

ANKARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FOSFORESENT IŞIK YAYAN DİYODLARDA KULLANILAN İRİDİUM (III)
KOMPLEKSLERİNİN FOTOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KUANTUM
MEKANİKSEL HESAPLAMA YÖNTEMLERİ İLE İNCELENMESİ

İlker İÇEN

FİZİK MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

ANKARA
2024

Her hakkı saklıdır

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

FOSFORESENT IŞIK YAYAN DİYODLARDA KULLANILAN İRİDİUM (III) KOMPLEKSLERİNİN FOTOFİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN KUANTUM MEKANİKSEL HESAPLAMA YÖNTEMLERİ İLE İNCELENMESİ

İlker İÇEN

Ankara Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Mühendisliği Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Mehmet KABAK

Bu yüksek lisans tez çalışmasında; Organik Işık Yayan Diyotların (OLEDs-Organic Light-Emitting Diodes) tarihsel gelişimi, çalışma prensibi, sahip oldukları avantajlar, OLED tipleri, mevcut ve devam eden malzeme çalışmaları, OLED'ler için gelecek öngörülere ve geleneksel OLED'lere göre daha yüksek verimliliğe sahip Fosforescent Işık Yayan Diyotlarda kullanılan iridium (III) kompleks çalışmaları hakkında bilgi verilecektir. Ayrıca; verimlilik açısından büyük avantaj sağlayan Fosforescent Işık Yayan Diyotlardaki emisyon malzemenin tasarımı için teorik bir çalışma yapılması amaçlanmıştır. Bu çerçevede; kuantum mekaniksel hesaplama yöntemleri ile ilgili kısa bilgi verilerek daha önce deneysel ve kuramsal çalışması yapılan dfppy-Ir-dfppy ve dfppy-Ir-dfbpy yapısının fotofiziksel özellikleri Gaussian16 paket programı kullanılarak Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi ve Zamana Bağlı Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi yöntemi ile incelenmiştir.

Eylül 2024, 110 sayfa

Anahtar Kelimeler: Elektrolüminesans, Organik Işık Yayan Diyotlar, Fosforescent Işık Yayan Diyotlar, Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi, Zamana Bağlı Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi, Fotofiziksel Özellik, İridium (III) Kompleksleri, Gaussian16 Yazılımı

ABSTRACT

Master Thesis

INVESTIGATION OF PHOTOPHYSICAL PROPERTIES OF IRIDIUM (III) COMPLEXES USED IN PHOSPHORESENT LIGHT EMITTING DIODES USING QUANTUM MECHANICAL COMPUTATION METHODS

İlker İÇEN

Ankara University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics Engineering

Supervisor: Prof.Dr. Mehmet KABAK

In this thesis study; information on historical development of OLEDs, operating principle of OLED's, advantages they have, types of OLED, current and ongoing material studies, future predictions for OLEDs technologies and iridium (III) complex studies used in Phosphorescent Light Emitting Diodes with higher efficiency than conventional OLEDs will be given. Moreover; It is aimed to carry out a theoretical study for the design of the emitting material in Phosphorescent Light Emitting Diodes, which provide a great advantage in terms of efficiency. In this context; by giving brief information about quantum mechanical calculation methods, the photophysical properties of dfbpy-Ir-dfppy and dfppy-Ir-dfbpy structures, which have been previously studied experimentally and theoretically, were investigated by using the Gaussian 16 package program with Density Functional Theory and Time Dependent Density Functional Theory methods.

September 2024, 110 pages

Key Words : Electroluminescence, Organic Light-Emitting Diodes, Phosphorescent Organic Light EMitting Diodes, Density Functional Theory, Time Dependent Density Functional Theory, Photophysical Properties, Iridium (III) Complexes, Gaussian16 Software

ÖNSÖZ ve TEŞEKKÜR

Tez çalışmalarımı yönlendiren, araştırmalarımın her aşamasında bilgi, öneri ve yardımlarını esirgemeyen tez danışmanım Sayın Prof.Dr.Mehmet KABAK'a, yüksek lisans eğitimini aldığım Ankara Üniversitesi Fizik Mühendisliği Anabilim Dalının değerli öğretim görevlileri ve çalışanlarına, tez yazım aşamasında yardımlarını esirgemeyen Makine Yüksek Mühendisi Eyüp Kutay ÇAKIROĞLU'na, çalışmalarım süresince beni destekleyen eşim Hilal İÇEN'e, eğitim hayatım boyunca desteğini esirgemeyen değerli anneme ve aile üyelerine en derin duygularıyla teşekkür ederim.

Bu araştırmada yer alan tüm/kısmi nümerik hesaplamalar TÜBİTAK ULAKBİM, Yüksek Başarım ve Grid Hesaplama Merkezi'nde (TRUBA kaynaklarında) gerçekleştirilmiştir.

İlker İÇEN
Ankara, Eylül 2024

İÇİNDEKİLER

TEZ ONAY SAYFASI

ETİK.....	i
ÖZET.....	ii
ABSTRACT	iii
ÖNSÖZ ve TEŞEKKÜR.....	iv
SİMGELER DİZİNİ	vii
ŞEKİLLER DİZİNİ	ix
ÇİZELGELER DİZİNİ	xiv
1. GİRİŞ	1
1.1 Organik Malzemelerde Işıma Olayı	5
1.1.1 Floresans	6
1.1.2 Fosforesans.....	7
1.2 OLED’lerin Çalışma Prensipleri	7
1.3 OLED Teknolojisinin Tarihsel Gelişimi	15
1.4 OLED Katman Yapısı ve Kullanılan Malzemeler	18
1.4.1 Alt tabaka (Substrate).....	19
1.4.2 Elektrotlar	19
1.4.2.1 Anot	20
1.4.2.2 Katot	20
1.4.3 Emisyon katmanı (EML)	21
1.4.4 Deşik ve elektron iletim katmanı (HTL/ETL)	22
1.4.5 Deşik ve elektron enjeksiyon katmanları (HIL/EIL).....	22
1.4.6 Deşik ve elektron engelleme katmanı (HBL/EBL)	23
1.5 OLED Tipleri.....	25
1.6 Iridium (III) Kompleksleri ve Özellikleri	25
1.7 Hesaplamalı Kimya Yöntemleri.....	29
2. MATERYAL ve YÖNTEM.....	33
2.1 Materyal	36
2.2 Yöntem	39
3. ARAŞTIRMA BULGULARI.....	41
4. TARTIŞMA VE SONUÇ	102

4.1 Değerlendirme	102
4.1.1 Öneriler	104
KAYNAKLAR	107
ÖZGEÇMİŞ.....	110



SİMGELER DİZİNİ

Alq3	Tris-(8-hidroksikuinolato)alüminyum
Ar	Argon
ν	Frekans
λ	Dalgaboyu
nm	Nanometre
Ir(III)	İridium Kompleks
PPV	Poli(fenilenvinilen)
s	Saniye
S	Singlet
T	Triplet
UV-VİS	Ultraviolet-visible
eV	Elektron volt
V	Volt
Cd/m ²	Kandela/metrekaare
lm/W	watt başına lümen

Kısaltmalar

Ar-Ge	Araştırma Geliştirme
B3LYP	Becke-3-Parametrelili-Lee-Yang-Parr
CCDC	The Cambridge Crystallographic Data Centre
DFT	Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (Density Functional Theory)
EBL	Elektron Engelleyici Katman (Electron Blocking Layer)
EIL	Elektron Enjeksiyon Katmanı (Electron Injection Layer)
EL	Elektrolüminesans
EML	Emisyon Katmanı (Emissive Layer)
EQE	Dış Kuantum Verimi (External Quantum Efficiency)

