209,040	-43,508	TSB-1N	12640,144	153,259	-33,031
SB1-11N	18178,876	208,438	-43,936	TSB-2N	14229,552	167,033	-35,498
SB1-12N	19808,881	220,287	-45,837	TSB-3N	13480,549	154,684	-32,615
SB1-13N	18552,587	205,831	-42,785	TSB-4N	12633,962	152,338	-32,763
SB1-14N	18038,115	202,361	-42,265	TSB-5N	12412,960	152,906	-33,153
SB1-15N	18297,811	201,966	-41,888	TSB-6N	12673,840	156,075	-33,837
SB1-16N	18044,583	196,861	-40,620	TSB-7N	12359,049	149,542	-32,205
SB1-17N	18400,403	197,601	-40,485	TSB-8N	13422,242	162,299	-34,943

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.32. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) bir proton almış haliyle AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)
SB1-1a	15178,848	174,955	-36,958	SB1-18a	16688,741	190,821	-40,176
SB1-1b	15206,340	178,055	-37,854	SB1-18b	16719,222	189,369	-39,713
SB1-2a	16766,160	191,350	-40,256	SB2-1a	16822,869	189,594	-39,676
SB1-2b	16855,564	187,214	-38,934	SB2-1b	16832,720	189,508	-39,641
SB1-3a	18581,620	204,273	-42,292	SB2-2a	17982,777	193,467	-39,670
SB1-3b	18417,385	204,086	-42,400	SB2-2b	18369,838	201,371	-41,639
SB1-4a	16727,300	191,121	-40,227	SB2-3a	17589,775	193,329	-40,022
SB1-4b	16716,715	189,708	-39,816	SB2-3b	17574,835	195,441	-40,666
SB1-5a	16143,489	183,690	-38,596	SB2-4a	16754,350	188,876	-39,531
SB1-5b	16154,753	185,386	-39,090	SB2-4b	16871,409	188,388	-39,268
SB1-6a	16173,850	184,413	-38,781	SB2-5a	16529,603	188,160	-39,542
SB1-6b	16158,477	184,285	-38,759	SB2-5b	16598,669	188,787	-39,660
SB1-7a	14228,091	168,255	-35,912	SB2-6a	16793,782	189,224	-39,595
SB1-7b	14291,307	171,605	-36,847	SB2-6b	16731,164	186,473	-38,838
SB1-8a	14454,627	162,687	-34,026	SB2-7a	16524,839	186,721	-39,118
SB1-8b	14498,876	172,566	-36,926	SB2-7b	16530,161	185,239	-38,671
SB1-9a	15026,419	175,351	-37,228	SB2-8a	17589,866	199,051	-41,727
SB1-9b	14927,781	173,667	-36,825	SB2-8b	17449,257	195,001	-40,661
SB1-10a	18550,371	199,752	-40,976	TSB-1a	12724,583	151,439	-32,404
SB1-10b	18962,572	207,152	-42,769	TSB-1b	12750,039	154,029	-33,151
SB1-11a	18249,524	203,888	-42,509	TSB-2a	14465,296	170,500	-35,941
SB1-11b	18152,817	201,248	-41,819	TSB-2b	14226,020	164,043	-34,651
SB1-12a	19688,046	213,412	-43,909	TSB-3a	13488,365	155,432	-32,830
SB1-12b	19850,600	216,228	-44,585	TSB-3b	13619,083	156,797	-33,106
SB1-13a	18575,002	205,106	-42,547	TSB-4a	12830,607	155,143	-33,402
SB1-13b	18450,282	201,326	-41,545	TSB-4b	12684,072	152,684	-32,816
SB1-14a	18090,185	199,359	-41,319	TSB-5a	12490,449	150,497	-32,358
SB1-14b	18059,082	198,909	-41,216	TSB-5b	12317,756	149,047	-32,098
SB1-15a	18273,283	201,207	-41,686	TSB-6a	12793,013	151,222	-32,271
SB1-15b	18303,601	201,533	-41,753	TSB-6b	12623,696	152,646	-32,865
SB1-16a	18165,916	202,627	-42,217	TSB-7a	12489,161	148,284	-31,700
SB1-16b	18161,194	199,902	-41,410	TSB-7b	12537,453	153,159	-33,104
SB1-17a	18477,299	199,225	-40,892	TSB-8a	13512,702	160,004	-34,168
SB1-17b	18268,883	196,834	-40,387	TSB-8b	13438,806	159,100	-33,973

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.33. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) iki proton almış haliyle AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)
SB1-1c	15274,652	173,758	-36,505	SB1-18c	16698,675	188,616	-39,509
SB1-2c	16784,689	185,487	-38,490	SB2-1c	16833,958	185,883	-38,559

Çizelge 7.33. (Devam) 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) iki proton almış haliyle AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

SB1-3c	18608,136	204,035	-42,194	SB2-2c	18285,795	194,365	-39,635
SB1-4c	16608,498	181,852	-37,583	SB2-3c	17594,897	189,976	-39,018
SB1-5c	16244,125	177,642	-36,693	SB2-4c	16787,077	184,813	-38,287
SB1-6c	16174,084	181,444	-37,896	SB2-5c	16512,049	182,228	-37,792
SB1-7c	14435,400	169,912	-36,198	SB2-6c	16890,510	189,131	-39,471
SB1-8c	14508,803	165,999	-34,959	SB2-7c	16509,447	182,667	-37,925
SB1-9c	14833,234	167,137	-34,974	SB2-8c	17568,994	192,369	-39,757
SB1-10c	18746,161	202,487	-41,595	TSB-1c	12583,132	147,731	-31,441
SB1-11c	18192,255	202,904	-42,273	TSB-2c	14285,065	164,921	-34,694
SB1-12c	19854,085	215,140	-44,258	TSB-3c	13469,982	155,402	-32,840
SB1-13c	18491,989	195,981	-39,910	TSB-4c	12605,060	149,164	-31,846
SB1-14c	18081,350	195,947	-40,311	TSB-5c	12365,128	146,267	-31,222
SB1-15c	18149,833	198,621	-41,039	TSB-6c	12716,331	151,983	-32,574
SB1-16c	18180,806	195,914	-40,201	TSB-7c	12398,120	147,323	-31,504
SB1-17c	18210,360	191,663	-38,905	TSB-8c	13448,112	156,341	-33,142

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.34. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) bir proton vermiş haliyle AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	$\Delta H(\text{cal/mol})$	$\Delta S(\text{cal/mol})$	$\Delta G(\text{kcal/mol})$
SB1-2d	16618,324	190,162	-40,050
SB1-2e	16488,753	185,489	-38,787
SB1-3d	18363,331	208,464	-43,759
SB1-3e	18217,441	200,669	-41,582
SB1-10d	18392,026	203,646	-42,295
SB1-10e	17693,562	190,669	-39,126
SB1-15d	17996,475	203,297	-42,586
SB1-15e	17793,182	194,966	-40,307
SB1-17d	18345,126	198,693	-40,865
SB1-17e	18061,148	197,603	-40,825
SB2-1d	16421,544	191,251	-40,571
SB2-2d	18010,797	203,143	-42,526
SB2-3d	17349,122	194,968	-40,751
SB2-3e	17284,669	191,017	-39,638
SB2-4d	16420,181	189,162	-39,950
SB2-5d	16168,866	185,160	-39,009
SB2-6d	16448,842	190,646	-40,364
SB2-7d	16167,201	185,199	-39,022
SB2-8d	17144,196	192,945	-40,353
TSB-3d	13217,978	154,757	-32,830
TSB-3e	13300,419	155,878	-33,106

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.35. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) iki proton vermiş haliyle AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	$\Delta H(\text{cal/mol})$	$\Delta S(\text{cal/mol})$	$\Delta G(\text{kcal/mol})$
SB1-2f	16143,320	183,786	-38,625
SB1-3f	17992,646	206,591	-43,571
SB1-10f	17716,188	196,292	-40,779
SB1-15f	17568,242	194,973	-40,534
SB1-17f	17928,404	195,770	-40,411
TSB-3f	12777,625	148,825	-32,840

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.36. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)
SB1-1N	15212,239	179,883	-38,393	SB1-18N	16657,417	191,875	-40,521
SB1-2N	17004,893	190,196	-39,674	SB2-1N	16805,880	194,307	-41,097
SB1-3N	18674,316	208,596	-43,487	SB2-2N	18334,165	205,100	-42,786
SB1-4N	16613,485	191,276	-40,387	SB2-3N	17531,281	193,317	-40,077
SB1-5N	16126,074	186,032	-39,311	SB2-4N	16828,588	191,624	-40,275
SB1-6N	16177,498	190,008	-40,445	SB2-5N	16657,624	194,004	-41,156
SB1-7N	14161,482	166,440	-35,438	SB2-6N	16367,445	187,561	-39,526
SB1-8N	14345,836	167,201	-35,480	SB2-7N	16431,041	187,879	-39,557
SB1-9N	15056,439	176,606	-37,572	SB2-8N	17587,543	202,054	-42,625
SB1-10N	18778,067	208,051	-43,221	TSB-1N	12640,886	153,445	-33,086
SB1-11N	18176,948	207,965	-43,797	TSB-2N	14229,552	167,033	-35,546
SB1-12N	19800,733	219,798	-45,699	TSB-3N	13485,458	154,877	-32,668
SB1-13N	18557,129	206,706	-43,041	TSB-4N	12631,792	152,284	-32,749
SB1-14N	18037,992	202,563	-42,326	TSB-5N	12411,529	152,967	-33,172
SB1-15N	18287,012	201,677	-41,813	TSB-6N	12679,054	157,780	-34,339
SB1-16N	18041,420	196,929	-40,644	TSB-7N	12360,550	149,667	-32,240
SB1-17N	18396,040	197,371	-40,420	TSB-8N	13425,155	162,765	-35,079

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.37. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) bir proton almış halinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)
SB1-1a	15179,416	174,995	-36,969	SB1-18a	16689,502	192,591	-40,702
SB1-1b	15206,939	178,461	-37,974	SB1-18b	16722,937	189,727	-39,816
SB1-2a	16765,713	191,107	-40,184	SB2-1a	16817,482	188,865	-39,464
SB1-2b	16862,592	187,586	-39,038	SB2-1b	16829,107	189,648	-39,686

Çizelge 7.37. (Devam) 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) bir proton almış halinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

SB1-3a	18573,711	204,064	-42,237	SB2-2a	17982,525	193,635	-39,721
SB1-3b	18419,252	204,593	-42,550	SB2-2b	18371,834	201,024	-41,533
SB1-4a	16719,344	190,854	-40,155	SB2-3a	17598,722	196,916	-41,082
SB1-4b	16715,677	189,892	-39,872	SB2-3b	17576,315	195,090	-40,560
SB1-5a	16139,300	183,656	-38,590	SB2-4a	16755,151	189,209	-39,629
SB1-5b	16156,255	185,447	-39,107	SB2-4b	16863,388	188,349	-39,265
SB1-6a	16174,180	184,349	-38,762	SB2-5a	16529,092	186,578	-39,071
SB1-6b	16155,413	184,221	-38,743	SB2-5b	16592,062	188,512	-39,584
SB1-7a	14230,290	168,343	-35,936	SB2-6a	16787,380	188,885	-39,500
SB1-7b	14290,552	171,295	-36,755	SB2-6b	16730,010	186,636	-38,888
SB1-8a	14459,459	163,462	-34,252	SB2-7a	16517,820	186,674	-39,111
SB1-8b	14499,121	172,469	-36,896	SB2-7b	16525,101	185,247	-38,679
SB1-9a	15023,854	175,349	-37,230	SB2-8a	17592,295	197,033	-41,124
SB1-9b	14927,450	173,767	-36,855	SB2-8b	17453,346	194,829	-40,606
SB1-10a	18558,386	199,399	-40,862	TSB-1a	12723,291	151,538	-32,435
SB1-10b	18966,115	207,345	-42,823	TSB-1b	12754,032	154,155	-33,184
SB1-11a	18240,040	203,485	-42,399	TSB-2a	14465,296	170,500	-36,344
SB1-11b	18153,102	201,486	-41,890	TSB-2b	14226,020	164,043	-34,659
SB1-12a	19687,147	213,257	-43,863	TSB-3a	13482,945	155,411	-32,829
SB1-12b	19849,769	216,351	-44,623	TSB-3b	13617,590	156,982	-33,163
SB1-13a	18573,915	205,507	-42,667	TSB-4a	12818,972	154,731	-33,291
SB1-13b	18445,886	201,260	-41,530	TSB-4b	12682,728	152,508	-32,765
SB1-14a	18096,918	199,856	-41,460	TSB-5a	12486,142	150,521	-32,369
SB1-14b	18056,617	198,540	-41,108	TSB-5b	12328,212	150,158	-32,419
SB1-15a	18271,400	204,086	-42,546	TSB-6a	12787,416	151,319	-32,305
SB1-15b	18300,964	202,498	-42,043	TSB-6b	12626,813	152,773	-32,899
SB1-16a	18162,564	202,782	-42,267	TSB-7a	12485,490	148,300	-31,708
SB1-16b	18160,010	199,998	-41,439	TSB-7b	12551,857	153,894	-33,309
SB1-17a	18464,677	198,417	-40,663	TSB-8a	13508,080	159,913	-34,146
SB1-17b	18258,928	196,563	-40,317	TSB-8b	13437,493	158,959	-33,932

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.38. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) iki proton almış halinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)
SB1-1c	15274,324	173,763	-36,507	SB1-18c	16696,173	188,527	-39,485
SB1-2c	16792,502	186,281	-38,719	SB2-1c	16833,57	185,841	-38,547
SB1-3c	18608,423	204,325	-42,281	SB2-2c	18290,767	194,601	-39,700
SB1-4c	16612,090	182,095	-37,652	SB2-3c	17582,382	189,576	-38,911
SB1-5c	16250,328	177,885	-36,760	SB2-4c	16785,469	184,897	-38,314
SB1-6c	16173,710	181,455	-37,900	SB2-5c	16512,035	182,423	-37,850
SB1-7c	14437,298	170,482	-36,366	SB2-6c	16891,665	188,721	-39,347
SB1-8c	14512,814	166,321	-35,051	SB2-7c	16505,116	182,707	-37,941

Çizelge 7.38. (Devam) 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) iki proton almış halinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

SB1-9c	14831,514	166,624	-34,822	SB2-8c	17565,799	192,373	-39,761
SB1-10c	18769,124	203,845	-41,977	TSB-1c	12586,501	147,763	-31,447
SB1-11c	18184,809	201,027	-41,721	TSB-2c	14285,065	164,921	-34,861
SB1-12c	19844,308	214,503	-44,078	TSB-3c	13465,126	155,406	-32,846
SB1-13c	18485,918	194,918	-39,600	TSB-4c	12609,525	149,276	-31,875
SB1-14c	18083,991	198,896	-41,187	TSB-5c	12370,143	146,358	-31,244
SB1-15c	18147,962	198,716	-41,069	TSB-6c	12722,238	151,7658	-32,504
SB1-16c	18184,242	196,164	-40,272	TSB-7c	12404,983	147,441	-31,532
SB1-17c	18205,045	191,706	-38,923	TSB-8c	13446,699	156,363	-33,150

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.39. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) bir proton vermiş halinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	$\Delta H(\text{cal/mol})$	$\Delta S(\text{cal/mol})$	$\Delta G(\text{kcal/mol})$
SB1-2d	16613,712	190,188	-40,062
SB1-2e	16492,887	185,845	-38,889
SB1-3d	8358,480	206,559	-53,196
SB1-3e	18212,043	200,836	-41,637
SB1-10d	18398,744	202,572	-41,968
SB1-10e	17700,475	190,006	-38,921
SB1-15d	17985,168	202,197	-42,270
SB1-15e	17798,846	195,669	-40,510
SB1-17d	18322,291	197,545	-40,546
SB1-17e	18060,945	200,143	-41,582
SB2-1d	16420,870	191,458	-40,634
SB2-2d	18008,625	202,807	-42,428
SB2-3d	17347,825	195,545	-40,925
SB2-3e	17281,013	190,944	-39,620
SB2-4d	16416,351	188,804	-39,847
SB2-5d	16170,085	185,508	-39,111
SB2-6d	16453,124	191,286	-40,550
SB2-7d	16160,652	185,043	-38,982
SB2-8d	17144,285	192,981	-40,364
TSB-3d	13218,120	154,843	-32,925
TSB-3e	13296,505	156,008	-33,194

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.40. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) iki proton vermiş halinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	$\Delta H(\text{cal/mol})$	$\Delta S(\text{cal/mol})$	$\Delta G(\text{kcal/mol})$
SB1-2f	16144,284	184,316	-38,782

Çizelge 7.40. (Devam) 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) iki proton vermiş halinin AM1 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

SB1-3f	17987,561	205,638	-43,293
SB1-10f	17703,236	195,146	-40,450
SB1-15f	17568,250	195,083	-40,567
SB1-17f	17906,399	195,416	-40,328
TSB-3f	12848,486	150,217	-31,916

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.41. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)
SB1-1N	15718,864	184,690	-39,319	SB1-18N	17179,636	195,335	-41,030
SB1-2N	17178,196	191,740	-39,960	SB2-1N	17275,907	195,033	-40,844
SB1-3N	19010,312	212,770	-44,395	SB2-2N	18867,327	204,933	-42,203
SB1-4N	17165,469	193,388	-40,464	SB2-3N	18166,667	197,165	-40,589
SB1-5N	16630,158	190,775	-40,221	SB2-4N	17126,188	195,050	-40,999
SB1-6N	16644,189	194,911	-41,439	SB2-5N	16968,064	192,186	-40,303
SB1-7N	14719,309	179,332	-38,722	SB2-6N	16977,647	192,627	-40,425
SB1-8N	14850,250	172,989	-36,700	SB2-7N	16815,515	187,966	-39,198
SB1-9N	15551,374	182,805	-38,924	SB2-8N	18039,482	202,571	-42,327
SB1-10N	19085,571	207,952	-42,884	TSB-1N	12970,713	157,068	-33,836
SB1-11N	18780,714	211,328	-44,195	TSB-2N	14631,951	170,095	-36,056
SB1-12N	20220,206	216,361	-44,255	TSB-3N	13958,610	160,467	-33,860
SB1-13N	19151,926	210,118	-43,463	TSB-4N	12999,021	157,382	-33,901
SB1-14N	18486,266	203,862	-42,265	TSB-5N	12728,076	155,145	-33,505
SB1-15N	18910,099	208,801	-43,313	TSB-6N	13006,563	158,024	-34,084
SB1-16N	18784,455	201,587	-41,289	TSB-7N	12708,571	153,304	-32,976
SB1-17N	18599,716	200,263	-41,079	TSB-8N	13793,741	161,985	-34,478

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.42. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) bir proton almış haliyle PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)
SB1-1a	15671,091	178,504	-37,523	SB1-18a	17203,279	193,791	-40,546
SB1-1b	15700,254	176,382	-36,862	SB1-18b	17246,748	193,425	-40,394
SB1-2a	17163,570	190,288	-39,542	SB2-1a	17085,875	189,684	-39,440
SB1-2b	17267,214	189,805	-39,295	SB2-1b	17197,093	189,393	-39,242
SB1-3a	19131,173	211,825	-43,993	SB2-2a	18654,083	198,007	-40,352
SB1-3b	18983,669	209,219	-43,364	SB2-2b	18712,314	203,979	-42,073
SB1-4a	17249,658	193,725	-40,480	SB2-3a	17985,727	195,280	-40,208

Çizelge 7.42. (Devam) 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) bir proton almış haliyle PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

SB1-4b	17214,645	191,850	-39,957	SB2-3b	17897,913	195,534	-40,371
SB1-5a	16623,623	188,563	-39,568	SB2-4a	17152,823	188,513	-39,024
SB1-5b	16602,004	185,910	-38,799	SB2-4b	17213,676	189,888	-39,373
SB1-6a	16582,354	186,049	-38,860	SB2-5a	16802,718	185,823	-38,572
SB1-6b	16624,865	188,993	-39,695	SB2-5b	16834,438	186,333	-38,693
SB1-7a	14654,593	170,298	-36,094	SB2-6a	16594,045	177,191	-36,209
SB1-7b	14691,115	171,787	-36,501	SB2-6b	16645,364	180,841	-37,245
SB1-8a	14780,547	167,197	-35,044	SB2-7a	16799,454	186,784	-38,862
SB1-8b	14837,791	168,579	-35,399	SB2-7b	16799,793	185,499	-38,479
SB1-9a	15559,212	180,663	-38,278	SB2-8a	18074,507	196,051	-40,349
SB1-9b	15560,177	182,102	-38,706	SB2-8b	17971,219	198,898	-41,300
SB1-10a	19081,816	202,806	-41,354	TSB-1a	13050,075	155,033	-33,150
SB1-10b	19040,617	206,613	-42,530	TSB-1b	13069,988	154,888	-33,086
SB1-11a	18803,541	206,225	-42,652	TSB-2a	14612,221	166,613	-35,038
SB1-11b	18794,022	207,201	-42,952	TSB-2b	14238,560	159,833	-33,392
SB1-12a	20456,791	219,988	-45,100	TSB-3a	13777,496	157,757	-33,234
SB1-12b	20447,456	219,593	-44,991	TSB-3b	13863,619	160,056	-33,833
SB1-13a	19136,031	205,949	-42,237	TSB-4a	13017,577	155,500	-33,321
SB1-13b	19141,958	208,814	-43,085	TSB-4b	12863,996	153,681	-32,933
SB1-14a	18490,284	203,673	-42,204	TSB-5a	12773,421	152,326	-32,620
SB1-14b	18429,190	203,025	-42,072	TSB-5b	12555,872	150,762	-32,371
SB1-15a	18790,546	203,730	-41,921	TSB-6a	13004,878	153,925	-32,865
SB1-15b	18908,580	203,538	-41,746	TSB-6b	12889,972	153,266	-32,783
SB1-16a	18841,228	208,946	-43,425	TSB-7a	12697,134	150,031	-32,012
SB1-16b	18788,511	203,844	-41,957	TSB-7b	12632,497	149,953	-32,054
SB1-17a	18763,758	201,376	-41,246	TSB-8a	13788,455	160,388	12,493
SB1-17b	18804,909	197,398	-40,020	TSB-8b	13532,011	157,052	12,123

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.43. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) iki proton almış haliyle PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)
SB1-1c	15600,488	173,228	-36,022	SB1-18c	17141,617	188,323	-38,979
SB1-2c	16997,487	183,925	-37,812	SB2-1c	17108,871	186,626	-38,979
SB1-3c	18922,732	204,056	-41,886	SB2-2c	18610,662	195,665	-38,506
SB1-4c	17190,437	187,907	-38,806	SB2-3c	17926,733	190,826	-39,698
SB1-5c	16590,237	182,081	-37,670	SB2-4c	17032,080	186,420	-38,939
SB1-6c	16592,119	180,139	-37,089	SB2-5c	16812,744	185,249	-38,521
SB1-7c	14775,409	168,268	-35,369	SB2-6c	16489,254	174,973	-38,392
SB1-8c	14847,594	168,888	-35,481	SB2-7c	16755,023	183,779	-35,653
SB1-9c	15443,035	171,875	-35,776	SB2-8c	17801,051	191,164	-38,011
SB1-10c	19141,896	206,440	-42,377	TSB-1c	12700,181	147,114	-39,166
SB1-11c	18754,413	204,375	-42,149	TSB-2c	14375,459	164,186	-31,140

Çizelge 7.43. (Devam) 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) iki proton almış haliyle PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

SB1-12c	20432,094	214,538	-43,500	TSB-3c	13728,487	156,248	-34,552
SB1-13c	19027,677	196,649	-39,574	TSB-4c	12804,045	152,275	-32,833
SB1-14c	18237,761	193,510	-39,428	TSB-5c	12553,964	145,439	-32,574
SB1-15c	18800,976	199,986	-40,795	TSB-6c	12798,727	148,592	-30,787
SB1-16c	18727,443	202,305	-41,560	TSB-7c	12546,436	147,407	-31,482
SB1-17c	18603,264	194,934	-39,487	TSB-8c	13549,277	155,186	-31,381

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.44. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) bir proton vermiş haliyle PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	$\Delta H(\text{cal/mol})$	$\Delta S(\text{cal/mol})$	$\Delta G(\text{kcal/mol})$
SB1-2d	16979,580	190,279	-39,724
SB1-2e	16552,081	185,414	-38,701
SB1-3d	18922,854	210,777	-43,889
SB1-3e	18467,374	206,382	-43,034
SB1-10d	18746,357	206,756	-42,867
SB1-10e	18093,654	189,371	-38,339
SB1-15d	18511,881	199,792	-41,026
SB1-15e	18173,410	196,129	-40,273
SB1-17d	18233,016	195,300	-39,966
SB1-17e	18584,432	199,266	-40,797
SB2-1d	16972,994	193,126	26,949
SB2-2d	18578,646	204,251	32,405
SB2-3d	17809,583	193,120	53,549
SB2-3e	17773,494	193,579	52,240
SB2-4d	16954,452	190,921	27,292
SB2-5d	16659,776	188,522	37,969
SB2-6d	17001,904	196,186	27,566
SB2-7d	16568,692	184,638	37,780
SB2-8d	17751,135	196,269	28,691
TSB-3d	13564,465	160,592	-34,292
TSB-3e	13589,859	161,631	-34,576

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.45. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) iki proton vermiş haliyle PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	$\Delta H(\text{cal/mol})$	$\Delta S(\text{cal/mol})$	$\Delta G(\text{kcal/mol})$
SB1-2f	16668,670	186,103	-38,790
SB1-3f	18690,205	204,591	-42,278
SB1-10f	18696,960	206,539	-42,852

Çizelge 7.45. (Devam) 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) iki proton vermiş haliyle PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

SB1-15f	18281,874	200,934	-41,596
SB1-17f	18594,364	200,765	-41,234
TSB-3f	13549,071	159,683	-34,037

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.46. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)
SB1-1N	15718,864	184,690	-39,517	SB1-18N	17179,636	195,335	-40,994
SB1-2N	17178,196	191,740	-40,196	SB2-1N	17275,907	195,033	-41,136
SB1-3N	19010,312	212,770	-44,409	SB2-2N	18867,327	204,933	-42,181
SB1-4N	17165,469	193,388	-40,508	SB2-3N	18166,667	197,165	-40,698
SB1-5N	16630,158	190,775	-40,167	SB2-4N	17126,188	195,050	-41,122
SB1-6N	16644,189	194,911	-40,754	SB2-5N	16968,064	192,186	-40,454
SB1-7N	14719,309	179,332	-38,638	SB2-6N	16977,647	192,627	-40,568
SB1-8N	14848,625	172,719	-36,622	SB2-7N	16815,515	187,966	-39,243
SB1-9N	15551,374	182,805	-38,988	SB2-8N	18039,482	202,571	-42,089
SB1-10N	19085,571	207,952	-43,195	TSB-1N	12970,713	157,068	-33,511
SB1-11N	18780,714	211,328	-43,983	TSB-2N	14631,951	170,095	-36,060
SB1-12N	20220,206	216,361	-44,529	TSB-3N	13958,610	160,467	-33,991
SB1-13N	19151,926	210,118	-43,855	TSB-4N	12999,021	157,382	-33,926
SB1-14N	18486,266	203,862	-42,406	TSB-5N	12728,076	155,145	-33,799
SB1-15N	18910,099	208,801	-43,337	TSB-6N	13006,563	158,024	-33,985
SB1-16N	18784,455	201,587	-41,789	TSB-7N	12708,571	153,304	-32,973
SB1-17N	18599,716	200,263	-41,034	TSB-8N	13793,741	161,985	-34,478

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.47. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) bir proton almış halinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)
SB1-1a	15672,140	178,161	-37,420	SB1-18a	17204,505	194,383	-40,722
SB1-1b	15704,939	176,648	-36,936	SB1-18b	17247,052	193,738	-40,487
SB1-2a	17161,539	189,983	-39,453	SB2-1a	17089,015	189,984	-39,526
SB1-2b	17249,793	189,387	-39,188	SB2-1b	17196,197	189,480	-39,269
SB1-3a	19125,540	212,157	-44,097	SB2-2a	18654,921	198,161	-40,397
SB1-3b	18982,970	210,038	-43,608	SB2-2b	18710,114	203,925	-42,060
SB1-4a	17248,548	193,821	-40,510	SB2-3a	17988,298	193,839	-39,776

Çizelge 7.47. (Devam) 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) bir proton almış halinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

SB1-4b	17215,883	192,161	-40,048	SB2-3b	17886,536	194,944	-40,207
SB1-5a	16622,425	188,546	-39,564	SB2-4a	17151,780	188,678	-39,074
SB1-5b	16600,960	185,905	-38,799	SB2-4b	17211,612	189,962	-39,397
SB1-6a	16580,599	186,019	-38,853	SB2-5a	16800,029	185,768	-38,559
SB1-6b	16630,931	191,036	-40,298	SB2-5b	16833,870	186,546	-38,757
SB1-7a	14654,712	170,207	-36,067	SB2-6a	17087,473	188,673	-39,137
SB1-7b	14688,297	171,608	-36,451	SB2-6b	17092,851	188,472	-39,072
SB1-8a	14787,169	167,446	-35,112	SB2-7a	16799,668	186,992	-38,924
SB1-8b	14841,992	168,849	-35,475	SB2-7b	16802,789	185,848	-38,580
SB1-9a	15558,425	180,713	-38,294	SB2-8a	18074,130	195,995	-40,332
SB1-9b	15561,787	182,189	-38,731	SB2-8b	17973,229	199,351	-41,433
SB1-10a	19084,673	203,345	-41,512	TSB-1a	13046,856	154,817	-33,089
SB1-10b	19033,271	207,587	-42,828	TSB-1b	13068,841	154,882	-33,086
SB1-11a	18805,001	206,468	-42,722	TSB-2a	14617,470	167,566	-35,317
SB1-11b	18796,947	207,693	-43,095	TSB-2b	14244,603	159,953	-33,421
SB1-12a	20452,876	219,410	-44,931	TSB-3a	13775,040	158,121	-33,345
SB1-12b	20446,779	219,552	-44,980	TSB-3b	13861,948	159,861	-33,777
SB1-13a	19130,706	205,668	-42,158	TSB-4a	13015,396	155,375	-33,286
SB1-13b	19137,229	209,186	-43,200	TSB-4b	12872,251	154,065	-33,039
SB1-14a	18483,708	204,219	-42,374	TSB-5a	16800,029	185,768	-32,565
SB1-14b	18428,563	203,383	-42,179	TSB-5b	16833,870	186,546	-32,501
SB1-15a	18794,081	203,494	-41,847	TSB-6a	17087,473	188,673	-32,843
SB1-15b	18904,686	203,677	-41,791	TSB-6b	17092,851	188,472	-32,819
SB1-16a	18838,573	209,858	-43,699	TSB-7a	16799,668	186,992	-32,004
SB1-16b	18786,432	203,628	-41,895	TSB-7b	16802,789	185,848	-32,072
SB1-17a	18757,925	201,370	-41,250	TSB-8a	18074,130	195,995	-34,011
SB1-17b	18792,207	197,402	-40,033	TSB-8b	17973,229	199,351	-33,327

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.48. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) iki proton almış halinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)
SB1-1c	15609,118	173,406	-36,066	SB1-18c	17145,923	188,766	-39,106
SB1-2c	17003,172	183,987	-37,825	SB2-1c	17113,185	186,755	-38,540
SB1-3c	18915,929	203,990	-41,873	SB2-2c	18617,705	195,927	-39,768
SB1-4c	17190,979	188,586	-39,008	SB2-3c	17923,680	190,821	-38,941
SB1-5c	16588,359	181,210	-37,412	SB2-4c	17035,334	186,412	-38,515
SB1-6c	16592,450	180,219	-37,113	SB2-5c	16814,530	185,250	-38,390
SB1-7c	14776,384	168,337	-35,388	SB2-6c	17042,475	184,469	-37,929
SB1-8c	14848,838	168,622	-35,400	SB2-7c	16762,811	184,279	-38,152
SB1-9c	15446,003	172,545	-35,972	SB2-8c	17804,011	191,326	-39,211
SB1-10c	19119,045	202,137	-41,118	TSB-1c	12705,828	147,173	-31,152
SB1-11c	18758,961	204,652	-42,227	TSB-2c	14380,639	164,311	-34,584

Çizelge 7.48. (Devam) 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) iki proton almış halinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

SB1-12c	20432,354	214,389	-43,456	TSB-3c	13731,844	156,590	-32,932
SB1-13c	19036,635	197,198	-39,728	TSB-4c	12811,676	152,705	-32,694
SB1-14c	18240,471	193,737	-39,493	TSB-5c	16814,530	185,250	-30,799
SB1-15c	18798,747	200,102	-40,832	TSB-6c	17042,475	184,469	-31,480
SB1-16c	18731,663	202,437	-41,595	TSB-7c	16762,811	184,279	-31,363
SB1-17c	18598,808	194,886	-39,477	TSB-8c	17804,011	191,326	-32,765

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.49. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) bir proton vermiş halinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	$\Delta H(\text{cal/mol})$	$\Delta S(\text{cal/mol})$	$\Delta G(\text{kcal/mol})$
SB1-2d	16978,683	190,442	-39,773
SB1-2e	16548,314	185,088	-38,608
SB1-3d	18923,974	211,190	-44,011
SB1-3e	18463,995	205,805	-42,866
SB1-10d	18732,424	207,358	-43,060
SB1-10e	18088,321	189,594	-38,411
SB1-15d	18503,478	199,517	-40,953
SB1-15e	18168,805	195,682	-40,144
SB1-17d	18225,708	195,311	-39,977
SB1-17e	18579,015	199,265	-40,802
SB2-1d	16975,057	193,993	-40,835
SB2-2d	18576,190	204,495	-42,363
SB2-3d	17802,915	193,114	-39,745
SB2-3e	17771,417	194,022	-40,047
SB2-4d	16958,180	191,567	-40,129
SB2-5d	16659,418	188,718	-39,579
SB2-6d	16999,743	195,335	-41,210
SB2-7d	16569,852	184,745	-38,484
SB2-8d	17749,581	196,635	-40,848
TSB-3d	13567,065	161,023	-34,418
TSB-3e	13583,786	161,423	-34,520

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.50. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) iki proton vermiş halinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	$\Delta H(\text{cal/mol})$	$\Delta S(\text{cal/mol})$	$\Delta G(\text{kcal/mol})$
SB1-2f	16673,135	186,525	-38,911
SB1-3f	18693,628	204,665	-42,297
SB1-10f	18684,654	205,881	-42,668

Çizelge 7.50. (Devam) 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) iki proton vermiş halinin PM3 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

SB1-15f	18281,874	200,934	-41,596
SB1-17f	17777,664	193,409	-39,858
TSB-3f	13543,871	159,693	-34,045

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.51. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)
SB1-1N	16059,036	182,312	-38,270	SB1-18N	17557,126	201,878	-42,603
SB1-2N	17639,403	190,067	-39,001	SB2-1N	17605,506	194,266	-40,286
SB1-3N	19540,666	211,035	-43,348	SB2-2N	19280,707	207,782	-42,638
SB1-4N	17570,389	195,939	-40,819	SB2-3N	18515,354	194,914	-39,569
SB1-5N	17121,570	194,924	-40,966	SB2-4N	17562,692	193,607	-40,132
SB1-6N	17180,615	192,363	-40,144	SB2-5N	17312,298	193,413	-40,325
SB1-7N	15054,925	177,698	-37,899	SB2-6N	17310,216	193,001	-40,204
SB1-8N	15191,305	176,512	-37,409	SB2-7N	17398,255	193,108	-40,148
SB1-9N	15949,370	179,021	-37,399	SB2-8N	18498,016	198,692	-40,712
SB1-10N	19553,871	203,748	-41,163	TSB-1N	13459,070	160,950	-34,504
SB1-11N	19039,157	207,215	-42,711	TSB-2N	15006,423	169,611	-35,538
SB1-12N	20848,925	225,114	-46,235	TSB-3N	14424,575	161,924	-33,829
SB1-13N	19803,630	212,404	-43,493	TSB-4N	13393,951	157,657	-33,588
SB1-14N	19102,453	207,608	-42,765	TSB-5N	13224,087	156,327	-33,361
SB1-15N	19423,960	210,405	-43,277	TSB-6N	13006,563	158,024	-34,084
SB1-16N	19059,762	202,983	-41,429	TSB-7N	13185,563	155,502	-33,154
SB1-17N	18880,606	197,269	-39,905	TSB-8N	14179,377	164,558	-34,859

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.52. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) bir proton almış halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)
SB1-1a	16140,727	181,885	-38,061	SB1-18a	17534,391	192,293	-39,769
SB1-1b	16067,265	183,337	-38,567	SB1-18b	17640,246	196,217	-40,833
SB1-2a	17910,852	190,209	-38,771	SB2-1a	17835,208	197,488	-41,016
SB1-2b	17688,146	192,677	-39,730	SB2-1b	17747,528	191,154	-39,216
SB1-3a	19617,787	208,943	-42,647	SB2-2a	19270,085	203,294	-41,311
SB1-3b	19623,702	211,724	-43,470	SB2-2b	19507,492	209,969	-43,063
SB1-4a	17518,757	194,233	-40,363	SB2-3a	18677,790	198,224	-40,393
SB1-4b	17571,118	196,416	-40,961	SB2-3b	18513,127	199,322	-40,885
SB1-5a	17187,104	193,251	-40,402	SB2-4a	17711,068	196,340	-40,798

Çizelge 7.52. (Devam) 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) bir proton almış halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

SB1-5b	17180,409	192,544	-40,198	SB2-4b	17690,461	194,139	-40,163
SB1-6a	17144,567	189,375	-39,289	SB2-5a	17529,629	194,807	-40,523
SB1-6b	17157,638	191,204	-39,821	SB2-5b	17563,518	191,632	-39,543
SB1-7a	15091,686	173,076	-36,485	SB2-6a	17684,820	194,195	-40,185
SB1-7b	15123,583	175,470	-37,166	SB2-6b	17815,156	195,926	-40,571
SB1-8a	15107,115	170,399	-35,672	SB2-7a	17550,066	192,392	-39,783
SB1-8b	15270,368	173,887	-36,548	SB2-7b	17444,803	190,245	-39,248
SB1-9a	15953,997	180,802	-37,925	SB2-8a	18574,821	200,571	-41,195
SB1-9b	15921,981	176,886	-36,790	SB2-8b	18499,589	202,052	-41,712
SB1-10a	19737,260	205,839	-41,603	TSB-1a	13688,115	158,452	-33,531
SB1-10b	19800,766	207,188	-41,941	TSB-1b	13436,797	155,529	-32,911
SB1-11a	19037,222	206,799	-42,589	TSB-2a	15156,217	169,804	-35,445
SB1-11b	19114,950	209,247	-43,241	TSB-2b	15061,367	175,592	-37,265
SB1-12a	20757,817	220,163	-44,851	TSB-3a	14535,083	162,657	-33,937
SB1-12b	20863,892	220,414	-44,820	TSB-3b	14394,397	160,970	-33,575
SB1-13a	19759,786	210,390	-42,936	TSB-4a	13570,393	159,875	-34,072
SB1-13b	19861,712	210,055	-42,735	TSB-4b	13486,821	159,571	-34,065
SB1-14a	19140,346	208,540	-43,004	TSB-5a	13381,241	154,128	-32,549
SB1-14b	19090,860	205,531	-42,157	TSB-5b	13196,990	154,466	-32,834
SB1-15a	19416,892	208,797	-42,805	TSB-6a	13004,878	153,925	-32,865
SB1-15b	19143,141	204,094	-41,677	TSB-6b	12889,972	153,266	-32,783
SB1-16a	19141,059	208,273	-42,924	TSB-7a	13443,273	155,622	-32,932
SB1-16b	19053,099	205,680	-42,240	TSB-7b	13293,490	157,739	-33,713
SB1-17a	19467,700	201,419	-40,555	TSB-8a	14040,623	160,877	-33,901
SB1-17b	19285,017	201,604	-40,793	TSB-8b	14236,131	166,482	-35,375

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.53. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) iki proton almış halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)
SB1-1c	16161,191	179,922	-37,455	SB1-18c	17628,880	190,579	-39,164
SB1-2c	17734,985	187,905	-38,261	SB2-1c	17586,458	187,814	-38,382
SB1-3c	19684,107	211,531	-43,352	SB2-2c	19247,600	202,893	-41,214
SB1-4c	17576,275	189,451	-38,880	SB2-3c	18440,087	192,528	-38,933
SB1-5c	17201,642	187,294	-38,612	SB2-4c	17627,051	189,427	-38,822
SB1-6c	17264,856	188,754	-38,984	SB2-5c	17519,203	187,257	-38,283
SB1-7c	15032,950	171,061	-35,943	SB2-6c	17620,713	190,044	-39,012
SB1-8c	15310,816	173,476	-36,385	SB2-7c	17511,235	188,227	-38,580
SB1-9c	15935,518	178,688	-37,314	SB2-8c	18409,857	195,732	-39,918
SB1-10c	19721,171	207,530	-42,123	TSB-1c	13374,301	153,750	-32,443
SB1-11c	19092,145	207,197	-42,653	TSB-2c	15058,642	168,628	-35,192
SB1-12c	20827,890	217,407	-43,959	TSB-3c	14224,573	159,684	-33,361
SB1-13c	19601,996	202,675	-40,795	TSB-4c	13317,462	153,815	-32,519

Çizelge 7.53. (Devam) 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) iki proton almış halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

SB1-14c	19097,682	205,777	-42,224	TSB-5c	13172,724	153,175	-32,474
SB1-15c	19169,584	202,591	-41,202	TSB-6c	12798,727	148,592	-31,482
SB1-16c	18958,628	202,033	-41,247	TSB-7c	13182,581	152,277	-32,196
SB1-17c	19346,326	200,508	-40,405	TSB-8c	14130,513	160,762	-33,777

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.54. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) bir proton vermiş halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	$\Delta H(\text{cal/mol})$	$\Delta S(\text{cal/mol})$	$\Delta G(\text{kcal/mol})$
SB1-2d	17478,010	189,415	-38,968
SB1-2e	17514,557	191,136	-39,444
SB1-3d	19454,489	209,887	-43,092
SB1-3e	19300,994	208,142	-42,725
SB1-10d	19248,401	206,590	-42,315
SB1-10e	18633,065	191,644	-38,477
SB1-15d	19082,087	207,467	-42,743
SB1-15e	18646,106	196,315	-39,856
SB1-17d	19386,909	203,028	-41,115
SB1-17e	19109,114	202,349	-41,191
SB2-1d	17350,013	193,548	-40,327
SB2-2d	19051,468	208,112	-42,966
SB2-3d	18238,067	196,561	-40,337
SB2-3e	18235,074	193,975	-39,570
SB2-4d	17308,228	190,673	-39,512
SB2-5d	17153,720	192,161	-39,952
SB2-6d	17347,258	195,656	-40,958
SB2-7d	17175,484	192,452	-40,175
SB2-8d	18152,896	198,964	-41,138
TSB-3d	14082,426	159,285	-33,385
TSB-3e	14149,513	164,258	-34,799

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.55. 4,4'-oxydianilin türevlerinin sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) iki proton vermiş halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	$\Delta H(\text{cal/mol})$	$\Delta S(\text{cal/mol})$	$\Delta G(\text{kcal/mol})$
SB1-2f	17108,993	191,755	-40,034
SB1-3f	18989,984	208,365	-43,103
SB1-10f	18672,555	200,767	-41,156
SB1-15f	18645,276	202,507	-41,702
SB1-17f	18946,851	199,272	-40,436
TSB-3f	13659,333	157,339	-33,228

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.56. Nötr 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)
SB1-1N	16053,231	180,592	-37,763	SB1-18N	17556,203	200,685	-42,248
SB1-2N	17643,782	190,398	-39,095	SB2-1N	17612,589	194,338	-40,300
SB1-3N	19551,603	211,235	-43,396	SB2-2N	19275,623	208,030	-42,717
SB1-4N	17570,369	196,156	-40,884	SB2-3N	18510,406	195,339	-39,701
SB1-5N	17117,502	194,387	-40,810	SB2-4N	17559,967	193,558	-40,120
SB1-6N	17177,017	192,350	-40,143	SB2-5N	17317,316	194,775	-40,726
SB1-7N	15056,166	178,418	-38,112	SB2-6N	17039,187	183,705	-37,705
SB1-8N	15192,694	176,712	-37,467	SB2-7N	17404,616	193,183	-40,164
SB1-9N	15948,689	179,183	-37,448	SB2-8N	18502,570	198,719	-40,716
SB1-10N	19561,926	204,096	-41,259	TSB-1N	13453,200	160,159	-34,274
SB1-11N	19039,032	207,500	-42,796	TSB-2N	15001,123	169,706	-35,571
SB1-12N	20844,944	225,699	-46,413	TSB-3N	14410,647	161,926	-33,843
SB1-13N	19797,619	212,396	-43,496	TSB-4N	13387,571	157,846	-33,651
SB1-14N	19101,750	207,875	-42,845	TSB-5N	13215,558	156,173	-33,324
SB1-15N	19429,461	212,979	-44,038	TSB-6N	13420,338	158,223	-33,730
SB1-16N	19054,619	202,926	-41,417	TSB-7N	13184,599	155,703	-33,215
SB1-17N	18876,920	197,036	-39,840	TSB-8N	14179,377	164,558	-34,859

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.57. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) bir proton almış halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)
SB1-1a	16137,845	181,833	-38,048	SB1-18a	17533,824	192,421	-39,808
SB1-1b	16065,146	182,263	-38,249	SB1-18b	17640,765	196,737	-40,987
SB1-2a	17898,795	190,338	-38,822	SB2-1a	17828,231	198,701	-41,385
SB1-2b	17685,772	192,334	-39,630	SB2-1b	17743,385	191,231	-39,243
SB1-3a	19610,435	208,280	-42,457	SB2-2a	19262,834	203,219	-41,296
SB1-3b	19629,456	212,037	-43,558	SB2-2b	19504,376	210,127	-43,113
SB1-4a	17517,058	194,404	-40,415	SB2-3a	18668,803	198,539	-40,496
SB1-4b	17571,094	196,212	-40,900	SB2-3b	18498,472	196,421	-40,035
SB1-5a	17187,363	193,319	-40,422	SB2-4a	17706,389	194,293	-40,193
SB1-5b	17184,820	194,008	-40,629	SB2-4b	17681,370	193,718	-40,047
SB1-6a	17143,292	189,306	-39,270	SB2-5a	17521,817	194,085	-40,316
SB1-6b	17157,872	191,435	-39,890	SB2-5b	17558,956	192,184	-39,712
SB1-7a	15090,042	173,161	-36,512	SB2-6a	17679,068	194,135	-40,173
SB1-7b	15118,768	174,460	-36,870	SB2-6b	17810,997	196,661	-40,794
SB1-8a	15108,648	170,583	-35,725	SB2-7a	17546,879	192,431	-39,798
SB1-8b	15275,293	174,648	-36,770	SB2-7b	17456,751	190,768	-39,392
SB1-9a	15955,990	181,307	-38,073	SB2-8a	18570,894	200,517	-41,183
SB1-9b	15922,450	177,043	-36,836	SB2-8b	18499,787	202,899	-41,964

Çizelge 7.57. (Devam) 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) bir proton almış halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

SB1-10a	19723,820	205,456	-41,502	TSB-1a	13694,343	157,894	-33,358
SB1-10b	19817,625	207,714	-42,081	TSB-1b	13438,642	155,717	-32,965
SB1-11a	19031,040	206,389	-42,473	TSB-2a	15151,502	170,196	-35,567
SB1-11b	19116,136	209,638	-43,356	TSB-2b	15062,203	176,765	-37,614
SB1-12a	20752,493	220,149	-44,852	TSB-3a	14490,047	161,562	-33,655
SB1-12b	20863,277	220,592	-44,873	TSB-3b	14390,419	161,234	-33,657
SB1-13a	19755,930	210,447	-42,957	TSB-4a	13586,358	160,543	-34,255
SB1-13b	19865,971	210,592	-42,890	TSB-4b	13488,663	159,892	-34,159
SB1-14a	19145,678	210,632	-43,623	TSB-5a	13394,449	153,999	-32,497
SB1-14b	19090,301	205,493	-42,147	TSB-5b	13198,680	154,288	-32,779
SB1-15a	19406,497	209,132	-42,915	TSB-6a	13694,743	159,322	-33,783
SB1-15b	19138,836	204,097	-41,682	TSB-6b	13486,579	159,322	-33,991
SB1-16a	19141,460	208,619	-43,027	TSB-7a	13455,028	155,306	-32,826
SB1-16b	19050,653	205,423	-42,165	TSB-7b	13294,963	157,559	-33,658
SB1-17a	19554,669	203,789	-41,174	TSB-8a	14043,294	160,997	-33,934
SB1-17b	19272,308	202,181	-40,978	TSB-8b	14235,545	164,851	-34,890

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.58. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) iki proton almış halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS cal/mol)	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)	ΔS (cal/mol)	ΔG (kcal/mol)
SB1-1c	16165,617	180,743	-37,696	SB1-18c	17628,994	190,684	-39,195
SB1-2c	17731,002	187,902	-38,264	SB2-1c	17589,587	188,072	-38,456
SB1-3c	19687,823	211,743	-43,412	SB2-2c	19242,614	203,038	-41,263
SB1-4c	17573,011	189,469	-38,889	SB2-3c	18442,376	192,902	-39,042
SB1-5c	17194,553	186,743	-38,455	SB2-4c	17630,957	189,306	-38,782
SB1-6c	17262,238	188,744	-38,983	SB2-5c	17513,814	187,229	-38,280
SB1-7c	15033,879	170,953	-35,910	SB2-6c	17621,595	191,252	-39,371
SB1-8c	15307,655	172,862	-36,205	SB2-7c	17510,415	188,328	-38,611
SB1-9c	15939,368	178,746	-37,327	SB2-8c	18405,624	195,680	-39,907
SB1-10c	19716,114	205,298	-41,463	TSB-1c	13377,354	153,763	-32,444
SB1-11c	19090,817	208,444	-43,026	TSB-2c	15062,303	168,688	-35,207
SB1-12c	20827,752	217,688	-44,043	TSB-3c	14220,062	159,481	-33,305
SB1-13c	19603,115	202,791	-40,829	TSB-4c	13324,947	154,040	-32,579
SB1-14c	19096,230	205,781	-42,226	TSB-5c	13176,858	154,315	-32,809
SB1-15c	19176,386	202,929	-41,296	TSB-6c	13401,353	155,578	-32,961
SB1-16c	18955,913	201,556	-41,108	TSB-7c	13185,914	152,310	-32,202
SB1-17c	19346,326	200,508	-40,405	TSB-8c	14135,785	160,928	-33,821

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.59. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) bir proton vermiş halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	$\Delta H(\text{cal/mol})$	$\Delta S(\text{cal/mol})$	$\Delta G(\text{kcal/mol})$
SB1-2d	17478,138	189,549	-39,007
SB1-2e	17510,888	191,491	-39,553
SB1-3d	19450,963	209,957	-43,116
SB1-3e	19295,418	210,856	-43,540
SB1-10d	19245,155	209,152	-43,082
SB1-10e	18620,352	191,704	-38,507
SB1-15d	19071,519	207,582	-42,788
SB1-15e	18650,347	196,553	-39,922
SB1-17d	19372,296	203,280	-41,205
SB1-17e	19095,447	202,686	-41,305
SB2-1d	17344,256	193,898	-40,437
SB2-2d	19049,710	208,456	-43,070
SB2-3d	18231,126	196,165	-40,226
SB2-3e	18238,365	193,871	-39,535
SB2-4d	17299,751	190,662	-39,517
SB2-5d	17145,269	191,928	-40,049
SB2-6d	17344,554	195,706	-40,976
SB2-7d	17164,533	191,691	-39,959
SB2-8d	18152,663	199,186	-41,205
TSB-3d	14077,708	159,212	-33,367
TSB-3e	14139,149	162,728	-34,354

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

Çizelge 7.60. 4,4'-oxydianilin türevlerinin DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) iki proton vermiş halinin PM6 metoduyla hesaplanan değerlerinden elde edilen ΔG

Bileşik	$\Delta H(\text{cal/mol})$	$\Delta S(\text{cal/mol})$	$\Delta G(\text{kcal/mol})$
SB1-2f	17103,525	189,760	-39,445
SB1-3f	18986,055	208,176	-43,050
SB1-10f	18661,307	200,624	-41,125
SB1-15f	18645,276	202,507	-41,702
SB1-17f	18938,984	200,369	-40,771
TSB-3f	13657,620	157,482	-33,272

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S$$

7.1.3. pK_a Hesapları

7.1.3.1. Kinetik pK_a Hesaplamaları

İncelenen moleküller için Nötr baz (B), Konjuge asit (BH⁺) olacak şekilde protonlanma merkezleri belirlenerek, Eşitlik (7.3.), (7.5.), (7.7.) ve (7.9)'a göre $\delta\Delta G_f(BH^+)$ (oluşum ısısı türünden standart serbest enerji değişimi) değerleri hesaplanmıştır ve Eşitlik (7.4.), (7.6.), (7.8.) ve (7.10) yardımıyla da kinetik pK_a değerleri hesaplanmıştır. Eşitlik (7.3.)- (7.10) 'daki hesaplamalarda aşağıdaki sabitler kullanılmıştır.

Sulu çözeltide AM1 hesaplamalarından elde edilen değerler:

$$H_2O \text{ için } \Delta H_f = -64.362 \text{ kcal mol}^{-1} \quad \Delta S = 45.087 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G_f = -77.798 \text{ kcal mol}^{-1}$$

$$H_3O^+ \text{ için } \Delta H_f = 50.521 \text{ kcal mol}^{-1} \quad \Delta S = 46.190 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G_f = 36.756 \text{ kcal mol}^{-1}$$

DMF çözeltisinde AM1 hesaplamalarından elde edilen değerler:

$$H_2O \text{ için } \Delta H_f = -64.240 \text{ kcal mol}^{-1} \quad \Delta S = 45.087 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G_f = -77.676 \text{ kcal mol}^{-1}$$

$$H_3O^+ \text{ için } \Delta H_f = 52.542 \text{ kcal mol}^{-1} \quad \Delta S = 46.190 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G_f = 38.777 \text{ kcal mol}^{-1}$$

Sulu çözeltide PM3 hesaplamalarından elde edilen değerler:

$$H_2O \text{ için } \Delta H_f = -58.077 \text{ kcal mol}^{-1} \quad \Delta S = 44.986 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G_f = -71.483 \text{ kcal mol}^{-1}$$

$$H_3O^+ \text{ için } \Delta H_f = 67.185 \text{ kcal mol}^{-1} \quad \Delta S = 46.025 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G_f = 53.470 \text{ kcal mol}^{-1}$$

DMF çözeltisinde PM3 hesaplamalarından elde edilen değerler:

$$H_2O \text{ için } \Delta H_f = -57.966 \text{ kcal mol}^{-1} \quad \Delta S = 44.986 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G_f = -71.372 \text{ kcal mol}^{-1}$$

$$H_3O^+ \text{ için } \Delta H_f = 69.182 \text{ kcal mol}^{-1} \quad \Delta S = 46.025 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G_f = 55.467 \text{ kcal mol}^{-1}$$

Sulu çözeltide PM6 hesaplamalarından elde edilen değerler:

$$H_2O \text{ için } \Delta H_f = -61.130 \text{ kcal mol}^{-1} \quad \Delta S = 45.002 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G_f = -74.541 \text{ kcal mol}^{-1}$$

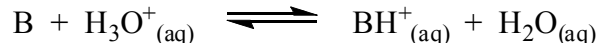
$$H_3O^+ \text{ için } \Delta H_f = 48.649 \text{ kcal mol}^{-1} \quad \Delta S = 46.414 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G_f = 34.818 \text{ kcal mol}^{-1}$$

DMF çözeltisinde PM6 hesaplamalarından elde edilen değerler:

$$H_2O \text{ için } \Delta H_f = -60.970 \text{ kcal mol}^{-1} \quad \Delta S = 45.002 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G_f = -74.381 \text{ kcal mol}^{-1}$$

$$H_3O^+ \text{ için } \Delta H_f = 50.664 \text{ kcal mol}^{-1} \quad \Delta S = 46.414 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G_f = 36.833 \text{ kcal mol}^{-1}$$

SB1 ve SB1-1a (bir proton alma (a ve b)) için AM1 yöntemi ile sulu çözeltide ($\epsilon=78.4$, $T=298K$) yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen değerler yardımıyla hesaplanan $\delta\Delta G_f(BH^+)$ ve kinetik pK_a hesapları aşağıdaki şekilde örneklendirilmiştir.



$\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$ ifadesi eşitlik (7.1.)'de verilmiştir.

$$\text{Asitlik: } \delta \Delta G_{f(BH^+)} = [\Delta G_{f(BH^+)} + \Delta G_{f(H_2O)}] - [\Delta G_{f(B)} + \Delta G_{f(H_3O^+)}] \quad (7.3.)$$

$$\delta \Delta G_{f(BH^+)} = [165,857 + (-77.798)] - [61,600 + 36.756]$$

$$\delta \Delta G_{f(BH^+)} = 88.059 - 98.356$$

$$\delta \Delta G_{f(BH^+)} = -10.297 \text{ kcal mol}^{-1}$$

$$pK_a(BH^+) = \frac{\delta \Delta G_{f(BH^+)}}{2,303 RT} \quad (7.4.)$$

$$pK_a(BH^+) = -10.297 \text{ kcal mol}^{-1} / 2.303 \times (1.987 \text{ cal mol}^{-1} \text{ K}^{-1}) \times 10^{-3} \times 298 \text{ K}$$

$$pK_a(BH^+) = -7.551$$

SB1 ve SB1-1c (iki proton alma (c)) için AM1 yöntemi ile sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298\text{K}$) yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen değerler yardımıyla hesaplanan $\delta \Delta G_{f(BH^+)}$ ve kinetik pK_a hesapları aşağıdaki şekilde örneklenmiştir.



$$\delta \Delta G_{f(BH_2^{2+})} = [\Delta G_{f(BH_2^{2+})} + 2 \cdot \Delta G_{f(H_2O)}] - [\Delta G_{f(B)} + 2 \Delta G_{f(H_3O^+)}] \quad (7.5.)$$

$$\delta \Delta G_{f(BH_2^{2+})} = [270,637 + 2 \times (-77.798)] - [61,600 + 2 \times 36.756]$$

$$\delta \Delta G_{f(BH_2^{2+})} = 115.041 - 135.112$$

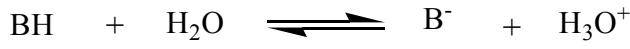
$$\delta \Delta G_{f(BH_2^{2+})} = -20.071 \text{ kcal mol}^{-1}$$

$$pK_a(BH_2^{2+}) = \frac{\delta \Delta G_{f(BH_2^{2+})}}{2,303 RT} \quad (7.6.)$$

$$pK_a(BH_2^{2+}) = -20.071 \text{ kcal mol}^{-1} / 2.303 \times (1.987 \text{ cal mol}^{-1} \text{ K}^{-1}) \times 10^{-3} \times 298 \text{ K}$$

$$pK_a(BH_2^{2+}) = -14.718$$

SB1-2 ve SB1-2d (bir proton verme (d ve e)) için AM1 yöntemi ile sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen değerler yardımıyla hesaplanan $\delta\Delta G_f(B^-)$ ve kinetik pK_a hesapları aşağıdaki şekilde örneklenmiştir.



$$\delta\Delta G_f(B^-) = [\Delta G_f(B^-) + \Delta G_f(H_3O^+)] - [\Delta G_f(BH) + \Delta G_f(H_2O)] \quad (7.7.)$$

$$\delta\Delta G_f(B^-) = [-114,923 + 36.756] - [-31,567 + (-77.798)]$$

$$\delta\Delta G_f(B^-) = (-78.167) - (-109.365)$$

$$\delta\Delta G_f(B^-) = 31.198 \text{ kcal mol}^{-1}$$

$$pK_{a(B^-)} = \frac{\delta\Delta G_f(B^-)}{2,303 RT} \quad (7.8.)$$

$$pK_{a(B^-)} = 31.198 \text{ kcal mol}^{-1} / 2.303 \times (1.987 \text{ cal mol}^{-1} \text{ K}^{-1}) \times 10^{-3} \times 298 \text{ K}$$

$$pK_{a(B^-)} = 22.878$$

SB1-2 ve SB1-2f (iki proton verme (f)) için AM1 yöntemi ile sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen değerler yardımıyla hesaplanan $\delta\Delta G_f(B^{2-})$ ve kinetik pK_a hesapları aşağıdaki şekilde örneklenmiştir.



$$\delta\Delta G_f(B^{2-}) = [\Delta G_f(B^{2-}) + 2 \times \Delta G_f(H_3O^+)] - [\Delta G_f(BH_2) + 2 \times \Delta G_f(H_2O)] \quad (7.9.)$$

$$\delta\Delta G_f(B^{2-}) = [-196,689 + 2 \times 36.756] - [-31,567 + 2 \times (-77.798)]$$

$$\delta\Delta G_f(B^{2-}) = (-123.177) - (-187.163)$$

$$\delta\Delta G_f(B^{2-}) = 63.986 \text{ kcal mol}^{-1}$$

$$pK_{a(B^{2-})} = \frac{\delta\Delta G_f(B^{2-})}{2,303 RT} \quad (7.10)$$

$$pK_{a(B^{2-})} = 63.986 \text{ kcal mol}^{-1} / 2.303 \times (1.987 \text{ cal mol}^{-1} \text{ K}^{-1}) \times 10^{-3} \times 298 \text{ K}$$

$$pK_{a(B^{2-})} = 46.922$$

Eşitlik (7.3.)-(7.10.) kullanılarak hesaplanan kinetik pK_a değerleri Çizelge 7.61 – 7.66’da verilmiştir.

7.1.3.2. Termodinamik pK_a Hesapları

İncelenen moleküller için Nötr baz (B), Konjuge asit (BH^+) olacak şekilde protonlanma merkezleri belirlenerek, Eşitlik (7.11), (7.13.), (7.15.) ve (7.17.)’e göre $\delta\Delta G_{(BH^+)}$ değeri hesaplanmıştır ve Eşitlik (7.12.), (7.14.), (7.16.) ve (7.18.) yardımıyla da termodinamik pK_a değerleri hesaplanmıştır. Eşitlik (7.11.)-(7.18.)’deki hesaplamalarda aşağıdaki sabitler kullanılmıştır.

Sulu çözeltide AM1 hesaplamalarından elde edilen değerler:

$$H_2O \text{ için } \Delta H = 2369.454 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta S = 45.087 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G = -11.066 \text{ cal mol}^{-1}$$

$$H_3O^+ \text{ için } \Delta H = 2377.772 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta S = 46.190 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G = -11.387 \text{ cal mol}^{-1}$$

DMF çözeltisinde AM1 hesaplamalarından elde edilen değerler:

$$H_2O \text{ için } \Delta H = -64.240 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta S = 45.087 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G = -11.066 \text{ cal mol}^{-1}$$

$$H_3O^+ \text{ için } \Delta H = 52.542 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta S = 46.190 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G = -11.387 \text{ cal mol}^{-1}$$

Sulu çözeltide PM3 hesaplamalarından elde edilen değerler:

$$H_2O \text{ için } \Delta H = 2370.017 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta S = 44.986 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G = -11.036 \text{ cal mol}^{-1}$$

$$H_3O^+ \text{ için } \Delta H = 2375.292 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta S = 46.025 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G = -11.340 \text{ cal mol}^{-1}$$

DMF çözeltisinde PM3 hesaplamalarından elde edilen değerler:

$$H_2O \text{ için } \Delta H = 2370.012 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta S = 44.986 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G = -11.036 \text{ cal mol}^{-1}$$

$$H_3O^+ \text{ için } \Delta H = 2375.338 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta S = 46.025 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G = -11.340 \text{ cal mol}^{-1}$$

Sulu çözeltide PM6 hesaplamalarından elde edilen değerler:

$$H_2O \text{ için } \Delta H = 2376.481 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta S = 45.002 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G = -11.034 \text{ cal mol}^{-1}$$

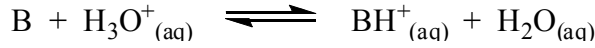
$$H_3O^+ \text{ için } \Delta H = 2382.801 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta S = 46.414 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G = -11.449 \text{ cal mol}^{-1}$$

DMF çözeltisinde PM6 hesaplamalarından elde edilen değerler:

$$H_2O \text{ için } \Delta H = 2376.425 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta S = 45.002 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G = -11.034 \text{ cal mol}^{-1}$$

$$H_3O^+ \text{ için } \Delta H = 2382.879 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta S = 46.414 \text{ cal mol}^{-1} \quad \Delta G = -11.449 \text{ cal mol}^{-1}$$

SB1 ve SB1-1a (bir proton alma (a ve b)) için AM1 yöntemi ile sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen değerler yardımıyla hesaplanan $\delta\Delta G_{(BH^+)}$ ve termodinamik pK_a hesapları aşağıdaki şekilde örneklendirilmiştir.



$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ ifadesi eşitlik (7.2.)'de verilmiştir.

$$\delta\Delta G_{(BH^+)} = [\Delta G_{(BH^+)} + \Delta G_{(H_2O)}] - [\Delta G_{(B)} + \Delta G_{(H_3O^+)}] \quad (7.11.)$$

$$\delta\Delta G_{(BH^+)} = [(-36,958) + (-11.066)] - [(-38,210) + (-11.387)]$$

$$\delta\Delta G_{(BH^+)} = (-48.024) - (-49.597)$$

$$\delta\Delta G_{(BH^+)} = 1.573 \text{ cal mol}^{-1}$$

$$pK_a(BH^+) = \frac{\delta\Delta G_{(BH^+)}}{2,303 RT} \quad (7.12)$$

$$pK_a(BH^+) = 1.573 \text{ cal mol}^{-1} / 2.303 \times (1.987 \text{ cal mol}^{-1} \text{ K}^{-1}) \times 10^{-3} \times 298 \text{ K}$$

$$pK_a(BH^+) = 1.153$$

SB1 ve SB1-1c (iki proton alma (c)) için AM1 yöntemi ile sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298\text{K}$) yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen değerler yardımıyla hesaplanan $\delta\Delta G_{(BH^+)}$ ve termodinamik pK_a hesapları aşağıdaki şekilde örneklendirilmiştir.



$$\delta\Delta G_{(BH_2^{2+})} = [\Delta G_{(BH_2^{2+})} + 2 \cdot \Delta G_{(H_2O)}] - [\Delta G_{(B)} + 2 \Delta G_{(H_3O^+)}] \quad (7.13.)$$

$$\delta\Delta G_{(BH_2^{2+})} = [(-36,505) + 2 \times (-11.066)] - [(-38,210) + 2 \times (-11.387)]$$

$$\delta\Delta G_{(BH_2^{2+})} = (-58.637) - (-60.984)$$

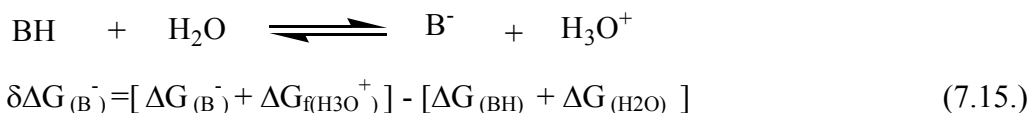
$$\delta\Delta G_{(BH_2^{2+})} = 2.347 \text{ cal mol}^{-1}$$

$$pK_a(BH_2^{2+}) = \frac{\delta\Delta G_{(BH_2^{2+})}}{2,303 RT} \quad (7.14.)$$

$$pK_a(BH_2^{2+}) = 2.347 \text{ cal mol}^{-1} / 2.303 \times (1.987 \text{ cal mol}^{-1} \text{ K}^{-1}) \times 10^{-3} \times 298 \text{ K}$$

$$pK_a(BH_2^{2+}) = 1.721$$

SB1-2 ve SB1-2d (bir proton verme (d ve e)) için AM1 yöntemi ile sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298\text{K}$) yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen değerler yardımıyla hesaplanan $\delta\Delta G_{(B^-)}$ ve termodinamik pK_a hesapları aşağıdaki şekilde örneklendirilmiştir.



$$\delta\Delta G_{(\text{B}^-)} = [(-40,050) + (-11,387)] - [(-39,551) + (-11,066)]$$

$$\delta\Delta G_{(\text{B}^-)} = (-51,437) - (-50,617)$$

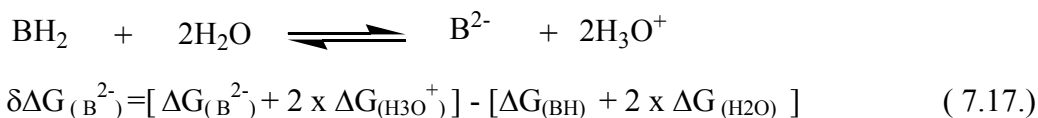
$$\delta\Delta G_{(\text{B}^-)} = -0,82 \text{ cal mol}^{-1}$$

$$\text{pK}_{\text{a}(\text{B}^-)} = \frac{\delta\Delta G_{(\text{B}^-)}}{2,303 \text{ RT}} \quad (7.16.)$$

$$\text{pK}_{\text{a}(\text{B}^-)} = -0,82 \text{ cal mol}^{-1} / 2,303 \times (1,987 \text{ cal mol}^{-1} \text{ K}^{-1}) \times 10^{-3} \times 298 \text{ K}$$

$$\text{pK}_{\text{a}(\text{B}^-)} = -0,601$$

SB1-2 ve SB1-2f (iki proton verme (f)) için AM1 yöntemi ile sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298\text{K}$) yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen değerler yardımıyla hesaplanan $\delta\Delta G_{(\text{B}^-)}$ ve termodinamik pK_{a} hesapları aşağıdaki şekilde örneklenmiştir.



$$\delta\Delta G_{(\text{B}^{2-})} = [(-38,625) + 2 \times (-11,387)] - [(-39,551) + 2 \times (-11,066)]$$

$$\delta\Delta G_{(\text{B}^{2-})} = (-61,399) - (-61,683)$$

$$\delta\Delta G_{(\text{B}^{2-})} = 0,284 \text{ cal mol}^{-1}$$

$$\text{pK}_{\text{a}(\text{B}^{2-})} = \frac{\delta\Delta G_{(\text{B}^{2-})}}{2,303 \text{ RT}} \quad (7.18.)$$

$$\text{pK}_{\text{a}(\text{B}^{2-})} = 0,284 \text{ cal mol}^{-1} / 2,303 \times (1,987 \text{ cal mol}^{-1} \text{ K}^{-1}) \times 10^{-3} \times 298 \text{ K}$$

$$\text{pK}_{\text{a}(\text{B}^{2-})} = 0,208$$

İlk proton almayı yaparak mono katyon haline gelen moleküller bu bölgede ikinci proton almayı da yaparlar. Protonlanma ilk önce imindeki bir N atomu üzerinde gerçekleşmekte sonra diğer N atomu üzerinden ve her ikisi üzerinden de gerçekleşmektedir. Eşitlik (7.11.)–(7.18.) kullanılarak hesaplanan termodinamik pK_{a} değerleri Çizelge 7.61 -7.66 'de verilmiştir.