ETL	Elektron İletim Katmanı (Electron Transport Layer)
HBL	Deşik Engelleyici Katman (Hole Blocking Layer)
HIL	Deşik Enjeksiyon Katmanı (Hole Injection Layer)
HOMO	Highest Occupied Molecular Orbital (En yüksek dolu moleküler orbital)
HTL	Deşik İletim Tabakası (Hole Transport Layer)
IC	İç Dönüşüm (Internal Conversion)
IQE	İç Kuantum Verimi (Internal Quantum Efficiency)
ISC	Sistemler Arası Geçiş (Intersystem Crossing)
ITO	İndiyum katkılı kalay oksit (Indium tin oxide)
LCD	Sıvı Kristal Ekran (Liquid Crystal Display)
LED	Işık Yayan Diyot (Light-Emitting Diode)
LUMO	Lowest Unoccupied Molecular Orbital (En düşük dolu olmayan moleküler orbital)
MD	Moleküler Dinamik (Molecular Dynamics)
MM	Moleküler Mekanik (Molecular Mechanic)
OFET	Organik Alan Etkili Transistör (Organic Field Effect Transistor)
OLED	Organik Işık Yayan Diyot (Organic Light-Emitting Diodes)
PHOLED	Fosforesent Işık Yayan Diyot (Phosphorescent Organic Light Emitting Diode)
PL	Fotoluminesans (Photoluminescence)
PLQY	Fotoluminesans Kuantum Verimi (Photoluminescence Quantum Yield)
TADF	Termal Olarak Etkinleştirilen Gecikmeli Floresans (Thermally Activated Delayed Fluorescence)
TDDFT	Zamana Bağlı Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (Time Dependent Density Functional Theory)
WOLED	Beyaz Işık Yayan Organik Diyot (White Organic Light-Emitting Diode)

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1.1 OLED uygulama alanları	1
Şekil 1.2 WOLED panel resimleri	2
Şekil 1.3 Temel OLED aygıt yapısı	3
Şekil 1.4 İlk OLED teknolojisi a) Ching W. Tang ve Steve VanSlyke b) Aygıt mimarisi	4
Şekil 1.5 Alq3 ve diamin moleküler yapısı	4
Şekil 1.6 PPV Polimerinin kimyasal yapısı	4
Şekil 1.7 Jablonski diyagramı	5
Şekil 1.8 Temel OLED yapısı	8
Şekil 1.9 Temel OLED yapısı	8
Şekil 1.10 Eksiton oluşumu (Nazlı 2023)	9
Şekil 1.11 Çok katmanlı OLED cihazlarda gerçekleştirilen EL işlemi	10
Şekil 1.12. a) OLED, b) Fosforesans OLED malzemeler (www.bloomtechz.com)	10
Şekil 1.13 OLED Singlet ve Triplet durumları	12
Şekil 1.14 1'inci, 2'nci ve 3'üncü Nesil OLED'lerin çalışma prensibi	14
Şekil 1.15 a) Tek (Single) katmanlı b) Çok katmanlı OLED'in yapısı.....	18
Şekil 1.16 OLED aygıt yapısının gelişimi	18
Şekil 1.17 a) Çok katmanlı OLED yapı örneği b) OLED üretim akış diyagramı c) İmalat akışı.....	24
Şekil 1.18 OLED'lerin farklı tipleri	25
Şekil 1.19 a) İridyum elementi.....	26
b) İridyum elementinin periyodik tabloda yeri (turchemsoc.org).....	26
Şekil 1.20 a) Homoleptik Ir(III) Kompleksi b) Heteroleptik Ir(III) Kompleksi	27
Şekil 1.21 a) Çalışmalarda Kullanılan Ana Ligandlar (1-10)	28
b) Yardımcı Ligandlar (11-12).....	28
Şekil 1.22 a.Hesaplamalı kuantum kimya yöntemleri b.Kuantum kimya uygulama alanları.....	32
Şekil 2.1 Flrpic.....	33
Şekil 2.2 (dfpysipy)2Ir(mpvc).....	33
Şekil 2.3 Ir(dmp)3	34
Şekil 2.4 Ir(mpim)3	34
Şekil 2.5 Ir(fdpt)3.....	35
Şekil 2.6 mer-Ir1	35
Şekil 2.7 dfbpy-Ir-dfppy ve dfppy-Ir-dfbpy sentezi.....	36

Şekil 2.8 dfbpy-Ir-dfppy (CCDC Nu.: 2243326) kimyasal diyagramı	37
Şekil 2.9 dfbpy-Ir-dfppy (CCDC Nu.: 2243324) kimyasal diyagramı	37
Şekil 3.1 dfbpy-Ir-dfppy ve optimize yapısı	41
Şekil 3.2 dfbpy-Ir-dfppy ve optimize yapısı	42
Şekil 3.3 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (çözelti olmayan ortam)	45
Şekil 3.4 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (çözelti olmayan ortam)	45
Şekil 3.5 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde).....	46
Şekil 3.6 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde).....	46
Şekil 3.7 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde).....	47
Şekil 3.8 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde)	47
Şekil 3.9 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde)	48
Şekil 3.10 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde).....	48
Şekil 3.11 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği.....	51
Şekil 3.12 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği.....	52
Şekil 3.13 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde).....	52
Şekil 3.14 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde).....	53
Şekil 3.15 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde)	53
Şekil 3.16 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde)	54
Şekil 3.17 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde).....	54
Şekil 3.18 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde).....	55
Şekil 3.19 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (çözelti olmayan ortam)	59
Şekil 3.20 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (çözelti olmayan ortam)	59

Şekil 3.21 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde).....	60
Şekil 3.22 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde).....	60
Şekil 3.23 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde)	61
Şekil 3.24 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde)	61
Şekil 3.25 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde).....	62
Şekil 3.26 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde).....	62
Şekil 3.27 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği.....	66
Şekil 3.28 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği	66
Şekil 3.29 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde)	67
Şekil 3.30 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde)	67
Şekil 3.31 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde).....	68
Şekil 3.32 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde).....	68
Şekil 3.33 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde)	69
Şekil 3.34 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde)	69
Şekil 3.35 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği.....	72
Şekil 3.36 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği.....	72
Şekil 3.37 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (DCM Çözeltisi).....	73
Şekil 3.38 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (DCM Çözeltisi).....	73
Şekil 3.39 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Etanol Çözeltisi)	74
Şekil 3.40 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Etanol Çözeltisi)	74

Şekil 3.41 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Su Çözeltisi)	75
Şekil 3.42 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Su Çözeltisi)	75
Şekil 3.43 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği	78
Şekil 3.44 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği	78
Şekil 3.45 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (DCM Çözeltisi)	79
Şekil 3.46 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (DCM Çözeltisi)	79
Şekil 3.47 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Etanol Çözeltisi)	80
Şekil 3.48 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Etanol Çözeltisi)	80
Şekil 3.49 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Su Çözeltisi)	81
Şekil 3.50 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Su Çözeltisi)	81
Şekil 3.51 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (çözeltili olmayan ortam)	86
Şekil 3.52 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (çözeltili olmayan ortam)	86
Şekil 3.53 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde)	87
Şekil 3.54 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde)	87
Şekil 3.55 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde)	88
Şekil 3.56 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde)	88
Şekil 3.57 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde)	89
Şekil 3.58 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde)	89
Şekil 3.59 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği	94
Şekil 3.60 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği	94

Şekil 3.61 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde)	95
Şekil 3.62 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde)	95
Şekil 3.64 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde)	96
Şekil 3.65 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde)	97
Şekil 3.66 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde)	97
Şekil 3.67 dfbpy-Ir-dfppy UV-VİS grafiği	100
Şekil 3.68 dfppy-Ir-dfbpy UV-VİS grafiği	101
Şekil 4.1 Hesaplamalar sonucu bulunan renk değeri	103