Çizelge 7.61. AM1 yöntemiyle su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri

Bileşik	$\delta\Delta G_f^a$	$pK_{a(k)}^b$	$\delta\Delta G^c$	$pK_{a(t)}^d$
SB1-1a	-10,297	-7,551	1,573	1,153
SB1-1b	-11,403	-8,362	0,677	0,496
SB1-2a	-12,312	-9,028	-0,384	-0,281
SB1-2b	-11,305	-8,290	0,938	0,688
SB1-3a	-11,364	-8,334	-1,331	-0,976
SB1-3b	-7,901	-5,794	-1,222	-0,896
SB1-4a	-10,469	-7,677	-0,344	-0,252
SB1-4b	-10,296	-7,550	-0,754	-0,553
SB1-5a	-9,983	-7,321	-0,956	-0,701
SB1-5b	-10,775	-7,902	-0,462	-0,339
SB1-6a	-8,797	-6,451	-1,587	-1,164
SB1-6b	-8,732	-6,403	-1,609	-1,180
SB1-7a	-13,185	-9,669	0,182	0,133
SB1-7b	-14,102	-10,341	1,117	0,819
SB1-8a	-12,893	-9,454	-1,730	-1,268
SB1-8b	-16,005	-11,737	1,170	0,858
SB1-9a	-8,977	-6,583	-0,844	-0,619
SB1-9b	-8,429	-6,181	-1,248	-0,915
SB1-10a	-11,176	-8,196	-2,853	-2,092
SB1-10b	-10,501	-7,701	-1,060	-0,778
SB1-11a	-6,660	-4,884	-1,748	-1,282
SB1-11b	-6,232	-4,570	-2,438	-1,788
SB1-12a	-4,444	-3,259	-2,249	-1,649
SB1-12b	-6,052	-4,438	-1,572	-1,153
SB1-13a	-11,951	-8,764	-0,560	-0,410
SB1-13b	-11,032	-8,090	-1,561	-1,145
SB1-14a	-12,551	-9,204	-1,267	-0,929
SB1-14b	-12,592	-9,234	-1,371	-1,005
SB1-15a	-12,295	-9,016	-0,523	-0,383
SB1-15b	-9,834	-7,211	-0,456	-0,334
SB1-16a	-9,005	-6,604	1,276	0,936
SB1-16b	-8,006	-5,871	0,469	0,344
SB1-17a	-11,373	-8,340	0,086	0,063
SB1-17b	-10,708	-7,853	-0,418	-0,307
SB1-18a	-8,565	-6,281	-0,774	-0,567
SB1-18b	-8,398	-6,158	-1,237	-0,907
SB2-1a	-9,117	-6,685	-1,668	-1,223
SB2-1b	-8,213	-6,023	-1,704	-1,249
SB2-2a	-7,288	-5,344	-3,373	-2,473
SB2-2b	-7,656	-5,614	-1,404	-1,030
SB2-3a	-11,11	-8,147	-0,312	-0,228
SB2-3b	-11,825	-8,672	0,333	0,244
SB2-4a	-9,817	-7,199	-1,082	-0,793
SB2-4b	-9,644	-7,072	-1,345	-0,986
SB2-5a	-9,035	-6,626	-1,839	-1,348

Çizelge 7.61. (Devam) AM1 yöntemiyle su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri

SB2-5b	-8,931	-6,549	-1,721	-1,262
SB2-6a	3,113	2,283	-0,347	-0,254
SB2-6b	4,138	3,034	-1,104	-0,809
SB2-7a	-10,047	-7,368	-1,015	-0,744
SB2-7b	-10,053	-7,372	-1,461	-1,072
SB2-8a	-10,000	-7,333	-0,790	-0,579
SB2-8b	-5,898	-4,325	-1,856	-1,361
TSB-1a	-8,834	-6,478	-0,948	-0,695
TSB-1b	-18,629	-13,661	-0,201	-0,148
TSB-2a	-9,048	-6,635	0,122	0,089
TSB-2b	-17,504	-12,836	-1,168	-0,856
TSB-3a	-12,17	-8,924	-0,106	-0,078
TSB-3b	-19,223	-14,096	0,170	0,125
TSB-4a	-11,469	-8,410	0,318	0,234
TSB-4b	-18,952	-13,898	-0,268	-0,196
TSB-5a	-9,486	-6,956	-1,116	-0,819
TSB-5b	-17,505	-12,837	-1,376	-1,009
TSB-6a	-8,949	-6,562	-1,886	-1,383
TSB-6b	-17,764	-13,027	-1,293	-0,948
TSB-7a	-10,606	-7,778	-0,826	-0,606
TSB-7b	-19,873	-14,573	0,578	0,424
TSB-8a	-6,924	-5,077	-1,095	-0,803
TSB-8b	-17,653	-12,945	-1,291	-0,947
SB1-1c	-20,071	-14,718	2,346	1,721
SB1-2c	-18,883	-13,848	-1,382	-1,013
SB1-3c	-15,342	-11,251	-1,428	-1,047
SB1-4c	-16,096	-11,803	-2,987	-2,191
SB1-5c	-17,251	-12,651	-2,859	-2,097
SB1-6c	-16,055	-11,774	-2,472	-1,813
SB1-7c	-25,091	-18,399	0,468	0,343
SB1-8c	-27,832	-20,410	-0,797	-0,585
SB1-9c	-13,911	-10,202	-3,099	-2,273
SB1-10c	-20,592	-15,101	-2,234	-1,638
SB1-11c	-11,857	-8,695	-1,984	-1,455
SB1-12c	-11,775	-8,635	-1,900	-1,393
SB1-13c	-18,934	-13,884	-3,196	-2,343
SB1-14c	-23,694	-17,375	-2,276	-1,669
SB1-15c	-19,779	-14,504	-1,170	-0,858
SB1-16c	-12,447	-9,127	-0,740	-0,542
SB1-17c	-17,687	-12,971	-1,901	-1,394
SB1-18c	-14,811	-10,861	-1,441	-1,057
SB2-1c	-14,646	-10,74	-2,785	-2,043
SB2-2c	-13,925	-10,212	-3,408	-2,499
SB2-3c	-17,288	-12,677	-1,316	-0,965
SB2-4c	-16,601	-12,174	-2,325	-1,705
SB2-5c	-15,029	-11,021	-3,589	-2,632
SB2-6c	-4,858	-3,562	-0,471	-0,345

Çizelge 7.61. (Devam) AM1 yöntemiyle su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri

SB2-7c	-17,209	-12,62	-2,207	-1,619
SB2-8c	-12,994	-9,528	-2,760	-2,024
TSB-1c	-24,438	-17,921	-1,911	-1,402
TSB-2c	-24,575	-18,022	-1,125	-0,825
TSB-3c	-29,021	-21,282	-0,096	-0,071
TSB-4c	-26,784	-19,641	-1,238	-0,908
TSB-5c	-25,707	-18,852	-2,252	-1,651
TSB-6c	-26,396	-19,357	-1,583	-1,161
TSB-7c	-27,485	-20,155	-1,021	-0,749
TSB-8c	-22,515	-16,510	-2,122	-1,556
SB1-2d	31,197	22,878	-8,641	-6,336
SB1-2e	39,550	29,003	-10,868	-7,97
SB1-3d	26,115	19,151	-9,097	-6,671
SB1-3e	32,910	24,133	-9,590	-7,033
SB1-10d	34,758	25,489	-7,314	-5,364
SB1-10e	44,191	32,406	-10,581	-7,760
SB1-15d	26,224	19,23	-9,355	-6,86
SB1-15e	38,474	28,214	-8,894	-6,522
SB1-17d	29,889	21,918	-8,422	-6,176
SB1-17e	33,875	24,841	-10,150	-7,443
SB2-1d	32,146	23,573	-9,282	-6,806
SB2-2d	-76,613	-56,181	-12,166	-8,922
SB2-3d	30,376	22,275	-8,980	-6,585
SB2-3e	36,857	27,028	-9,223	-6,763
SB2-4d	32,112	23,549	-58,175	-42,66
SB2-5d	33,601	24,640	-56,294	-41,281
SB2-6d	44,417	32,572	-0,321	-0,235
SB2-7d	32,47	23,811	-17,385	-12,749
SB2-8d	33,38	24,478	-14,584	-10,695
TSB-3d	216,938	159,084	-18,966	-13,908
TSB-3e	209,885	153,912	-15,494	-11,362
SB1-2f	63,986	46,922	0,285	0,209
SB1-3f	53,482	39,219	-0,912	-0,669
SB1-10f	69,915	51,270	2,087	1,53
SB1-15f	56,895	41,722	0,712	0,522
SB1-17f	79,399	58,224	-0,568	-0,417
TSB-3f	429,195	314,736	-0,867	-0,635

$$pK_{a(k)} = \delta\Delta G_f / 2,303RT, \quad pK_{a(t)} = \delta\Delta G / 2,303RT$$

Çizelge 7.62. AM1 yöntemiyle DMF fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri

Bileşik	$\delta\Delta G_f^a$	$pK_{a(k)}^b$	$\delta\Delta G^c$	$pK_{a(t)}^d$
SB1-1a	-11,132	-8,163	1,745	1,280

Çizelge 7.62. (Devam) AM1 yöntemiyle DMF fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri

SB1-1b	-12,342	-9,051	0,740	0,542
SB1-2a	-12,972	-9,512	-0,190	-0,139
SB1-2b	-12,250	-8,983	0,956	0,701
SB1-3a	-12,152	-8,912	1,571	1,152
SB1-3b	-8,821	-6,469	1,259	0,923
SB1-4a	-11,129	-8,161	0,553	0,405
SB1-4b	-11,110	-8,147	0,836	0,613
SB1-5a	-10,765	-7,894	1,042	0,764
SB1-5b	-11,602	-8,508	0,525	0,385
SB1-6a	-9,263	-6,792	2,004	1,470
SB1-6b	-9,164	-6,720	2,023	1,484
SB1-7a	-14,097	-10,338	-0,177	-0,130
SB1-7b	-14,897	-10,924	-0,997	-0,731
SB1-8a	-14,004	-10,269	1,549	1,136
SB1-8b	-16,903	-12,395	-1,095	-0,803
SB1-9a	-9,968	-7,310	0,663	0,486
SB1-9b	-9,452	-6,931	1,038	0,761
SB1-10a	-12,371	-9,072	2,680	1,965
SB1-10b	-11,716	-8,592	0,720	0,528
SB1-11a	-7,590	-5,566	1,719	1,261
SB1-11b	-7,283	-5,341	2,228	1,634
SB1-12a	-5,418	-3,973	2,157	1,581
SB1-12b	-6,989	-5,125	1,397	1,025
SB1-13a	-12,766	-9,361	0,695	0,51
SB1-13b	-11,745	-8,613	1,833	1,344
SB1-14a	-13,567	-9,949	1,187	0,87
SB1-14b	-13,394	-9,822	1,538	1,128
SB1-15a	-14,265	-10,461	-0,413	-0,303
SB1-15b	-11,131	-8,162	0,09	0,066
SB1-16a	-9,992	-7,327	-1,302	-0,955
SB1-16b	-8,951	-6,564	-0,475	-0,348
SB1-17a	-12,128	-8,893	0,078	0,057
SB1-17b	-11,705	-8,584	0,425	0,311
SB1-18a	-10,162	-7,452	0,140	0,103
SB1-18b	-9,505	-6,970	1,027	0,753
SB2-1a	-9,702	-7,114	1,954	1,433
SB2-1b	-9,064	-6,647	1,732	1,270
SB2-2a	-8,257	-6,055	3,386	2,483
SB2-2b	-8,234	-6,038	1,573	1,154
SB2-3a	-12,988	-9,525	-0,684	-0,502
SB2-3b	-12,648	-9,275	-0,162	-0,119
SB2-4a	-10,788	-7,911	0,967	0,709
SB2-4b	-10,520	-7,714	1,332	0,977
SB2-5a	-9,349	-6,856	2,405	1,764
SB2-5b	-9,603	-7,042	1,892	1,388
SB2-6a	2,149	1,576	0,346	0,254
SB2-6b	3,034	2,225	0,959	0,703

Çizelge 7.62. (Devam) AM1 yöntemiyle DMF fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri

SB2-7a	-11,135	-8,166	0,767	0,562
SB2-7b	-11,194	-8,209	1,199	0,879
SB2-8a	-9,860	-7,230	1,822	1,336
SB2-8b	-6,339	-4,648	2,34	1,716
TSB-1a	-9,761	-7,158	0,972	0,713
TSB-1b	-19,16	-14,051	0,223	0,163
TSB-2a	-10,187	-7,470	-0,476	-0,349
TSB-2b	-18,118	-13,286	1,209	0,886
TSB-3a	-13,145	-9,640	0,159	0,117
TSB-3b	-19,772	-14,499	-0,174	-0,128
TSB-4a	-12,298	-9,018	-0,221	-0,162
TSB-4b	-19,429	-14,248	0,305	0,224
TSB-5a	-10,396	-7,624	1,125	0,825
TSB-5b	-18,364	-13,467	1,075	0,788
TSB-6a	-9,403	-6,896	2,355	1,727
TSB-6b	-17,832	-13,076	1,761	1,291
TSB-7a	-11,508	-8,439	0,853	0,626
TSB-7b	-20,566	-15,081	-0,748	-0,548
TSB-8a	-7,747	-5,681	1,254	0,919
TSB-8b	-18,025	-13,218	1,468	1,076
SB1-1c	-21,081	-15,459	2,528	1,854
SB1-2c	-20,097	-14,738	1,596	1,171
SB1-3c	-16,198	-11,879	1,849	1,356
SB1-4c	-17,020	-12,481	3,377	2,476
SB1-5c	-18,221	-13,362	3,194	2,342
SB1-6c	-16,622	-12,189	3,187	2,337
SB1-7c	-26,301	-19,287	-0,287	-0,210
SB1-8c	-29,054	-21,306	1,071	0,785
SB1-9c	-14,756	-10,821	3,392	2,487
SB1-10c	-22,519	-16,514	1,887	1,383
SB1-11c	-12,428	-9,114	2,718	1,993
SB1-12c	-12,484	-9,155	2,263	1,66
SB1-13c	-19,549	-14,336	4,084	2,995
SB1-14c	-25,733	-18,871	1,781	1,306
SB1-15c	-21,083	-15,460	1,385	1,016
SB1-16c	-13,594	-9,969	1,013	0,743
SB1-17c	-18,922	-13,876	2,139	1,569
SB1-18c	-15,970	-11,711	1,678	1,231
SB2-1c	-15,567	-11,416	3,193	2,341
SB2-2c	-14,859	-10,897	3,727	2,733
SB2-3c	-18,210	-13,354	1,808	1,326
SB2-4c	-17,623	-12,923	2,604	1,909
SB2-5c	-15,975	-11,715	3,947	2,895
SB2-6c	-5,915	-4,337	0,820	0,602
SB2-7c	-18,448	-13,528	2,257	1,655
SB2-8c	-13,592	-9,967	3,505	2,571
TSB-1c	-25,017	-18,345	2,281	1,673

Çizelge 7.62. (Devam) AM1 yöntemiyle DMF fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri

TSB-2c	-25,242	-18,511	1,327	0,973
TSB-3c	-29,726	-21,798	0,464	0,340
TSB-4c	-27,418	-20,106	1,516	1,112
TSB-5c	-26,301	-19,287	2,570	1,885
TSB-6c	-26,423	-19,376	2,477	1,817
TSB-7c	-28,063	-20,579	1,350	0,990
TSB-8c	-23,032	-16,89	2,571	1,886
SB1-2d	34,288	25,144	-0,710	-0,520
SB1-2e	42,447	31,127	0,464	0,340
SB1-3d	29,773	21,833	-10,03	-7,355
SB1-3e	35,963	26,373	1,529	1,121
SB1-10d	37,749	27,682	0,932	0,684
SB1-10e	46,866	34,368	3,979	2,918
SB1-15d	29,364	21,533	-0,778	-0,57
SB1-15e	40,991	30,060	0,981	0,720
SB1-17d	33,006	24,204	-0,447	-0,328
SB1-17e	35,911	26,334	-1,482	-1,087
SB2-1d	35,084	25,728	0,143	0,105
SB2-2d	33,746	24,747	0,037	0,027
SB2-3d	33,263	24,392	-1,169	-0,857
SB2-3e	39,827	29,206	0,136	0,100
SB2-4d	35,154	25,779	0,107	0,079
SB2-5d	36,541	26,796	1,723	1,264
SB2-6d	46,990	34,458	-1,346	-0,987
SB2-7d	35,219	25,827	0,254	0,186
SB2-8d	36,744	26,945	1,940	1,422
TSB-3d	219,761	161,154	-0,578	-0,424
TSB-3e	213,134	156,295	-0,847	-0,621
SB1-2f	70,461	51,671	0,250	0,183
SB1-3f	60,351	44,257	-0,447	-0,328
SB1-10f	76,426	56,044	2,129	1,561
SB1-15f	63,203	46,348	0,604	0,443
SB1-17f	86,685	63,567	-0,549	-0,403
TSB-3f	436,086	319,790	0,110	0,080

$$pK_{a(k)} = \delta\Delta G_f / 2,303RT, \quad pK_{a(t)} = \delta\Delta G / 2,303RT$$

Çizelge 7.63. PM3 yöntemiyle su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri

Bileşik	$\delta\Delta G_f^a$	$pK_{a(k)}^b$	$\delta\Delta G^c$	$pK_{a(t)}^d$
SB1-1a	-16,192	-11,874	2,100	1,540
SB1-1b	-15,815	-11,598	-2,761	-2,025
SB1-2a	-17,512	-12,842	-0,722	-0,529

Çizelge 7.63. (Devam) PM3 yöntemiyle su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri

SB1-2b	-18,191	-13,340	-0,970	-0,711
SB1-3a	-17,251	-12,651	-0,706	-0,518
SB1-3b	-17,078	-12,523	-1,335	-0,979
SB1-4a	-17,826	-13,072	-0,288	-0,211
SB1-4b	-17,211	-12,621	-0,811	-0,595
SB1-5a	-17,212	-12,622	-0,957	-0,701
SB1-5b	-16,635	-12,199	-1,726	-1,266
SB1-6a	-14,935	-10,952	-2,883	-2,114
SB1-6b	-15,505	-11,370	-2,048	-1,502
SB1-7a	-16,946	-12,427	-2,931	-2,150
SB1-7b	-17,502	-12,834	-2,524	-1,851
SB1-8a	-18,656	-13,681	-1,960	-1,437
SB1-8b	-19,539	-14,328	-1,606	-1,178
SB1-9a	-16,564	-12,147	-0,950	-0,697
SB1-9b	-17,018	-12,479	-0,522	-0,383
SB1-10a	-17,547	-12,867	-1,834	-1,345
SB1-10b	-18,338	-13,447	-0,658	-0,483
SB1-11a	-14,978	-10,984	-1,847	-1,355
SB1-11b	-14,930	-10,949	-1,547	-1,134
SB1-12a	-17,124	-12,557	0,540	0,396
SB1-12b	-16,760	-12,290	0,432	0,317
SB1-13a	-17,258	-12,655	-1,530	-1,122
SB1-13b	-18,239	-13,375	-0,683	-0,501
SB1-14a	-20,769	-15,23	-0,364	-0,267
SB1-14b	-20,645	-15,139	-0,496	-0,364
SB1-15a	-16,346	-11,987	-1,696	-1,243
SB1-15b	-17,025	-12,484	-1,871	-1,372
SB1-16a	-17,430	-12,782	1,832	1,343
SB1-16b	-15,644	-11,472	0,364	0,267
SB1-17a	-18,963	-13,906	-0,136	-0,100
SB1-17b	-14,153	-10,379	-1,363	-0,999
SB1-18a	-16,785	-12,309	-0,788	-0,578
SB1-18b	-15,923	-11,677	-0,940	-0,690
SB2-1a	-16,587	-12,163	-1,708	-1,253
SB2-1b	-15,144	-11,105	-1,906	-1,398
SB2-2a	-15,542	-11,397	-2,155	-1,58
SB2-2b	-16,304	-11,956	-0,433	-0,318
SB2-3a	-18,004	-13,203	-0,685	-0,502
SB2-3b	-19,016	-13,945	-0,521	-0,382
SB2-4a	-16,786	-12,31	-2,278	-1,671
SB2-4b	-16,192	-11,874	-1,93	-1,415
SB2-5a	-16,071	-11,785	-2,035	-1,492
SB2-5b	-15,833	-11,610	-1,915	-1,404
SB2-6a	1,862	1,365	-4,520	-3,315
SB2-6b	1,072	0,786	-3,484	-2,555
SB2-7a	-17,791	-13,046	-0,640	-0,469
SB2-7b	-17,391	-12,753	-1,023	-0,751

Çizelge 7.63. (Devam) PM3 yöntemiyle su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri

SB2-8a	-16,509	-12,106	-2,282	-1,673
SB2-8b	-14,152	-10,378	-1,330	-0,976
TSB-1a	-16,269	-11,931	-0,990	-0,726
TSB-1b	-32,665	-23,954	-1,053	-0,772
TSB-2a	-15,126	-11,092	-1,322	-0,970
TSB-2b	-28,937	-21,220	-2,969	-2,177
TSB-3a	-18,539	-13,595	-0,930	-0,682
TSB-3b	-33,385	-24,482	-0,331	-0,243
TSB-4a	-17,347	-12,721	-0,883	-0,648
TSB-4b	-32,155	-23,580	-1,272	-0,933
TSB-5a	-16,954	-12,433	-1,189	-0,872
TSB-5b	-31,833	-23,344	-1,438	-1,054
TSB-6a	-16,721	-12,262	-1,524	-1,117
TSB-6b	-31,879	-23,378	-1,605	-1,177
TSB-7a	-17,119	-12,553	-1,268	-0,930
TSB-7b	-32,272	-23,666	-1,226	-0,899
TSB-8a	-15,033	-11,024	-2,556	-1,874
TSB-8b	-32,002	-23,468	-7,613	-5,582
SB1-1c	-30,727	-22,532	3,905	2,864
SB1-2c	-31,827	-23,340	2,756	2,021
SB1-3c	-29,04	-21,296	3,117	2,286
SB1-4c	-30,617	-22,452	2,266	1,662
SB1-5c	-29,91	-21,934	3,159	2,317
SB1-6c	-26,604	-19,509	4,958	3,636
SB1-7c	-34,612	-25,382	3,961	2,905
SB1-8c	-38,531	-28,256	1,827	1,340
SB1-9c	-27,754	-20,352	3,757	2,755
SB1-10c	-33,114	-24,283	1,115	0,817
SB1-11c	-26,661	-19,551	2,654	1,946
SB1-12c	-29,659	-21,749	1,363	1,000
SB1-13c	-29,843	-21,884	4,498	3,298
SB1-14c	-36,078	-26,457	3,444	2,526
SB1-15c	-30,499	-22,366	3,126	2,292
SB1-16c	-28,024	-20,550	0,337	0,247
SB1-17c	-32,022	-23,482	2,200	1,613
SB1-18c	-28,412	-20,835	2,660	1,950
SB2-1c	-29,366	-21,534	2,946	2,161
SB2-2c	-29,497	-21,631	3,113	2,283
SB2-3c	-31,679	-23,231	2,257	1,655
SB2-4c	-29,588	-21,698	3,086	2,263
SB2-5c	-29,383	-21,547	2,520	1,848
SB2-6c	-12,555	-9,207	5,380	3,946
SB2-7c	-31,529	-23,121	1,795	1,316
SB2-8c	-27,403	-20,095	3,769	2,764
TSB-1c	-43,856	-32,16	3,304	2,423
TSB-2c	-45,361	-33,264	2,112	1,549
TSB-3c	-47,749	-35,015	1,635	1,199

Çizelge 7.63. (Devam) PM3 yöntemiyle su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri

TSB-4c	-47,057	-34,508	1,935	1,419
TSB-5c	-45,943	-33,691	3,326	2,439
TSB-6c	-45,948	-33,695	3,211	2,355
TSB-7c	-47,026	-34,485	2,203	1,616
TSB-8c	-43,774	-32,100	-25,811	-18,928
SB1-2d	40,287	29,543	-0,067	-0,049
SB1-2e	44,467	32,608	0,955	0,700
SB1-3d	37,285	27,342	0,202	0,148
SB1-3e	40,043	29,364	1,057	0,775
SB1-10d	43,339	31,781	-0,287	-0,210
SB1-10e	48,295	35,416	4,241	3,110
SB1-15d	38,852	28,491	1,983	1,454
SB1-15e	46,275	33,934	2,736	2,006
SB1-17d	37,083	27,194	0,808	0,593
SB1-17e	40,701	29,847	-0,022	-0,016
SB2-1d	39,750	29,150	67,489	49,491
SB2-2d	38,139	27,968	74,304	54,488
SB2-3d	40,010	29,340	93,834	68,810
SB2-3e	44,404	32,562	92,524	67,850
SB2-4d	39,626	29,059	67,986	49,856
SB2-5d	40,390	29,619	77,968	57,176
SB2-6d	50,983	37,387	67,687	49,636
SB2-7d	40,069	29,383	76,674	56,227
SB2-8d	40,909	29,999	70,713	51,855
TSB-3d	43,078	31,590	-0,736	-0,539
TSB-3e	42,665	31,287	-1,020	-0,748
SB1-2f	80,363	58,931	0,562	0,412
SB1-3f	74,037	54,293	1,509	1,107
SB1-10f	83,229	61,033	-0,576	-0,422
SB1-15f	77,513	56,842	1,108	0,813
SB1-17f	95,552	70,070	-0,763	-0,559
TSB-3f	97,935	71,818	-0,784	-0,575

$$pK_{a(k)} = \delta\Delta G_f / 2,303RT, \quad pK_{a(t)} = \delta\Delta G / 2,303RT$$

Çizelge 7.64. PM3 yöntemiyle DMF fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri

Bileşik	$\delta\Delta G_f^a$	$pK_{a(k)}^b$	$\delta\Delta G^c$	$pK_{a(t)}^d$
SB1-1a	-16,768	-12,296	2,401	1,761
SB1-1b	-16,569	-12,151	2,885	2,115
SB1-2a	-18,015	-13,210	1,047	0,767
SB1-2b	-18,767	-13,762	1,312	0,962
SB1-3a	-18,158	-13,315	0,615	0,451

Çizelge 7.64. (Devam) PM3 yöntemiyle DMF fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri

SB1-3b	-18,183	-13,334	1,104	0,810
SB1-4a	-18,655	-13,68	0,302	0,222
SB1-4b	-18,126	-13,292	0,764	0,560
SB1-5a	-18,065	-13,248	0,907	0,665
SB1-5b	-17,507	-12,838	1,672	1,226
SB1-6a	-16,447	-12,061	2,205	1,617
SB1-6b	-17,652	-12,944	0,760	0,557
SB1-7a	-17,879	-13,111	2,876	2,109
SB1-7b	-18,408	-13,499	2,492	1,827
SB1-8a	-19,675	-14,428	1,814	1,330
SB1-8b	-20,607	-15,111	1,451	1,064
SB1-9a	-17,273	-12,667	0,998	0,732
SB1-9b	-17,736	-13,006	0,562	0,412
SB1-10a	-18,413	-13,503	1,987	1,457
SB1-10b	-19,260	-14,124	0,672	0,493
SB1-11a	-16,121	-11,822	1,564	1,147
SB1-11b	-16,113	-11,816	1,191	0,874
SB1-12a	-17,478	-12,817	-0,099	-0,072
SB1-12b	-17,206	-12,617	-0,147	-0,108
SB1-13a	-17,685	-12,969	2,001	1,467
SB1-13b	-18,897	-13,857	0,959	0,703
SB1-14a	-21,680	-15,898	0,336	0,246
SB1-14b	-21,540	-15,795	0,530	0,389
SB1-15a	-17,060	-12,510	1,794	1,316
SB1-15b	-17,935	-13,152	1,851	1,357
SB1-16a	-18,117	-13,286	-1,606	-1,178
SB1-16b	-15,969	-11,710	0,198	0,145
SB1-17a	-19,888	-14,585	0,088	0,065
SB1-17b	-15,242	-11,177	1,305	0,957
SB1-18a	-17,866	-13,102	0,576	0,423
SB1-18b	-16,905	-12,397	0,811	0,595
SB2-1a	-17,199	-12,612	1,914	1,403
SB2-1b	-15,734	-11,538	2,171	1,592
SB2-2a	-16,555	-12,140	2,088	1,531
SB2-2b	-17,058	-12,509	0,425	0,312
SB2-3a	-18,308	-13,426	1,226	0,899
SB2-3b	-19,687	-14,437	0,795	0,583
SB2-4a	-17,520	-12,848	2,352	1,725
SB2-4b	-16,936	-12,42	2,029	1,488
SB2-5a	-16,738	-12,274	2,199	1,612
SB2-5b	-16,537	-12,127	2,001	1,467
SB2-6a	-4,996	-3,664	1,735	1,272
SB2-6b	-4,598	-3,372	1,800	1,320
SB2-7a	-18,626	-13,659	0,623	0,457
SB2-7b	-18,277	-13,403	0,967	0,709
SB2-8a	-17,571	-12,885	2,061	1,511
SB2-8b	-15,422	-11,309	0,96	0,704

Çizelge 7.64. (Devam) PM3 yöntemiyle DMF fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri

TSB-1a	-17,433	-12,784	0,726	0,533
TSB-1b	-33,516	-24,578	0,729	0,535
TSB-2a	-16,196	-11,877	1,046	0,767
TSB-2b	-29,632	-21,730	2,942	2,157
TSB-3a	-19,503	-14,302	0,950	0,697
TSB-3b	-33,730	-24,735	0,519	0,380
TSB-4a	-18,168	-13,323	0,944	0,692
TSB-4b	-32,743	-24,011	1,191	0,873
TSB-5a	-17,425	-12,778	1,538	1,128
TSB-5b	-32,200	-23,613	1,602	1,175
TSB-6a	-17,676	-12,962	1,446	1,061
TSB-6b	-32,533	-23,857	1,469	1,078
TSB-7a	-17,967	-13,175	1,273	0,934
TSB-7b	-32,797	-24,050	1,205	0,884
TSB-8a	-15,786	-11,576	0,770	0,565
TSB-8b	-32,401	-23,760	1,455	1,067
SB1-1c	-31,561	-23,144	4,059	2,976
SB1-2c	-32,597	-23,904	2,979	2,185
SB1-3c	-29,918	-21,939	3,144	2,305
SB1-4c	-31,684	-23,234	2,109	1,546
SB1-5c	-30,537	-22,394	3,363	2,466
SB1-6c	-28,170	-20,658	4,249	3,116
SB1-7c	-35,680	-26,165	3,858	2,829
SB1-8c	-39,553	-29,005	1,829	1,341
SB1-9c	-28,590	-20,966	3,624	2,658
SB1-10c	-32,515	-23,844	2,686	1,969
SB1-11c	-27,864	-20,433	2,363	1,733
SB1-12c	-30,011	-22,007	1,681	1,233
SB1-13c	-30,681	-22,499	4,735	3,472
SB1-14c	-37,084	-27,195	3,521	2,582
SB1-15c	-31,587	-23,163	3,114	2,284
SB1-16c	-28,526	-20,919	0,803	0,589
SB1-17c	-33,091	-24,267	2,165	1,588
SB1-18c	-29,525	-21,651	2,495	1,830
SB2-1c	-30,005	-22,004	3,204	2,350
SB2-2c	-30,459	-22,336	3,021	2,215
SB2-3c	-32,571	-23,885	2,365	1,734
SB2-4c	-30,370	-22,271	3,215	2,357
SB2-5c	-30,116	-22,084	2,672	1,959
SB2-6c	-18,514	-13,577	3,247	2,381
SB2-7c	-32,494	-23,828	1,699	1,246
SB2-8c	-28,598	-20,972	3,486	2,556
TSB-1c	-44,731	-32,802	2,967	2,176
TSB-2c	-45,931	-33,682	2,084	1,528
TSB-3c	-48,384	-35,481	1,667	1,223
TSB-4c	-47,682	-34,966	1,840	1,349
TSB-5c	-46,159	-33,849	3,608	2,646

Çizelge 7.64. (Devam) PM3 yöntemiyle DMF fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri

TSB-6c	-46,574	-34,153	3,113	2,283
TSB-7c	-47,498	-34,831	2,218	1,627
TSB-8c	-44,214	-32,423	2,321	1,702
SB1-2d	43,454	31,865	0,119	0,087
SB1-2e	47,740	35,009	1,284	0,942
SB1-3d	40,082	29,393	0,094	0,069
SB1-3e	43,14	31,635	1,239	0,908
SB1-10d	46,356	33,994	-0,169	-0,124
SB1-10e	51,206	37,551	4,481	3,286
SB1-15d	41,881	30,712	2,081	1,526
SB1-15e	49,280	36,138	2,889	2,119
SB1-17d	39,904	29,262	0,753	0,552
SB1-17e	43,553	31,938	-0,072	-0,052
SB2-1d	42,743	31,344	-0,003	-0,002
SB2-2d	41,008	30,072	-0,486	-0,357
SB2-3d	43,124	31,623	0,649	0,476
SB2-3e	47,295	34,682	0,347	0,254
SB2-4d	42,543	31,197	0,689	0,505
SB2-5d	43,448	31,861	0,571	0,419
SB2-6d	54,310	39,826	-0,946	-0,694
SB2-7d	43,051	31,570	0,455	0,333
SB2-8d	43,522	31,916	0,937	0,687
TSB-3d	46,008	33,738	-0,730	-0,536
TSB-3e	45,793	33,581	-0,833	-0,611
SB1-2f	86,989	63,790	0,676	0,496
SB1-3f	80,441	58,989	1,504	1,103
SB1-10f	90,156	66,113	-0,080	-0,059
SB1-15f	81,015	59,410	1,133	0,831
SB1-17f	129,684	95,099	0,568	0,417
TSB-3f	105,530	77,387	-0,662	-0,485

$$pK_{a(k)} = \delta\Delta G_f / 2,303RT, \quad pK_{a(t)} = \delta\Delta G / 2,303RT$$

Çizelge 7.65. PM6 yöntemiyle su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri

Bileşik	$\delta\Delta G_f^a$	$pK_{a(k)}^b$	$\delta\Delta G^c$	$pK_{a(t)}^d$
SB1-1a	-6,339	-4,648	0,624	0,458
SB1-1b	-7,813	-5,730	0,118	0,086
SB1-2a	-7,764	-5,694	0,644	0,472
SB1-2b	-8,780	-6,438	-0,314	-0,230
SB1-3a	-5,935	-4,352	1,116	0,818
SB1-3b	-7,346	-5,387	0,293	0,215
SB1-4a	-6,000	-4,400	0,872	0,639
SB1-4b	-6,880	-5,045	0,273	0,200

Çizelge 7.65. (Devam) PM6 yöntemiyle su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pKa ve Kinetik pKa değerleri

SB1-5a	-6,142	-4,504	0,979	0,718
SB1-5b	-6,174	-4,527	1,183	0,868
SB1-6a	-5,115	-3,751	1,269	0,931
SB1-6b	-5,516	-4,045	0,738	0,541
SB1-7a	-6,494	-4,762	1,829	1,341
SB1-7b	-7,259	-5,323	1,148	0,842
SB1-8a	-6,556	-4,808	2,152	1,578
SB1-8b	-8,106	-5,944	1,276	0,936
SB1-9a	-5,915	-4,337	-0,111	-0,082
SB1-9b	-4,532	-3,323	1,024	0,751
SB1-10a	-10,93	-8,015	-0,025	-0,018
SB1-10b	-8,816	-6,465	-0,363	-0,266
SB1-11a	-5,046	-3,700	0,537	0,394
SB1-11b	-5,925	-4,345	-0,115	-0,084
SB1-12a	-2,653	-1,945	1,799	1,319
SB1-12b	-1,512	-1,109	1,830	1,342
SB1-13a	-6,864	-5,033	0,971	0,712
SB1-13b	-6,917	-5,072	1,173	0,860
SB1-14a	-8,953	-6,565	0,175	0,129
SB1-14b	-8,270	-6,065	1,022	0,750
SB1-15a	-5,832	-4,277	0,887	0,650
SB1-15b	-4,590	-3,366	2,015	1,477
SB1-16a	-6,081	-4,460	-1,080	-0,792
SB1-16b	-5,142	-3,771	-0,395	-0,290
SB1-17a	-11,542	-8,464	-0,235	-0,172
SB1-17b	-12,077	-8,856	-0,472	-0,346
SB1-18a	-3,486	-2,556	3,249	2,382
SB1-18b	-4,490	-3,293	2,185	1,602
SB2-1a	-7,673	-5,627	-0,316	-0,231
SB2-1b	-5,165	-3,787	1,484	1,088
SB2-2a	-5,510	-4,041	1,742	1,277
SB2-2b	-5,666	-4,155	-0,010	-0,007
SB2-3a	-8,312	-6,096	-0,409	-0,300
SB2-3b	-9,110	-6,680	-0,901	-0,661
SB2-4a	-7,775	-5,702	-0,251	-0,184
SB2-4b	-6,835	-5,012	0,384	0,282
SB2-5a	-7,166	-5,255	0,217	0,159
SB2-5b	-5,388	-3,951	1,197	0,878
SB2-6a	3,884	2,848	0,434	0,318
SB2-6b	3,653	2,679	0,049	0,036
SB2-7a	-6,661	-4,885	0,780	0,572
SB2-7b	-6,292	-4,614	1,315	0,964
SB2-8a	-7,561	-5,545	-0,068	-0,050
SB2-8b	-5,530	-4,056	-0,585	-0,429
TSB-1a	-5,738	-4,208	1,389	1,018
TSB-1b	-15,090	-11,066	2,008	1,473
TSB-2a	-4,651	-3,410	0,507	0,372

Çizelge 7.65. (Devam) PM6 yöntemiyle su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pKa ve Kinetik pKa değerleri

TSB-2b	-17,899	-13,126	-1,312	-0,962
TSB-3a	-8,665	-6,354	0,307	0,225
TSB-3b	-16,285	-11,942	0,669	0,491
TSB-4a	-7,920	-5,808	-0,070	-0,051
TSB-4b	-17,463	-12,806	-0,063	-0,046
TSB-5a	-5,851	-4,290	1,228	0,900
TSB-5b	-16,042	-11,764	0,943	0,691
TSB-6a	-1,127	-0,826	1,635	1,199
TSB-6b	-16,285	-11,942	1,716	1,258
TSB-7a	-7,244	-5,312	0,637	0,467
TSB-7b	-17,334	-12,711	-0,144	-0,105
TSB-8a	-3,218	-2,360	1,373	1,007
TSB-8b	-17,636	-12,933	-0,102	-0,074
SB1-1c	-12,265	-8,994	1,644	1,206
SB1-2c	-12,03	-8,822	1,570	1,151
SB1-3c	-11,027	-8,086	0,826	0,605
SB1-4c	-8,466	-6,208	2,769	2,031
SB1-5c	-8,991	-6,593	3,184	2,335
SB1-6c	-8,777	-6,437	1,990	1,459
SB1-7c	-12,664	-9,287	2,786	2,043
SB1-8c	-15,113	-11,082	1,854	1,360
SB1-9c	-8,998	-6,598	0,915	0,671
SB1-10c	-11,509	-8,440	-0,130	-0,095
SB1-11c	-8,045	-5,899	0,888	0,652
SB1-12c	-3,684	-2,702	3,105	2,277
SB1-13c	-10,191	-7,473	3,528	2,587
SB1-14c	-15,301	-11,221	1,371	1,005
SB1-15c	-10,107	-7,412	2,904	2,130
SB1-16c	-7,545	-5,533	1,012	0,742
SB1-17c	-12,779	-9,371	0,330	0,242
SB1-18c	-6,469	-4,744	4,269	3,130
SB2-1c	-8,496	-6,230	2,733	2,004
SB2-2c	-7,351	-5,391	2,254	1,653
SB2-3c	-10,418	-7,640	1,466	1,075
SB2-4c	-9,734	-7,138	2,140	1,569
SB2-5c	-8,267	-6,063	2,872	2,106
SB2-6c	1,141	0,837	2,022	1,483
SB2-7c	-9,494	-6,962	2,398	1,758
SB2-8c	-8,556	-6,274	1,624	1,191
TSB-1c	-19,750	-14,483	2,891	2,120
TSB-2c	-19,025	-13,951	1,175	0,862
TSB-3c	-22,716	-16,658	1,298	0,952
TSB-4c	-19,769	-14,497	1,898	1,392
TSB-5c	-20,640	-15,135	1,718	1,260
TSB-6c	-14,760	-10,824	3,433	2,517
TSB-7c	-21,104	-15,476	1,788	1,311
TSB-8c	-19,455	-14,267	1,912	1,402

Çizelge 7.65. (Devam) PM6 yöntemiyle su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pKa ve Kinetik pKa değerleri

SB1-2d	13,790	10,113	-0,382	-0,280
SB1-2e	20,984	15,388	-0,858	-0,629
SB1-3d	9,643	7,072	-0,159	-0,117
SB1-3e	13,713	10,056	0,208	0,152
SB1-10d	12,464	9,140	-1,567	-1,149
SB1-10e	16,583	12,161	2,271	1,665
SB1-15d	10,060	7,377	0,119	0,087
SB1-15e	22,701	16,647	3,006	2,204
SB1-17d	5,653	4,145	-1,625	-1,192
SB1-17e	9,449	6,929	-1,700	-1,247
SB2-1d	12,970	9,511	-0,457	-0,335
SB2-2d	12,531	9,189	-0,743	-0,545
SB2-3d	12,221	8,962	-1,183	-0,868
SB2-3e	15,646	11,473	-0,416	-0,305
SB2-4d	13,861	10,165	0,205	0,150
SB2-5d	13,426	9,846	-0,042	-0,031
SB2-6d	23,151	16,977	-1,169	-0,857
SB2-7d	13,287	9,743	-0,442	-0,324
SB2-8d	13,349	9,789	-0,841	-0,617
TSB-3d	16,509	12,107	0,029	0,021
TSB-3e	16,211	11,888	-1,386	-1,016
SB1-2f	25,682	18,833	-1,863	-1,366
SB1-3f	19,291	14,146	-0,585	-0,429
SB1-10f	27,642	20,270	-0,823	-0,603
SB1-15f	24,841	18,217	0,745	0,546
SB1-17f	36,183	26,534	-1,361	-0,998
TSB-3f	42,453	31,132	-0,229	-0,168

$$pK_{a(k)} = \delta\Delta G_f / 2,303RT \quad pK_{a(t)} = \delta\Delta G / 2,303RT$$

Çizelge 7.66. PM6 yöntemiyle DMF fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pKa ve Kinetik pKa değerleri

Bileşik	$\delta\Delta G_f^a$	$pK_{a(k)}^b$	$\delta\Delta G^c$	$pK_{a(t)}^d$
SB1-1a	-7,761	-5,691	0,130	0,095
SB1-1b	-8,920	-6,541	-0,071	-0,052
SB1-2a	-8,588	-6,298	0,688	0,504
SB1-2b	-9,579	-7,024	-0,12	-0,088
SB1-3a	-6,517	-4,779	1,354	0,993
SB1-3b	-8,307	-6,092	0,254	0,186
SB1-4a	-6,829	-5,008	0,884	0,648
SB1-4b	-7,613	-5,583	0,399	0,293
SB1-5a	-7,175	-5,261	0,803	0,589
SB1-5b	-7,640	-5,602	0,595	0,437

Çizelge 7.66. (Devam) PM6 yöntemiyle DMF fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pKa ve Kinetik pKa değerleri