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 1.1 OLED Teknolojisinin tarihsel gelişimi	17
Çizelge 3.1 dfbpy-Ir-dfppy yapısı bağ uzunluğu değerleri ile dört farklı ortamda B3LYP metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası	42
Çizelge 3.2 dfbpy-Ir-dfppy yapısı bağ uzunluğu değerleri ile dört farklı ortamda HF metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası	49
Çizelge 3.3 dfbpy-Ir-dfppy yapısı bağ açıları değerleri ile dört farklı ortamda B3LYP metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası	55
Çizelge 3.4 dfbpy-Ir-dfppy yapısı bağ açıları değerleri ile dört farklı ortamda HF metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası	63
Çizelge 3.5 dfppy-Ir-dfbpy yapısı bağ uzunluğu değerleri ile dört farklı ortamda B3LYP metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası	70
Çizelge 3.6 dfppy-Ir-dfbpy yapısı bağ uzunluğu değerleri ile dört farklı ortamda HF metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası	76
Çizelge 3.7 dfppy-Ir-dfbpy yapısı bağ açıları değerleri ile dört farklı ortamda B3LYP metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası	82
Çizelge 3.8 dfppy-Ir-dfbpy yapısı bağ açıları değerleri ile dört farklı ortamda HF metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası	90
Şekil 3.63 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltilsinde)	96
Çizelge 3.9 dfbpy-Ir-dfppy yapısının; 4 farklı baz seti ile hesaplanan bazı enerji seviyeleri arası geçişlere karşılık dalga boyları (λ)	98
Çizelge 3.10 dfbpy-Ir-dfppy yapısının; 4 farklı baz seti ile hesaplanan bazı enerji seviyeleri arası geçişlere karşılık dalga boyları (λ) (DCM Çözeltsi)	98
Çizelge 3.11 dfbpy-Ir-dfppy yapısının; 4 farklı baz seti ile hesaplanan bazı enerji seviyeleri arası geçişlere karşılık dalga boyları (λ) (Etanol Çözeltsi)	98
Çizelge 3.12 dfbpy-Ir-dfppy yapısının; 4 farklı baz seti ile hesaplanan bazı enerji seviyeleri arası geçişlere karşılık dalga boyları (λ) (Su Çözeltsi)	99
Çizelge 3.13 dfppy-Ir-dfbpy yapısının; 4 farklı baz seti ile hesaplanan bazı enerji seviyeleri arası geçişlere karşılık dalga boyları (λ)	99
Çizelge 3.14 dfppy-Ir-dfbpy yapısının; 4 farklı baz seti ile hesaplanan bazı enerji seviyeleri arası geçişlere karşılık dalga boyları (λ) (DCM Çözeltsi)	99

Çizelge 3.15 dfppy-Ir-dfbpy yapısının; 4 farklı baz seti ile hesaplanan bazı enerji seviyeleri arası geçişlere karşılık dalga boyları (λ) (Etanol Çözeltsi)	100
Çizelge 3.16 dfbpy-Ir-dfppy yapısının; 4 farklı baz seti ile hesaplanan bazı enerji eviyeleri arası geçişlere karşılık dalga boyları (λ) (Su Çözeltsi)	100
Şekil 3.17 dfbpy-Ir-dfppy ve dfppy-Ir-dfbpy emisyon dalga boyu.....	101



1. GİRİŞ

Organik bileşikli malzemeler karbon atomlarının birbirleri ile kovalent bağ ve diğer elementlerin atomlarıyla yaygın olarak hidrojen, oksijen veya azota bağlandığı herhangi bir kimyasal bileşiklerdir. Bu tür bileşikler kullanılarak yapılan ve ışık yayan diyotlara Organik Işık Yayan Diyotlar (OLED) adı verilir (Demir 2023). Basit anlamda OLED, elektrolüminesans olayına dayanan ve elektrik enerjisini ışık enerjisine dönüştüren bir aygıttır. (Sahu ve Soni 2022) OLED aygıtları, kalınlıkları birkaç yüz nanometre arasında değişen ince yarıiletken filmlerden oluşan elektronik cihazlardır (Yeter 2020). Organik moleküller; sentezlenmesindeki esneklik, lüminesans ve iletkenlik gibi özellikleri kontrol edilebildiğinden OLED’lerde, OFET’lerde ve Fotovoltaik hücrelerde kullanılmaktadır. OLED’ler, LED’lerle benzer şekilde; elektrotlar arasında elektriksel bir potansiyel etkisinde kalan organik yarı iletkenler elektrotlardan yayılan elektron ve deşik yük taşıyıcılarının organik madde içinde bir şekilde birleşmeleriyle ortama ışık yayarlar (Demir 2014).

OLED teknolojileri, ekran ve aydınlatma teknolojilerinde kullanılmaktadır. OLED teknolojisi gündelik yaşamımızda TV, akıllı telefon, akıllı saat, dizüstü bilgisayarlar vb. cihazların bilgi ekranlarında ya da (katıhal) aydınlatma sistemlerinde yaygın bir şekilde kullanılmaktadır (Şekil 1.1).



Şekil 1.1 OLED uygulama alanları (<https://www.samsung.com/>)

OLED aygıtı, iki elektrot arasına sıkıştırılmış bazı organik maddelerden oluşan ve bu aygıt üzerinden elektriksel bir akım geçirildiğinde ışık yayan bir teknolojiye sahiptir (Gaspar ve Polikarpov 2015). OLED aygıtlar; ekranlar ya da aydınlatma sistemleri için yeterince parlak ışık yaymak için çok sayıda elektriksel yükü iletme için organik

molekülerin kullanılmasına dayanan emsalsiz bir teknolojidir. OLED’ler optoelektronik cihazlar sınıfındadırlar.

OLED kullanılarak yapılan cihazlar, geleneksel ekranlara göre; yüksek parlaklık ve keskinlik, yüksek ışık verimliliği, düşük elektrik güç tüketimi, hızlı tepki süresi, geniş görünürlük açısı, kütleli hafiflik gibi avantajlara sahiptir (Li ve Meng 2015) OLED ekranlar; esnek alt katmanlar dahil olmak üzere büyük alanlı alt katman üzerine üretilebilmekte ve neredeyse sınırsız renk seçeneği sunabilmektedir. Ayrıca; yeni teknolojilerin gelişmesinin aygıt üretim maliyetlerini düşürmesi ile beraber, OLED’ler sahip oldukları bu benzersiz özelliklerinin vaat ettiği teknolojik gelişim; birçok devlet kurumu, endüstri ve üniversitenin OLED teknolojileri üzerine araştırma yapmasına neden olmuştur. Tüketici elektroniği alanında pek çok endüstriyel elektronik firması OLED araştırma ve geliştirme çalışmalarına büyük yatırımlar yapmaktadır. Ayrıca; dünyada elektrik tüketiminde önemli bir paya sahip aydınlatma sistemleri için, elektrik tüketimini minimum seviyeye indirebilen aygıtların tasarımına yoğun biçimde çalışılmaktadır. Klasik ampüllere göre %95 daha az enerji ile aynı parlaklıkta ışık yayabilen LED ampuller son yıllarda yoğun olarak kullanılmaktadır. Bunun yanı sıra; ince ve esnek yüzeylerde üretilebilen aydınlatma amaçlı OLED teknolojilerine yönelik, kullanım açısından getireceği avantajlar göz önünde bulundurularak yoğun ARGE çalışmaları yürütülmektedir.

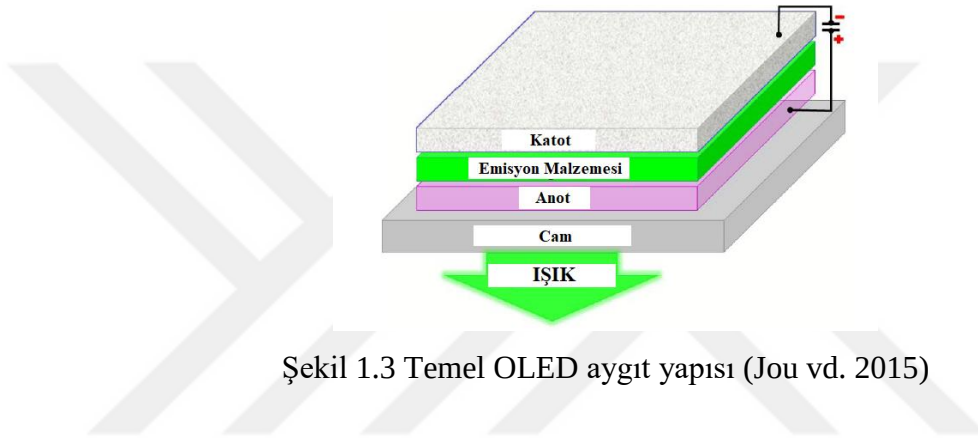
WOLED’lerin (Şekil 1.2) tungsten flamanlı lamba, inorganik LED ve floresan lambaya göre; yük taşıyıcılarının yayılması ile ışıma yapabilmelerini sağlayan geniş aydınlatma açısına sahip, düz alan aydınlatma ve tasarım alternatifleri gibi özellikleri mevcuttur (Öner 2015).