SB1-6a	-5,961	-4,371	1,288	0,945
SB1-6b	-6,459	-4,737	0,669	0,490
SB1-7a	-7,222	-5,296	2,016	1,478
SB1-7b	-7,660	-5,618	1,657	1,215
SB1-8a	-7,455	-5,467	2,157	1,582
SB1-8b	-9,221	-6,762	1,113	0,816
SB1-9a	-6,796	-4,984	-0,211	-0,154
SB1-9b	-5,313	-3,896	1,026	0,753
SB1-10a	-11,793	-8,648	0,172	0,126
SB1-10b	-9,809	-7,193	-0,407	-0,299
SB1-11a	-5,718	-4,193	0,738	0,541
SB1-11b	-6,799	-4,986	-0,145	-0,106
SB1-12a	-3,34	-2,449	1,977	1,449
SB1-12b	-2,162	-1,585	1,955	1,434
SB1-13a	-7,878	-5,777	0,954	0,700
SB1-13b	-8,115	-5,951	1,021	0,749
SB1-14a	-10,451	-7,664	-0,363	-0,266
SB1-14b	-9,177	-6,730	1,113	0,817
SB1-15a	-5,995	-4,396	1,538	1,128
SB1-15b	-4,759	-3,490	2,771	2,032
SB1-16a	-7,180	-5,266	-1,195	-0,876
SB1-16b	-6,023	-4,417	-0,333	-0,244
SB1-17a	-12,758	-9,356	-0,920	-0,674
SB1-17b	-13,155	-9,647	-0,723	-0,530
SB1-18a	-4,811	-3,528	2,855	2,094
SB1-18b	-5,947	-4,361	1,676	1,229
SB2-1a	-8,901	-6,527	-0,669	-0,491
SB2-1b	-6,070	-4,451	1,472	1,079
SB2-2a	-6,389	-4,685	1,836	1,346
SB2-2b	-6,390	-4,686	0,019	0,014
SB2-3a	-9,165	-6,721	-0,380	-0,279
SB2-3b	-9,132	-6,697	0,081	0,059
SB2-4a	-8,037	-5,894	0,342	0,251
SB2-4b	-7,560	-5,544	0,489	0,358
SB2-5a	-7,428	-5,447	0,825	0,605
SB2-5b	-5,992	-4,394	1,429	1,048
SB2-6a	0,200	0,146	-2,053	-1,506
SB2-6b	-0,218	-0,160	-2,674	-1,961
SB2-7a	-7,511	-5,508	0,781	0,573
SB2-7b	-7,294	-5,348	1,187	0,870
SB2-8a	-8,443	-6,191	-0,052	-0,038
SB2-8b	-6,706	-4,918	-0,833	-0,611
TSB-1a	-6,783	-4,974	1,331	0,976
TSB-1b	-15,969	-11,710	1,724	1,264
TSB-2a	-5,560	-4,077	0,419	0,308
TSB-2b	-18,903	-13,862	-1,628	-1,193
TSB-3a	-9,411	-6,901	0,603	0,442

Çizelge 7.66. (Devam) PM6 yöntemiyle DMF fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pKa ve Kinetik pKa değerleri

TSB-3b	-16,943	-12,424	0,601	0,441
TSB-4a	-8,962	-6,572	-0,190	-0,139
TSB-4b	-18,026	-13,219	-0,094	-0,069
TSB-5a	-6,767	-4,962	1,242	0,911
TSB-5b	-16,591	-12,167	0,96	0,704
TSB-6a	-7,938	-5,821	0,362	0,265
TSB-6b	-17,396	-12,757	0,154	0,113
TSB-7a	-8,008	-5,872	0,804	0,589
TSB-7b	-17,753	-13,019	-0,028	-0,02
TSB-8a	-3,909	-2,866	1,340	0,983
TSB-8b	-17,379	-12,745	0,384	0,281
SB1-1c	-14,05	-10,303	0,898	0,658
SB1-2c	-13,026	-9,552	1,661	1,218
SB1-3c	-11,973	-8,780	0,815	0,598
SB1-4c	-9,286	-6,810	2,825	2,072
SB1-5c	-9,875	-7,241	3,185	2,336
SB1-6c	-9,635	-7,066	1,990	1,459
SB1-7c	-13,437	-9,854	3,032	2,224
SB1-8c	-15,939	-11,688	2,092	1,534
SB1-9c	-9,655	-7,080	0,951	0,697
SB1-10c	-11,771	-8,632	0,626	0,459
SB1-11c	-9,225	-6,765	0,600	0,440
SB1-12c	-4,311	-3,161	3,200	2,347
SB1-13c	-11,479	-8,418	3,497	2,565
SB1-14c	-16,415	-12,037	1,449	1,062
SB1-15c	-10,595	-7,770	3,572	2,619
SB1-16c	-8,463	-6,206	1,140	0,836
SB1-17c	-17,142	-12,570	0,265	0,194
SB1-18c	-7,864	-5,767	3,883	2,848
SB2-1c	-9,538	-6,994	2,674	1,961
SB2-2c	-8,220	-6,028	2,285	1,675
SB2-3c	-11,506	-8,437	1,488	1,091
SB2-4c	-10,620	-7,788	2,168	1,590
SB2-5c	-8,778	-6,437	3,275	2,402
SB2-6c	-2,958	-2,169	-0,837	-0,613
SB2-7c	-10,428	-7,647	2,382	1,747
SB2-8c	-9,521	-6,982	1,639	1,202
TSB-1c	-20,586	-15,096	2,660	1,951
TSB-2c	-19,553	-14,338	1,194	0,876
TSB-3c	-23,423	-17,177	1,368	1,003
TSB-4c	-20,312	-14,895	1,902	1,394
TSB-5c	-21,551	-15,804	1,345	0,986
TSB-6c	-21,230	-15,568	1,599	1,173
TSB-7c	-21,582	-15,826	1,842	1,351
TSB-8c	-19,765	-14,494	1,868	1,370
SB1-2d	16,793	12,315	-0,328	-0,240
SB1-2e	23,789	17,445	-0,874	-0,641

Çizelge 7.66. (Devam) PM6 yöntemiyle DMF fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pKa ve Kinetik pKa değerleri

SB1-3d	12,560	9,210	-0,135	-0,099
SB1-3e	15,865	11,634	-0,558	-0,409
SB1-10d	14,647	10,741	-2,239	-1,642
SB1-10e	19,263	14,126	2,336	1,713
SB1-15d	13,663	10,020	0,835	0,613
SB1-15e	26,134	19,164	3,701	2,714
SB1-17d	8,438	6,188	-1,780	-1,306
SB1-17e	12,257	8,988	-1,880	-1,379
SB2-1d	15,793	11,581	-0,552	-0,405
SB2-2d	15,421	11,308	-0,768	-0,563
SB2-3d	15,455	11,334	-0,940	-0,689
SB2-3e	18,689	13,705	-0,249	-0,183
SB2-4d	16,795	12,316	0,188	0,138
SB2-5d	16,836	12,346	0,261	0,192
SB2-6d	23,261	17,057	-3,686	-2,703
SB2-7d	16,478	12,084	-0,211	-0,154
SB2-8d	16,212	11,888	-0,904	-0,663
TSB-3d	19,422	14,242	0,061	0,045
TSB-3e	19,574	14,354	-0,926	-0,679
SB1-2f	32,858	24,096	-1,180	-0,865
SB1-3f	25,770	18,897	-0,484	-0,355
SB1-10f	34,131	25,029	-0,696	-0,510
SB1-15f	28,848	21,154	1,506	1,105
SB1-17f	43,060	31,576	-1,761	-1,292
TSB-3f	49,885	36,582	-0,259	-0,190

$$pK_{a(k)} = \delta\Delta G_f / 2,303RT, \quad pK_{a(t)} = \delta\Delta G / 2,303RT$$

^{a/} Eşitlik (7.3.), (7.5.), (7.7.) ve (7.9.)'dan hesaplandı ^{b/} Eşitlik (7.4.), (7.6.), (7.8.) ve (7.10)'dan hesaplandı. ^{c/} Eşitlik (7.11.), (7.13.), (7.15.) ve (7.17.)'den hesaplandı. ^{d/} Eşitlik (7.12.), (7.14.), (7.16.) ve (7.18.)'den hesaplandı (Catalan and Elguero, 1987).

7.1.4. PA Hesapları

Teorik hesaplamada proton affinitesi değerinin hesaplanmasında kullanılan denklem ve eşitlikler aşağıda verilmiştir.

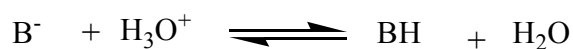
Birinci proton alma reaksiyonu için;



aşağıdaki eşitlikler yazılabilir.

$$\delta\Delta H_{(BH^+)} = [\Delta H_{(BH^+)} + \Delta H_{(H_2O)}] - [\Delta H_{(B)} + \Delta H_{(H_3O^+)}] \quad (7.19.)$$

Birinci proton verme reaksiyonu için ise;



Aşağıdaki eşitlikler yazılabilir.

$$\delta\Delta H_{(BH)} = [\Delta H_{(BH)} + \Delta H_{(H_2O)}] - [\Delta H_{(B^-)} + \Delta H_{(H_3O^+)}] \quad (7.20.)$$

İkinci proton alma reaksiyonu için;



$$\delta\Delta H_{(BH_2^{2+})} = [\Delta H_{(BH_2^{2+})} + 2 \cdot \Delta H_{(H_2O)}] - [\Delta H_{(B)} + 2 \Delta H_{(H_3O^+)}] \quad (7.21.)$$

eşitliği yazılabilir.

İkinci proton verme reaksiyonu için ;



$$\delta\Delta H_{(B^{2-})} = [\Delta H_{(B^{2-})} + 2 \times \Delta H_{(H_3O^+)}] - [\Delta H_{(BH_2)} + 2 \times \Delta H_{(H_2O)}] \quad (7.22.)$$

eşitliği yazılabilir.

Eşitlik 7.19-7.22 kullanılarak elde edilen bu değerler Çizelge 7.70-7.75'de verilmiştir.

Eşitlik 7.19 ve 7.21 kullanılarak elde edilen PA değerleri AM1 yöntemi için su ve DMF fazı için Çizelge 7.67'de, Eşitlik 7.20 ve 7.22 kullanılarak elde edilen PA değerleri Çizelge 7.68'de verilmiştir.

Eşitlik 7.19 ve 7.21 kullanılarak elde edilen PA değerleri PM3 yöntemi için su ve DMF fazı için Çizelge 7.69'de, Eşitlik 7.20 ve 7.22 kullanılarak elde edilen PA değerleri Çizelge 7.70'de verilmiştir.

Eşitlik 7.19 ve 7.21 kullanılarak elde edilen PA değerleri PM6 yöntemi için su ve DMF fazı için Çizelge 7.71'de, Eşitlik 7.20 ve 7.22 kullanılarak elde edilen PA değerleri Çizelge 7.72'de verilmiştir.

Çizelge 7.67. Birinci ve ikinci protonlanma merkezlerine göre AM1 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen PA değerleri

AM1-DMF			
Bileşik	$\Delta H(B)$	$\Delta H(BH^+)$	PA
Birinci proton alma			
SB1-1a	15212,239	15179,416	-41,156

Çizelge 7.67. (Devam) Birinci ve ikinci protonlanma merkezlerine göre AM1 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen PA değerleri

SB1-1b	15212,239	15206,939	-13,633
SB1-2a	17004,893	16765,713	-247,513
SB1-2b	17004,893	16862,592	-150,634
SB1-3a	18674,316	18573,711	-108,939
SB1-3b	18674,316	18419,252	-263,398
SB1-4a	16613,485	16719,344	97,526
SB1-4b	16613,485	16715,677	93,859
SB1-5a	16126,074	16139,300	4,893
SB1-5b	16126,074	16156,255	21,848
SB1-6a	16177,498	16174,18	-11,651
SB1-6b	16177,498	16155,413	-30,417
SB1-7a	14161,482	14230,290	60,475
SB1-7b	14161,482	14290,552	120,737
SB1-8a	14345,836	14459,459	105,289
SB1-8b	14345,836	14499,121	144,951
SB1-9a	15056,439	15023,854	-40,918
SB1-9b	15056,439	14927,450	-137,322
SB1-10a	18778,067	18558,386	-228,014
SB1-10b	18778,067	18966,115	179,715
SB1-11a	18176,948	18240,04	54,758
SB1-11b	18176,948	18153,102	-32,180
SB1-12a	19800,733	19687,147	-121,919
SB1-12b	19800,733	19849,769	40,703
SB1-13a	18557,129	18573,915	8,453
SB1-13b	18557,129	18445,886	-119,576
SB1-14a	18037,992	18096,918	50,592
SB1-14b	18037,992	18056,617	10,292
SB1-15a	18287,012	18271,400	-23,945
SB1-15b	18287,012	18300,964	5,619
SB1-16a	18041,420	18162,564	112,811
SB1-16b	18041,420	18160,010	110,257
SB1-17a	18396,040	18464,677	60,304
SB1-17b	18396,040	18258,928	-145,445
SB1-18a	16657,417	16689,502	23,752
SB1-18b	16657,417	16722,937	57,187
SB2-1a	16805,88	16817,482	3,269
SB2-1b	16805,88	16829,107	14,894
SB2-2a	18334,165	17982,525	-359,974
SB2-2b	18334,165	18371,834	29,336
SB2-3a	17531,281	17598,722	59,108
SB2-3b	17531,281	17576,315	36,701
SB2-4a	16828,588	16755,151	-81,770
SB2-4b	16828,588	16863,388	26,467
SB2-5a	16657,624	16529,092	-136,865
SB2-5b	16657,624	16592,062	-73,895
SB2-6a	16367,445	16787,380	411,603
SB2-6b	16367,445	16730,010	354,232

Çizelge 7.67. (Devam) Birinci ve ikinci protonlanma merkezlerine göre AM1 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen PA değerleri

SB2-7a	16431,041	16517,820	78,447
SB2-7b	16431,041	16525,101	85,727
SB2-8a	17587,543	17592,295	-3,581
SB2-8b	17587,543	17453,346	-142,530
TSB-1a	12640,886	12723,291	74,072
TSB-1b	12640,886	12754,032	104,813
TSB-2a	14229,552	14465,296	227,412
TSB-2b	14229,552	14226,020	-11,865
TSB-3a	13485,458	13482,945	-10,846
TSB-3b	13485,458	13617,590	123,799
TSB-4a	12631,792	12818,972	178,847
TSB-4b	12631,792	12682,728	42,603
TSB-5a	12411,529	12486,142	66,280
TSB-5b	12411,529	12328,212	-91,649
TSB-6a	12679,054	12787,416	100,029
TSB-6b	12679,054	12626,813	-60,574
TSB-7a	12360,550	12485,490	116,606
TSB-7b	12360,550	12551,857	182,974
TSB-8a	13425,155	13508,080	74,592
TSB-8b	13425,155	13437,493	4,005
İkinci proton alma			
SB1-1c	15212,239	15274,324	45,419
SB1-2c	17004,893	16792,502	-229,057
SB1-3c	18674,316	18608,423	-82,559
SB1-4c	16613,485	16612,090	-18,062
SB1-5c	16126,074	16250,328	107,588
SB1-6c	16177,498	16173,710	-20,453
SB1-7c	14161,482	14437,298	259,151
SB1-8c	14394,201	14476,266	65,399
SB1-9c	15056,439	14831,514	-241,591
SB1-10c	18778,067	18769,124	-25,609
SB1-11c	18176,948	18184,809	-8,805
SB1-12c	19800,733	19844,308	26,908
SB1-13c	18557,129	18485,918	-87,877
SB1-14c	18037,992	18083,991	29,333
SB1-15c	18287,012	18147,962	-155,716
SB1-16c	18041,420	18184,242	126,156
SB1-17c	18396,004	18205,045	-207,661
SB1-18c	16657,417	16696,173	22,09
SB2-1c	16805,880	16833,570	11,025
SB2-2c	18334,165	18290,767	-60,064
SB2-3c	17531,281	17582,382	34,435
SB2-4c	16828,588	16785,469	-59,785
SB2-5c	16657,624	16512,035	-162,255
SB2-6c	16367,445	16891,665	507,555
SB2-7c	16431,041	16505,116	57,409
SB2-8c	17587,543	17565,799	-38,41

Çizelge 7.67. (Devam) Birinci ve ikinci protonlanma merkezlerine göre AM1 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen PA değerleri

TSB-1c	12640,886	12586,501	-71,051
TSB-2c	14229,552	14285,065	38,848
TSB-3c	13485,458	13465,126	-36,998
TSB-4c	12631,792	12609,525	-38,933
TSB-5c	12411,529	12370,143	-58,052
TSB-6c	12679,054	12722,238	26,518
TSB-7c	12360,550	12404,983	27,767
TSB-8c	13425,155	13446,699	4,877
AM1-H₂O			
Bileşik	$\Delta H(B)$	$\Delta H(BH^+)$	PA
Birinci proton alma			
SB1-1a	15210,285	15178,848	-39,754
SB1-1b	15210,285	15206,340	-12,262
SB1-2a	16997,254	16766,160	-239,412
SB1-2b	16997,254	16855,564	-150,007
SB1-3a	18673,671	18581,620	-100,369
SB1-3b	18673,671	18417,385	-264,604
SB1-4a	16613,777	16727,300	105,205
SB1-4b	16613,777	16716,715	94,620
SB1-5a	16126,629	16143,489	8,542
SB1-5b	16126,629	16154,753	19,806
SB1-6a	16174,069	16173,850	-8,536
SB1-6b	16174,069	16158,477	-23,910
SB1-7a	14161,592	14228,091	58,181
SB1-7b	14161,592	14291,307	121,397
SB1-8a	14345,281	14454,627	101,028
SB1-8b	14345,281	14498,876	145,277
SB1-9a	15060,520	15026,419	-42,419
SB1-9b	15060,520	14927,781	-141,056
SB1-10a	18786,113	18550,371	-244,060
SB1-10b	18786,113	18962,572	168,141
SB1-11a	18178,876	18249,524	62,330
SB1-11b	18178,876	18152,817	-34,377
SB1-12a	19808,881	19688,046	-129,152
SB1-12b	19808,881	19850,600	33,402
SB1-13a	18552,587	18575,002	14,097
SB1-13b	18552,587	18450,282	-110,623
SB1-14a	18038,115	18090,185	43,752
SB1-14b	18038,115	18059,082	12,649
SB1-15a	18297,811	18273,283	-32,846
SB1-15b	18297,811	18303,601	-2,528
SB1-16a	18044,583	18165,916	113,015
SB1-16b	18044,583	18161,194	108,293
SB1-17a	18400,403	18477,299	68,578
SB1-17b	18400,403	18268,883	-139,838
SB1-18a	16662,273	16688,741	18,151

Çizelge 7.67. (Devam) Birinci ve ikinci protonlanma merkezlerine göre AM1 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen PA değerleri

SB1-18b	16662,273	16719,222	48,631
SB2-1a	16809,688	16822,869	4,863
SB2-1b	16809,688	16832,720	14,714
SB2-2a	18341,472	17982,777	-367,012
SB2-2b	18341,472	18369,838	20,049
SB2-3a	17537,339	17589,775	44,118
SB2-3b	17537,339	17574,835	29,178
SB2-4a	16832,851	16754,350	-86,819
SB2-4b	16832,851	16871,409	30,240
SB2-5a	16657,744	16529,603	-136,460
SB2-5b	16657,744	16598,669	-67,393
SB2-6a	16456,077	16793,782	329,387
SB2-6b	16456,077	16731,164	266,77
SB2-7a	16426,896	16524,839	89,625
SB2-7b	16426,896	16530,161	94,947
SB2-8a	17585,089	17589,866	-3,540
SB2-8b	17585,089	17449,257	-144,150
TSB-1a	12640,144	12724,583	76,122
TSB-1b	12640,144	12750,039	101,577
TSB-2a	14231,571	14466,380	226,491
TSB-2b	14231,571	14227,650	-12,239
TSB-3a	13480,549	13488,365	-0,502
TSB-3b	13480,549	13619,083	130,216
TSB-4a	12633,962	12830,607	188,327
TSB-4b	12633,962	12684,072	41,792
TSB-5a	12412,960	12490,449	69,171
TSB-5b	12412,960	12317,756	-103,522
TSB-6a	12673,840	12793,013	110,855
TSB-6b	12673,840	12623,696	-58,461
TSB-7a	12359,049	12489,161	121,795
TSB-7b	12359,049	12537,453	170,087
TSB-8a	13422,242	13512,702	82,143
TSB-8b	13422,242	13438,806	8,247
İkinci proton alma			
SB1-1c	15210,285	15274,652	47,732
SB1-2c	16997,254	16784,689	-229,200
SB1-3c	18673,671	18608,136	-82,170
SB1-4c	16613,777	16608,498	-21,914
SB1-5c	16126,629	16244,125	100,860
SB1-6c	16174,069	16174,084	-16,621
SB1-7c	14161,592	14435,400	257,173
SB1-8c	14345,281	14508,803	146,886
SB1-9c	15060,520	14833,234	-243,922
SB1-10c	18786,113	18746,161	-56,587
SB1-11c	18178,876	18192,255	-3,257
SB1-12c	19808,881	19854,085	28,569
SB1-13c	18552,587	18491,989	-77,233

Çizelge 7.67. (Devam) Birinci ve ikinci protonlanma merkezlerine göre AM1 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen PA değerleri

SB1-14c	18038,115	18081,350	26,599
SB1-15c	18297,811	18149,833	-164,613
SB1-16c	18044,583	18180,806	119,587
SB1-17c	18400,403	18210,360	-206,679
SB1-18c	16662,273	16698,675	19,767
SB2-1c	16809,688	16833,958	7,634
SB2-2c	18341,472	18285,795	-72,312
SB2-3c	17537,339	17594,897	40,923
SB2-4c	16832,851	16787,077	-62,409
SB2-5c	16657,744	16512,049	-162,331
SB2-6c	16456,077	16890,510	417,798
SB2-7c	16426,896	16509,447	65,915
SB2-8c	17585,089	17568,994	-32,731
TSB-1c	12640,144	12583,132	-73,648
TSB-2c	14231,571	14280,606	32,400
TSB-3c	13480,549	13469,982	-27,203
TSB-4c	12633,962	12605,060	-45,537
TSB-5c	12412,960	12365,128	-64,467
TSB-6c	12673,840	12716,331	25,856
TSB-7c	12359,049	12398,120	22,436
TSB-8c	13422,242	13448,112	9,235

Çizelge 7.68. Birinci ve ikinci deprotonlanma merkezlerine göre AM1 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen ve PA değerleri

AM1-DMF			
Bileşik	$\Delta H(\text{BH})$	$\Delta H(\text{B}^-)$	PA
Birinci proton verme			
SB1-2d	17004,893	16613,712	-382,848
SB1-2e	17004,893	16492,887	-503,673
SB1-3d	18674,316	8358,480	-10307,504
SB1-3e	18674,316	18212,043	-453,940
SB1-10d	18778,067	18398,744	-370,990
SB1-10e	18778,067	17700,475	-1069,259
SB1-15d	18287,012	17985,168	-293,511
SB1-15e	18287,012	17798,846	-479,833
SB1-17d	18396,040	18322,291	-65,416
SB1-17e	18396,040	18060,945	-326,762
SB2-1d	16805,880	16420,870	-376,677
SB2-2d	18334,165	18008,625	-317,207
SB2-3d	17531,281	17347,825	-175,123
SB2-3e	17531,281	17281,013	-241,935
SB2-4d	16828,588	16416,351	-403,905

Çizelge 7.68. (Devam) Birinci ve ikinci deprotonlanma merkezlerine göre AM1 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen ve PA değerleri

SB2-5d	16657,624	16170,085	-479,206
SB2-6d	16367,445	16453,124	94,012
SB2-7d	16431,041	16160,652	-262,056
SB2-8d	17587,543	17144,285	-434,924
TSB-3d	13485,458	13218,120	-259,005
TSB-3e	13485,458	13296,505	-180,620
İkinci proton verme			
SB1-2f	17004,893	16144,284	-843,943
SB1-3f	18674,316	17987,561	-670,089
SB1-10f	18778,067	17703,236	-1058,165
SB1-15f	18287,012	17568,205	-702,095
SB1-17f	18396,040	17906,399	-472,975
TSB-3f	13485,458	12848,486	-620,306
AM1-H₂O			
Birinci proton verme			
SB1-2d	16997,254	16618,324	-370,612
SB1-2e	16997,254	16488,753	-500,183
SB1-3d	18673,671	18363,331	-302,022
SB1-3e	18673,671	18217,441	-447,913
SB1-10d	18786,113	18392,026	-385,769
SB1-10e	18786,113	17693,562	-1084,234
SB1-15d	18297,811	17996,475	-293,019
SB1-15e	18297,811	17793,182	-496,311
SB1-17d	18400,403	18345,126	-46,960
SB1-17e	18400,403	18061,148	-330,938
SB2-1d	16809,688	16421,544	-379,826
SB2-2d	18341,472	18010,797	-322,357
SB2-3d	17537,339	17349,122	-179,900
SB2-3e	17537,339	17284,669	-244,352
SB2-4d	16832,851	16420,181	-404,353
SB2-5d	16657,744	16168,866	-480,561
SB2-6d	16456,077	16448,842	1,083
SB2-7d	16426,896	16167,201	-251,377
SB2-8d	17585,089	17144,196	-432,575
TSB-3d	13480,549	13217,978	-254,254
TSB-3e	13480,549	13300,419	-171,813
İkinci proton verme			
SB1-2f	16997,254	16143,320	-837,298
SB1-3f	18673,671	17992,646	-664,390
SB1-10f	18786,113	17716,188	-1053,289
SB1-15f	18297,811	17568,242	-712,934
SB1-17f	18400,403	17928,404	-455,363
TSB-3f	13480,549	12777,625	-686,289

Çizelge 7.69. Birinci ve ikinci protonlanma merkezlerine göre PM3 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen PA değerleri

PM3-DMF			
Bileşik	$\Delta H(B)$	$\Delta H(BH^+)$	PA
Birinci proton alma			
SB1-1a	15720,996	15672,140	-54,182
SB1-1b	15720,996	15704,939	-21,383
SB1-2a	17182,453	17161,539	-26,241
SB1-2b	17182,453	17249,793	62,014
SB1-3a	19008,269	19125,540	111,944
SB1-3b	19008,269	18982,97	-30,626
SB1-4a	17163,401	17248,548	79,821
SB1-4b	17163,401	17215,883	47,157
SB1-5a	16628,357	16622,425	-11,258
SB1-5b	16628,357	16600,960	-32,722
SB1-6a	16636,163	16580,599	-60,89
SB1-6b	16636,163	16630,931	-10,558
SB1-7a	14717,208	14654,712	-67,894
SB1-7b	14717,280	14688,297	-34,309
SB1-8a	14848,625	14787,169	-66,782
SB1-8b	14848,625	14841,992	-11,959
SB1-9a	15552,940	15558,425	0,159
SB1-9b	15552,940	15561,787	3,521
SB1-10a	19085,027	19084,673	-5,679
SB1-10b	19085,027	19033,271	-57,082
SB1-11a	18772,702	18805,001	26,972
SB1-11b	18772,702	18796,947	18,918
SB1-12a	20226,498	20452,876	221,052
SB1-12b	20226,498	20446,779	214,955
SB1-13a	19156,676	19130,706	-31,297
SB1-13b	19156,676	19137,229	-24,773
SB1-14a	18489,511	18483,708	-11,129
SB1-14b	18489,511	18428,563	-66,274
SB1-15a	18905,060	18794,081	-116,306
SB1-15b	18905,060	18904,686	-5,700
SB1-16a	18793,146	18838,573	40,101
SB1-16b	18793,146	18786,432	-12,040
SB1-17a	18604,296	18757,925	148,304
SB1-17b	18604,296	18792,207	182,585
SB1-18a	17179,270	17204,505	19,909
SB1-18b	17179,207	17247,052	62,456
SB2-1a	17277,547	17089,015	-193,858
SB2-1b	17277,547	17196,197	-86,677
SB2-2a	18860,877	18654,921	-211,282
SB2-2b	18860,877	18710,114	-156,089
SB2-3a	18166,776	17988,298	-183,804
SB2-3b	18166,776	17886,536	-285,566

Çizelge 7.69. (Devam) Birinci ve ikinci protonlanma merkezlerine göre PM3 yöntemiyle DMFve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen PA değerleri

SB2-4a	17129,517	17151,780	16,937
SB2-4b	17129,517	17211,612	76,769
SB2-5a	16982,184	16800,029	-187,481
SB2-5b	16982,184	16833,87	-153,64
SB2-6a	16979,298	17087,473	102,848
SB2-6b	16979,298	17092,851	108,227
SB2-7a	16815,377	16799,668	-21,034
SB2-7b	16815,377	16802,789	-17,913
SB2-8a	18044,614	18074,13	24,190
SB2-8b	18044,614	17973,229	-76,711
TSB-1a	12965,513	13046,856	76,016
TSB-1b	12965,513	13068,841	98,002
TSB-2a	14631,506	14617,47	-19,362
TSB-2b	14631,506	14244,603	-392,228
TSB-3a	13957,494	13775,04	-187,78
TSB-3b	13957,494	13861,948	-100,872
TSB-4a	12997,967	13015,396	12,103
TSB-4b	12997,967	12872,251	-131,042
TSB-5a	12731,306	12765,455	28,823
TSB-5b	12731,306	12561,829	-174,804
TSB-6a	13003,217	13003,889	-4,654
TSB-6b	13003,217	12892,45	-116,092
TSB-7a	12705,223	12695,954	-14,594
TSB-7b	12705,223	12637,203	-73,346
TSB-8a	13793,741	13788,196	-10,871
TSB-8b	13793,741	13539,557	-259,509
İkinci proton alma			
SB1-1c	15720,996	15609,118	-122,531
SB1-2c	17182,453	17003,172	-189,933
SB1-3c	19008,269	18915,929	-102,992
SB1-4c	17163,401	17190,979	16,927
SB1-5c	16628,357	16588,359	-50,650
SB1-6c	16636,163	16592,450	-54,365
SB1-7c	14717,280	14776,384	48,452
SB1-8c	14848,625	14848,838	-10,440
SB1-9c	15552,940	15446,003	-117,589
SB1-10c	19085,027	19119,045	23,367
SB1-11c	18772,702	18758,961	-24,393
SB1-12c	20226,498	20432,354	195,204
SB1-13c	19156,676	19036,635	-130,693
SB1-14c	18489,511	18240,471	-259,692
SB1-15c	18905,060	18798,747	-116,965
SB1-16c	18793,146	18731,663	-72,135
SB1-17c	18604,296	18598,808	-16,140
SB1-18c	17179,270	17145,923	-43,999
SB2-1c	17277,547	17113,185	-175,014
SB2-2c	18860,877	18617,705	-253,824

Çizelge 7.69. (Devam) Birinci ve ikinci protonlanma merkezlerine göre PM3 yöntemiyle DMFve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen PA değerleri

SB2-3c	18166,776	17923,680	-253,748
SB2-4c	17129,517	17035,334	-104,835
SB2-5c	16982,184	16814,530	-178,306
SB2-6c	16979,298	17042,475	52,525
SB2-7c	16815,377	16762,811	-63,217
SB2-8c	18044,614	17804,011	-251,255
TSB-1c	12965,513	12705,828	-270,337
TSB-2c	14631,506	14380,639	-261,518
TSB-3c	13957,494	13731,844	-236,303
TSB-4c	12997,967	12811,676	-196,943
TSB-5c	12731,306	12558,547	-183,412
TSB-6c	13003,217	12802,815	-211,054
TSB-7c	12705,223	12547,974	-167,901
TSB-8c	13793,741	13555,684	-248,709
PM3-H₂O			
Bileşik	ΔH(B)	ΔH(BH⁺)	PA
Birinci proton alma			
SB1-1a	15718,864	15671,091	-53,048
SB1-1b	15718,864	15700,254	-23,885
SB1-2a	17178,196	17163,570	-19,901
SB1-2b	17178,196	17267,214	83,743
SB1-3a	19010,312	19131,173	115,586
SB1-3b	19010,312	18983,669	-31,917
SB1-4a	17165,469	17249,658	78,914
SB1-4b	17165,469	17214,645	43,901
SB1-5a	16630,158	16623,623	-11,810
SB1-5b	16630,158	16602,004	-33,429
SB1-6a	16644,189	16582,354	-67,110
SB1-6b	16644,189	16624,865	-24,599
SB1-7a	14719,309	14654,593	-69,991
SB1-7b	14719,309	14691,115	-33,469
SB1-8a	14850,250	14780,547	-74,978
SB1-8b	14850,250	14837,791	-17,734
SB1-9a	15551,374	15559,212	2,564
SB1-9b	15551,374	15560,177	3,528
SB1-10a	19085,571	19081,816	-9,030
SB1-10b	19085,571	19040,617	-50,229
SB1-11a	18780,714	18803,541	17,552
SB1-11b	18780,714	18794,022	8,033
SB1-12a	20220,206	20456,791	231,31
SB1-12b	20220,206	20447,456	221,975
SB1-13a	19151,926	19136,031	-21,170
SB1-13b	19151,926	19141,958	-15,243
SB1-14a	18486,266	18490,284	-1,257
SB1-14b	18486,266	18429,190	-62,350

Çizelge 7.69. (Devam) Birinci ve ikinci protonlanma merkezlerine göre PM3 yöntemiyle DMFve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen PA değerleri

SB1-15a	18910,099	18790,546	-124,828
SB1-15b	18910,099	18908,580	-6,794
SB1-16a	18784,455	18841,228	51,498
SB1-16b	18784,455	18788,511	-1,219
SB1-17a	18599,716	18763,758	158,768
SB1-17b	18599,716	18804,909	199,918
SB1-18a	17179,636	17203,279	18,368
SB1-18b	17179,636	17246,748	61,837
SB2-1a	17275,907	17085,875	-195,307
SB2-1b	17275,907	17197,093	-84,088
SB2-2a	18867,327	18654,083	-218,519
SB2-2b	18867,327	18712,314	-160,288
SB2-3a	18166,667	17985,727	-186,215
SB2-3b	18166,667	17897,913	-274,028
SB2-4a	17126,188	17152,823	21,360
SB2-4b	17126,188	17213,676	82,213
SB2-5a	16968,064	16802,718	-170,621
SB2-5b	16968,064	16834,438	-138,901
SB2-6a	16977,647	16594,045	-388,877
SB2-6b	16977,647	16645,364	-337,558
SB2-7a	16815,515	16799,454	-21,337
SB2-7b	16815,515	16799,793	-20,997
SB2-8a	18039,482	18074,507	29,750
SB2-8b	18039,482	17971,219	-73,538
TSB-1a	12970,713	13050,075	74,087
TSB-1b	12970,713	13069,988	94,000
TSB-2a	14631,951	14612,221	-25,005
TSB-2b	14631,951	14238,560	-398,666
TSB-3a	13958,610	13777,496	-186,389
TSB-3b	13958,610	13863,619	-100,266
TSB-4a	12999,021	13017,577	13,281
TSB-4b	12999,021	12863,996	-140,301
TSB-5a	12728,076	12773,421	40,070
TSB-5b	12728,076	12555,872	-177,480
TSB-6a	13006,563	13004,878	-6,960
TSB-6b	13006,563	12889,972	-121,866
TSB-7a	12708,571	12697,134	-16,711
TSB-7b	12708,571	12632,497	-81,349
TSB-8a	13793,741	13788,455	-10,561
TSB-8b	13793,741	13532,011	-267,004
İkinci proton alma			
SB1-1c	15718,864	15600,488	-128,926
SB1-2c	17178,196	16997,487	-191,259
SB1-3c	19010,312	18922,732	-98,129
SB1-4c	17165,469	17190,437	14,418
SB1-5c	16630,158	16590,237	-50,471
SB1-6c	16644,189	16592,119	-62,620

Çizelge 7.69. (Devam) Birinci ve ikinci protonlanma merkezlerine göre PM3 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen PA değerleri

SB1-7c	14719,309	14775,409	45,551
SB1-8c	14850,250	14847,594	-13,205
SB1-9c	15551,374	15443,035	-118,888
SB1-10c	19085,571	19141,896	45,775
SB1-11c	18780,714	18754,413	-36,851
SB1-12c	20220,206	20432,094	201,338
SB1-13c	19151,926	19027,677	-134,799
SB1-14c	18486,266	18237,761	-259,054
SB1-15c	18910,099	18800,976	-119,673
SB1-16c	18784,455	18727,443	-67,562
SB1-17c	18599,716	18603,264	-7,002
SB1-18c	17179,636	17141,617	-48,569
SB2-1c	17275,907	17108,871	-177,585
SB2-2c	18867,327	18610,662	-267,215
SB2-3c	18166,667	17926,733	-250,484
SB2-4c	17126,188	17032,080	-104,658
SB2-5c	16968,064	16812,744	-165,870
SB2-6c	16977,647	16489,254	-498,943
SB2-7c	16815,515	16755,023	-71,042
SB2-8c	18039,482	17801,051	-248,981
TSB-1c	12970,713	12700,181	-281,083
TSB-2c	14631,951	14375,459	-267,043
TSB-3c	13958,610	13728,487	-240,673
TSB-4c	12999,021	12804,045	-205,527
TSB-5c	12728,076	12553,964	-184,663
TSB-6c	13006,563	12798,727	-218,386
TSB-7c	12708,571	12546,436	-172,684
TSB-8c	13793,741	13549,277	-255,014

Çizelge 7.70. Birinci ve ikinci deprotonlanma merkezlerine göre PM3 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen ve PA değerleri

PM3-DMF			
Bileşik	$\Delta H(BH)$	$\Delta H(B^-)$	PA
Birinci proton verme			
SB1-2d	17182,453	16978,683	-198,444
SB1-2e	17182,453	16548,314	-628,813
SB1-3d	19008,269	18923,974	-78,969
SB1-3e	19008,269	18463,995	-538,948
SB1-10d	19085,027	18732,424	-347,276
SB1-10e	19085,027	18088,321	-991,379
SB1-15d	18905,060	18503,478	-396,256
SB1-15e	18905,060	18168,805	-730,929
SB1-17d	18604,296	18225,708	-373,262

Çizelge 7.70. (Devam) Birinci ve ikinci deprotonlanma merkezlerine göre PM3yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen ve PA değerleri

SB1-17e	18604,296	18579,015	-19,954
SB2-1d	17277,547	16975,057	-297,164
SB2-2d	18860,877	18576,190	-279,361
SB2-3d	18166,776	17802,915	-358,536
SB2-3e	18166,776	17771,417	-390,033
SB2-4d	17129,517	16958,180	-166,011
SB2-5d	16982,184	16659,418	-317,440
SB2-6d	16979,298	16999,743	25,771
SB2-7d	16815,377	16569,852	-240,199
SB2-8d	18044,614	17749,581	-289,707
TSB-3d	13957,494	13567,065	-385,103
TSB-3e	13957,494	13583,786	-368,382
İkinci proton verme			
SB1-2f	17182,453	16673,135	-498,666
SB1-3f	19008,269	18693,628	-303,989
SB1-10f	19085,027	18684,654	-389,720
SB1-15f	18905,060	18281,874	-612,534
SB1-17f	18604,296	17777,664	-815,980
TSB-3f	13957,494	13543,871	-402,971
PM3-H₂O			
Bileşik	$\Delta H(\text{BH})$	$\Delta H(\text{B}^-)$	PA
Birinci proton verme			
SB1-2d	17178,196	16979,58	-193,341
SB1-2e	17178,196	16552,081	-620,840
SB1-3d	19010,312	18922,854	-82,183
SB1-3e	19010,312	18467,374	-537,662
SB1-10d	19085,571	18746,357	-333,939
SB1-10e	19085,571	18093,654	-986,642
SB1-15d	18910,099	18511,881	-392,943
SB1-15e	18910,099	18173,410	-731,414
SB1-17d	18599,716	18233,016	-361,424
SB1-17e	18599,716	18584,432	-10,008
SB2-1d	17275,907	16972,994	-297,638
SB2-2d	18867,327	18578,646	-283,406
SB2-3d	18166,667	17809,583	-351,809
SB2-3e	18166,667	17773,494	-387,897
SB2-4d	17126,188	16954,452	-166,461
SB2-5d	16968,064	16659,776	-303,013
SB2-6d	16977,647	17001,904	29,532
SB2-7d	16815,515	16568,692	-241,548
SB2-8d	18039,482	17751,135	-283,072
TSB-3d	13958,610	13564,465	-388,87
TSB-3e	13958,610	13589,859	-363,476
İkinci proton verme			
SB1-2f	17178,196	16668,670	-498,976

Çizelge 7.70. (Devam) Birinci ve ikinci deprotonlanma merkezlerine göre PM3 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen ve PA değerleri

SB1-3f	19010,312	18690,205	-309,556
SB1-10f	19085,571	18696,960	-378,061
SB1-15f	18910,099	18281,874	-617,675
SB1-17f	18599,716	18594,364	5,199
TSB-3f	13958,610	13549,071	-398,988

Çizelge 7.71. Birinci ve ikinci protonlanma merkezlerine göre PM6 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen ve PA değerleri

PM6-DMF			
Bileşik	$\Delta H(B)$	$\Delta H(BH^+)$	PA
Birinci proton alma			
SB1-1a	16053,231	16137,845	78,160
SB1-1b	16053,231	16065,146	5,461
SB1-2a	17643,782	17898,795	248,559
SB1-2b	17643,782	17685,772	35,536
SB1-3a	19551,603	19610,435	52,379
SB1-3b	19551,603	19629,456	71,399
SB1-4a	17570,369	17517,058	-59,765
SB1-4b	17570,369	17571,094	-5,729
SB1-5a	17117,502	17187,363	63,407
SB1-5b	17117,502	17184,820	60,865
SB1-6a	17177,017	17143,292	-40,179
SB1-6b	17177,017	17157,872	-25,599
SB1-7a	15056,166	15090,042	27,422
SB1-7b	15056,166	15118,768	56,148
SB1-8a	15192,694	15108,648	-90,499
SB1-8b	15192,694	15275,293	76,145
SB1-9a	15948,689	15955,990	0,847
SB1-9b	15948,689	15922,450	-32,693
SB1-10a	19561,926	19723,820	155,44
SB1-10b	19561,926	19817,625	249,245
SB1-11a	19039,032	19031,040	-14,445
SB1-11b	19039,032	19116,136	70,650
SB1-12a	20844,944	20752,493	-98,906
SB1-12b	20844,944	20863,277	11,879
SB1-13a	19797,619	19755,930	-48,142
SB1-13b	19797,619	19865,971	61,899
SB1-14a	19101,750	19145,678	37,474
SB1-14b	19101,750	19090,301	-17,903
SB1-15a	19429,461	19406,497	-29,417
SB1-15b	19429,461	19138,836	-297,079
SB1-16a	19054,619	19141,460	80,386
SB1-16b	19054,619	19050,653	-10,421
SB1-17a	18876,920	19554,669	671,295

Çizelge 7.71. (Devam) Birinci ve ikinci protonlanma merkezlerine göre PM6 yöntemiyle DMFve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen ve PA değerleri

SB1-17b	18876,920	19272,308	388,934
SB1-18a	17556,203	17533,824	-28,833
SB1-18b	17556,203	17640,765	78,108
SB2-1a	17612,589	17828,231	209,187
SB2-1b	17612,589	17743,385	124,342
SB2-2a	19275,623	19262,834	-19,243
SB2-2b	19275,623	19504,376	222,299
SB2-3a	18510,406	18668,803	151,943
SB2-3b	18510,406	18498,472	-18,388
SB2-4a	17559,967	17706,389	139,968
SB2-4b	17559,967	17681,37	114,949
SB2-5a	17317,316	17521,817	198,046
SB2-5b	17317,316	17558,956	235,186
SB2-6a	17039,187	17679,068	633,427
SB2-6b	17039,187	17810,997	765,355
SB2-7a	17404,616	17546,879	135,809
SB2-7b	17404,616	17456,751	45,681
SB2-8a	18502,570	18570,894	61,870
SB2-8b	18502,570	18499,787	-9,236
TSB-1a	13453,200	13694,343	234,69
TSB-1b	13453,200	13438,642	-21,011
TSB-2a	15001,123	15151,502	143,926
TSB-2b	15001,123	15062,203	54,626
TSB-3a	14410,647	14490,047	72,946
TSB-3b	14410,647	14390,419	-26,682
TSB-4a	13387,571	13586,358	192,334
TSB-4b	13387,571	13488,663	94,639
TSB-5a	13215,558	13394,449	172,437
TSB-5b	13215,558	13198,680	-23,332
TSB-6a	13420,338	13694,743	267,951
TSB-6b	13420,338	13486,579	59,786
TSB-7a	13184,599	13455,028	263,975
TSB-7b	13184,599	13294,963	103,910
TSB-8a	14179,377	14043,294	-142,537
TSB-8b	14179,377	14235,545	49,714
İkinci proton alma			
SB1-1c	16053,231	16165,617	99,479
SB1-2c	17643,782	17731,002	74,311
SB1-3c	19551,603	19687,823	123,312
SB1-4c	17570,369	17573,011	-10,266
SB1-5c	17117,502	17194,553	64,143
SB1-6c	17177,017	17262,238	72,313
SB1-7c	15056,166	15033,879	-35,195
SB1-8c	15192,694	15307,655	102,053
SB1-9c	15948,689	15939,368	-22,230
SB1-10c	19561,926	19716,114	141,280
SB1-11c	19039,032	19090,817	38,878

Çizelge 7.71. (Devam) Birinci ve ikinci protonlanma merkezlerine göre PM6 yöntemiyle DMF'Ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen ve PA değerleri

SB1-12c	20844,944	20827,752	-30,101
SB1-13c	19797,619	19603,115	-207,412
SB1-14c	19101,750	19096,230	-18,429
SB1-15c	19429,461	19176,386	-265,982
SB1-16c	19054,619	18955,913	-111,614
SB1-17c	18876,920	19346,326	456,497
SB1-18c	17556,203	17628,994	59,882
SB2-1c	17612,589	17589,587	-35,910
SB2-2c	19275,623	19242,614	-45,917
SB2-3c	18510,406	18442,376	-80,938
SB2-4c	17559,967	17630,957	58,082
SB2-5c	17317,316	17513,814	183,589
SB2-6c	17039,187	17621,595	569,500
SB2-7c	17404,616	17510,415	92,891
SB2-8c	18502,570	18405,624	-109,853
TSB-1c	13453,200	13377,354	-88,754
TSB-2c	15001,123	15062,303	48,272
TSB-3c	14410,647	14220,062	-203,494
TSB-4c	13387,571	13324,947	-75,531
TSB-5c	13215,558	13176,858	-51,609
TSB-6c	13420,338	13401,353	-31,894
TSB-7c	13184,599	13185,914	-11,593
TSB-8c	14179,377	14135,785	-56,501
PM6-H₂O			
Bileşik	$\Delta H(B)$	$\Delta H(BH^+)$	PA
Birinci proton alma			
SB1-1a	16059,036	16140,727	75,370
SB1-1b	16059,036	16067,265	1,909
SB1-2a	17639,430	17910,852	265,101
SB1-2b	17639,430	17688,146	42,395
SB1-3a	19540,666	19617,787	70,801
SB1-3b	19540,666	19623,702	76,716
SB1-4a	17570,389	17518,757	-57,952
SB1-4b	17570,389	17571,118	-5,591
SB1-5a	17121,570	17187,104	59,213
SB1-5b	17121,570	17180,409	52,519
SB1-6a	17180,615	17144,567	-42,368
SB1-6b	17180,615	17157,638	-29,296
SB1-7a	15054,925	15091,686	30,441
SB1-7b	15054,925	15123,583	62,338
SB1-8a	15191,305	15107,115	-90,510
SB1-8b	15191,305	15270,368	72,743
SB1-9a	15949,370	15953,997	-1,693
SB1-9b	15949,370	15921,981	-33,709
SB1-10a	19553,871	19737,260	177,070

Çizelge 7.71. (Devam) Birinci ve ikinci protonlanma merkezlerine göre PM6 yöntemiyle DMF'Ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen ve PA değerleri

SB1-10b	19553,871	19800,766	240,575
SB1-11a	19039,157	19037,222	-8,255
SB1-11b	19039,157	19114,950	69,473
SB1-12a	20848,925	20757,817	-97,428
SB1-12b	20848,925	20863,892	8,646
SB1-13a	19803,630	19759,786	-50,164
SB1-13b	19803,630	19861,712	51,761
SB1-14a	19102,453	19140,346	31,572
SB1-14b	19102,453	19090,860	-17,913
SB1-15a	19423,960	19416,892	-13,388
SB1-15b	19423,960	19143,141	-287,139
SB1-16a	19059,762	19141,059	74,977
SB1-16b	19059,762	19053,099	-12,983
SB1-17a	18880,606	19467,700	580,774
SB1-17b	18880,606	19285,017	398,092
SB1-18a	17557,126	17534,391	-29,056
SB1-18b	17557,126	17640,246	76,800
SB2-1a	17605,506	17835,208	223,381
SB2-1b	17605,506	17747,528	135,702
SB2-2a	19280,707	19270,085	-16,941
SB2-2b	19280,707	19507,492	220,465
SB2-3a	18515,354	18677,790	156,116
SB2-3b	18515,354	18513,127	-8,547
SB2-4a	17562,692	17711,068	142,057
SB2-4b	17562,692	17690,461	121,45
SB2-5a	17312,298	17529,629	211,012
SB2-5b	17312,298	17563,518	244,901
SB2-6a	17310,216	17684,820	368,283
SB2-6b	17310,216	17815,156	498,619
SB2-7a	17398,255	17550,066	145,491
SB2-7b	17398,255	17444,803	40,228
SB2-8a	18498,016	18574,821	70,485
SB2-8b	18498,016	18499,589	-4,748
TSB-1a	13459,070	13688,115	222,724
TSB-1b	13459,070	13436,797	-28,594
TSB-2a	15006,423	15156,217	143,474
TSB-2b	15006,423	15061,367	48,624
TSB-3a	14424,575	14535,083	104,188
TSB-3b	14424,575	14394,397	-36,498
TSB-4a	13393,951	13570,393	170,122
TSB-4b	13393,951	13486,821	86,550
TSB-5a	13224,087	13381,241	150,834
TSB-5b	13224,087	13196,990	-33,418
TSB-6a	13006,563	13004,878	-8,005
TSB-6b	13006,563	12889,972	-122,911
TSB-7a	13185,563	13443,273	251,391
TSB-7b	13185,563	13293,490	101,607

Çizelge 7.71. (Devam) Birinci ve ikinci protonlanma merkezlerine göre PM6 yöntemiyle DMFve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen ve PA değerleri

TSB-8a	14179,377	14040,623	-145,074
TSB-8b	14179,377	14236,131	50,434
İkinci proton alma			
SB1-1c	16059,036	16161,191	89,514
SB1-2c	17639,430	17734,985	82,914
SB1-3c	19540,666	19684,107	130,801
SB1-4c	17570,389	17576,275	-6,753
SB1-5c	17121,57	17201,642	67,432
SB1-6c	17180,615	17264,856	71,602
SB1-7c	15054,925	15032,950	-34,615
SB1-8c	15191,305	15310,816	106,871
SB1-9c	15949,370	15935,518	-26,492
SB1-10c	19553,871	19721,171	154,660
SB1-11c	19039,157	19092,145	40,348
SB1-12c	20848,925	20827,890	-33,675
SB1-13c	19803,630	19601,996	-214,274
SB1-14c	19102,453	19097,682	-17,411
SB1-15c	19423,960	19169,584	-267,016
SB1-16c	19059,762	18958,628	-113,774
SB1-17c	18880,606	19346,326	453,080
SB1-18c	17557,126	17628,880	59,114
SB2-1c	17605,506	17586,458	-31,688
SB2-2c	19280,707	19247,600	-45,746
SB2-3c	18515,354	18440,087	-87,907
SB2-4c	17562,692	17627,051	51,719
SB2-5c	17312,298	17519,203	194,265
SB2-6c	17310,216	17620,713	297,857
SB2-7c	17398,255	17511,235	100,340
SB2-8c	18498,016	18409,857	-100,799
TSB-1c	13459,070	13374,301	-97,409
TSB-2c	15006,423	15058,642	39,578
TSB-3c	14424,575	14224,573	-212,642
TSB-4c	13393,951	13317,462	-89,130
TSB-5c	13224,087	13172,724	-64,003
TSB-6c	13006,563	12798,727	-220,476
TSB-7c	13185,563	13182,581	-15,621
TSB-8c	14179,377	14130,513	-61,504

Çizelge 7.72. Birinci ve ikinci deprotonlanma merkezlerine göre PM6 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen ve PA değerleri

PM6-DMF			
Bileşik	$\Delta H(BH)$	$\Delta H(B)$	PA
Birinci proton verme			
SB1-2d	17643,782	17478,138	-159,190

Çizelge 7.72. (Devam) Birinci ve ikinci deprotonlanma merkezlerine göre PM6 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen ve PA değerleri

SB1-2e	17643,782	17510,888	-126,441
SB1-3d	19551,603	19450,963	-94,185
SB1-3e	19551,603	19295,418	-249,730
SB1-10d	19561,926	19245,155	-310,317
SB1-10e	19561,926	18620,352	-935,120
SB1-15d	19429,461	19071,519	-351,488
SB1-15e	19429,461	18650,347	-772,659
SB1-17d	18876,920	19372,296	501,830
SB1-17e	18876,920	19095,447	224,981
SB2-1d	17612,589	17344,256	-261,879
SB2-2d	19275,623	19049,710	-219,459
SB2-3d	18510,406	18231,126	-272,827
SB2-3e	18510,406	18238,365	-265,587
SB2-4d	17559,967	17299,751	-253,762
SB2-5d	17317,316	17145,269	-165,594
SB2-6d	17039,187	17344,554	311,821
SB2-7d	17404,616	17164,533	-233,629
SB2-8d	18502,570	18152,663	-343,453
TSB-3d	14410,647	14077,708	-326,485
TSB-3e	14410,647	14139,149	-265,044
İkinci proton verme			
SB1-2f	17643,782	17103,525	-527,349
SB1-3f	19551,603	18986,055	-552,640
SB1-10f	19561,926	18661,307	-887,711
SB1-15f	19429,461	18645,276	-771,277
SB1-17f	18876,920	18938,984	74,971
TSB-3f	14410,647	13657,620	-740,120
PM6-H₂O			
Bileşik	$\Delta H(\text{BH})$	$\Delta H(\text{B}^-)$	PA
Birinci proton verme			
SB1-2d	17639,430	17478,010	-155,100
SB1-2e	17639,430	17514,557	-118,553
SB1-3d	19540,666	19454,489	-79,857
SB1-3e	19540,666	19300,994	-233,352
SB1-10d	19553,871	19248,401	-299,150
SB1-10e	19553,871	18633,065	-914,486
SB1-15d	19423,960	19082,087	-335,553
SB1-15e	19423,960	18646,106	-771,533
SB1-17d	18880,606	19386,909	512,623
SB1-17e	18880,606	19109,114	234,828
SB2-1d	17605,506	17350,013	-249,174
SB2-2d	19280,707	19051,468	-222,918
SB2-3d	18515,354	18238,067	-270,967
SB2-3e	18515,354	18235,074	-273,961
SB2-4d	17562,692	17308,228	-248,144

Çizelge 7.72. (Devam) Birinci ve ikinci deprotonlanma merkezlerine göre PM6 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen ve PA değerleri

SB2-5d	17312,298	17312,298	6,320
SB2-6d	17310,216	17347,258	43,362
SB2-7d	17398,255	17175,484	-216,451
SB2-8d	18498,016	18152,896	-338,800
TSB-3d	14424,575	14082,426	-335,828
TSB-3e	14424,575	14149,513	-268,742
İkinci proton verme			
SB1-2f	17639,430	17108,993	-517,797
SB1-3f	19540,666	18989,984	-538,042
SB1-10f	19553,871	18672,555	-868,676
SB1-15f	19423,960	18645,276	-766,044
SB1-17f	18880,606	18946,851	78,886
TSB-3f	14424,575	13659,333	-752,602

7.1.5. E_{HOMO}- E_{LUMO} Değerleri

Bilgisayar hesaplamaları sonucu elde edilen Sınır Orbital Enerji Değerlerinden yararlanılarak nükleofilik değerleri hesaplanmıştır.

Sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, T=298K) AM1, PM3 ve PM6 yöntemleri ile yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen nükleofilik değerleri Çizelge 7.73 'de, DMF fazındaki ($\epsilon=36,71$, T=298K) hesaplamalar Çizelge 7.74'de, sıralama bazındaki değerler Çizelge 7.75'de verilmiştir.

$$\eta = E_{\text{HOMO}} - E_{\text{LUMO}}$$

Çizelge 7.73. Sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, T=298K) AM1, PM3 ve PM6 yöntemleri ile yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen nükleofilik değerleri

Bileşik	E _{HOMO}	E _{LUMO}	η
AM1-H₂O			
SB1-1N	-8,558	-0,355	-8,203
SB1-2N	-8,608	-0,445	-8,163
SB1-3N	-8,722	0,830	-9,552
SB1-4N	-8,661	-0,589	-8,072
SB1-5N	-8,659	-0,568	-8,091
SB1-6N	-8,678	-0,592	-8,086
SB1-7N	-8,619	-0,334	-8,285
SB1-8N	-14,355	-6,663	-7,692
SB1-9N	-8,772	-0,595	-8,177
SB1-10N	-8,814	-0,566	-8,248

Çizelge 7.73. (Devam) Sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) AM1, PM3 ve PM6 yöntemleri ile yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen nükleofilik değerleri

SB1-11N	-8,747	-0,742	-8,005
SB1-12N	-8,914	-1,538	-7,376
SB1-13N	-8,504	-0,293	-8,211
SB1-14N	-8,503	-0,762	-7,741
SB1-15N	-8,698	-0,407	-8,291
SB1-16N	-8,630	-0,394	-8,236
SB1-17N	-8,604	-0,348	-8,256
SB1-18N	-8,646	-0,487	-8,159
SB2-1N	-8,688	-0,487	-8,201
SB2-2N	-8,740	-1,381	-7,359
SB2-3N	-8,610	-0,389	-8,221
SB2-4N	-8,702	-0,609	-8,093
SB2-5N	-8,676	-0,624	-8,052
SB2-6N	-8,879	-0,654	-8,225
SB2-7N	-8,696	-0,612	-8,084
SB2-8N	-8,691	-0,493	-8,198
TSB-1N	-8,633	-0,059	-8,574
TSB-2N	-8,464	-1,272	-7,192
TSB-3N	-8,279	-0,005	-8,274
TSB-4N	0,389	-0,506	4,302
TSB-5N	-8,406	-0,455	-7,951
TSB-6N	-8,395	-0,443	-7,952
TSB-7N	-8,468	-0,470	-7,998
TSB-8N	-8,436	-0,339	-8,097
PM3-H₂O			
SB1-1N	-8,665	-0,374	-8,291
SB1-2N	-8,682	-0,470	-8,212
SB1-3N	-8,736	-0,730	-8,006
SB1-4N	-8,729	-0,586	-8,143
SB1-5N	-8,785	-0,614	-8,171
SB1-6N	-8,791	-0,646	-8,145
SB1-7N	-8,707	-0,238	-8,469
SB1-8N	-14,583	-6,836	-7,747
SB1-9N	-8,859	-0,679	-8,180
SB1-10N	-8,782	-0,563	-8,219
SB1-11N	-8,793	-0,763	-8,030
SB1-12N	-9,126	-1,623	-7,503
SB1-13N	-8,630	-0,301	-8,329
SB1-14N	-8,648	-0,858	-7,790
SB1-15N	-8,870	-0,514	-8,356
SB1-16N	-8,698	-0,379	-8,319
SB1-17N	-8,636	-0,460	-8,176
SB1-18N	-8,732	-0,553	-8,179
SB2-1N	-8,781	-0,556	-8,225
SB2-2N	-8,746	-1,426	-7,302
SB2-3N	-8,761	-0,323	-8,438
SB2-4N	-8,782	-0,618	-8,164

Çizelge 7.73. (Devam) Sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) AM1, PM3 ve PM6 yöntemleri ile yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen nükleofilik değerleri

SB2-5N	-8,765	-0,618	-8,147
SB2-6N	-8,959	-0,510	-8,449
SB2-7N	-8,767	-0,647	-8,120
SB2-8N	-8,752	-0,419	-8,333
TSB-1N	-8,644	-0,444	-8,200
TSB-2N	-8,581	-1,428	-7,153
TSB-3N	-8,370	-0,175	-8,195
TSB-4N	-8,586	-0,519	-8,067
TSB-5N	-8,564	-0,551	-8,013
TSB-6N	-8,529	-0,495	-8,034
TSB-7N	-8,599	-0,565	-8,034
TSB-8N	-8,559	-0,352	-8,207
PM6-H₂O			
SB1-1N	-8,512	-0,533	-7,979
SB1-2N	-8,532	-0,593	-7,939
SB1-3N	-8,652	-0,750	-7,902
SB1-4N	-8,676	-0,782	-7,894
SB1-5N	-8,642	-0,710	-7,932
SB1-6N	-8,683	-0,760	-7,923
SB1-7N	-8,545	-0,386	-8,159
SB1-8N	-14,683	-6,738	-7,945
SB1-9N	-8,762	-0,775	-7,987
SB1-10N	-8,812	-0,859	-7,953
SB1-11N	-8,714	-1,034	-7,680
SB1-12N	-8,834	-1,926	-6,908
SB1-13N	-8,416	-0,411	-8,005
SB1-14N	-8,477	-0,809	-7,668
SB1-15N	-8,696	-0,694	-8,002
SB1-16N	-8,534	-0,741	-7,793
SB1-17N	-8,725	-0,643	-8,082
SB1-18N	-8,591	-0,738	-7,853
SB2-1N	-8,631	-0,637	-7,994
SB2-2N	-8,705	-1,772	-6,933
SB2-3N	-8,515	-0,597	-7,918
SB2-4N	-8,690	-0,825	-7,865
SB2-5N	-8,664	-0,741	-7,923
SB2-6N	-8,832	-0,799	-8,033
SB2-7N	-8,663	-0,723	-7,940
SB2-8N	-8,619	-0,815	-7,804
TSB-1N	-8,526	-0,337	-8,189
TSB-2N	-8,513	-1,706	-6,807
TSB-3N	-8,222	-0,279	-7,943
TSB-4N	-8,454	-0,604	-7,850
TSB-5N	-8,417	-0,547	-7,870
TSB-6N	-8,529	-0,495	-8,034
TSB-7N	-8,437	-0,537	-7,900
TSB-8N	-8,490	-0,662	-7,828

η = HOMO-LUMO

Çizelge 7.74. DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) AM1, PM3 ve PM6 yöntemleri ile yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen nükleofilik değerleri

Bileşik	E _{HOMO}	E _{LUMO}	η
AM1-DMF			
SB1-1N	-8,558	-0,355	-8,203
SB1-2N	-8,608	-0,445	-8,163
SB1-3N	-8,722	-0,583	-8,139
SB1-4N	-8,661	-0,589	-8,072
SB1-5N	-8,659	-0,568	-8,091
SB1-6N	-8,678	-0,592	-8,086
SB1-7N	-8,619	-0,334	-8,285
SB1-8N	-8,641	-0,351	-8,290
SB1-9N	-8,772	-0,595	-8,177
SB1-10N	-8,814	-0,566	-8,248
SB1-11N	-8,747	-0,742	-8,005
SB1-12N	-8,914	-1,538	-7,376
SB1-13N	-8,504	-0,293	-8,211
SB1-14N	-8,503	-0,762	-7,741
SB1-15N	-8,698	-0,407	-8,291
SB1-16N	-8,63	-0,394	-8,236
SB1-17N	-8,604	-0,348	-8,256
SB1-18N	-8,646	-0,487	-8,159
SB2-1N	-8,688	-0,487	-8,201
SB2-2N	-8,740	-1,381	-7,359
SB2-3N	-8,610	-0,389	-8,221
SB2-4N	-8,702	-0,609	-8,093
SB2-5N	-8,676	-0,624	-8,052
SB2-6N	-9,000	-0,668	-8,200
SB2-7N	-8,696	-0,612	-8,084
SB2-8N	-8,691	-0,493	-8,198
TSB-1N	-8,633	-0,059	-8,574
TSB-2N	-8,464	-1,272	-7,192
TSB-3N	-8,279	-0,005	-8,274
TSB-4N	-8,422	-0,506	-7,916
TSB-5N	-8,406	-0,455	-7,951
TSB-6N	-8,395	-0,443	-7,952
TSB-7N	-8,468	-0,470	-7,998
TSB-8N	-8,436	-0,339	-8,097
PM3-DMF			
SB1-1N	-8,665	-0,374	-8,291
SB1-2N	-8,682	-0,470	-8,212
SB1-3N	-8,736	-0,730	-8,006
SB1-4N	-8,729	-0,586	-8,143
SB1-5N	-8,785	-0,614	-8,171
SB1-6N	-8,791	-0,646	-8,145
SB1-7N	-8,707	-0,238	-8,469
SB1-8N	-8,848	-0,273	-8,575
SB1-9N	-8,859	-0,679	-8,180

Çizelge 7.74. (Devam) DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) AM1, PM3 ve PM6 yöntemleri ile yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen nükleofilik değerleri

SB1-10N	-8,782	-0,563	-8,219
SB1-11N	-8,793	-0,763	-8,030
SB1-12N	-9,126	-1,623	-7,503
SB1-13N	-8,630	-0,301	-8,329
SB1-14N	-8,648	-0,858	-7,790
SB1-15N	-8,870	-0,514	-8,356
SB1-16N	-8,698	-0,379	-8,319
SB1-17N	-8,636	-0,460	-8,176
SB1-18N	-8,732	-0,553	-8,179
SB2-1N	-8,781	-0,556	-8,225
SB2-2N	-8,746	-1,426	-7,320
SB2-3N	-8,761	-0,323	-8,438
SB2-4N	-8,782	-0,618	-8,164
SB2-5N	-8,765	-0,618	-8,147
SB2-6N	-9,006	-0,507	-8,499
SB2-7N	-8,767	-0,647	-8,120
SB2-8N	-8,752	-0,419	-8,333
TSB-1N	-8,644	-0,444	-8,200
TSB-2N	-8,581	-1,428	-7,153
TSB-3N	-8,370	-0,175	-8,195
TSB-4N	-8,586	-0,519	-8,067
TSB-5N	-8,564	-0,551	-8,013
TSB-6N	-8,529	-0,495	-8,034
TSB-7N	-8,599	-0,565	-8,034
TSB-8N	-8,559	-0,352	-8,207
PM6-DMF			
SB1-1N	-8,512	-0,533	-7,979
SB1-2N	-8,532	-0,593	-7,939
SB1-3N	-8,652	-0,750	-7,902
SB1-4N	-8,676	-0,782	-7,894
SB1-5N	-8,642	-0,710	-7,932
SB1-6N	-8,683	-0,760	-7,923
SB1-7N	-8,545	-0,386	-8,159
SB1-8N	-8,703	-0,470	-8,233
SB1-9N	-8,762	-0,775	-7,987
SB1-10N	-8,812	-0,859	-7,953
SB1-11N	-8,714	-1,034	-7,680
SB1-12N	-8,834	-1,926	-6,908
SB1-13N	-8,416	-0,411	-8,005
SB1-14N	-8,477	-0,809	-7,668
SB1-15N	-8,696	-0,694	-8,002
SB1-16N	-8,534	-0,741	-7,793
SB1-17N	-8,725	-0,643	-8,082
SB1-18N	-8,591	-0,738	-7,853
SB2-1N	-8,631	-0,637	-7,994
SB2-2N	-8,705	-1,772	-6,933
SB2-3N	-8,515	-0,597	-7,918

Çizelge 7.74. (Devam) DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) AM1, PM3 ve PM6 yöntemleri ile yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen nükleofilik değerleri

SB2-4N	-8,690	-0,825	-7,865
SB2-5N	-8,664	-0,741	-7,923
SB2-6N	-8,832	-0,799	-8,033
SB2-7N	-8,663	-0,723	-7,940
SB2-8N	-8,619	-0,815	-7,804
TSB-1N	-8,526	-0,337	-8,189
TSB-2N	-8,513	-1,706	-6,807
TSB-3N	-8,222	-0,279	-7,943
TSB-4N	-8,454	-0,604	-7,850
TSB-5N	-8,417	-0,547	-7,870
TSB-6N	-8,399	-0,600	-7,799
TSB-7N	-8,437	-0,537	-7,900
TSB-8N	-8,490	-0,662	-7,828

η = HOMO-LUMO

Çizelge 7.75. Oluşan ürünlerin AM1, PM3 ve PM6 yöntemleriyle sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) ve DMF fazında ($\epsilon=36,71$, $T=298K$) E_{HOMO} - E_{LUMO} sıralaması

Bileşik	η	Bileşik	η	Bileşik	η
AM1-H₂O		AM1-DMF		PM3-H₂O	
SB1-3N	-9,552	TSB-1N	-8,574	SB1-8N	-8,481
TSB-1N	-8,574	SB1-15N	-8,291	SB1-7N	-8,469
SB1-15N	-8,291	SB1-7N	-8,285	SB2-6N	-8,449
SB1-7N	-8,285	SB1-8N	-8,280	SB2-3N	-8,438
SB1-8N	-8,280	TSB-3N	-8,274	SB1-15N	-8,356
TSB-3N	-8,274	SB1-17N	-8,256	SB2-8N	-8,333
SB1-17N	-8,256	SB1-10N	-8,248	SB1-13N	-8,329
SB1-10N	-8,248	SB1-16N	-8,236	SB1-16N	-8,319
SB1-16N	-8,236	SB2-3N	-8,221	SB1-1N	-8,291
SB2-6N	-8,225	SB1-13N	-8,211	SB2-1N	-8,225
SB2-3N	-8,221	SB1-1N	-8,203	SB1-10N	-8,219
SB1-13N	-8,211	SB2-1N	-8,201	SB1-2N	-8,212
SB1-1N	-8,203	SB2-6N	-8,200	TSB-8N	-8,207
SB2-1N	-8,201	SB2-8N	-8,198	TSB-1N	-8,200
SB2-8N	-8,198	SB1-9N	-8,177	TSB-3N	-8,195
SB1-9N	-8,177	SB1-2N	-8,163	SB1-9N	-8,180
SB1-2N	-8,163	SB1-18N	-8,159	SB1-18N	-8,179
SB1-18N	-8,159	SB1-3N	-8,139	SB1-17N	-8,176
TSB-8N	-8,097	TSB-8N	-8,097	SB1-5N	-8,171
SB2-4N	-8,093	SB2-4N	-8,093	SB2-4N	-8,164
SB1-5N	-8,091	SB1-5N	-8,091	SB2-5N	-8,147
SB1-6N	-8,086	SB1-6N	-8,086	SB1-6N	-8,145
SB2-7N	-8,084	SB2-7N	-8,084	SB1-4N	-8,143
SB1-4N	-8,072	SB1-4N	-8,072	SB2-7N	-8,120

Çizelge 7.75. (Devam) Oluşan ürünlerin AM1, PM3 ve PM6 yöntemleriyle sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, T=298K) ve DMF fazında ($\epsilon=36,71$, T=298K) E_{HOMO}- E_{LUMO} sıralaması

SB2-5N	-8,052	SB2-5N	-8,052	TSB-4N	-8,067
SB1-11N	-8,005	SB1-11N	-8,005	TSB-6N	-8,034
TSB-7N	-7,998	TSB-7N	-7,998	TSB-7N	-8,034
TSB-6N	-7,952	TSB-6N	-7,952	SB1-11N	-8,030
TSB-5N	-7,951	TSB-5N	-7,951	TSB-5N	-8,013
SB1-14N	-7,741	TSB-4N	-7,916	SB1-3N	-8,006
SB1-12N	-7,376	SB1-14N	-7,741	SB1-14N	-7,790
SB2-2N	-7,359	SB1-12N	-7,376	SB1-12N	-7,503
TSB-2N	-7,192	SB2-2N	-7,359	SB2-2N	-7,320
TSB-4N	4,302	TSB-2N	-7,192	TSB-2N	-7,153
PM3-DMF		PM6-H₂O		PM6-DMF	
SB2-6N	-8,499	TSB-1N	-8,189	TSB-1N	-8,189
SB1-8N	-8,481	SB1-8N	-8,168	SB1-8N	-8,168
SB1-7N	-8,469	SB1-7N	-8,159	SB1-7N	-8,159
SB2-3N	-8,438	SB1-17N	-8,082	SB1-17N	-8,082
SB1-15N	-8,356	TSB-6N	-8,034	SB2-6N	-8,033
SB2-8N	-8,333	SB2-6N	-8,033	SB1-13N	-8,005
SB1-13N	-8,329	SB1-13N	-8,005	SB1-15N	-8,002
SB1-16N	-8,319	SB1-15N	-8,002	SB2-1N	-7,994
SB1-1N	-8,291	SB2-1N	-7,994	SB1-9N	-7,987
SB2-1N	-8,225	SB1-9N	-7,987	SB1-1N	-7,979
SB1-10N	-8,219	SB1-1N	-7,979	SB1-10N	-7,953
SB1-2N	-8,212	SB1-10N	-7,953	TSB-3N	-7,943
TSB-8N	-8,207	TSB-3N	-7,943	SB2-7N	-7,940
TSB-1N	-8,200	SB2-7N	-7,940	SB1-2N	-7,939
TSB-3N	-8,195	SB1-2N	-7,939	SB1-5N	-7,932
SB1-9N	-8,180	SB1-5N	-7,932	SB1-6N	-7,923
SB1-18N	-8,179	SB1-6N	-7,923	SB2-5N	-7,923
SB1-17N	-8,176	SB2-5N	-7,923	SB2-3N	-7,918
SB1-5N	-8,171	SB2-3N	-7,918	SB1-3N	-7,902
SB2-4N	-8,164	SB1-3N	-7,902	TSB-7N	-7,900
SB2-5N	-8,147	TSB-7N	-7,900	SB1-4N	-7,894
SB1-6N	-8,145	SB1-4N	-7,894	TSB-5N	-7,870
SB1-4N	-8,143	TSB-5N	-7,870	SB2-4N	-7,865
SB2-7N	-8,120	SB2-4N	-7,865	SB1-18N	-7,853
TSB-4N	-8,067	SB1-18N	-7,853	TSB-4N	-7,850
TSB-6N	-8,034	TSB-4N	-7,850	TSB-8N	-7,828
TSB-7N	-8,034	TSB-8N	-7,828	SB2-8N	-7,804
SB1-11N	-8,030	SB2-8N	-7,804	TSB-6N	-7,799
TSB-5N	-8,013	SB1-16N	-7,793	SB1-16N	-7,793
SB1-3N	-8,006	SB1-11N	-7,680	SB1-11N	-7,680
SB1-14N	-7,790	SB1-14N	-7,668	SB1-14N	-7,668
SB1-12N	-7,503	SB2-2N	-6,933	SB2-2N	-6,933
SB2-2N	-7,320	SB1-12N	-6,908	SB1-12N	-6,908
TSB-2N	-7,153	TSB-2N	-6,807	TSB-2N	-6,807

η = HOMO-LUMO

Bir maddenin baz olarak davranabilmesi için kolaylıkla verebileceği elektronlara sahip olması gerektiğinden ve yüksek enerjili dolu molekül orbitalinden elektron verebileceğinden, yüksek enerjili dolu molekül orbitaline sahip olan maddeler baz olarak davranır. Yani HOMO'su yüksek enerjili maddeler bazdır. LUMO'su ne kadar düşük enerjili ise, madde o kadar kuvvetli asittir.

Moleküllerin semi-empirik yöntemiyle optimizasyonundan sonra HOMO ve LUMO enerjileri elde edilmiştir. Burada moleküllerin $\eta = \text{HOMO-LUMO}$ enerji farkları hesaplanmıştır. Bu değer artması demek nükleofil özelliğinin artması anlamına gelir. Bu da o maddeyi daha kolay elektron sağlayan bir gruba yani daha iyi bir Lewis bazına dönüştürür. Genellikle daha güçlü bir baz zayıf bir bazdan daha iyi bir nükleofildir.

7.1.6. Ürün Kararlılıkları

Ürünlerin kararlılıkları Çizelge 7.76.'da verilmiştir. Elde edilen veriler Eşitlik (7.1.)'deki $\Delta G_f = \Delta H_f - T\Delta S$ ve Eşitlik (7.2.)'deki $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ ifadeleri kullanılarak elde edilmiştir.