Şekil 1.2 WOLED panel resimleri (Öner 2015)

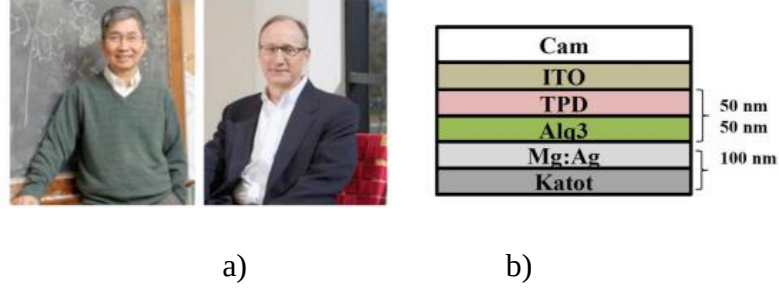
Bununla birlikte; özellikle, yüksek verimli ve yaydıkları ışığın kararlı olmaması, OLED malzemelerin eksikliği, OLED aygıtların çalışma ömürlerinin yetersizliği ve OLED ekranların büyük ölçekli üretim verimliliklerindeki teknik engeller gibi zorlukların aşılması için daha fazla disiplinlerarası çalışma yapılması gerekmektedir.

OLED’de iki elektrot arasına aktif materyal yerleştirilmiştir. Basit anlamda bir OLED, aktif organik materyallerin iki elektrot arasına yerleştirildiği bir yapıdan oluşmaktadır (Şekil 1.3). Anot ve katot arasına bir gerilim farkı uygulandığı zaman emisyon malzemesi aldığı enerjiyi ışık olarak yayımlar. Bu olay elektrolüminesans (EL) olarak adlandırılır.



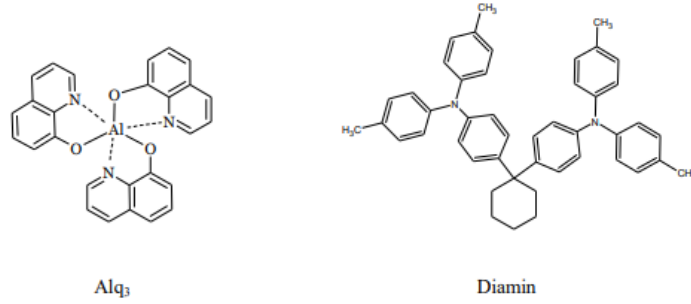
Elektrolüminesans (EL) olayı; Pope ve grubu tarafından ilk olarak 1963 yılında gözlemlenmiştir (Pope 1963). Araştırmacılar, oldukça kalın (10 mikrometre-5mm) antresen tabakasına 400 V gibi yüksek elektriksel gerilim uyguladıklarında elektrolüminesans olayını gözlemlemişlerdi. Antresen tabakasına bu kadar yüksek elektriksel gerilimin uygulanmasının nedeni, organik malzemelerin elektriksel iletkenliklerinin düşük olmasıydı. Sonraki yıllarda EL çalışmaları tek kristaller malzemelerden organik ince film malzemelerine doğru evrilmiş ve kullanışlı hale gelmiştir.

Organik elektronik teknolojisindeki önemli kilometre taşlarından biri, araştırmacıların (Tang, C.W. ve VanSlyke, S. 1987) 1987 yılında ilk küçük organik molekül OLED cihazını geliştirilmesidir (Şekil 1.4).



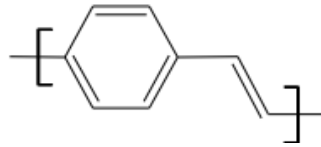
Şekil 1.4 İlk OLED teknolojisi a) Ching W. Tang ve Steve VanSlyke b) Aygıt mimarisi (Nazlı 2023)

Tang ve Steve Van Slyke bu çalışmalarında; vakum ortamında buharlaştırma yöntemi ile organik molekülleri alttaşlar üzerine kaplayarak iki tabakalı OLED geliştirdiklerini belirtmişlerdir. Bu aygıtta; HTL malzemesi olarak diamin, elektron iletim ve emisyon katmanı malzemesi olarak Alq₃ kullanılmıştır. (Şekil 1.5). Bahse konu aygıt için; verim 1.5 lm/W, çalışma gerilimi yaklaşık olarak 10 V ve parlaklık 1000 cd/m² 'nin üzerinde olduğu rapor edilmiştir.



Şekil 1.5 Alq₃ ve diamin moleküler yapısı (Usluer 2010)

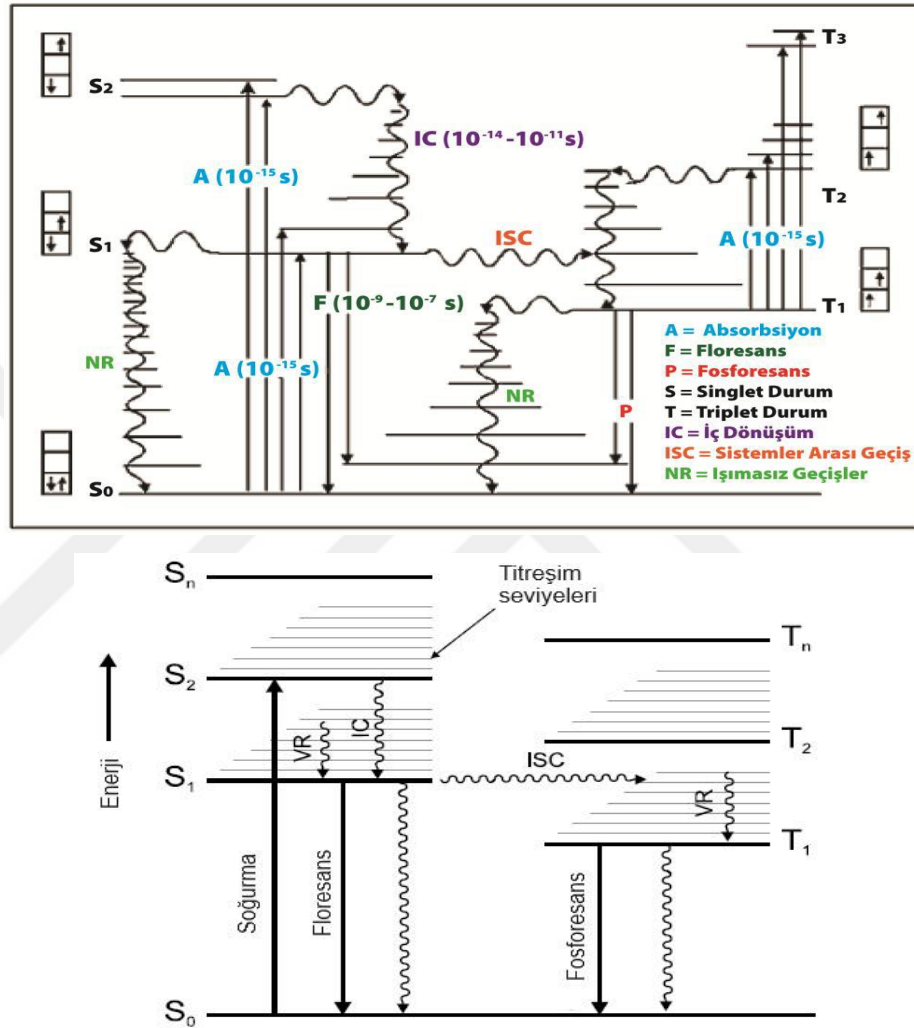
Burroughs ve grubu tarafından ilk polimer LED 1990 yılında raporlandırılmıştır. Bahse konu cihaz için; lüminesans malzemesi olarak poli(p-fenilen vinilen) (PPV) polimeri (Şekil 1.6) kullanılmıştır.



Şekil 1.6 PPV Polimerinin kimyasal yapısı (Usluer 2010)

1.1 Organik Malzemelerde Işıma Olayı

Işıma olayı, floresans ve fosforesans ışıma olarak ikiye ayrılır. Organik malzemelerde enerji seviyeleri, bunlar arasında muhtemel geçişleri ve meydana gelen ışıma olaylarını Jablonski Diyagramı (Şekil 1.7) ile açıklamak mümkündür.



Şekil 1.7 Jablonski diyagramı (Havare 2011)

Atomun enerji açısından S_0 temel halinden uyarılan bir elektronu, yeterli enerjiyi soğurduysa, S_1 veya daha yüksek enerji seviyelerine geçebilir. Uyarılan elektron, bu enerji seviyelerinden S_0 kararlı enerjili hale gelmek, kararlı olduğu temel enerji haline dönmek ister. Bu olası geçişler; S_1 enerji seviyesinden S_0 temel haline geçişe floresans yani uyarılma ile ışık saçılması yaparak veya elektron S_1 singlet durumundan T_1 triplet durumuna geçer ve oradan da S_0 temel enerji seviyesine fosforesans ışıma yaparak olur.

Bir polimer veya organik yarıiletken dış elektriksel alan uygulandığında, molekülün HOMO enerji düzeyindeki bir elektronu LUMO enerji düzeyine uyarılır/geçer. Bu durumda, enerji kazanan elektron bir üst enerji seviyesine uyarılmış olur; fakat LUMO enerji düzeyindeki elektron enerjice kararsız olduğu için HOMO enerji seviyesine geri dönmek ister.

Organik bir yarıiletkenin optik ya da elektrikle uyarımı sonucunda o ana kadar birbirlerine Coulomb kuvveti ile bağlı olan elektron ve deşik çiftini (eksiton) ortaya çıkarır. Bunu bir yarıiletken uygulanan elektriksel gerilim ile değerlik bandındaki elektronun iletkenlik bandına çıkarken geride bıraktığı pozitif yüklü deşik şeklinde kabul edebiliriz. Yarıiletkenin iletkenlik bandındaki elektron ve değerlik bandında kalan deşik uygulanan dış elektriksel kuvvete göre hareket ederler. Molekülde ise uyarılmış bir elektron iletkenlik bandına yani LUMO enerji seviyesine geçerken HOMO enerji seviyesinde bir deşik bırakır. Molekül enerji açısından kararlı duruma geçebilmesi için (ideal durumda) LUMO enerji seviyesine uyarılmış her elektronun kararlı olacağı HOMO enerji seviyesine düşerek oradaki bir deşigi doldurması beklenir. Böylece; LUMO enerji seviyesindeki elektronlar ve HOMO enerji seviyesindeki (yani değerlik bandındaki) deşiklerle birleşirken ortama ışık salınımı yaparlar. Maksimum veya değişik renklerde ışık salınımları sağlayabilmek için çoklu organik ve anorganik katmanlar kullanılarak OLED'in iş fonksiyonunu (work function) veya Fermi enerji seviyelerini birbirlerine yakın tutulmaya çalışılır.

1.1.1 Floresans

Molekül sistemindeki elektronların titreşim enerji seviyeleri arasındaki geçişler çok kısa sürelidir ($\sim 10^{-12}$ s). Uyarılmış bir molekülde farklı enerji seviyelerinde olan elektronlar taban durum enerji hallerine dönmek isterler. Bu taban durum, moleküldeki en düşük titreşim enerjise sahip enerji düzeyidir. Bir moleküldeki floresans singlet eksitonunun ömrü genelde 10^{-9} - 10^{-6} s aralığında değişmektedir. Organik yarıiletken malzemelerde, elektriksel bir uyarılma sonucunda her üç triplet eksitona karşı 1 adet singlet eksiton olduğu literatürde ifade edilmektedir. Temel enerji hali seviyesinde elektronun spin simetrisini koruması ve bu durumu sadece singlet eksitonların karşılayabildiği için sadece floresans olayı meydana gelir (Şekil 1.7).

1.1.2 Fosforesans

Singlet ve Triplet arasındaki geçişler genelde spin yasaklıdır. Bununla birlikte; molekül ağır atom içeriyorsa (Pt, Ir, Ru vb.), bu atom spin-yörünge eşleşmesi (SOC) neden olarak tekli (singlet) enerji seviyesinden üçlü (triplet) seviyesine olan sistemler arası geçiş (ISC) kolaylaşır. Organometalik moleküllerde (ağır atom içeren) ISC frekansı yaklaşık 10^{12} - 10^{13} s⁻¹ mertebesinde. Bundan dolayı; ağır atom içeren organometalik moleküllerin, verimli bir şekilde fosforesans (triplet ışıması) yapma imkanları ortaya çıkar (Şekil 1.7).

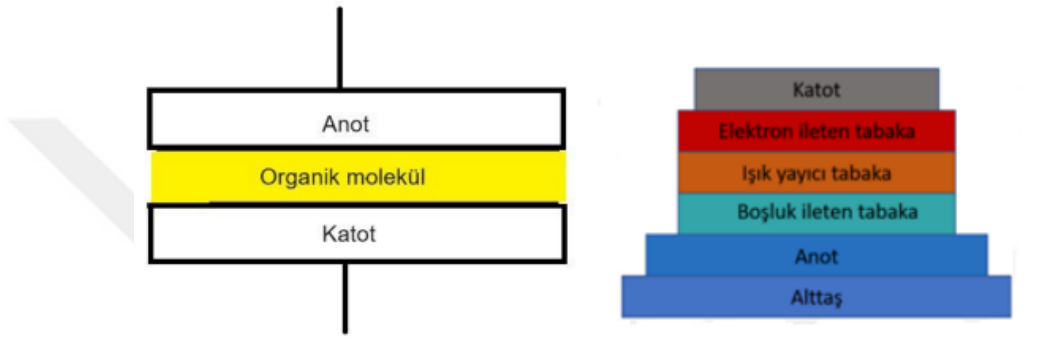
1.2 OLED'lerin Çalışma Prensibi

Organik moleküllerden oluşan malzemelerde ışık yayma olayını gerçekleştirebilmek için; organik malzemenin elektronlarının uygun enerjilerle uyarılması gerekmektedir. Bir molekül, yeterli miktarda bir enerji ile uyarıldığında (enerji soğurduğunda-absorption) molekül yörüngelerindeki elektronların bir kısmı uyarılarak kararlı oldukları enerjilerin üstündeki enerji seviyelerine çıkmış olurlar. Molekülden de kopmayan fakat uyarılmış elektronlar, kararlı hale kavuşacağı temel enerji seviyesine dönerken molekülün soğurduğu enerjiyi farklı yollarla (ışık emisyonu, ısı gibi) geri verir. Işık ışıması olan floresans ışıması; uyarılan bir elektronun singlet enerji durumundan temel enerji durumuna geri dönüşü esnasında oluşur. Spince izinli olan bu geçiş çok hızlı bir şekilde meydana gelir (10^{-5} - 10^{-8} s). Uyarılan bir elektronun molekülün enerji seviyeleri arasında olan bir seviyeden yani triplet enerji düzeyinden temel enerji düzeyine dönerken fosforesans ışık ışıması yapabilir. Spince yasaklı olan bu geçiş singlet geçişe göre genellikle daha yavaştır (10^{-4} - saniye mertebesinde). Uyarılan elektron, soğurduğu bu enerjiyi iç dönüşüm veya sistem içi geçişle ısı şeklinde dışarıya salabilir.