Çizelge 7.76. Oluşan ürünlerin kararlılıkları

AM1-DMF							
İki ucu aynı Schiff bazları							
Bileşik	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)
SB1-17N	-128,475	SB1-12N	-45,699	SB1-17N	-69,659	SB1-7N	14,161
SB1-10N	-125,471	SB1-11N	-43,797	SB1-10N	-63,472	SB1-8N	14,345
SB1-15N	-43,981	SB1-3N	-43,487	SB1-15N	16,119	SB1-9N	15,056
SB1-2N	-31,304	SB1-10N	-43,221	SB1-5N	24,397	SB1-1N	15,212
SB1-5N	-31,040	SB1-13N	-43,041	SB1-2N	25,374	SB1-5N	16,126
SB1-6N	-30,895	SB1-14N	-42,326	SB1-6N	25,727	SB1-6N	16,177
SB1-13N	-26,62	SB1-15N	-41,813	SB1-13N	34,979	SB1-4N	16,613
SB1-3N	-22,154	SB1-16N	-40,644	SB1-3N	40,008	SB1-18N	16,657
SB1-7N	23,090	SB1-18N	-40,521	SB1-7N	72,689	SB1-2N	17,005
SB1-11N	29,751	SB1-6N	-40,445	SB1-11N	91,725	SB1-14N	18,038
SB1-16N	35,122	SB1-17N	-40,420	SB1-16N	93,807	SB1-16N	18,041
SB1-4N	44,155	SB1-4N	-40,387	SB1-4N	101,155	SB1-11N	18,177
SB1-12N	45,829	SB1-2N	-39,674	SB1-18N	104,178	SB1-15N	18,287

Çizelge 7.76. (Devam) Oluşan ürünlerin kararlılıkları

SB1-18N	46,999	SB1-5N	-39,311	SB1-12N	111,329	SB1-17N	18,396
SB1-1N	61,787	SB1-1N	-38,393	SB1-1N	115,392	SB1-13N	18,557
SB1-14N	78,558	SB1-9N	-37,572	SB1-9N	133,351	SB1-3N	18,674
SB1-9N	80,722	SB1-8N	-35,480	SB1-14N	138,922	SB1-10N	18,778
SB1-8N	90,218	SB1-7N	-35,438	SB1-8N	140,044	SB1-12N	19,801
İki ucu farklı Schiff bazları							
SB2-3N	-80,858	SB2-2N	-42,786	SB2-3N	-23,250	SB2-6N	16,367
SB2-5N	-32,132	SB2-8N	-42,625	SB2-7N	24,964	SB2-7N	16,431
SB2-7N	-31,024	SB2-5N	-41,156	SB2-5N	25,681	SB2-5N	16,658
SB2-6N	-6,288	SB2-1N	-41,097	SB2-6N	49,605	SB2-1N	16,806
SB2-8N	-0,629	SB2-4N	-40,275	SB2-8N	59,583	SB2-4N	16,829
SB2-4N	6,189	SB2-3N	-40,077	SB2-4N	63,293	SB2-3N	17,531
SB2-1N	7,006	SB2-7N	-39,557	SB2-1N	64,909	SB2-8N	17,588
SB2-2N	8,196	SB2-6N	-39,526	SB2-2N	69,316	SB2-2N	18,334
Tek uçlu Schiff bazları							
TSB-3N	-76,391	TSB-2N	-35,546	TSB-3N	-30,238	TSB-7N	12,361
TSB-5N	-27,918	TSB-8N	-35,079	TSB-7N	17,064	TSB-5N	12,412
TSB-7N	-27,537	TSB-6N	-34,339	TSB-5N	17,666	TSB-4N	12,632
TSB-8N	3,147	TSB-5N	-33,172	TSB-8N	51,651	TSB-1N	12,641
TSB-6N	8,647	TSB-1N	-33,086	TSB-4N	55,478	TSB-6N	12,679
TSB-4N	10,097	TSB-4N	-32,749	TSB-6N	55,665	TSB-8N	13,425
TSB-1N	11,024	TSB-3N	-32,668	TSB-1N	56,751	TSB-3N	13,485
TSB-2N	11,229	TSB-7N	-32,240	TSB-2N	61,005	TSB-2N	14,230
AM1-H₂O							
İki ucu aynı Schiff bazları							
Bileşik	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)
SB1-17N	-129,104	SB1-12N	-45,837	SB1-17N	-70,219	SB1-7N	14,162
SB1-10N	-126,166	SB1-11N	-43,936	SB1-10N	-63,872	SB1-8N	14,345
SB1-15N	-44,431	SB1-10N	-43,508	SB1-15N	15,755	SB1-9N	15,061
SB1-2N	-31,567	SB1-3N	-43,302	SB1-5N	24,096	SB1-1N	15,210
SB1-5N	-31,262	SB1-13N	-42,785	SB1-2N	24,982	SB1-5N	16,127
SB1-6N	-30,798	SB1-14N	-42,265	SB1-6N	25,423	SB1-6N	16,174
SB1-13N	-26,729	SB1-15N	-41,888	SB1-13N	34,609	SB1-4N	16,614
SB1-3N	-22,354	SB1-18N	-40,629	SB1-3N	39,621	SB1-18N	16,662
SB1-7N	22,792	SB1-16N	-40,620	SB1-7N	72,363	SB1-2N	16,997
SB1-11N	29,331	SB1-17N	-40,485	SB1-11N	91,445	SB1-14N	18,038
SB1-16N	34,859	SB1-4N	-40,249	SB1-16N	93,524	SB1-16N	18,045
SB1-4N	43,995	SB1-6N	-40,047	SB1-4N	100,858	SB1-11N	18,179
SB1-12N	45,124	SB1-2N	-39,551	SB1-18N	103,886	SB1-15N	18,298
SB1-18N	46,595	SB1-5N	-39,231	SB1-12N	110,770	SB1-17N	18,400
SB1-1N	61,600	SB1-1N	-38,210	SB1-1N	115,020	SB1-13N	18,553
SB1-14N	78,291	SB1-9N	-37,752	SB1-9N	132,961	SB1-3N	18,674
SB1-9N	80,149	SB1-8N	-35,435	SB1-14N	138,594	SB1-10N	18,786

Çizelge 7.76. (Devam) Oluşan ürünlerin kararlılıkları

SB1-8N	89,915	SB1-7N	-35,409	SB1-8N	139,695	SB1-12N	19,809
İki ucu farklı Schiff bazları							
SB2-3N	-81,266	SB2-2N	-42,722	SB2-3N	-23,716	SB2-7N	16,427
SB2-5N	-32,372	SB2-8N	-42,196	SB2-7N	24,628	SB2-6N	16,456
SB2-7N	-31,610	SB2-5N	-41,060	SB2-5N	25,346	SB2-5N	16,658
SB2-6N	-6,810	SB2-1N	-41,024	SB2-6N	49,267	SB2-1N	16,810
SB2-8N	-0,528	SB2-4N	-40,292	SB2-8N	59,253	SB2-4N	16,833
SB2-4N	5,837	SB2-3N	-40,013	SB2-4N	62,962	SB2-3N	17,537
SB2-1N	6,746	SB2-7N	-39,811	SB2-1N	64,579	SB2-8N	17,585
SB2-2N	7,801	SB2-6N	-39,620	SB2-2N	68,865	SB2-2N	18,341
Tek uçlu Schiff bazları							
TSB-3N	-76,769	TSB-2N	-35,498	TSB-3N	-30,673	TSB-7N	12,359
TSB-5N	-28,192	TSB-8N	-34,943	TSB-7N	16,773	TSB-5N	12,413
TSB-7N	-27,791	TSB-6N	-33,837	TSB-5N	17,374	TSB-4N	12,634
TSB-8N	3,001	TSB-5N	-33,153	TSB-8N	51,366	TSB-1N	12,640
TSB-6N	8,865	TSB-1N	-33,031	TSB-4N	55,192	TSB-6N	12,674
TSB-4N	9,795	TSB-4N	-32,763	TSB-6N	55,375	TSB-8N	13,422
TSB-1N	10,789	TSB-3N	-32,615	TSB-1N	56,406	TSB-3N	13,481
TSB-2N	10,872	TSB-7N	-32,205	TSB-2N	60,602	TSB-2N	14,230
PM3-DMF							
İki ucu aynı Schiff bazları							
Bileşik	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)
SB1-17N	-144,309	SB1-12N	-44,529	SB1-17N	-84,670	SB1-7N	14,719
SB1-10N	-138,804	SB1-3N	-44,409	SB1-10N	-76,523	SB1-8N	14,849
SB1-15N	-60,196	SB1-11N	-43,983	SB1-15N	2,047	SB1-9N	15,551
SB1-2N	-45,589	SB1-13N	-43,855	SB1-2N	11,789	SB1-1N	15,719
SB1-5N	-40,206	SB1-15N	-43,337	SB1-5N	16,589	SB1-5N	16,630
SB1-6N	-40,156	SB1-10N	-43,195	SB1-6N	17,234	SB1-6N	16,644
SB1-13N	-37,948	SB1-14N	-42,406	SB1-13N	25,064	SB1-4N	17,165
SB1-3N	-33,575	SB1-16N	-41,789	SB1-3N	29,842	SB1-2N	17,178
SB1-7N	-7,605	SB1-17N	-41,034	SB1-7N	45,751	SB1-18N	17,180
SB1-12N	1,528	SB1-18N	-40,994	SB1-12N	66,283	SB1-14N	18,486
SB1-11N	18,303	SB1-6N	-40,754	SB1-11N	81,058	SB1-17N	18,600
SB1-16N	23,523	SB1-4N	-40,508	SB1-16N	84,105	SB1-11N	18,781
SB1-4N	33,388	SB1-2N	-40,196	SB1-4N	91,060	SB1-16N	18,784
SB1-18N	35,312	SB1-5N	-40,167	SB1-18N	93,485	SB1-15N	18,910
SB1-1N	49,097	SB1-1N	-39,517	SB1-8N	101,318	SB1-3N	19,010
SB1-8N	49,848	SB1-9N	-38,988	SB1-1N	104,335	SB1-10N	19,086
SB1-9N	60,818	SB1-7N	-38,638	SB1-9N	115,359	SB1-13N	19,152
SB1-14N	68,078	SB1-8N	-36,622	SB1-14N	128,973	SB1-12N	20,220
İki ucu farklı Schiff bazları							
SB2-3N	-94,787	SB2-2N	-42,181	SB2-3N	-35,922	SB2-7N	16,816
SB2-5N	-42,886	SB2-8N	-42,089	SB2-7N	14,250	SB2-5N	16,968
SB2-7N	-41,808	SB2-1N	-41,136	SB2-5N	14,550	SB2-6N	16,978

Çizelge 7.76. (Devam) Oluşan ürünlerin kararlılıkları

SB2-2N	-21,523	SB2-4N	-41,122	SB2-6N	39,105	SB2-4N	17,126
SB2-6N	-18,442	SB2-3N	-40,698	SB2-2N	39,519	SB2-1N	17,276
SB2-8N	-11,788	SB2-6N	-40,568	SB2-8N	48,346	SB2-8N	18,039
SB2-4N	-6,151	SB2-5N	-40,454	SB2-4N	52,101	SB2-3N	18,167
SB2-1N	-5,289	SB2-7N	-39,243	SB2-1N	53,125	SB2-2N	18,867
Tek uçlu Schiff bazları							
TSB-3N	-85,506	TSB-2N	-36,060	TSB-3N	-37,557	TSB-7N	12,709
TSB-5N	-33,449	TSB-8N	-34,478	TSB-7N	12,790	TSB-5N	12,728
TSB-7N	-32,889	TSB-3N	-33,991	TSB-5N	13,081	TSB-1N	12,971
TSB-2N	-13,286	TSB-6N	-33,985	TSB-2N	37,405	TSB-4N	12,999
TSB-8N	-1,785	TSB-4N	-33,926	TSB-8N	46,486	TSB-6N	13,007
TSB-4N	3,112	TSB-5N	-33,799	TSB-4N	50,036	TSB-8N	13,794
TSB-6N	3,219	TSB-1N	-33,511	TSB-6N	50,207	TSB-3N	13,959
TSB-1N	4,684	TSB-7N	-32,973	TSB-1N	51,161	TSB-2N	14,632
PM3-H2O							
İki ucu aynı Schiff bazları							
Bileşik	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)
SB1-17N	-144,814	SB1-3N	-44,395	SB1-17N	-85,136	SB1-7N	14,719
SB1-10N	-138,910	SB1-12N	-44,255	SB1-10N	-76,940	SB1-8N	14,850
SB1-15N	-60,466	SB1-11N	-44,195	SB1-15N	1,757	SB1-9N	15,551
SB1-2N	-45,672	SB1-13N	-43,463	SB1-2N	11,466	SB1-1N	15,719
SB1-6N	-41,089	SB1-15N	-43,313	SB1-5N	16,355	SB1-5N	16,630
SB1-5N	-40,496	SB1-10N	-42,884	SB1-6N	16,994	SB1-6N	16,644
SB1-13N	-37,826	SB1-14N	-42,265	SB1-13N	24,789	SB1-4N	17,165
SB1-3N	-33,889	SB1-6N	-41,439	SB1-3N	29,516	SB1-2N	17,178
SB1-7N	-7,936	SB1-16N	-41,289	SB1-7N	45,505	SB1-18N	17,180
SB1-12N	1,210	SB1-17N	-41,079	SB1-12N	65,686	SB1-14N	18,486
SB1-11N	17,884	SB1-18N	-41,030	SB1-11N	80,860	SB1-17N	18,600
SB1-16N	23,828	SB1-4N	-40,464	SB1-16N	83,901	SB1-11N	18,781
SB1-4N	33,213	SB1-5N	-40,221	SB1-4N	90,843	SB1-16N	18,784
SB1-18N	35,066	SB1-2N	-39,960	SB1-18N	93,276	SB1-15N	18,910
SB1-1N	49,080	SB1-1N	-39,319	SB1-8N	101,006	SB1-3N	19,010
SB1-8N	49,455	SB1-9N	-38,924	SB1-1N	104,118	SB1-10N	19,086
SB1-9N	60,560	SB1-7N	-38,722	SB1-9N	115,036	SB1-13N	19,152
SB1-14N	67,970	SB1-8N	-36,700	SB1-14N	128,721	SB1-12N	20,220
İki ucu farklı Schiff bazları							
SB2-3N	-95,071	SB2-8N	-42,327	SB2-3N	-36,316	SB2-7N	16,816
SB2-5N	-42,994	SB2-2N	-42,203	SB2-7N	13,978	SB2-5N	16,968
SB2-7N	-42,036	SB2-4N	-40,999	SB2-5N	14,277	SB2-6N	16,978
SB2-2N	-22,003	SB2-1N	-40,844	SB2-6N	38,806	SB2-4N	17,126
SB2-6N	-18,597	SB2-3N	-40,589	SB2-2N	39,067	SB2-1N	17,276
SB2-8N	-12,274	SB2-6N	-40,425	SB2-8N	48,092	SB2-8N	18,039
SB2-4N	-6,278	SB2-5N	-40,303	SB2-4N	51,847	SB2-3N	18,167
SB2-1N	-5,248	SB2-7N	-39,198	SB2-1N	52,872	SB2-2N	18,867

Çizelge 7.76. (Devam) Oluşan ürünlerin kararlılıkları

Tek uçlu Schiff bazları							
TSB-3N	-85,714	TSB-2N	-36,056	TSB-3N	-37,895	TSB-7N	12,709
TSB-5N	-33,361	TSB-8N	-34,478	TSB-7N	12,582	TSB-5N	12,728
TSB-7N	-33,103	TSB-6N	-34,084	TSB-5N	12,872	TSB-1N	12,971
TSB-2N	-13,699	TSB-4N	-33,901	TSB-2N	36,989	TSB-4N	12,999
TSB-8N	-1,785	TSB-3N	-33,860	TSB-8N	46,486	TSB-6N	13,007
TSB-6N	2,918	TSB-1N	-33,836	TSB-4N	49,839	TSB-8N	13,794
TSB-4N	2,939	TSB-5N	-33,505	TSB-6N	50,009	TSB-3N	13,959
TSB-1N	4,161	TSB-7N	-32,976	TSB-1N	50,967	TSB-2N	14,632
PM6-DMF							
İki ucu aynı Schiff bazları							
Bileşik	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)
SB1-17N	-155,918	SB1-12N	-46,413	SB1-17N	-97,201	SB1-7N	15,056
SB1-10N	-141,357	SB1-15N	-44,038	SB1-10N	-80,537	SB1-8N	15,193
SB1-15N	-75,459	SB1-13N	-43,496	SB1-15N	-11,991	SB1-9N	15,949
SB1-5N	-57,561	SB1-3N	-43,396	SB1-5N	0,366	SB1-1N	16,053
SB1-6N	-56,030	SB1-14N	-42,845	SB1-6N	1,290	SB1-5N	17,118
SB1-13N	-55,402	SB1-11N	-42,796	SB1-2N	2,618	SB1-6N	17,177
SB1-2N	-54,121	SB1-18N	-42,248	SB1-13N	7,892	SB1-18N	17,556
SB1-3N	-52,930	SB1-16N	-41,417	SB1-3N	10,018	SB1-4N	17,570
SB1-7N	-23,085	SB1-10N	-41,259	SB1-7N	30,084	SB1-2N	17,644
SB1-11N	-1,859	SB1-4N	-40,884	SB1-11N	59,976	SB1-17N	18,877
SB1-12N	-0,971	SB1-5N	-40,810	SB1-16N	60,845	SB1-11N	19,039
SB1-16N	0,373	SB1-6N	-40,143	SB1-12N	66,287	SB1-16N	19,055
SB1-4N	17,864	SB1-17N	-39,840	SB1-4N	76,318	SB1-14N	19,102
SB1-18N	18,258	SB1-2N	-39,095	SB1-18N	78,062	SB1-15N	19,429
SB1-8N	40,756	SB1-7N	-38,112	SB1-8N	93,416	SB1-3N	19,552
SB1-1N	43,102	SB1-1N	-37,763	SB1-1N	96,919	SB1-10N	19,562
SB1-14N	57,971	SB1-8N	-37,467	SB1-9N	111,946	SB1-13N	19,798
SB1-9N	58,549	SB1-9N	-37,448	SB1-14N	119,918	SB1-12N	20,845
İki ucu farklı Schiff bazları							
SB2-3N	-107,607	SB2-2N	-42,717	SB2-3N	-49,396	SB2-6N	17,039
SB2-5N	-55,821	SB2-5N	-40,726	SB2-7N	1,833	SB2-5N	17,317
SB2-7N	-55,735	SB2-8N	-40,716	SB2-5N	2,222	SB2-7N	17,405
SB2-8N	-27,198	SB2-1N	-40,300	SB2-6N	29,259	SB2-4N	17,560
SB2-2N	-26,906	SB2-7N	-40,164	SB2-8N	32,020	SB2-1N	17,613
SB2-6N	-25,485	SB2-4N	-40,120	SB2-2N	35,087	SB2-8N	18,503
SB2-4N	-17,850	SB2-3N	-39,701	SB2-4N	39,830	SB2-3N	18,510
SB2-1N	-17,028	SB2-6N	-37,705	SB2-1N	40,885	SB2-2N	19,276
Tek uçlu Schiff bazları							
TSB-3N	-98,868	TSB-2N	-35,571	TSB-3N	-50,614	TSB-7N	13,185
TSB-7N	-46,544	TSB-8N	-34,859	TSB-7N	-0,145	TSB-5N	13,216
TSB-5N	-46,281	TSB-1N	-34,274	TSB-5N	0,258	TSB-4N	13,388
TSB-8N	-19,091	TSB-3N	-33,843	TSB-8N	29,947	TSB-6N	13,420

Çizelge 7.76. (Devam) Oluşan ürünlerin kararlılıkları

TSB-2N	-17,764	TSB-6N	-33,730	TSB-2N	32,808	TSB-1N	13,453
TSB-4N	-9,114	TSB-4N	-33,651	TSB-4N	37,924	TSB-8N	14,179
TSB-6N	-9,109	TSB-5N	-33,324	TSB-6N	38,042	TSB-3N	14,411
TSB-1N	-8,967	TSB-7N	-33,215	TSB-1N	38,760	TSB-2N	15,001
PM6-H20							
İki ucu aynı Schiff bazları							
Bileşik	ΔG_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔG (kcal/mol)	Bileşik	ΔH_f (kcal/mol)	Bileşik	ΔH (cal/mol)
SB1-17N	-156,570	SB1-12N	-46,235	SB1-17N	-97,784	SB1-7N	15,055
SB1-10N	-141,853	SB1-13N	-43,493	SB1-10N	-81,136	SB1-8N	15,191
SB1-15N	-75,163	SB1-3N	-43,348	SB1-15N	-12,462	SB1-9N	15,949
SB1-5N	-58,078	SB1-15N	-43,277	SB1-5N	0,009	SB1-1N	16,059
SB1-6N	-56,385	SB1-14N	-42,765	SB1-6N	0,939	SB1-5N	17,122
SB1-13N	-55,886	SB1-11N	-42,711	SB1-2N	2,112	SB1-6N	17,181
SB1-2N	-54,528	SB1-18N	-42,603	SB1-13N	7,410	SB1-18N	17,557
SB1-3N	-53,375	SB1-16N	-41,429	SB1-3N	9,514	SB1-4N	17,570
SB1-7N	-23,241	SB1-10N	-41,163	SB1-7N	29,713	SB1-2N	17,639
SB1-11N	-2,135	SB1-5N	-40,966	SB1-11N	59,615	SB1-17N	18,881
SB1-12N	-1,442	SB1-4N	-40,819	SB1-16N	60,481	SB1-11N	19,039
SB1-16N	-0,008	SB1-6N	-40,144	SB1-12N	65,642	SB1-16N	19,060
SB1-18N	17,529	SB1-17N	-39,905	SB1-4N	75,955	SB1-14N	19,102
SB1-4N	17,565	SB1-2N	-39,001	SB1-18N	77,689	SB1-15N	19,424
SB1-8N	40,407	SB1-1N	-38,270	SB1-8N	93,007	SB1-3N	19,541
SB1-1N	42,242	SB1-7N	-37,899	SB1-1N	96,571	SB1-10N	19,554
SB1-14N	57,640	SB1-9N	-37,399	SB1-9N	111,434	SB1-13N	19,804
SB1-9N	58,086	SB1-8N	-37,409	SB1-14N	119,507	SB1-12N	20,849
İki ucu farklı Schiff bazları							
SB2-3N	-108,075	SB2-2N	-42,638	SB2-3N	-49,991	SB2-6N	17,310
SB2-7N	-56,126	SB2-8N	-40,712	SB2-7N	1,420	SB2-5N	17,312
SB2-5N	-55,827	SB2-5N	-40,325	SB2-5N	1,810	SB2-7N	17,398
SB2-6N	-28,713	SB2-1N	-40,286	SB2-6N	28,801	SB2-4N	17,563
SB2-8N	-27,611	SB2-6N	-40,204	SB2-8N	31,599	SB2-1N	17,606
SB2-2N	-27,376	SB2-7N	-40,148	SB2-2N	34,543	SB2-8N	18,498
SB2-4N	-18,280	SB2-4N	-40,132	SB2-4N	39,415	SB2-3N	18,515
SB2-1N	-17,433	SB2-3N	-39,569	SB2-1N	40,458	SB2-2N	19,281
Tek uçlu Schiff bazları							
TSB-3N	-99,411	TSB-2N	-35,538	TSB-3N	-51,158	TSB-6N	13,007
TSB-7N	-46,829	TSB-8N	-34,859	TSB-7N	-0,489	TSB-7N	13,186
TSB-5N	-46,668	TSB-1N	-34,504	TSB-5N	-0,082	TSB-5N	13,224
TSB-8N	-19,091	TSB-6N	-34,084	TSB-8N	29,947	TSB-4N	13,394
TSB-2N	-18,226	TSB-3N	-33,829	TSB-2N	32,318	TSB-1N	13,459
TSB-1N	-9,566	TSB-4N	-33,588	TSB-4N	37,583	TSB-8N	14,179
TSB-4N	-9,399	TSB-5N	-33,361	TSB-1N	38,397	TSB-3N	14,425
TSB-6N	2,918	TSB-7N	-33,154	TSB-6N	50,009	TSB-2N	15,006

$$\Delta G = \Delta H - T \cdot \Delta S, \quad \Delta G_f = \Delta H_f - T \cdot \Delta S$$

Oluşan ürünlerin kararlılıkları için AM1, PM3 ve PM6 yöntemleriyle su ve DMF fazında hesaplanan ΔG_f ve ΔG değerleri kıyaslandığında; ΔG_f değerleri için, tüm yöntem ve fazlarda SB1-17N ve SB1-10N moleküllerinin oluşan ürünler içerisinde en düşük enerjiye sahip olmaları onların en kararlı yapıya sahip olduğunu göstermiştir.

ΔG değerleri için PM3 yönteminde su fazında SB1-3N ve daha sonra SB1-12N molekülünün, diğer tüm yöntem ve fazlarda SB1-12N molekülünün oluşan ürünler içerisinde en düşük enerjiye sahip olması onun en kararlı yapıya sahip olduğunu göstermiştir. Oluşan ürünlerin ΔG_f ve ΔG değerleri incelendiğinde, ΔG_f hesaplamalarında ΔG değerlerine göre çok daha düşük enerjili moleküllerin olması ΔG_f değerlerini daha kararlı olduğunu gösterirken tablonun tamamına bakıldığında ΔG değerlerinin tamamının (-) enerjili daha düşük değerlerden oluşması sebebiyle ΔG daha kararlı olup bu sentezler için ürün oluşumu ΔG (termodinamik) yönünde gerçekleşmektedir.

Oluşan ürünlerin kararlılıkları için AM1, PM3 ve PM6 yöntemleriyle su ve DMF fazında hesaplanan ΔH_f ve ΔH değerleri kıyaslandığında; ΔH_f değerleri için, tüm yöntem ve fazlarda SB1-17N ve SB1-10N moleküllerinin oluşan ürünler içerisinde en düşük enerjiye sahip olmaları onların en kararlı yapıya sahip olduğunu göstermiştir. ΔH değerleri için PM6 yönteminde su fazında tek uçlu schiff bazlarından TSB-6N, iki ucu aynı olan schiff bazlarından SB1-7N molekülünün, diğer tüm yöntem ve fazlarda SB1-7N ve tek uçlu yapılardan TSB-7N molekülün daha düşük enerjili olup daha kararlı yapılar oluşturduğunu söyleyebiliriz. ΔH_f ve ΔH değerleri incelendiğinde ΔH değerlerinin daha düşük enerjili olmasından dolayı daha kararlı olduğu ve ürün oluşumunun ΔH (termodinamik) yönde gerçekleştiğini söyleyebiliriz.

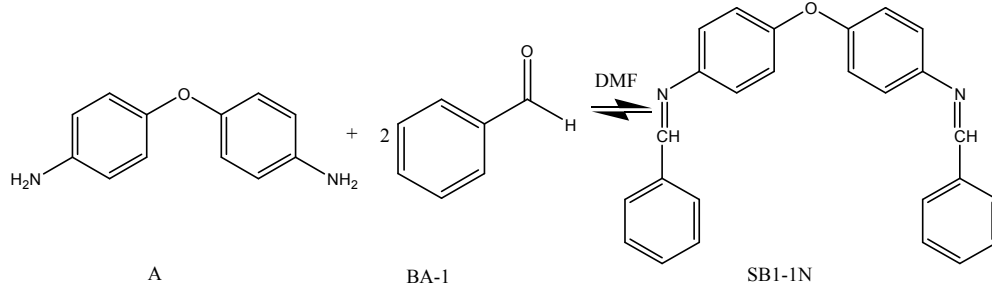
AM1, PM3 ve PM6 yöntemlerindeki değerler kıyaslandığında PM6 yöntemindeki enerjilerin daha düşük olması PM6 yöntemiyle daha kararlı yapılar oluştuğunu göstermektedir.

Çizelge 7.77.'de gerçekleşen reaksiyonların kararlılıkları verilmiştir.

Reaktifler \rightleftharpoons Ürünler

$$\delta\Delta G_f = \Delta G_{f\text{ürün}} - \Delta G_{f\text{reaktifler}} \quad (7.23.)$$

SB1-1N için AM1 yöntemi ile sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen değerler yardımıyla hesaplanan $\delta\Delta G_f$ ve $\delta\Delta G$ hesapları aşağıda Şekil 7.1’de örneklenmiştir.



Şekil 7.1. SB1-1N molekülünün oluşum reaksiyonu

$$\delta\Delta G_f = \Delta G_{f \text{ ürün}} - \Delta G_{f \text{ reaktifler}} \quad (7.23)$$

$$\delta\Delta G_f = \Delta G_{SB1-1N} - (\Delta G_A + 2 * (\Delta G_{BA-1}))$$

$$\delta\Delta G_f = 61,600 - (-24,666 \text{ kcal/mol} + 2 * (-38,491))$$

$$\delta\Delta G_f = 163,248 \text{ kcal/mol}$$

Eşitlik 7.23 kullanılarak elde edilen bu değerler Çizelge 7.77’de verilmiştir.

$$\delta\Delta G = \Delta G_{\text{ürün}} - \Delta G_{\text{reaktifler}} \quad (7.24)$$

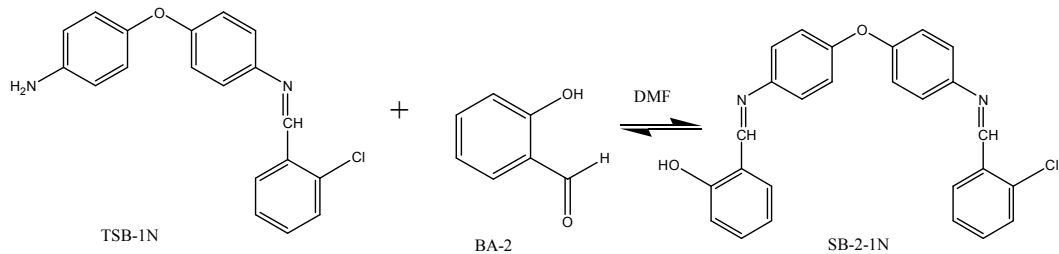
$$\delta\Delta G = \Delta G_{SB1-1N} - (\Delta G_A + 2 * (\Delta G_{BA-1}))$$

$$\delta\Delta G = ((-38,210) \text{ kcal/mol}) - [(-25,792) \text{ kcal/mol} + 2 * (-19,479) \text{ kcal/mol}]$$

$$\delta\Delta G = 26,541 \text{ kcal/mol}$$

Eşitlik 7.24 kullanılarak elde edilen bu değerler Çizelge 7.77’de verilmiştir.

SB2-1N için AM1 yöntemi ile sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298K$) yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen değerler yardımıyla hesaplanan $\delta\Delta G_f$ ve $\delta\Delta G$ hesapları aşağıda Şekil 7.2’de örneklenmiştir.



Şekil 7.2. SB2-1N molekülünün oluşum reaksiyonu

$$\delta\Delta G_f = \Delta G_{f\text{ürün}} - \Delta G_{f\text{reaktifler}}$$

$$\delta\Delta G_f = \Delta G_{\text{SB2-1N}} - (\Delta G_{\text{TSB-1N}} + \Delta G_{\text{BA-2}})$$

$$\delta\Delta G_f = 6,746 \text{ kcal/mol} - (10,789 \text{ kcal/mol} + (-85,723) \text{ kcal/mol})$$

$$\delta\Delta G_f = 81,679 \text{ kcal/mol}$$

Eşitlik 7.23 kullanılarak elde edilen bu değerler Çizelge 7.77’de verilmiştir.

$$\delta\Delta G = \Delta G_{\text{ürün}} - \Delta G_{\text{reaktifler}}$$

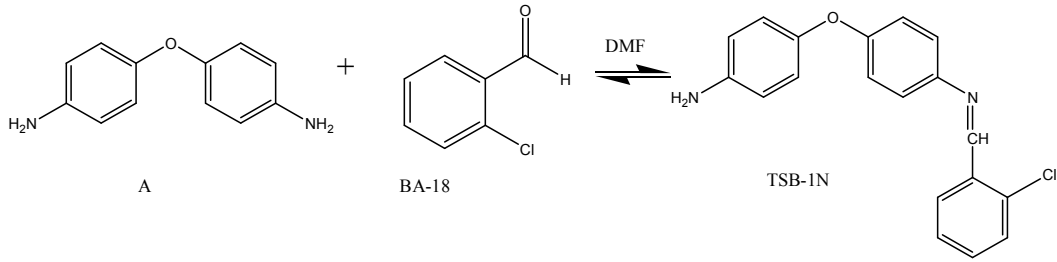
$$\delta\Delta G = \Delta G_{\text{SB2-1N}} - (\Delta G_{\text{TSB-1N}} + \Delta G_{\text{BA-2}})$$

$$\delta\Delta G = (-41,024 \text{ kcal/mol}) - [(-33,031 \text{ kcal/mol}) + (-20,918 \text{ kcal/mol})]$$

$$\delta\Delta G = 12,925 \text{ kcal/mol}$$

Eşitlik 7.24 kullanılarak elde edilen bu değerler Çizelge 7.77’de verilmiştir.

TSB-1N için AM1 yöntemi ile sulu çözeltide ($\epsilon=78,4$, $T=298\text{K}$) yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen değerler yardımıyla hesaplanan $\delta\Delta G_f$ ve $\delta\Delta G$ hesapları aşağıda Şekil 7.3’de örneklenmiştir



Şekil 7.3. TSB-1N molekülünün oluşum reaksiyonu

$$\delta\Delta G_f = \Delta G_{f\text{ürün}} - \Delta G_{f\text{reaktifler}}$$

$$\delta\Delta G_f = \Delta G_{\text{TSB-1N}} - (\Delta G_{\text{A}} + \Delta G_{\text{BA-18}})$$

$$\delta\Delta G_f = 10,789 \text{ kcal/mol} - (-24,666 \text{ kcal/mol} + (-45,305) \text{ kcal/mol})$$

$$\delta\Delta G_f = 80,759 \text{ kcal/mol}$$

Eşitlik 7.23 kullanılarak elde edilen bu değerler Çizelge 7.77’de verilmiştir.

$$\delta\Delta G = \Delta G_{\text{ürün}} - \Delta G_{\text{reaktifler}}$$

$$\delta\Delta G = \Delta G_{\text{TSB-1N}} - (\Delta G_{\text{A}} + \Delta G_{\text{BA-18}})$$

$$\delta\Delta G = (-33,031 \text{ kcal/mol}) - [(-25,792 \text{ kcal/mol}) + (-20,748 \text{ kcal/mol})]$$

$$\delta\Delta G = 13,510 \text{ kcal/mol}$$

Eşitlik 7.24 kullanılarak elde edilen bu değerler Çizelge 7.77’de verilmiştir.

Eşitlik 7.23. ve 7.24 kullanılarak elde edilen $\delta\Delta G_f$ ve $\delta\Delta G$ değerleri reaksiyon kararlılıklarını göstermek üzere Çizelge 7.77’de verilmiştir.