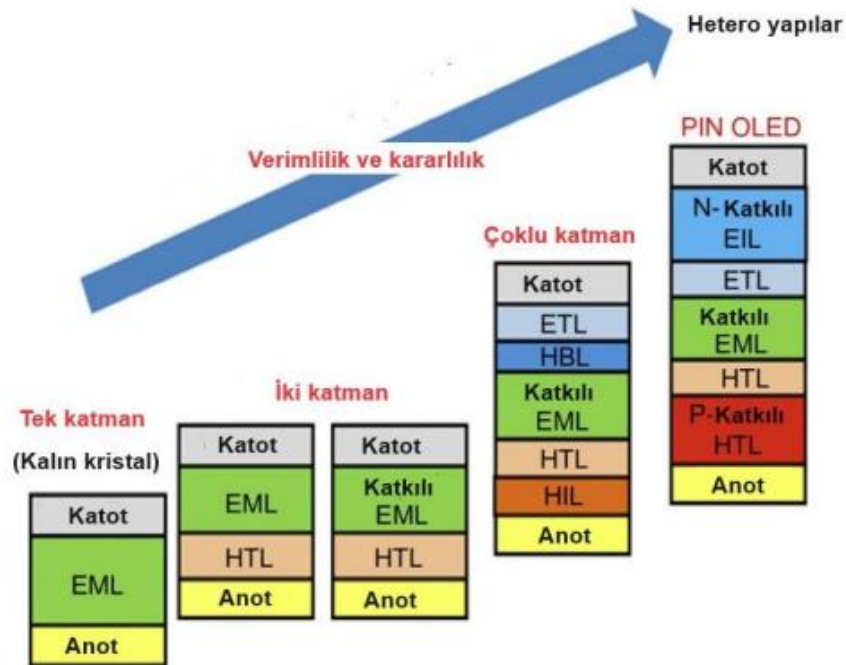
OLED cihazlarda yayımlanan ışığın özelliği; katmanlarda kullanılan malzemelerin özelliklerine (kimyasal ve fiziksel) bağlıdır

Bir OLED aygıtının temel yapısı, Şekil 1.8'de gösterildiği gibi anot ve katotun yani iki elektrodun arasına organik bir katman yerleştirilerek oluşturulur.

Anot ve katot arasına bir elektrik alan uygulandığında, deşik taşıyıcı katman (HTL) ve elektron taşıyıcı katman (ETL) arasında arayüz veya ara bölge oluşur. Böylece, bu ara bölgede elektron-deşik eşleşmesi meydana gelir ve bu olay ışık yayılmasına neden olur. Ayrıca; deşik-elektron bağlantı ara yüzü oluşturabilmek için HTL ve ETL arasına ışık yayan organik bir katman yerleştirilebilir. Deşiklerin ve elektronların hareket/iletimi sistemin diğer elemanlarından bağımsız olarak iyileştirilebildiğinden deşik ve elektron akımı dengelenebilir. Arayüzden yayılacak olan ışığın rengi, farklı organik malzemeler kullanılarak değişik renkte ışık türleri elde edilebilir (Şekil 1.9).

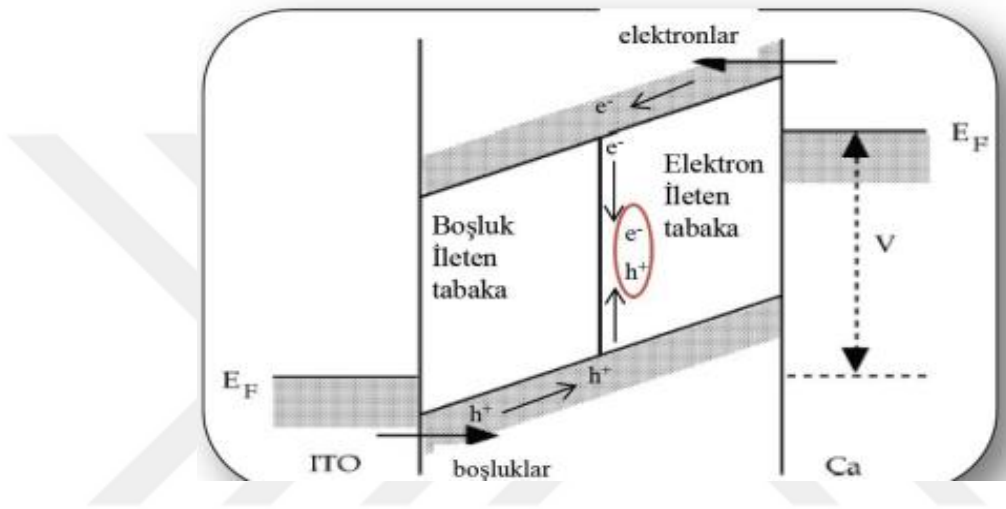


Şekil 1.8 Temel OLED yapısı (Nazlı 2023)



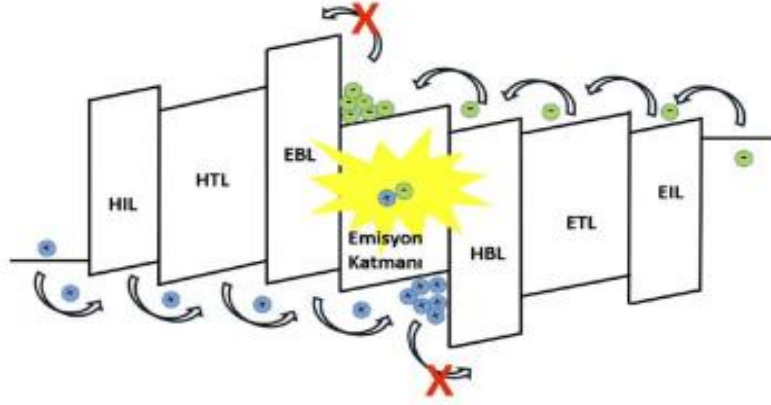
Şekil 1.9 Temel OLED yapısı (Nazlı 2023)

Anot ve katot arasına elektriksel bir potansiyel farkı uygulanarak bir elektrik alan oluşturulduğunda, katottan ayrılan elektronlar ETL'nin enerji olarak en düşük doldurulmamış molekül orbitallerine (LUMO), anottan ayrılan deşikler ise HTL'nin enerji olarak en dolu molekül orbitallerine (HOMO) doğru akın ederler. Elektrik alanın etkisi ile; deşikler HTL'ye, elektronları ETL'ye doğru hareket ettirir. Bu hareketlenme sonucunda; ışık yayan katman olarak da bilinen HTL/ETL ara yüzünde, elektronlar ve deşikler birleşerek eksitonları oluştururlar. Coulomb etkisiyle uyarılma kaynaklı olan lüminesans olayı, anot ve alttaştan salınmaktadır (Şekil 1.10).



Şekil 1.10 Eksiton oluşumu (Nazlı 2023)

Etkin ve verimli bir OLED aygıt tasarımı için elektron-deşik çiftlerinin kontrolü önem arz etmektedir. OLED'lerde, organik katot arayüzündeki elektron enjeksiyonuna karşı yüksek bariyer (çoğu molekülün hareketlilik farklılıklarından dolayı), rekombinasyon bölgesini daha düşük hareketliliğe sahip taşıyıcılara kaydırır. Bu nedenle oluşan ekstra deşikler, henüz LUMO enerji düzeyine ulaşmamış elektronlarla organik malzeme ile katot arasındaki arayüzünde birleşerek bozunmakta ve cihaz veriminde önemli bir düşüşe neden olmaktadır. Yüksek hareket kabiliyetine sahip taşıyıcılar, yük taşıma ve engelleme katmanları kullanılarak ışık yayan katmanla sınırlandırılabilir (Şekil 1.11). Bu şekilde bir tasarım ile OLED'lerin etkinliği önemli derecede iyileştirilebilir.



Şekil 1.11 Çok katmanlı OLED cihazlarda gerçekleştirilen EL işlemi (Nazlı 2023)

Birbirinden farklı kimyasal ve fiziksel özellikleri olan organik malzemeler ince film tabakası şeklinde cam veya esnek plastik yüzeyler üzerine belirli aşamalardan geçirilerek OLED'ler hazırlanır. OLED aygıt üzerinden elektriksel bir akım geçirildiğinde, OLED ortama ışık yayar (Şekil 1.12 a)). OLED'i oluşturan katman yığını, çok ince ve esnek ve/veya şeffaf malzemeleri de içerecek şekilde birçok varyasyona sahip olabilir. Kullanılan organik malzemeler, polimer veya küçük moleküller veya inorganik bileşenler içerebilir (Şekil 1.12 b)). Elektrotlar metallardan, metal oksitlerden, karbon nanomalzemelerden veya diğer türlerden oluşabilir ancak; ışığın yayılması için bir elektrotun şeffaf olması gerekmektedir. OLED'ler; cam, metal folyo veya polimer tabakalar üzerinde üretilebilir. OLED'ler tek renkli ışık, beyaz ışık ve hatta ayarlanabilir renkler yayacak şekilde tasarlanabilir.



a)



b)