Çizelge 7.77. Gerçekleşen reaksiyonların kararlılıkları

AM1-DMF			
İki ucu aynı schiff bazları			
Bileşik	$\delta\Delta G_f$	Bileşik	$\delta\Delta G$
SB1-16N	156,009	SB1-6N	25,765
SB1-14N	160,337	SB1-11N	26,243
SB1-11N	160,687	SB1-1N	26,406
SB1-6N	161,637	SB1-10N	26,504
SB1-18N	161,809	SB1-18N	26,823
SB1-9N	162,445	SB1-13N	26,963
SB1-1N	162,923	SB1-12N	27,009
SB1-4N	163,108	SB1-5N	27,115
SB1-3N	163,133	SB1-4N	27,132
SB1-15N	163,209	SB1-9N	27,182
SB1-12N	163,212	SB1-14N	27,549
SB1-5N	163,301	SB1-3N	27,830
SB1-10N	163,362	SB1-2N	27,907
SB1-13N	163,944	SB1-8N	28,220
SB1-2N	164,083	SB1-15N	28,243
SB1-7N	165,091	SB1-16N	28,735
SB1-8N	165,868	SB1-7N	28,742
SB1-17N	169,923	SB1-17N	29,072
İki ucu farklı schiff bazları			
SB2-6N	70,559	SB2-1N	12,875
SB2-3N	81,026	SB2-5N	12,904
SB2-5N	81,279	SB2-8N	13,341
SB2-1N	81,474	SB2-4N	13,360
SB2-4N	81,585	SB2-3N	13,478
SB2-8N	81,717	SB2-7N	13,570
SB2-7N	82,006	SB2-2N	13,648
SB2-2N	82,460	SB2-6N	15,701
Tek uçlu schiff bazları			
TSB-8N	75,791	TSB-6N	12,231
TSB-6N	79,998	TSB-8N	12,514
TSB-5N	80,549	TSB-5N	12,836
TSB-1N	80,630	TSB-1N	13,490
TSB-4N	81,775	TSB-2N	13,711
TSB-7N	81,835	TSB-7N	13,876
TSB-2N	82,121	TSB-4N	13,914
TSB-3N	85,009	TSB-3N	14,982

Çizelge 7.77. (Devam) Gerçekleşen reaksiyonların kararlılıkları

AM1-H₂O			
İki ucu aynı schiff bazları			
Bileşik	$\delta\Delta G_f$	Bileşik	$\delta\Delta G$
SB1-16N	156,286	SB1-11N	26,068
SB1-14N	160,512	SB1-6N	26,118
SB1-11N	160,734	SB1-10N	26,185
SB1-18N	161,870	SB1-1N	26,541
SB1-6N	162,250	SB1-18N	26,660
SB1-9N	162,475	SB1-12N	26,821
SB1-1N	163,248	SB1-9N	26,953
SB1-12N	163,288	SB1-5N	27,132
SB1-15N	163,317	SB1-13N	27,163
SB1-10N	163,374	SB1-4N	27,226
SB1-4N	163,467	SB1-14N	27,471
SB1-3N	163,503	SB1-3N	27,897
SB1-5N	163,584	SB1-15N	28,054
SB1-13N	164,423	SB1-2N	28,076
SB1-2N	164,544	SB1-8N	28,293
SB1-7N	165,308	SB1-17N	28,679
SB1-8N	166,257	SB1-7N	28,691
SB1-17N	169,696	SB1-16N	28,739
İki ucu farklı schiff bazları			
SB2-6N	70,048	SB2-1N	12,925
SB2-3N	81,225	SB2-5N	13,011
SB2-5N	81,543	SB2-7N	13,311
SB2-1N	81,679	SB2-4N	13,389
SB2-4N	81,765	SB2-3N	13,520
SB2-7N	81,903	SB2-8N	13,664
SB2-8N	82,193	SB2-2N	13,694
SB2-2N	82,652	SB2-6N	15,134
Tek uçlu schiff bazları			
TSB-8N	76,047	TSB-8N	12,633
TSB-6N	80,602	TSB-6N	12,703
TSB-5N	80,665	TSB-5N	12,826
TSB-1N	80,759	TSB-1N	13,510
TSB-4N	81,864	TSB-2N	13,727
TSB-7N	81,965	TSB-4N	13,871
TSB-2N	82,287	TSB-7N	13,874
TSB-3N	84,964	TSB-3N	14,863
PM3-DMF			
İki ucu aynı schiff bazları			
Bileşik	$\delta\Delta G_f$	Bileşik	$\delta\Delta G$
SB1-14N	151,074	SB1-1N	25,693
SB1-16N	152,989	SB1-7N	25,841

Çizelge 7.77. (Devam) Gerçekleşen reaksiyonların kararlılıkları

SB1-9N	153,031	SB1-6N	25,998
SB1-11N	153,363	SB1-9N	26,007
SB1-6N	153,696	SB1-13N	26,060
SB1-1N	153,724	SB1-3N	26,220
SB1-18N	153,863	SB1-5N	26,552
SB1-7N	154,424	SB1-11N	26,707
SB1-5N	154,594	SB1-14N	26,897
SB1-13N	154,606	SB1-2N	26,936
SB1-10N	155,382	SB1-18N	26,991
SB1-4N	155,403	SB1-17N	27,022
SB1-2N	155,572	SB1-10N	27,033
SB1-3N	156,417	SB1-8N	27,451
SB1-15N	156,959	SB1-4N	27,506
SB1-12N	158,166	SB1-15N	27,711
SB1-8N	159,157	SB1-16N	28,210
SB1-17N	159,671	SB1-12N	28,389
İki ucu farklı schiff bazları			
SB2-6N	66,122	SB2-1N	12,907
SB2-8N	77,781	SB2-8N	12,921
SB2-1N	77,811	SB2-4N	13,336
SB2-5N	78,347	SB2-3N	13,826
SB2-3N	78,503	SB2-5N	13,877
SB2-4N	78,521	SB2-6N	13,949
SB2-7N	78,864	SB2-7N	14,263
SB2-2N	79,547	SB2-2N	14,411
Tek uçlu schiff bazları			
TSB-8N	75,745	TSB-5N	12,611
TSB-5N	76,274	TSB-6N	12,984
TSB-6N	76,728	TSB-3N	13,070
TSB-1N	76,757	TSB-4N	13,115
TSB-4N	76,916	TSB-7N	13,420
TSB-7N	77,308	TSB-2N	13,433
TSB-2N	77,830	TSB-1N	13,515
TSB-3N	79,281	TSB-8N	13,555
PM3-H₂O			
İki ucu aynı schiff bazları			
Bileşik	$\delta\Delta G_f$	Bileşik	$\delta\Delta G$
SB1-14N	151,396	SB1-6N	25,291
SB1-6N	153,178	SB1-7N	25,627
SB1-9N	153,261	SB1-1N	25,856
SB1-11N	153,306	SB1-9N	26,039
SB1-16N	153,689	SB1-3N	26,207
SB1-18N	153,953	SB1-13N	26,407
SB1-1N	154,089	SB1-5N	26,471

Çizelge 7.77. (Devam) Gerçekleşen reaksiyonların kararlılıkları

SB1-7N	154,402	SB1-11N	26,477
SB1-5N	154,720	SB1-18N	26,908
SB1-13N	155,156	SB1-17N	27,006
SB1-4N	155,611	SB1-14N	27,022
SB1-2N	156,029	SB1-2N	27,183
SB1-10N	156,122	SB1-15N	27,361
SB1-3N	156,644	SB1-8N	27,437
SB1-15N	156,846	SB1-4N	27,513
SB1-12N	158,659	SB1-10N	27,576
SB1-8N	159,367	SB1-12N	28,618
SB1-17N	159,786	SB1-16N	28,697
İki ucu farklı schiff bazları			
SB2-6N	66,449	SB2-8N	12,689
SB2-8N	77,476	SB2-4N	13,441
SB2-5N	78,331	SB2-1N	13,530
SB2-1N	78,556	SB2-5N	13,740
SB2-3N	78,607	SB2-3N	13,811
SB2-4N	78,747	SB2-6N	14,198
SB2-7N	79,031	SB2-7N	14,316
SB2-2N	79,661	SB2-2N	14,392
Tek uçlu schiff bazları			
TSB-8N	76,031	TSB-6N	12,866
TSB-1N	76,491	TSB-5N	12,893
TSB-5N	76,659	TSB-4N	13,120
TSB-6N	76,706	TSB-1N	13,166
TSB-4N	77,024	TSB-3N	13,215
TSB-7N	77,392	TSB-7N	13,403
TSB-2N	77,911	TSB-2N	13,413
TSB-3N	79,472	TSB-8N	13,548
PM6-DMF			
İki ucu aynı schiff bazları			
Bileşik	$\delta\Delta G_f$	Bileşik	$\delta\Delta G$
SB1-9N	129,087	SB1-18N	23,996
SB1-18N	129,428	SB1-7N	24,397
SB1-6N	129,592	SB1-5N	24,459
SB1-16N	129,966	SB1-6N	24,926
SB1-11N	131,123	SB1-15N	25,123
SB1-14N	131,405	SB1-13N	25,342
SB1-5N	131,493	SB1-4N	25,521
SB1-7N	131,684	SB1-8N	25,661
SB1-4N	131,702	SB1-1N	25,770
SB1-12N	132,313	SB1-12N	26,028
SB1-1N	132,412	SB1-9N	26,077
SB1-15N	133,065	SB1-11N	26,079

Çizelge 7.77. (Devam) Gerçekleşen reaksiyonların kararlılıkları

SB1-13N	134,281	SB1-14N	26,206
SB1-3N	134,822	SB1-17N	26,566
SB1-10N	135,414	SB1-3N	26,764
SB1-8N	135,986	SB1-16N	26,972
SB1-2N	136,304	SB1-10N	27,312
SB1-17N	147,162	SB1-2N	27,523
İki ucu farklı schiff bazları			
SB2-6N	68,351	SB2-5N	13,658
SB2-5N	75,188	SB2-2N	13,913
SB2-7N	75,536	SB2-7N	14,110
SB2-2N	75,586	SB2-4N	14,590
SB2-3N	75,988	SB2-1N	15,033
SB2-4N	75,991	SB2-3N	15,202
SB2-8N	76,620	SB2-8N	15,202
SB2-1N	76,667	SB2-6N	17,085
Tek uçlu schiff bazları			
TSB-8N	56,190	TSB-1N	11,097
TSB-5N	57,015	TSB-5N	11,460
TSB-1N	57,103	TSB-8N	11,586
TSB-6N	57,423	TSB-3N	11,609
TSB-4N	58,290	TSB-6N	11,628
TSB-7N	58,468	TSB-7N	11,669
TSB-2N	59,363	TSB-4N	11,802
TSB-3N	63,157	TSB-2N	12,899
PM6-H₂O			
İki ucu aynı schiff bazları			
Bileşik	$\delta\Delta G_f$	Bileşik	$\delta\Delta G$
SB1-18N	143,498	SB1-18N	24,817
SB1-9N	143,592	SB1-5N	25,473
SB1-6N	144,060	SB1-7N	25,717
SB1-16N	144,454	SB1-6N	26,098
SB1-11N	145,617	SB1-1N	26,417
SB1-5N	145,823	SB1-13N	26,505
SB1-14N	145,882	SB1-4N	26,755
SB1-4N	146,252	SB1-15N	27,036
SB1-7N	146,313	SB1-8N	27,124
SB1-1N	146,378	SB1-9N	27,290
SB1-12N	147,020	SB1-11N	27,337
SB1-15N	148,383	SB1-14N	27,397
SB1-13N	148,765	SB1-12N	27,436
SB1-3N	149,401	SB1-17N	27,712
SB1-10N	149,898	SB1-3N	27,944
SB1-8N	150,813	SB1-16N	28,143

Çizelge 7.77. (Devam) Gerçekleşen reaksiyonların kararlılıkları

SB1-2N	151,510	SB1-10N	28,505
SB1-17N	161,640	SB1-2N	29,365
İki ucu farklı schiff bazları			
SB2-6N	53,658	SB2-2N	14,236
SB2-7N	75,992	SB2-7N	14,343
SB2-5N	76,130	SB2-5N	14,373
SB2-2N	76,140	SB2-4N	14,792
SB2-4N	76,408	SB2-6N	15,217
SB2-3N	76,626	SB2-8N	15,483
SB2-8N	76,770	SB2-1N	15,555
SB2-1N	77,423	SB2-3N	15,596
Tek uçlu schiff bazları			
TSB-8N	70,869	TSB-1N	12,052
TSB-1N	71,147	TSB-6N	12,452
TSB-5N	71,285	TSB-5N	12,606
TSB-4N	72,674	TSB-8N	12,774
TSB-7N	72,852	TSB-3N	12,826
TSB-2N	73,734	TSB-7N	12,912
TSB-3N	77,423	TSB-4N	13,046
TSB-6N	84,107	TSB-2N	14,144

Gerçekleşen reaksiyonların kararlılıkları için AM1, PM3 ve PM6 yöntemleriyle su ve DMF fazında hesaplanan $\delta\Delta G_f$ ve $\delta\Delta G$ değerleri kıyaslandığında; $\delta\Delta G_f$ değerleri için PM6 yöntemiyle DMF fazında TSB-8N molekülünün, diğer tüm yöntem ve fazlarda SB2-6N molekülünün en düşük enerjiye sahip olması bu ürün oluşumu sırasında gerçekleşen reaksiyonun daha kararlı olduğunu göstermektedir.

$\delta\Delta G$ değerleri incelendiğinde, AM1 yönteminde DMF fazında TSB-6N molekülünün, su fazında TSB-8N molekülünün, PM3 yönteminde DMF fazında TSB-5N molekülünün, su fazında SB2-8N molekülünün, PM6 yönteminde DMF ve su fazında TSB-1N molekülünün daha düşük enerjilere sahip olması ve gerçekleşen reaksiyonlarının daha kararlı olduğunu göstermektedir. $\delta\Delta G_f$ ve $\delta\Delta G$ değerleri incelendiğinde $\delta\Delta G$ değerlerinin $\delta\Delta G_f$ değerlerine göre oldukça düşük enerjili olması bu schiff bazları sentezindeki reaksiyonların $\delta\Delta G$ (termodinamik) yönünde daha kararlı bir şekilde gerçekleşeceğini göstermektedir.

7.1.7.Asitlik-Bazlık Sonuçları

Eşitlik 7.3-7.18 kullanılarak elde edilen termodinamik ve kinetik pKa değerleri sıralaması AM1 yöntemi için Çizelge 7.78'de, PM3 yöntemi için Çizelge 7.79'da, PM6 yöntemi için Çizelge 7.80'de verilmiştir.

Çizelge 7.78. AM1 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pKa ve Kinetik pKa değerleri sıralaması

AM1-H ₂ O				AM1-DMF			
Bileşik	pK _a (k) ^d	Bileşik	pK _a (t) ^d	Bileşik	pK _a (k) ^b	Bileşik	pK _a (t) ^d
Birinci protonlanma							
TSB-7b	-14,573	SB2-2a	-2,473	TSB-7b	-15,081	SB1-16a	-0,955
TSB-3b	-14,096	SB1-10a	-2,092	TSB-3b	-14,499	SB1-8b	-0,803
TSB-4b	-13,898	SB1-11b	-1,788	TSB-4b	-14,248	SB1-7b	-0,731
TSB-1b	-13,661	SB1-12a	-1,649	TSB-1b	-14,051	TSB-7b	-0,548
TSB-6b	-13,027	TSB-6a	-1,383	TSB-5b	-13,467	SB2-3a	-0,502
TSB-8b	-12,945	SB2-8b	-1,361	TSB-2b	-13,286	TSB-2a	-0,349
TSB-5b	-12,837	SB2-5a	-1,348	TSB-8b	-13,218	SB1-16b	-0,348
TSB-2b	-12,836	SB1-11a	-1,282	TSB-6b	-13,076	SB1-15a	-0,303
SB1-8b	-11,737	SB1-8a	-1,268	SB1-8b	-12,395	TSB-4a	-0,162
SB1-7b	-10,341	SB2-5b	-1,262	SB1-7b	-10,924	SB1-2a	-0,139
SB1-7a	-9,669	SB2-1b	-1,249	SB1-15a	-10,461	SB1-7a	-0,130
SB1-8a	-9,454	SB2-1a	-1,223	SB1-7a	-10,338	TSB-3b	-0,128
SB1-14b	-9,234	SB1-6b	-1,180	SB1-8a	-10,269	SB2-3b	-0,119
SB1-14a	-9,204	SB1-6a	-1,164	SB1-14a	-9,949	SB1-17a	0,057
SB1-2a	-9,028	SB1-12b	-1,153	SB1-14b	-9,822	SB1-15b	0,066
SB1-15a	-9,016	SB1-13b	-1,145	TSB-3a	-9,640	SB1-18a	0,103
TSB-3a	-8,924	SB2-7b	-1,072	SB2-3a	-9,525	TSB-3a	0,117
SB1-13a	-8,764	SB2-2b	-1,030	SB1-2a	-9,512	TSB-1b	0,163
SB2-3b	-8,672	TSB-5b	-1,009	SB1-13a	-9,361	TSB-4b	0,224
TSB-4a	-8,410	SB1-14b	-1,005	SB2-3b	-9,275	SB2-6a	0,254
SB1-1b	-8,362	SB2-4b	-0,986	SB1-10a	-9,072	SB1-17b	0,311
SB1-17a	-8,340	SB1-3a	-0,976	SB1-1b	-9,051	SB1-5b	0,385
SB1-3a	-8,334	TSB-6b	-0,948	TSB-4a	-9,018	SB1-4a	0,405
SB1-2b	-8,290	TSB-8b	-0,947	SB1-2b	-8,983	SB1-9a	0,486
SB1-10a	-8,196	SB1-14a	-0,929	SB1-3a	-8,912	SB1-13a	0,510
SB2-3a	-8,147	SB1-9b	-0,915	SB1-17a	-8,893	SB1-10b	0,528
SB1-13b	-8,090	SB1-18b	-0,907	SB1-13b	-8,613	SB1-1b	0,542
SB1-5b	-7,902	SB1-3b	-0,896	SB1-10b	-8,592	SB2-7a	0,562
SB1-17b	-7,853	TSB-2b	-0,856	SB1-17b	-8,584	SB1-4b	0,613
TSB-7a	-7,778	TSB-5a	-0,819	SB1-5b	-8,508	TSB-7a	0,626
SB1-10b	-7,701	SB2-6b	-0,809	TSB-7a	-8,439	SB1-2b	0,701
SB1-4a	-7,677	TSB-8a	-0,803	SB2-7b	-8,209	SB2-6b	0,703

Çizelge 7.78. (Devam) AM1 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pKa ve Kinetik pKa değerleri sıralaması

SB1-1a	-7,551	SB2-4a	-0,793	SB2-7a	-8,166	SB2-4a	0,709
SB1-4b	-7,550	SB1-10b	-0,778	SB1-1a	-8,163	TSB-1a	0,713
SB2-7b	-7,372	SB2-7a	-0,744	SB1-15b	-8,162	SB1-18b	0,753
SB2-7a	-7,368	SB1-5a	-0,701	SB1-4a	-8,161	SB1-9b	0,761
SB2-8a	-7,333	TSB-1a	-0,695	SB1-4b	-8,147	SB1-5a	0,764
SB1-5a	-7,321	SB1-9a	-0,619	SB2-4a	-7,911	TSB-5b	0,788
SB1-15b	-7,211	TSB-7a	-0,606	SB1-5a	-7,894	TSB-5a	0,825
SB2-4a	-7,199	SB2-8a	-0,579	SB2-4b	-7,714	SB1-14a	0,870
SB2-4b	-7,072	SB1-18a	-0,567	TSB-5a	-7,624	SB2-7b	0,879
TSB-5a	-6,956	SB1-4b	-0,553	TSB-2a	-7,470	TSB-2b	0,886
SB2-1a	-6,685	SB1-13a	-0,410	SB1-18a	-7,452	TSB-8a	0,919
TSB-2a	-6,635	SB1-15a	-0,383	SB1-16a	-7,327	SB1-3b	0,923
SB2-5a	-6,626	SB1-5b	-0,339	SB1-9a	-7,310	SB2-4b	0,977
SB1-16a	-6,604	SB1-15b	-0,334	SB2-8a	-7,230	SB1-12b	1,025
SB1-9a	-6,583	SB1-17b	-0,307	TSB-1a	-7,158	TSB-8b	1,076
TSB-6a	-6,562	SB1-2a	-0,281	SB2-1a	-7,114	SB1-14b	1,128
SB2-5b	-6,549	SB2-6a	-0,254	SB2-5b	-7,042	SB1-8a	1,136
TSB-1a	-6,478	SB1-4a	-0,252	SB1-18b	-6,970	SB1-3a	1,152
SB1-6a	-6,451	SB2-3a	-0,228	SB1-9b	-6,931	SB2-2b	1,154
SB1-6b	-6,403	TSB-4b	-0,196	TSB-6a	-6,896	SB1-11a	1,261
SB1-18a	-6,281	TSB-1b	-0,148	SB2-5a	-6,856	SB2-1b	1,270
SB1-9b	-6,181	TSB-3a	-0,078	SB1-6a	-6,792	SB1-1a	1,280
SB1-18b	-6,158	SB1-17a	0,063	SB1-6b	-6,720	TSB-6b	1,291
SB2-1b	-6,023	TSB-2a	0,089	SB2-1b	-6,647	SB2-8a	1,336
SB1-16b	-5,871	TSB-3b	0,125	SB1-16b	-6,564	SB1-13b	1,344
SB1-3b	-5,794	SB1-7a	0,133	SB1-3b	-6,469	SB2-5b	1,388
SB2-2b	-5,614	TSB-4a	0,234	SB2-2a	-6,055	SB2-1a	1,433
SB2-2a	-5,344	SB2-3b	0,244	SB2-2b	-6,038	SB1-6a	1,470
TSB-8a	-5,077	SB1-16b	0,344	TSB-8a	-5,681	SB1-6b	1,484
SB1-11a	-4,884	TSB-7b	0,424	SB1-11a	-5,566	SB1-12a	1,581
SB1-11b	-4,570	SB1-1b	0,496	SB1-11b	-5,341	SB1-11b	1,634
SB1-12b	-4,438	SB1-2b	0,688	SB1-12b	-5,125	SB2-8b	1,716
SB2-8b	-4,325	SB1-7b	0,819	SB2-8b	-4,648	TSB-6a	1,727
SB1-12a	-3,259	SB1-8b	0,858	SB1-12a	-3,973	SB2-5a	1,764
SB2-6a	2,283	SB1-16a	0,936	SB2-6a	1,576	SB1-10a	1,965
SB2-6b	3,034	SB1-1a	1,153	SB2-6b	2,225	SB2-2a	2,483
ikinci protonlanma							
TSB-3c	-21,282	SB2-5c	-2,632	TSB-3c	-21,798	SB1-7c	-0,210
SB1-8c	-20,410	SB2-2c	-2,499	SB1-8c	-21,306	TSB-3c	0,340
TSB-7c	-20,155	SB1-13c	-2,343	TSB-7c	-20,579	SB2-6c	0,602
TSB-4c	-19,641	SB1-9c	-2,273	TSB-4c	-20,106	SB1-16c	0,743
TSB-6c	-19,357	SB1-4c	-2,191	TSB-6c	-19,376	SB1-8c	0,785
TSB-5c	-18,852	SB1-5c	-2,097	SB1-7c	-19,287	TSB-2c	0,973
SB1-7c	-18,399	SB2-1c	-2,043	TSB-5c	-19,287	TSB-7c	0,990

Çizelge 7.78. (Devam) AM1 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pKa ve Kinetik pKa değerleri sıralaması

TSB-2c	-18,022	SB2-8c	-2,024	SB1-14c	-18,871	SB1-15c	1,016
TSB-1c	-17,921	SB1-6c	-1,813	TSB-2c	-18,511	TSB-4c	1,112
SB1-14c	-17,375	SB2-4c	-1,705	TSB-1c	-18,345	SB1-2c	1,171
TSB-8c	-16,510	SB1-14c	-1,669	TSB-8c	-16,890	SB1-18c	1,231
SB1-10c	-15,101	TSB-5c	-1,651	SB1-10c	-16,514	SB1-14c	1,306
SB1-1c	-14,718	SB1-10c	-1,638	SB1-15c	-15,460	SB2-3c	1,326
SB1-15c	-14,504	SB2-7c	-1,619	SB1-1c	-15,459	SB1-3c	1,356
SB1-13c	-13,884	TSB-8c	-1,556	SB1-2c	-14,738	SB1-10c	1,383
SB1-2c	-13,848	SB1-11c	-1,455	SB1-13c	-14,336	SB1-17c	1,569
SB1-17c	-12,971	TSB-1c	-1,402	SB1-17c	-13,876	SB2-7c	1,655
SB2-3c	-12,677	SB1-17c	-1,394	SB2-7c	-13,528	SB1-12c	1,660
SB1-5c	-12,651	SB1-12c	-1,393	SB1-5c	-13,362	TSB-1c	1,673
SB2-7c	-12,620	TSB-6c	-1,161	SB2-3c	-13,354	TSB-6c	1,817
SB2-4c	-12,174	SB1-18c	-1,057	SB2-4c	-12,923	SB1-1c	1,854
SB1-4c	-11,803	SB1-3c	-1,047	SB1-4c	-12,481	TSB-5c	1,885
SB1-6c	-11,774	SB1-2c	-1,013	SB1-6c	-12,189	TSB-8c	1,886
SB1-3c	-11,251	SB2-3c	-0,965	SB1-3c	-11,879	SB2-4c	1,909
SB2-5c	-11,021	TSB-4c	-0,908	SB2-5c	-11,715	SB1-11c	1,993
SB1-18c	-10,861	SB1-15c	-0,858	SB1-18c	-11,711	SB1-6c	2,337
SB2-1c	-10,740	TSB-2c	-0,825	SB2-1c	-11,416	SB2-1c	2,341
SB2-2c	-10,212	TSB-7c	-0,749	SB2-2c	-10,897	SB1-5c	2,342
SB1-9c	-10,202	SB1-8c	-0,585	SB1-9c	-10,821	SB1-4c	2,476
SB2-8c	-9,528	SB1-16c	-0,542	SB1-16c	-9,969	SB1-9c	2,487
SB1-16c	-9,127	SB2-6c	-0,345	SB2-8c	-9,967	SB2-8c	2,571
SB1-11c	-8,695	TSB-3c	-0,071	SB1-12c	-9,155	SB2-2c	2,733
SB1-12c	-8,635	SB1-7c	0,343	SB1-11c	-9,114	SB2-5c	2,895
SB2-6c	-3,562	SB1-1c	1,721	SB2-6c	-4,337	SB1-13c	2,995
Birinci proton verme							
SB2-2d	-56,181	SB2-4d	-42,66	SB1-15d	21,533	SB1-3d	-7,355
SB1-3d	19,151	SB2-5d	-41,281	SB1-3d	21,833	SB1-17e	-1,087
SB1-15d	19,230	TSB-3d	-13,908	SB1-17d	24,204	SB2-6d	-0,987
SB1-17d	21,918	SB2-7d	-12,749	SB2-3d	24,392	SB2-3d	-0,857
SB2-3d	22,275	TSB-3e	-11,362	SB2-2d	24,747	TSB-3e	-0,621
SB1-2d	22,878	SB2-8d	-10,695	SB1-2d	25,144	SB1-15d	-0,570
SB2-4d	23,549	SB2-2d	-8,922	SB2-1d	25,728	SB1-2d	-0,520
SB2-1d	23,573	SB1-2e	-7,970	SB2-4d	25,779	TSB-3d	-0,424
SB2-7d	23,811	SB1-10e	-7,760	SB2-7d	25,827	SB1-17d	-0,328
SB1-3e	24,133	SB1-17e	-7,443	SB1-17e	26,334	SB2-2d	0,027
SB2-8d	24,478	SB1-3e	-7,033	SB1-3e	26,373	SB2-4d	0,079
SB2-5d	24,640	SB1-15d	-6,860	SB2-5d	26,796	SB2-3e	0,100
SB1-17e	24,841	SB2-1d	-6,806	SB2-8d	26,945	SB2-1d	0,105
SB1-10d	25,489	SB2-3e	-6,763	SB1-10d	27,682	SB2-7d	0,186
SB2-3e	27,028	SB1-3d	-6,671	SB2-3e	29,206	SB1-2e	0,340
SB1-15e	28,214	SB2-3d	-6,585	SB1-15e	30,060	SB1-10d	0,684

Çizelge 7.78. (Devam) AM1 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri sıralaması

SB1-2e	29,003	SB1-15e	-6,522	SB1-2e	31,127	SB1-15e	0,720
SB1-10e	32,406	SB1-2d	-6,336	SB1-10e	34,368	SB1-3e	1,121
SB2-6d	32,572	SB1-17d	-6,176	SB2-6d	34,458	SB2-5d	1,264
TSB-3e	153,912	SB1-10d	-5,364	TSB-3e	156,295	SB2-8d	1,422
TSB-3d	159,084	SB2-6d	-0,235	TSB-3d	161,154	SB1-10e	2,918
İkinci proton verme							
SB1-3f	39,219	SB1-3f	-0,669	SB1-3f	44,257	SB1-17f	-0,403
SB1-15f	41,722	TSB-3f	-0,635	SB1-15f	46,348	SB1-3f	-0,328
SB1-2f	46,922	SB1-17f	-0,417	SB1-2f	51,671	TSB-3f	0,080
SB1-10f	51,270	SB1-2f	0,209	SB1-10f	56,044	SB1-2f	0,183
SB1-17f	58,224	SB1-15f	0,522	SB1-17f	63,567	SB1-15f	0,443
TSB-3f	314,736	SB1-10f	1,530	TSB-3f	319,79	SB1-10f	1,561

Çizelge 7.79. PM3 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri sıralaması

PM3-H2O				PM3-DMF			
Bileşik	pK _a (k) ^b	Bileşik	pK _a (t) ^d	Bileşik	pK _a (k) ^b	Bileşik	pK _a (t) ^d
Birinci protonlanma							
TSB-3b	-24,482	TSB-8b	-5,582	TSB-3b	-24,735	SB1-16a	-1,178
TSB-1b	-23,954	SB2-6a	-3,315	TSB-1b	-24,578	SB1-12b	-0,108
TSB-7b	-23,666	SB2-6b	-2,555	TSB-7b	-24,050	SB1-12a	-0,072
TSB-4b	-23,580	TSB-2b	-2,177	TSB-4b	-24,011	SB1-17a	0,065
TSB-8b	-23,468	SB1-7a	-2,150	TSB-6b	-23,857	SB1-16b	0,145
TSB-6b	-23,378	SB1-6a	-2,114	TSB-8b	-23,760	SB1-4a	0,222
TSB-5b	-23,344	SB1-1b	-2,025	TSB-5b	-23,613	SB1-14a	0,246
TSB-2b	-21,220	TSB-8a	-1,874	TSB-2b	-21,730	SB2-2b	0,312
SB1-14a	-15,230	SB1-7b	-1,851	SB1-14a	-15,898	TSB-3b	0,380
SB1-14b	-15,139	SB2-8a	-1,673	SB1-14b	-15,795	SB1-14b	0,389
SB1-8b	-14,328	SB2-4a	-1,671	SB1-8b	-15,111	SB1-9b	0,412
SB2-3b	-13,945	SB2-2a	-1,580	SB1-17a	-14,585	SB1-18a	0,423
SB1-17a	-13,906	SB1-6b	-1,502	SB2-3b	-14,437	SB1-3a	0,451
SB1-8a	-13,681	SB2-5a	-1,492	SB1-8a	-14,428	SB2-7a	0,457
TSB-3a	-13,595	SB1-8a	-1,437	TSB-3a	-14,302	SB1-10b	0,493
SB1-10b	-13,447	SB2-4b	-1,415	SB1-10b	-14,124	TSB-1a	0,533
SB1-13b	-13,375	SB2-5b	-1,404	SB1-13b	-13,857	TSB-1b	0,535
SB1-2b	-13,340	SB2-1b	-1,398	SB1-2b	-13,762	SB1-6b	0,557
SB2-3a	-13,203	SB1-15b	-1,372	SB1-4a	-13,680	SB1-4b	0,560
SB1-4a	-13,072	SB1-11a	-1,355	SB2-7a	-13,659	TSB-8a	0,565
SB2-7a	-13,046	SB1-10a	-1,345	SB1-10a	-13,503	SB2-3b	0,583
SB1-10a	-12,867	SB1-5b	-1,266	SB1-7b	-13,499	SB1-18b	0,595
SB1-2a	-12,842	SB2-1a	-1,253	SB2-3a	-13,426	SB1-5a	0,665

Çizelge 7.79. (Devam) PM3 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri sıralaması

SB1-7b	-12,834	SB1-15a	-1,243	SB2-7b	-13,403	TSB-4a	0,692
SB1-16a	-12,782	SB1-8b	-1,178	SB1-3b	-13,334	TSB-3a	0,697
SB2-7b	-12,753	TSB-6b	-1,177	TSB-4a	-13,323	SB1-13b	0,703
TSB-4a	-12,721	SB1-11b	-1,134	SB1-3a	-13,315	SB2-8b	0,704
SB1-13a	-12,655	SB1-13a	-1,122	SB1-4b	-13,292	SB2-7b	0,709
SB1-3a	-12,651	TSB-6a	-1,117	SB1-16a	-13,286	SB1-9a	0,732
SB1-5a	-12,622	TSB-5b	-1,054	SB1-5a	-13,248	SB1-2a	0,767
SB1-4b	-12,621	SB1-17b	-0,999	SB1-2a	-13,210	TSB-2a	0,767
SB1-12a	-12,557	SB1-3b	-0,979	TSB-7a	-13,175	SB1-3b	0,810
TSB-7a	-12,553	SB2-8b	-0,976	SB1-15b	-13,152	TSB-4b	0,873
SB1-3b	-12,523	TSB-2a	-0,970	SB1-7a	-13,111	SB1-11b	0,874
SB1-15b	-12,484	TSB-4b	-0,933	SB1-18a	-13,102	TSB-7b	0,884
SB1-9b	-12,479	TSB-7a	-0,930	SB1-9b	-13,006	SB2-3a	0,899
TSB-5a	-12,433	TSB-7b	-0,899	SB1-13a	-12,969	TSB-7a	0,934
SB1-7a	-12,427	TSB-5a	-0,872	TSB-6a	-12,962	SB1-17b	0,957
SB2-4a	-12,310	TSB-1b	-0,772	SB1-6b	-12,944	SB1-2b	0,962
SB1-18a	-12,309	SB2-7b	-0,751	SB2-8a	-12,885	TSB-6a	1,061
SB1-12b	-12,290	TSB-1a	-0,726	SB2-4a	-12,848	SB1-8b	1,064
TSB-6a	-12,262	SB1-2b	-0,711	SB1-5b	-12,838	TSB-8b	1,067
SB1-5b	-12,199	SB1-5a	-0,701	SB1-12a	-12,817	TSB-6b	1,078
SB2-1a	-12,163	SB1-9a	-0,697	TSB-1a	-12,784	TSB-5a	1,128
SB1-9a	-12,147	SB1-18b	-0,690	TSB-5a	-12,778	SB1-11a	1,147
SB2-8a	-12,106	TSB-3a	-0,682	SB1-9a	-12,667	TSB-5b	1,175
SB1-15a	-11,987	TSB-4a	-0,648	SB1-12b	-12,617	SB1-5b	1,226
SB2-2b	-11,956	SB1-4b	-0,595	SB2-1a	-12,612	SB2-6a	1,272
TSB-1a	-11,931	SB1-18a	-0,578	SB1-15a	-12,510	SB1-15a	1,316
SB1-1a	-11,874	SB1-2a	-0,529	SB2-2b	-12,509	SB2-6b	1,320
SB2-4b	-11,874	SB1-3a	-0,518	SB2-4b	-12,420	SB1-8a	1,330
SB2-5a	-11,785	SB2-3a	-0,502	SB1-18b	-12,397	SB1-15b	1,357
SB1-18b	-11,677	SB1-13b	-0,501	SB1-1a	-12,296	SB2-1a	1,403
SB2-5b	-11,610	SB1-10b	-0,483	SB2-5a	-12,274	SB1-10a	1,457
SB1-1b	-11,598	SB2-7a	-0,469	SB1-1b	-12,151	SB1-13a	1,467
SB1-16b	-11,472	SB1-9b	-0,383	SB2-2a	-12,140	SB2-5b	1,467
SB2-2a	-11,397	SB2-3b	-0,382	SB2-5b	-12,127	SB2-4b	1,488
SB1-6b	-11,370	SB1-14b	-0,364	SB1-6a	-12,061	SB2-8a	1,511
SB2-1b	-11,105	SB2-2b	-0,318	TSB-2a	-11,877	SB2-2a	1,531
TSB-2a	-11,092	SB1-14a	-0,267	SB1-11a	-11,822	SB2-1b	1,592
TSB-8a	-11,024	TSB-3b	-0,243	SB1-11b	-11,816	SB2-5a	1,612
SB1-11a	-10,984	SB1-4a	-0,211	SB1-16b	-11,710	SB1-6a	1,617
SB1-6a	-10,952	SB1-17a	-0,100	TSB-8a	-11,576	SB2-4a	1,725
SB1-11b	-10,949	SB1-16b	0,267	SB2-1b	-11,538	SB1-1a	1,761
SB1-17b	-10,379	SB1-12b	0,317	SB2-8b	-11,309	SB1-7b	1,827
SB2-8b	-10,378	SB1-12a	0,396	SB1-17b	-11,177	SB1-7a	2,109
SB2-6b	0,786	SB1-16a	1,343	SB2-6a	-3,664	SB1-1b	2,115

Çizelge 7.79. (Devam) PM3 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri sıralaması

SB2-6a	1,365	SB1-1a	1,540	SB2-6b	-3,372	TSB-2b	2,157
İkinci protonlanma							
TSB-3c	-35,015	TSB-8c	-18,928	TSB-3c	-35,481	SB1-16c	0,589
TSB-4c	-34,508	SB1-16c	0,247	TSB-4c	-34,966	TSB-3c	1,223
TSB-7c	-34,485	SB1-10c	0,817	TSB-7c	-34,831	SB1-12c	1,233
TSB-6c	-33,695	SB1-12c	1,000	TSB-6c	-34,153	SB2-7c	1,246
TSB-5c	-33,691	TSB-3c	1,199	TSB-5c	-33,849	SB1-8c	1,341
TSB-2c	-33,264	SB2-7c	1,316	TSB-2c	-33,682	TSB-4c	1,349
TSB-1c	-32,160	SB1-8c	1,340	TSB-1c	-32,802	TSB-2c	1,528
TSB-8c	-32,100	TSB-4c	1,419	TSB-8c	-32,423	SB1-4c	1,546
SB1-8c	-28,256	TSB-2c	1,549	SB1-8c	-29,005	SB1-17c	1,588
SB1-14c	-26,457	SB1-17c	1,613	SB1-14c	-27,195	TSB-7c	1,627
SB1-7c	-25,382	TSB-7c	1,616	SB1-7c	-26,165	TSB-8c	1,702
SB1-10c	-24,283	SB2-3c	1,655	SB1-17c	-24,267	SB1-11c	1,733
SB1-17c	-23,482	SB1-4c	1,662	SB1-2c	-23,904	SB2-3c	1,734
SB1-2c	-23,340	SB2-5c	1,848	SB2-3c	-23,885	SB1-18c	1,830
SB2-3c	-23,231	SB1-11c	1,946	SB1-10c	-23,844	SB2-5c	1,959
SB2-7c	-23,121	SB1-18c	1,950	SB2-7c	-23,828	SB1-10c	1,969
SB1-1c	-22,532	SB1-2c	2,021	SB1-4c	-23,234	TSB-1c	2,176
SB1-4c	-22,452	SB2-1c	2,161	SB1-15c	-23,163	SB1-2c	2,185
SB1-15c	-22,366	SB2-4c	2,263	SB1-1c	-23,144	SB2-2c	2,215
SB1-5c	-21,934	SB2-2c	2,283	SB1-13c	-22,499	TSB-6c	2,283
SB1-13c	-21,884	SB1-3c	2,286	SB1-5c	-22,394	SB1-15c	2,284
SB1-12c	-21,749	SB1-15c	2,292	SB2-2c	-22,336	SB1-3c	2,305
SB2-4c	-21,698	SB1-5c	2,317	SB2-4c	-22,271	SB2-1c	2,350
SB2-2c	-21,631	TSB-6c	2,355	SB2-5c	-22,084	SB2-4c	2,357
SB2-5c	-21,547	TSB-1c	2,423	SB1-12c	-22,007	SB2-6c	2,381
SB2-1c	-21,534	TSB-5c	2,439	SB2-1c	-22,004	SB1-5c	2,466
SB1-3c	-21,296	SB1-14c	2,526	SB1-3c	-21,939	SB2-8c	2,556
SB1-18c	-20,835	SB1-9c	2,755	SB1-18c	-21,651	SB1-14c	2,582
SB1-16c	-20,550	SB2-8c	2,764	SB2-8c	-20,972	TSB-5c	2,646
SB1-9c	-20,352	SB1-1c	2,864	SB1-9c	-20,966	SB1-9c	2,658
SB2-8c	-20,095	SB1-7c	2,905	SB1-16c	-20,919	SB1-7c	2,829
SB1-11c	-19,551	SB1-13c	3,298	SB1-6c	-20,658	SB1-1c	2,976
SB1-6c	-19,509	SB1-6c	3,636	SB1-11c	-20,433	SB1-6c	3,116
SB2-6c	-9,207	SB2-6c	3,946	SB2-6c	-13,577	SB1-13c	3,472
Birinci proton verme							
SB1-17d	27,194	TSB-3e	-0,748	SB1-17d	29,262	SB2-6d	-0,694
SB1-3d	27,342	TSB-3d	-0,539	SB1-3d	29,393	TSB-3e	-0,611
SB2-2d	27,968	SB1-10d	-0,210	SB2-2d	30,072	TSB-3d	-0,536
SB1-15d	28,491	SB1-2d	-0,049	SB1-15d	30,712	SB2-2d	-0,357
SB2-4d	29,059	SB1-17e	-0,016	SB2-4d	31,197	SB1-10d	-0,124
SB2-1d	29,150	SB1-3d	0,148	SB2-1d	31,344	SB1-17e	-0,052
SB2-3d	29,340	SB1-17d	0,593	SB2-7d	31,570	SB2-1d	-0,002

Çizelge 7.79. (Devam) PM3 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri sıralaması

SB1-3e	29,364	SB1-2e	0,700	SB2-3d	31,623	SB1-3d	0,069
SB2-7d	29,383	SB1-3e	0,775	SB1-3e	31,635	SB1-2d	0,087
SB1-2d	29,543	SB1-15d	1,454	SB2-5d	31,861	SB2-3e	0,254
SB2-5d	29,619	SB1-15e	2,006	SB1-2d	31,865	SB2-7d	0,333
SB1-17e	29,847	SB1-10e	3,110	SB2-8d	31,916	SB2-5d	0,419
SB2-8d	29,999	SB2-1d	49,491	SB1-17e	31,938	SB2-3d	0,476
TSB-3e	31,287	SB2-6d	49,636	TSB-3e	33,581	SB2-4d	0,505
TSB-3d	31,590	SB2-4d	49,856	TSB-3d	33,738	SB1-17d	0,552
SB1-10d	31,781	SB2-8d	51,855	SB1-10d	33,994	SB2-8d	0,687
SB2-3e	32,562	SB2-2d	54,488	SB2-3e	34,682	SB1-3e	0,908
SB1-2e	32,608	SB2-7d	56,227	SB1-2e	35,009	SB1-2e	0,942
SB1-15e	33,934	SB2-5d	57,176	SB1-15e	36,138	SB1-15d	1,526
SB1-10e	35,416	SB2-3e	67,850	SB1-10e	37,551	SB1-15e	2,119
SB2-6d	37,387	SB2-3d	68,810	SB2-6d	39,826	SB1-10e	3,286
İkinci proton verme							
SB1-3f	54,293	TSB-3f	-0,575	SB1-3f	58,989	TSB-3f	-0,485
SB1-15f	56,842	SB1-17f	-0,559	SB1-15f	59,410	SB1-10f	-0,059
SB1-2f	58,931	SB1-10f	-0,422	SB1-2f	63,790	SB1-17f	0,417
SB1-10f	61,033	SB1-2f	0,412	SB1-10f	66,113	SB1-2f	0,496
SB1-17f	70,070	SB1-15f	0,813	TSB-3f	77,387	SB1-15f	0,831
TSB-3f	71,818	SB1-3f	1,107	SB1-17f	95,099	SB1-3f	1,103

Çizelge 7.80. PM6 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri sıralaması

PM6-H2O				PM6-DMF			
Bileşik	pK_a (k) ^b	Bileşik	pK_a (t) ^d	Bileşik	pK_a (k) ^b	Bileşik	pK_a (t) ^d
Birinci protonlanma							
TSB-2b	-13,126	TSB-2b	-0,962	TSB-2b	-13,862	SB2-6b	-1,961
TSB-8b	-12,933	SB1-16a	-0,792	TSB-4b	-13,219	SB2-6a	-1,506
TSB-4b	-12,806	SB2-3b	-0,661	TSB-7b	-13,019	TSB-2b	-1,193
TSB-7b	-12,711	SB2-8b	-0,429	TSB-6b	-12,757	SB1-16a	-0,876
TSB-3b	-11,942	SB1-17b	-0,346	TSB-8b	-12,745	SB1-17a	-0,674
TSB-6b	-11,942	SB2-3a	-0,300	TSB-3b	-12,424	SB2-8b	-0,611
TSB-5b	-11,764	SB1-16b	-0,290	TSB-5b	-12,167	SB1-17b	-0,530
TSB-1b	-11,066	SB1-10b	-0,266	TSB-1b	-11,710	SB2-1a	-0,491
SB1-17b	-8,856	SB2-1a	-0,231	SB1-17b	-9,647	SB1-10b	-0,299
SB1-17a	-8,464	SB1-2b	-0,230	SB1-17a	-9,356	SB2-3a	-0,279
SB1-10a	-8,015	SB2-4a	-0,184	SB1-10a	-8,648	SB1-14a	-0,266
SB2-3b	-6,680	SB1-17a	-0,172	SB1-14a	-7,664	SB1-16b	-0,244
SB1-14a	-6,565	TSB-7b	-0,105	SB1-10b	-7,193	SB1-9a	-0,154
SB1-10b	-6,465	SB1-11b	-0,084	SB1-2b	-7,024	TSB-4a	-0,139

Çizelge 7.80. (Devam) PM6 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri sıralaması

SB1-2b	-6,438	SB1-9a	-0,082	TSB-3a	-6,901	SB1-11b	-0,106
TSB-3a	-6,354	TSB-8b	-0,074	SB1-8b	-6,762	SB1-2b	-0,088
SB2-3a	-6,096	TSB-4a	-0,051	SB1-14b	-6,730	TSB-4b	-0,069
SB1-14b	-6,065	SB2-8a	-0,050	SB2-3a	-6,721	SB1-1b	-0,052
SB1-8b	-5,944	TSB-4b	-0,046	SB2-3b	-6,697	SB2-8a	-0,038
TSB-4a	-5,808	SB1-10a	-0,018	TSB-4a	-6,572	TSB-7b	-0,020
SB1-1b	-5,730	SB2-2b	-0,007	SB1-1b	-6,541	SB2-2b	0,014
SB2-4a	-5,702	SB2-6b	0,036	SB2-1a	-6,527	SB2-3b	0,059
SB1-2a	-5,694	SB1-1b	0,086	SB1-2a	-6,298	SB1-1a	0,095
SB2-1a	-5,627	SB1-14a	0,129	SB2-8a	-6,191	TSB-6b	0,113
SB2-8a	-5,545	SB2-5a	0,159	SB1-3b	-6,092	SB1-10a	0,126
SB1-3b	-5,387	SB1-4b	0,200	SB1-13b	-5,951	SB1-3b	0,186
SB1-7b	-5,323	SB1-3b	0,215	SB2-4a	-5,894	SB2-4a	0,251
TSB-7a	-5,312	TSB-3a	0,225	TSB-7a	-5,872	TSB-6a	0,265
SB2-5a	-5,255	SB2-4b	0,282	TSB-6a	-5,821	TSB-8b	0,281
SB1-13b	-5,072	SB2-6a	0,318	SB1-13a	-5,777	SB1-4b	0,293
SB1-4b	-5,045	TSB-2a	0,372	SB1-1a	-5,691	TSB-2a	0,308
SB1-13a	-5,033	SB1-11a	0,394	SB1-7b	-5,618	SB2-4b	0,358
SB2-4b	-5,012	SB1-1a	0,458	SB1-5b	-5,602	SB1-5b	0,437
SB2-7a	-4,885	TSB-7a	0,467	SB1-4b	-5,583	TSB-3b	0,441
SB1-8a	-4,808	SB1-2a	0,472	SB2-4b	-5,544	TSB-3a	0,442
SB1-7a	-4,762	TSB-3b	0,491	SB2-7a	-5,508	SB1-6b	0,490
SB1-1a	-4,648	SB1-6b	0,541	SB1-8a	-5,467	SB1-2a	0,504
SB2-7b	-4,614	SB2-7a	0,572	SB2-5a	-5,447	SB1-11a	0,541
SB1-5b	-4,527	SB1-4a	0,639	SB2-7b	-5,348	SB2-7a	0,573
SB1-5a	-4,504	SB1-15a	0,650	SB1-7a	-5,296	SB1-5a	0,589
SB1-16a	-4,46	TSB-5b	0,691	SB1-16a	-5,266	TSB-7a	0,589
SB1-4a	-4,400	SB1-13a	0,712	SB1-5a	-5,261	SB2-5a	0,605
SB1-3a	-4,352	SB1-5a	0,718	SB1-4a	-5,008	SB1-4a	0,648
SB1-11b	-4,345	SB1-14b	0,750	SB1-11b	-4,986	SB1-13a	0,700
SB1-9a	-4,337	SB1-9b	0,751	SB1-9a	-4,984	TSB-5b	0,704
TSB-5a	-4,290	SB1-3a	0,818	TSB-1a	-4,974	SB1-13b	0,749
SB1-15a	-4,277	SB1-7b	0,842	TSB-5a	-4,962	SB1-9b	0,753
TSB-1a	-4,208	SB1-13b	0,86	SB2-8b	-4,918	SB1-8b	0,816
SB2-2b	-4,155	SB1-5b	0,868	SB1-3a	-4,779	SB1-14b	0,817
SB2-8b	-4,056	SB2-5b	0,878	SB1-6b	-4,737	SB2-7b	0,870
SB1-6b	-4,045	TSB-5a	0,900	SB2-2b	-4,686	TSB-5a	0,911
SB2-2a	-4,041	SB1-6a	0,931	SB2-2a	-4,685	SB1-6a	0,945
SB2-5b	-3,951	SB1-8b	0,936	SB2-1b	-4,451	TSB-1a	0,976
SB2-1b	-3,787	SB2-7b	0,964	SB1-16b	-4,417	TSB-8a	0,983
SB1-16b	-3,771	TSB-8a	1,007	SB1-15a	-4,396	SB1-3a	0,993
SB1-6a	-3,751	TSB-1a	1,018	SB2-5b	-4,394	SB2-5b	1,048
SB1-11a	-3,700	SB2-1b	1,088	SB1-6a	-4,371	SB2-1b	1,079
TSB-2a	-3,410	TSB-6a	1,199	SB1-18b	-4,361	SB1-15a	1,128

Çizelge 7.80. (Devam) PM6 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri sıralaması

SB1-15b	-3,366	TSB-6b	1,258	SB1-11a	-4,193	SB1-7b	1,215
SB1-9b	-3,323	SB2-2a	1,277	TSB-2a	-4,077	SB1-18b	1,229
SB1-18b	-3,293	SB1-12a	1,319	SB1-9b	-3,896	TSB-1b	1,264
SB1-18a	-2,556	SB1-7a	1,341	SB1-18a	-3,528	SB2-2a	1,346
TSB-8a	-2,360	SB1-12b	1,342	SB1-15b	-3,490	SB1-12b	1,434
SB1-12a	-1,945	TSB-1b	1,473	TSB-8a	-2,866	SB1-12a	1,449
SB1-12b	-1,109	SB1-15b	1,477	SB1-12a	-2,449	SB1-7a	1,478
TSB-6a	-0,826	SB1-8a	1,578	SB1-12b	-1,585	SB1-8a	1,582
SB2-6b	2,679	SB1-18b	1,602	SB2-6b	-0,160	SB1-15b	2,032
SB2-6a	2,848	SB1-18a	2,382	SB2-6a	0,146	SB1-18a	2,094
İkinci protonlanma							
TSB-3c	-16,658	SB1-10c	-0,095	TSB-3c	-17,177	SB2-6c	-0,613
TSB-7c	-15,476	SB1-17c	0,242	TSB-7c	-15,826	SB1-17c	0,194
TSB-5c	-15,135	SB1-3c	0,605	TSB-5c	-15,804	SB1-11c	0,440
TSB-4c	-14,497	SB1-11c	0,652	TSB-6c	-15,568	SB1-10c	0,459
TSB-1c	-14,483	SB1-9c	0,671	TSB-1c	-15,096	SB1-3c	0,598
TSB-8c	-14,267	SB1-16c	0,742	TSB-4c	-14,895	SB1-1c	0,658
TSB-2c	-13,951	TSB-2c	0,862	TSB-8c	-14,494	SB1-9c	0,697
SB1-14c	-11,221	TSB-3c	0,952	TSB-2c	-14,338	SB1-16c	0,836
SB1-8c	-11,082	SB1-14c	1,005	SB1-17c	-12,570	TSB-2c	0,876
TSB-6c	-10,824	SB2-3c	1,075	SB1-14c	-12,037	TSB-5c	0,986
SB1-17c	-9,371	SB1-2c	1,151	SB1-8c	-11,688	TSB-3c	1,003
SB1-7c	-9,287	SB2-8c	1,191	SB1-1c	-10,303	SB1-14c	1,062
SB1-1c	-8,994	SB1-1c	1,206	SB1-7c	-9,854	SB2-3c	1,091
SB1-2c	-8,822	TSB-5c	1,260	SB1-2c	-9,552	TSB-6c	1,173
SB1-10c	-8,440	TSB-7c	1,311	SB1-3c	-8,780	SB2-8c	1,202
SB1-3c	-8,086	SB1-8c	1,360	SB1-10c	-8,632	SB1-2c	1,218
SB2-3c	-7,640	TSB-4c	1,392	SB2-3c	-8,437	TSB-7c	1,351
SB1-13c	-7,473	TSB-8c	1,402	SB1-13c	-8,418	TSB-8c	1,370
SB1-15c	-7,412	SB1-6c	1,459	SB2-4c	-7,788	TSB-4c	1,394
SB2-4c	-7,138	SB2-6c	1,483	SB1-15c	-7,770	SB1-6c	1,459
SB2-7c	-6,962	SB2-4c	1,569	SB2-7c	-7,647	SB1-8c	1,534
SB1-9c	-6,598	SB2-2c	1,653	SB1-5c	-7,241	SB2-4c	1,590
SB1-5c	-6,593	SB2-7c	1,758	SB1-9c	-7,080	SB2-2c	1,675
SB1-6c	-6,437	SB2-1c	2,004	SB1-6c	-7,066	SB2-7c	1,747
SB2-8c	-6,274	SB1-4c	2,031	SB2-1c	-6,994	TSB-1c	1,951
SB2-1c	-6,230	SB1-7c	2,043	SB2-8c	-6,982	SB2-1c	1,961
SB1-4c	-6,208	SB2-5c	2,106	SB1-4c	-6,810	SB1-4c	2,072
SB2-5c	-6,063	TSB-1c	2,120	SB1-11c	-6,765	SB1-7c	2,224
SB1-11c	-5,899	SB1-15c	2,130	SB2-5c	-6,437	SB1-5c	2,336
SB1-16c	-5,533	SB1-12c	2,277	SB1-16c	-6,206	SB1-12c	2,347
SB2-2c	-5,391	SB1-5c	2,335	SB2-2c	-6,028	SB2-5c	2,402
SB1-18c	-4,744	TSB-6c	2,517	SB1-18c	-5,767	SB1-13c	2,565
SB1-12c	-2,702	SB1-13c	2,587	SB1-12c	-3,161	SB1-15c	2,619

Çizelge 7.80. (Devam) PM6 yöntemiyle DMF ve su fazında yapılan hesaplamalar ile elde edilen Termodinamik pK_a ve Kinetik pK_a değerleri sıralaması

SB2-6c	0,837	SB1-18c	3,130	SB2-6c	-2,169	SB1-18c	2,848
Birinci proton verme							
SB1-17d	4,145	SB1-17e	-1,247	SB1-17d	6,188	SB2-6d	-2,703
SB1-17e	6,929	SB1-17d	-1,192	SB1-17e	8,988	SB1-10d	-1,642
SB1-3d	7,072	SB1-10d	-1,149	SB1-3d	9,210	SB1-17e	-1,379
SB1-15d	7,377	TSB-3e	-1,016	SB1-15d	10,020	SB1-17d	-1,306
SB2-3d	8,962	SB2-3d	-0,868	SB1-10d	10,741	SB2-3d	-0,689
SB1-10d	9,140	SB2-6d	-0,857	SB2-2d	11,308	TSB-3e	-0,679
SB2-2d	9,189	SB1-2e	-0,629	SB2-3d	11,334	SB2-8d	-0,663
SB2-1d	9,511	SB2-8d	-0,617	SB2-1d	11,581	SB1-2e	-0,641
SB2-7d	9,743	SB2-2d	-0,545	SB1-3e	11,634	SB2-2d	-0,563
SB2-8d	9,789	SB2-1d	-0,335	SB2-8d	11,888	SB1-3e	-0,409
SB2-5d	9,846	SB2-7d	-0,324	SB2-7d	12,084	SB2-1d	-0,405
SB1-3e	10,056	SB2-3e	-0,305	SB1-2d	12,315	SB1-2d	-0,240
SB1-2d	10,113	SB1-2d	-0,280	SB2-4d	12,316	SB2-3e	-0,183
SB2-4d	10,165	SB1-3d	-0,117	SB2-5d	12,346	SB2-7d	-0,154
SB2-3e	11,473	SB2-5d	-0,031	SB2-3e	13,705	SB1-3d	-0,099
TSB-3e	11,888	TSB-3d	0,021	SB1-10e	14,126	TSB-3d	0,045
TSB-3d	12,107	SB1-15d	0,087	TSB-3d	14,242	SB2-4d	0,138
SB1-10e	12,161	SB2-4d	0,150	TSB-3e	14,354	SB2-5d	0,192
SB1-2e	15,388	SB1-3e	0,152	SB2-6d	17,057	SB1-15d	0,613
SB1-15e	16,647	SB1-10e	1,665	SB1-2e	17,445	SB1-10e	1,713
SB2-6d	16,977	SB1-15e	2,204	SB1-15e	19,164	SB1-15e	2,714
İkinci proton verme							
SB1-3f	14,146	SB1-2f	-1,366	SB1-3f	18,897	SB1-17f	-1,292
SB1-15f	18,217	SB1-17f	-0,998	SB1-15f	21,154	SB1-2f	-0,865
SB1-2f	18,833	SB1-10f	-0,603	SB1-2f	24,096	SB1-10f	-0,510
SB1-10f	20,270	SB1-3f	-0,429	SB1-10f	25,029	SB1-3f	-0,355
SB1-17f	26,534	TSB-3f	-0,168	SB1-17f	31,576	TSB-3f	-0,190
TSB-3f	31,132	SB1-15f	0,546	TSB-3f	36,582	SB1-15f	1,105

AM1, PM3 ve PM6 yöntemlerinde sentezlenen schiff bazları için hesaplanan $pK_{a(k)}$ ve $pK_{a(t)}$ değerleri incelendiğinde birinci ve ikinci proton alma ve verme durumları için; $pK_{a(k)}$ değerlerine göre; birinci protonlanmada, AM1 yönteminde su ve DMF fazında SB2-6b molekülünün, PM3 yönteminde su fazında SB2-6a ve DMF fazında SB2-6b molekülünün, PM6 yönteminde su ve DMF fazında SB2-6a molekülünün; ikinci protonlanmada tüm yöntem ve fazlarda SB2-6c molekülünün; birinci proton verme halinde AM1 yönteminde su ve DMF fazında TSB-3d molekülünün, diğer yöntem ve fazlarda SB2-6d molekülünün en bazik yapıyı oluşturduğunu söyleyebiliriz.

PM6 yönteminde su fazında SB1-15e molekülünün; ikinci proton verme hali için tüm yöntem ve fazlarda TSB-3f molekülünün daha büyük pK_a değerine sahip oldukları ve en bazik yapıyı oluşturdukları ve bunların zayıf asit varlığında protonlanacakları görülmüştür.

AM1, PM3 ve PM6 yöntemlerinde sentezlenen schiff bazları için hesaplanan $pK_{a(t)}$ değerleri incelendiğinde birinci ve ikinci proton alma ve verme durumları için; birinci proton alma hali için AM1 yönteminde su fazında SB1-1a molekülünün, DMF fazında SB2-2a molekülünün, PM3 yönteminde su fazında SB1-1a molekülünün, DMF fazında TSB-2b molekülünün, PM6 yönteminde su ve DMF fazında SB1-18a molekülünün; ikinci proton alma hali için AM1 yönteminde su fazında SB1-18c molekülünün, DMF fazında SB1-13c molekülünün daha bazik yapıyı oluşturduğu görülmüştür.

PM3 yönteminde su fazında SB2-6c molekülünün, DMF fazında SB1-13c molekülünün, PM6 yönteminde su ve DMF fazında SB1-18c molekülünün; birinci proton verme hali için AM1 yöntemi su fazında SB2-6d molekülünün, DMF fazında SB1-10e molekülünün, PM3 yönteminde su fazında SB2-3d molekülünün, DMF fazında SB1-10e molekülünün, PM6 yönteminde su ve DMF fazında SB1-15e molekülünün; ikinci proton verme hali için AM1 yönteminde su ve DMF fazı için SB1-10f molekülünün daha bazik olduğu görülmüştür. PM3 yönteminde her iki fazda da SB1-3f molekülünün, PM6 yönteminde ise su ve DMF fazında SB1-15f molekülünün daha yüksek enerjili pK_a değerine sahip oldukları ve en bazik yapıyı oluşturdukları ve bunların zayıf asit varlığında protonlanacakları görülmüştür.

Bu farklılık moleküllerin geometrisi, molekülde bulunan e^- iten ve çeken gruplardan yani sübstitüent etkilerinden kaynaklanmaktadır. Bu kuvvetli bazların konjuge asitlerinin pK_a 'sı oldukça büyüktür (zayıf asittir).

$pK_{a(k)}$ ve $pK_{a(t)}$ değerleri kıyaslandığında AM1, PM3 ve PM6 yöntemlerinde su ve DMF fazlarında proton alma durumları için $pK_{a(k)}$ değerleri, proton verme durumları için $pK_{a(t)}$ değerlerinin daha düşük olduğunu söyleyebiliriz.

Bu çalışmalarla literatüre yeni sentezlenen moleküller kazandırdık. Bu moleküllerle ilgili çalışmalar yapacak olanlar için ön çalışma bilgileri sağlandı.

Sentezlenen Schiff bazlarından hangi ürünün ve hangi reaksiyonların daha kararlı olduğu belirlendi. Bu şekilde moleküllerin asitlik-bazlık özellikleri incelendi. Hesaplanan termodinamik ve kinetik değerler kıyaslandığında bu moleküllerin hem ürün çalışmalarının hem de gerçekleşen reaksiyonların termodinamik yönündeki çalışmalarının daha kararlı olduğu belirlendi. Kullanılan semi-empirik yöntemlerden PM6 yönteminin AM1 ve PM3 yöntemlerine göre daha düşük enerjili sonuçlar oluşturduğu belirlenmiştir.

8. KAYNAKLAR

- Abbo, H.S., Titinchi, S.J.J., Prasad, R. ve Chand, S. (2005), "Synthesis, characterization and study of polymeric iron(III) complexes with bidentate p-hydroxy Schiff bases as heterogeneous catalysts" *J. Mol. Catalys A: Chem.*, **225**, 225-232.
- Akpolat, O. ve Kartal, F., (2009), "Kimyacılar için bilişim teknolojileri, Akademik Bilişim'09 -XI. Akademik Bilişim Konferansı Bildirileri", Harran Üniversitesi, Şanlıurfa
- Alemi, A.A. ve Shaabani, B. (2000), *Acta. Chim. Slov.*, **47**, 363-369.
- Aly, A.A. ve El-Shaieb, K.M. (2004), *Tetrahedron*, **60**, 3797-3802.
- Arora K. , D. Kumar , Burman K. , Agnihotri S. , Singh B., (2010), "Theoretical studies of 2-nitrobenzaldehyde and furan-2-carbaldehyde Schiff base of 2-amino pyridine", *Journal of Saudi Chemical Society*, King Saud University 15, Pages 161-165.
- Atakol, O. (1986), Doktora Tezi. Ankara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, 9-12, Ankara.
- Bera, C.R., Chattopadhyay, S. and Sengupta, G.P., (1979), *J. Indian Chem. Soc.*, LVI, 416-418.
- Berber H. , Türkoğlu G., Dal H., Öğretir C., "Synthesis, characterization, tautomerism and theoretical study of some new Schiff base derivatives", *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, Volume 79, Issue 5, September 2011, Pages 1573-1583.
- Beyer, H. (1980), *Lehrbuch der Organischen Chemie*, S. Hirzel Verlag, 18. Auflage, 16-17, Stuttgart.
- Bilman, J. H. And Tai, K. M. (1958), Reduction of Schiff bases, II. Benzhydrylamines and structurally related compounds. *J. Of Org. Chem.* **23**, 535-539.
- Bingham, R.C., Dewar, M.J.S. ve Lo, D.C., (1975), *J. Am. Chem. Soc.*, **97**, 1285.
- Brown, H.C., Daniel, O.H.Mc. ve Haflinger, O. (1985), "Determination of organic structure by physical methods", Academic Press, New York.

- Brown, W.H. (1995), *Organic Chemistry*. Saunders College Publishing, 674-675.
- Bukhari, I.H., (2002), “*Preparation, Characterization and biological evaluation of Schiff-base metal complexes of some drug substances,*” Doktora tezi, Bahauddin Zakeriya Üniv., Pakistan.
- Campbell, E.J. ve Nguyen, S.T. (2001), *Tetrahedron Lett.* **42**, 1221.
- Catalan, J., Abboud, J.L.M., and Elguero, J., (1987), “Basicity and acidity of azoles, advances in heterocyclic chemistry”, vol. 41., Academic Press Inc.
- Chaichit, N. (2004), *J. Mol. Struct.* **701**, 93.
- Chantarasiri, N., Ruangpronvisuti, V., Muangsin, N., Desten, H., Mananunsap, T., Batiya, C., Chilton, X. ve Stenlake, J.B. (1962), *J. Pharm. Pharmacol.*, **14**, 367.
- CS ChemOffice Pro for Microsoft Windows, Cambridge Scientific Computing Inc., 875 Massachusetts Avenue, Suite 61, Cambridge, MA 02139, USA.
- Corwin. H., Leo, and Taft, *Chem. Rev.*, **1991**, 91 (2), 165-195.
- Demirhan, F. Sarıkahya, F. And Sarıkahya, Y. (1997), “*Reactions of Tin (IV) tetrachloride with some transition metal ion Schiff base complexes*”. Doktora Tezi E.Ü. Fen-Ed. Fak. Kimya Böl. İzmir.
- Demirtaş, E., (2003), “*Bazı Piridin N-Oksit Türevlerinin Asitlik-Bazlık Davranışlarının Teorik Olarak İncelenmesi*”, Osmangazi Üni. Fen Bil. Ens., Yüksek Lisans Tezi.
- Dewar, M.J.S. Ve Morita, T. (1977), *J. Am. Chem. Soc.*, **99**, 4899.
- Dıđrak, M., Selvi, S., Ahmedov, M.A. ve Bađcı, E. (1997), “1,5-dien-3ol’lerin antimikrobiyal etkilerinin incelenmesi”, XII. Ulusal Kimya Kongresi, Y.Y Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümü, Kongre Özetler Kitabı, 677 s., Van.
- Dubay, S.D., Singh, K. ve Tandon, J.P. (1993), *Synth. React. Inorg. Met. Org. Chem.*, **23**, 1251.
- Ebbing, D.D., (1993), *General Chemistry*, 4th ed, Houghton Mifflin Compsny, Boston.
- Eleman, Y., Kabak, Y., Elmalı, A. (2002), *Naturforsch, Z.*, B **57**, 651.

- Elmalı, A., Kabak, M., Kavlakoglu, E., Elerman, Y. (2000), “*Tautomeric Properties, Conformations and Structure of N-(2-hydroxy-5-clorophenyl) salicylaldimine.*” *J. Mol. Structure* **510**,207.
- Fessenden, J.S. and Fessenden, R.J., (1990), *Organic Chemistry*, 4th ed. 610.
- Foresman, J.B. and Frisch, A., (1996), “Exploring Chemistry With Electronic Structure Methods”, Gaussian Inc., Pittsburgh.
- Geary, W.J., Nicklers, G., Pollard, F.H., (1962), *Anal. Chim. Acta* **27**, 71.
- Gece, G., (2008), “The use of quantum chemical methods in corrosion inhibitor studies”, *Corrosion Science*, **50**, 2981–2992.
- Grasselli, R.K. (1999), *Catal. Today*, **49**, 141.
- Gürkan P., Güngör Ö.,(2010), “ Synthesis and spectroscopic properties of novel asymmetric Schiff bases”, Gazi University, Faculty of Arts and Science, Department of Chemistry , 06500 Teknikokullar, Ankara.
- Haas, A., Lieb, M. ve Schelvis, M.(1997), *J. Fluor. Chem.* **83**, 133–143.
- Hargittai, M., Schulz, A., Reffy B., Kolonits., (2001) , *J.Am. Chem. Soc.*, **123**, 1149.
- Hinchliffe, A., (1997), *Modelling Molecular Structures*, John Wiley&Sons, New York.
- Huili, C. and Chang, T.C., (1991), *Eur. Polym. J.*, **56**, 2296-2298.
- Iwan, A., Kaczmarczyk, B., Janeczek, H., Sek, D. ve Ostrowski, S. (2007), “Similarities and differences between azomethines and ketimines: Synthesis, materials characterization and structure of novel imines compounds,” *Spectrochim. Acta Part A: Mol. Biomol. Spectrosc.*, **66**, 1030-1041.
- Kallen, R.G., Korpella, T., Martell, A.E., Matsushima, Y., Matzler, C.M., Morozov, Y.V., Ralston, I.M., Savin, F.A., Toschinsky, Y.M., Ueno, H., in: Christen, P., Matzler, D.E. (Eds), (1985), *Transaminases*, Wiley, New York, p.37.
- Khalaji A.D., Chermahini A.N. Fejfarova K., Dusek M., (2009), “Synthesis, characterization, crystal structure, and theoretical studies on Schiff-base compound 6-[(5-Bromopyridin-2-yl)iminomethyl]phenol”, *Struct Chem* **21**:153–157 Springer Science+Business Media, LLC.

- Khalil, M. M.H., Aboaly, M. M., Ramadan, R. M. (2005), *Spectrochim. Acta A* **61**, 157.
- Kunkely, H. ve Vogler, A. (2001), *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.*, **138**, 51-54.
- Laurent, ve Gerhard, C.R. (1850), *Trav. Chim.*, 117-114.
- Leila N., Sakina H., Bouhadiba A., Madi F., (2011),” Theoretical study of inclusion complexation of 3-amino-5-nitrobenzothiazole with β -cyclodextrin” , *Journal of Molecular Liquids* 160, pages 8–13, Guelma's University, Algeria.
- Li, Y., Yang, Z. ve Wang, B. (2006), *Transition Met. Chem.*, **31**, 598.
- Miessler, G.L. and Tarr, D.A., (2002), *İnorganik kimya*, (Çev. N. Karacan ve P. Gürkan), Palme Yayıncılık, Ankara, 642 p.
- Mohand, S.A., Levina, A. ve Muzart, J. (1995), *J. Chem. Res.* **25**, 2051.
- Munoz-Hernandez, M.A., Mckee, M.L., Keizer, T.S., Yearwood, B.C., Adwood, D.A. *J. Chem. Soc.*, (2002), *Dalton Trans.*, 410.
- Öğretir C., Güray T., Gedikbey T., Hüseyinli A.A., (2011), “Synthesis and spectrophotometric determination of acidity constants of 2,3,4,6-tetrahydroxy-3-sulfoazobenzene and their use in determination of aluminum”, *Turk J Chem* 35 , 291 – 305, TÜBİTAK.
- Ölmez, H. ve Yılmaz, V.T., (1998), *Anorganik kimya*, Furkan Kitabevi, Samsun.
- Öztürk Yıldırım S., Akkurt, M., (2008), “2-Hidroksi-1,2-Difenil-ethanon’un cndo/2 yaklaşımı ile konformasyonun tayini ve x-ışınları yapı analiz sonuçlarının karşılaştırılması”, *Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi*, Kayseri, 24 (1-2) 191 – 201.
- Palys, B.J., Bukowska, J. ve Jackowska, K. (1997), *J. Electroanal. Chem.*, **428**,19.
- Parashar, R.K., Sharma, R.C., Kumar, A. and Mohan, G., (1988), *Inorg. Chim. Acta*, 151,201.
- PATAI, S., (1970), *Chemistry of the carbon-nitrogen double bond*, Wiley, New York.
- Patel, V. K., Vasanwala, A. M. and Jejurkar, C. R. (1989). “Synthesis of mixed Schiff base complexes of Cu (II) and Ni (II) and their spectral, magnetik and antifungal studies”. *Indian Journal of Chemistry*, 28A, 719-721.

- Pesek, J.J. ve Frost, J.H. (1974), "Synthesis of imines from aromatic aldehydes and aliphatic amines in aqueous solution," *Synth. Commun.*, **4**(6), 367-372.
- Pfeiffer, et. al., (1932), "Tricyclische orthokondensierte Nebervalenzringe," *Ann.Chem.*, **492**, 81-127.
- Rahaman, S.H., Choowdhury, H., Bose, D., Ghosh, R., Chen-Hsing, G., Barindra Kumar Ghosh, H. (2005), "Synthesis, Structure and properties of mononuclear Cobalt (II) and Cobalt (III) pseudohalide complexes containing n-donor schiff bases: synthetic control of metal oxidation levels" *Polyhedron*, **24**, 1755-1763.
- Rajakantoanina, V., Phung, N.K.P., Jaureguiberry, G., (2000), *Parasitol. Res.*, **86**, 665-668.
- Richards, W.G. And Cooper, D.L., (1983), *Ab Initio Molecular Orbital Calculations For Chemists*, Oxford University Press New York.
- Rochester, C.H, Cockerill ve Lamper, (1971), *Acidity function*, academic press, London.
- Schaefer III, H.F., (2001), "Computers and Molecular Quantum Mechanics", 1965-2001, A Personal Perspective, *J. Mol. Struct. (Theochem)*, **573**-129-137.
- Schiff, H. (1864), *Ann. Chem. Pharm. Suppl.*, **3**, 343-370.
- Schiff, H. (1869). Untersuchungen über salicinderivate. *Annalen der Chemie* **150**, 193-200.
- Serin, S. ve Gök, Y. (1988). "Hidroksi Schiff bazı metal komplekslerinin tekstil boyamacılığında kullanılabilirliğinin incelenmesi". *Doğa*, **12**,325-331.
- Sheldon, R.A., Arends, I.W.C.E. ve Lempers, H.E.B. (1998), *Catal. Today*, **41**, 387
- Shi, L., Ge, H.-M., Tan, S.-H., Li, H.-Q., Song, Y.-C., Zhu, H.-L. ve Tan, R.-X. (2006), *Eur. J. Med. Chem.*, 1-7.
- Shori, N., Garg, B.S., Dutty, Y. ve Singh, R\ P. (1971), *Indian J. of Chem.*, **9**, 1661-1664.

- Sillanpää, A., Ahokas, J., Blomqvist, J., Ennari J., Kinnunen, T., Korhonen S-P., Kurtén, T., Mattila, K., Runeberg, N. and Tuononen, H., (2008), "From problem to solution-CSC's chemistry modeling guide", CSC-Scientific Computing Ltd., Finland, 132 p.
- Soliman, A. A. (2001), *J. Therm. Anal. Calorim.* **63**, 221.
- Soliman, A. A., Mohamed, G. G. (2004), *J. Thermochim. Acta* **421**, 151.
- Solomons, T.W.G., (1996), *Organic Chemistry*, 6th ed., John Wiley&Sons,USA.
- Solomons, T.W. ve Fryhle, C.B. (2002), *Organik Kimya*, Literatür Yayıncılık, İstanbul.
- Sönmez, M., Levent, A., Şekerci, M. (2003), *Synth. React. Inorg. Met.: Org. Chem.* **33**, 1747.
- Stewarts, J.J.P.,(1989), *J. Camp. Chem.*, **10**, 209-221.
- Streyer, L., (1995), *Biochemistry*, Freeman: New York.
- Taşçı, D., (2004), "Bazı Metil Sübstitüe Piridin Türevlerinin Asitlik ve Bazlık Davranışlarının Teorik Olarak İncelenmesi", Osmangazi Üni. Fen Bil. Ens., Yüksek Lisans Tezi.
- Taş, E., Aslanoğlu, M., Ulusoy, M., Güler, M. (2004), *Polish J. Chem.* **78**, 903.
- Thronback, J.R., Wilkinson, G., (1978) *J. Chem. Soc., Dalton Trans.*, 110.
- Tunalı N. K. Ve Özkar S. *Anorganik Kimya* (1999), 4.Basım 216-223.
- Vaghasiya, Y. K., Nair, R., Soni, M., Baluja, S., Chanda, S., Serb, J. (2004), *Chem. Soc.* **69**, 991.
- Vance, A.L., Alcock, N.W., Heppert, J.A. ve Busch, D.H. (1998), *Inorg. Chem.*, **37**, 6912.
- Vanco, J., Svajlenova, O., Racanska, E., Muselik, J. ve Valentova, J. (2004), *J. Trace Elem. Med. Biol.*, **18**, 155.
- Wade, L.G. (1999), *Organic Chemistry*, 4th edi., p. 818-819.
- Walsh, C.T. ve Orme-Johnson, W.H. (1987), *Biochemistry*, **26**, 4901.
- Wojciechowski, G., Przybylski, P., Schilf, W. Kamien'ski, B. ve Brzezinski, B., (2003) *J. Molecular Structure* 649, 197-205.
- Yamada, M., Araki, K. ve Shiraishi, S. (1990), *J. Chem. Soc., Perkin Trans.*, **1**, 2687.
- Yang, Z.Y. Yang, R.D. Li, F.S. and Yu, K.B. (2000). *Polyhedron* 19, 2599-2604.

- Yanga Z., Jianga X., Wanga B., Liub Y., Lia T., Liua Z., “8-hydroxyquinoline-5-carbaldehyde Schiff-base as a highly selective and sensitive Al³⁺ sensor in weak acid aqueous medium”, *Inorganic Chemistry Communications* (2011)
- Yarlıgan. S. (2001). “*Bazı Piridazinon Türevleri Üzerinde Sentetik Deneysel Ve Teorik Çalışmalar*”, Osmangazi Üni. Fen Bil. Ens., Doktora Tezi.
- Young, D., (2001), *Computational chemistry: a practical guide for applying techniques to real world problems*, Wiley-Interscience, New York, 408 p.
- Zalaoğlu Y., Ulgen A.T., Terzioğlu C., Yıldırım G.,(2010), “ Theoretical Study On The Characterization Of 6- Methyl 1,2,3,4-Tetrahydroquinoline Using Quantum Mechanical Calculation Methods”, SAÜ. Fen Bilimleri Dergisi, 14. Cilt, 2. Sayı, s. 66-76.
- Zeishen, W. , Huixia, W., Zhenhuan, Y. and Changhai, H. (1987), *XXV. International Conference on Coordination Chemistry*, Book of Abstracts, pp. 663.
- Ziessel, R. (2001), *Coord Chem Rev*; 216-217:195.