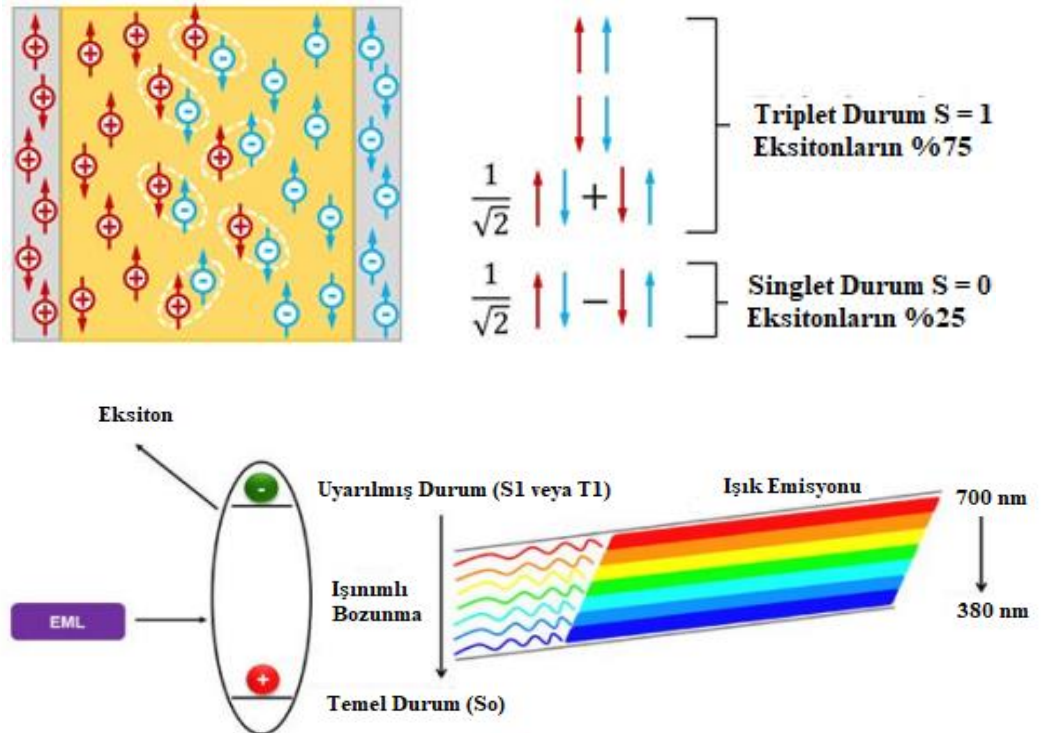
Şekil 1.12. a) OLED, b) Fosforesans OLED malzemeler (www.bloomtechz.com)

OLED aygıtlar; ekran ya da aydınlatma uygulamalarında yeterince parlak ışık yaymak için, büyük miktarlarda elektrik yükü iletmek amacıyla organik malzeme kullanımını esas alan yeni bir teknolojidir. Işık yayan cihazlarda organik lüminesansın başarılı bir şekilde oluşturulabilmesi için, elektrotlardan organik katmanlara dengeli elektriksel yük hareketinin sağlanması için organik malzemelerin yüksek elektriksel direncini yenen malzeme ve aygıtlar kullanılmalıdır. Bu özelliklerin sağlanabileceği ifade eden ilk çalışma, C. W. Tang ve S. VanSlyke tarafından hazırlanan ve ince film heteroyapısının (yığılmış ince filmler) kullanılmasından bahseden bir makaledir. Heteroyapıya sahip bir OLED'de; deşikler ve elektronlar katot ve anot elektrotlarından (genellikle inorganik) organik katmanlara doğru yayılırlar. Deşik ve elektronlar daha sonra ışık yayılımının yapılacağı emisyon katmanına (EML) elektriksel kuvvetler aracılığı ile taşınırlar. Deşik ve elektronlar, sistemin elektronik olarak temel duruma geçmesini sağlarken ortama da foton yayınlayan eksitonlar oluştururlar. Bu ışık emisyonu, ışık yayımlayıcı moleküle bağlı olarak floresans ya da fosforesans olayı ile gerçekleşebilir. Tang ve VanSlyke tarafından geliştirilen OLED cihazında, tamamen ışık yayımlayıcı molekülden oluşan bir EML kullanılmıştı. 1990'ların sonlarında, OLED verimliliğinde belirgin bir artış sağlayan ışık yayımlayıcı yeni katkı maddeleri ortaya çıktı. Kısa bir süre sonra; ince film heteroyapı bazlı OLED'lerin piyasaya sürülmesiyle uygun bir ana yapıya/matrise katkılı ışık yayıcı moleküllerden oluşan iki bileşenli EML'ler ortaya çıktı ve bu da cihaz verimliliğinde büyük bir artışa yol açmıştır. İki bileşenli EML'lerin yüksek verimli olmaları, bir EML'de artan yüklerin birleşmesi ve eksiton olayına gelen sınırlamanın sonucu olmuştur. Üçlü (triplet) eksitonların verimli bir şekilde toplanması, hem tekli (singlet) hem de üçlü yayımlayıcı rekombinasyona yol açabilecek bir fosforesan katkı maddesini gerektirir. Bozunmayı azaltmak ve ışımsal olmayan rekombinasyona göre verimli ışımsal rekombinasyonu sağlamak için, fosforesan katkı maddesinin mikrosaniye zaman ölçeğinde ışımsal ömrüne sahip olması gerekir. Günümüzde yapılan çalışmalarda hem yüksek fosforesans verimliliğine hem de mikrosaniye süreli bir ışımsal ömrüne ulaşmanın bilinen tek yolunun; spin-yörünge eşleşmesi singlet ve triplet durumlar arasında sistemler arası geçişi verimli bir şekilde destekleyen katkı maddesine ağır bir metal atomu eklemektir. Bu nedenle, en verimli OLED'ler özellikle iridium gibi metal atomu içermektedir. EML malzemesinin HOMO ve LUMO enerji seviyeleri aralığı ortama yayılan ışığın rengini belirler. Eksiton oluşumu; elektronik özellik, organik yapı ve HOMO-LUMO seviyesi gibi ışık yayımlayıcıların içsel faktörlerine bağlı olacaktır.

Uyarılmış durumdaki (S_1 veya T_1) elektronun temel enerji durumuna (S_0) foton salarak veya ışımsal bozunması ile eksitonun rekombinasyonu, Şekil 1.13’de gösterildiği gibi OLED görünür bölgede belirli bir dalga boyunda ışık emisyonu üretir.

Araştırmacılar, uygun HOMO-LUMO seviyelerine sahip malzemeleri dikkatli bir şekilde seçerek ve OLED yapısını optimum enerji seviyesi hizalaması için tasarlayarak, verimli ışık emisyonuna sahip OLED’ler oluşturabilir ve görüntülenmek istenen renkleri kontrol edebilir.

OLED’lerde, organik yarı iletken boyunca uygulanan elektriksel bir gerilim, elektron ve deşiklerin enjeksiyonuna neden olur. Organik moleküle enjekte olan elektronlar ve deşikler, rekombinasyon olmadan ve Şekil 1.13’de gösterilen eksiton olarak adlandırılan güçlü elektron-deşik çiftleri oluşturulmadan önce elektron ve deşikler yarı iletken boyunca hareket ederler. Elektron ve deşikler yarım tam sayı spinli fermiyonlardır ve iki spinin göreceli yönelimlerine bağlıdırlar. Eksiton; ya “Singlet Eksiton” olarak adlandırılan toplam 0 (sıfır) spin ($S=0$), ya da “Triplet Eksiton” olarak adlandırılan toplam 1 (bir) spin ($S=1$) sayısına sahiptir.



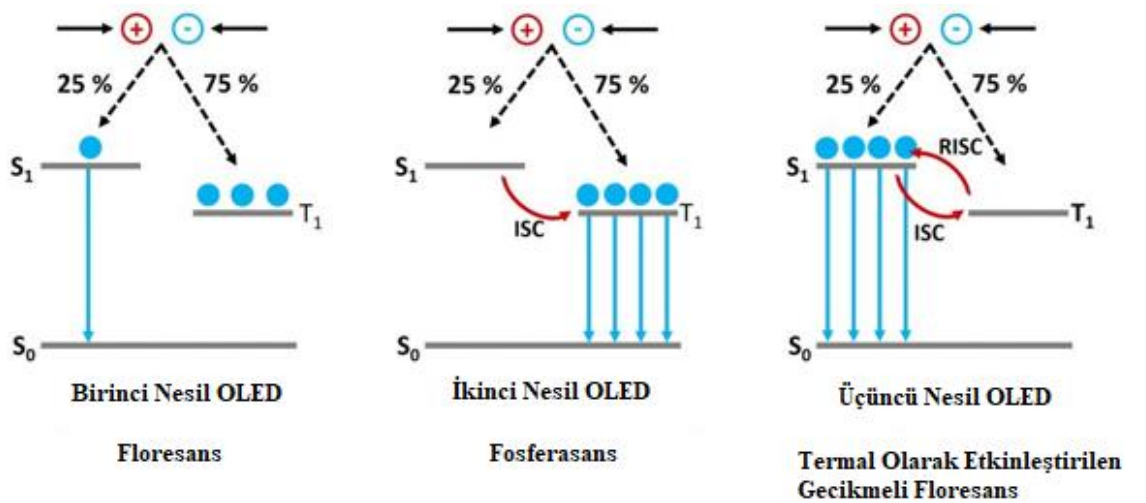
Şekil 1.13 OLED Singlet ve Triplet durumları (Dhali 2022)

Şekil 1.13'de görüldüğü üzere; $S = 1$ eksitonlarını oluşturan yarım tam sayı spinli 3 (üç) kombinasyon, $S = 0$ eksitonlarını oluşturan 1 (bir) kombinasyon vardır. Bu durum şu şekilde açıklanabilir; OLED'de oluşan eksitonların %75'i üçlü (triplet) durumlardan, %25'i tekli (singlet) durumlardan oluşur. Bu durumlar; verimli bir OLED'te elektrolüminesans oluşumunda en önemli problemlerden biridir. Üçlü durumdan (T_1) tekli taban duruma ışınım yapılarak bozunma (radiative decay) oluşur, açısal momentumun korunumu nedeniyle bu geçişler yasaklı kabul edilir. Aygıtta enjekte edilen elektron ve deşiklerin %75'i bu nedenle rekombinasyon oluşturmaz. OLED'in maksimum iç kuantum verimliliği %25 ile sınırlandırılır. Bu probleme ilk çözüm önerisi, 1'inci nesil OLED'lerde kullanılan saf organik bileşiklerden iridium gibi ağır metalleri içeren organik bileşiklerin kullanılması ile sağlanmıştır. OLED'lerde ağır metal elementi kullanımı, eksiton spin açısal momentumu ve orbital açısal momentumu arasında spin orbit çiftlenimini arttırmıştır. Bu yapılarıdaki spin-orbit çiftlenimi (SOC), yasaklı olmayan T_1 'den S_0 'a ışınlımlı geçişe neden olmakta ve T_1 durumu oluşunca ışık emisyonu yapılır. Ayrıca; SOC, S_1 ve T_1 enerji seviyeleri arasındaki sistemler arası geçişleri (ISC) teşvik eder ve bu da S_1 enerji seviyesi yerine T_1 enerji durumunu daha fazla doldurulmasına neden olur. OLED'ler bu mekanizmayı kullanırken; ikinci nesil OLED ya da PHOLED'ler iç kuantum verimliliğini %100'e yaklaştırır.

OLED ekranlarında kullanılan bir piksel, üç farklı renk (kırmızı, yeşil ve mavi-RGB) salan OLED'den oluşur. Ticari OLED ekranlarında kullanılan yeşil ve kırmızı renk yayımlayıcılar ikinci nesil fosforesent olayıyla ışık yayan malzemelerden yapılmıştır. Kararlı mavi fosforesent yayımlayıcı geliştirilmesi zor bir problemdir ve hala çalışılan bir konudur. Bu nedenle; ticari uygulamalarda, hala verimsiz 1'inci nesil floresans mavi yayımcılar kullanılmaktadır ve sonuç olarak mavi OLED'ler kırmızı ve yeşile göre daha fazla enerji harcamaktadır. Özellikle; batarya kullanım ömrünün kritik olduğu durumlarda, OLED aygıtının fazla enerji harcaması büyük bir sorun oluşturmaktadır. Bu nedenle, verimli bir mavi yayımlayıcıya büyük bir gereksinim vardır. Bu problemi umut veren bir çözüm, fosforesent ışık yayımlayıcılar yerine TADF olarak bilinen olayı gerçekleştiren floresans ışık yayımlayıcıların kullanılması olabilecektir. TADF kavramının ortaya çıkışı 1929 yıllarına dayanmasına rağmen, 2012 yılında Chihaya Adachi TDAF mekanizmasını fosforesans malzeme kullanmadan verimli OLED üretmek için kullanmıştır. Bu çalışmalardan sonra; TDAF geniş bir ilgi görmüş ve günümüzde

dünya genelinde birçok araştırma grubu tarafından üzerinde yoğun bir şekilde çalışılmaktadır. TDAF yayımlayıcıda, S_1 ve T_1 enerji seviyeleri arasında ISC geçiş izni verecek şekilde atomlar birbirlerine güçlü şekilde bağlıdır. Ayrıca; S_1 ve T_1 arasında enerji farkı (ΔE_{ST}) tipik organik moleküllerden daha düşük olacak şekilde moleküller tasarlanabilmektedir (Verimli TDAF'ler (ΔE_{ST}) 100meV daha düşük olmalıdır). Bu düşük enerji aralığı, T_1 enerji seviyesindeki eksitonların termal olarak aktive edildiği süreçte ise elektronlar S_1 enerji seviyelerine döndüğü görülmekte, yani tersine ISC (RISC) olayının oluşmasına neden olmaktadır. Elektronlar S_1 uyarılmış enerji durumuna geçtikten sonra floresans yoluyla S_0 temel enerji durumlarına geri dönebilirler. RISC zamana göre yavaş bir süreç olduğundan, üçlü enerji seviyesinde olan eksitonlardan gelen floresans, doğrudan S_1 durumunda oluşturulan eksitonlardan gelen floresanstan daha sonra ortaya çıkar. Bu nedenle üçlü seviyeden taban durumuna geçişler gecikmiş floresans olarak yani TADF adıyla isimlendirilir. TDAF mekanizması kullanılarak, OLED'lerde %100 iç kuantum verimliliği başarılabılır ve bu; kararlı ve yüksek verimli mavi ışık yayımlayıcısının oluşturulmasına imkân verebilir.

İstenilen verimde OLED aygıt imal edilebilmesi için; kullanılan organik bileşikler, tabaka kalınlıkları ve kullanılacak gerilim değerlerine bağlı olarak, kullanılacak katman sayısının belirlenmesi gerektirmektedir. Şekil 1.14'de 1, 2 ve 3.cü nesil OLED'ler gösterilmektedir.



Şekil 1.14 1'inci, 2'nci ve 3'üncü Nesil OLED'lerin çalışma prensibi
(<https://www.edinst.com>)

1.3 OLED Teknolojisinin Tarihsel Gelişimi

Teknolojinin gelişimine bağlı olarak ışığın elektriksel olarak üretimi 18'inci yüzyılın sonlarında akkor telli lambalar ile sağlanmıştır. 1960'lı yıllarda ise, inorganik yarıiletkenler ile üretilen diyotlar sahip oldukları elektrolüminesans özellikleri nedeniyle başlarda aydınlatma amaçlı olmasa bile bildirim ve uyarım amaçlı ışık yayılımı için kullanılmıştır. Günümüzde ışıma verimi artan inorganik LED teknoloji aydınlatma amaçlı tasarımlarda kullanılmaya başlanmıştır. İnorganik yarıiletken yapıdaki ürünlerden elde edilen diyotların imalatını müteakip organik yarıiletkenler ile de benzer özelliklerde diyotların yapılabileceği fikri ortaya çıkmıştır. OLED teknolojisi, LCD teknolojisine alternatif olarak ortaya çıkmıştır. OLED imalatı, ince film teknolojisine dayanmaktadır (Ongun 2005).

Bilim, teknoloji ve sanayi alanında birçok önemli uygulamaya sahip olan OLED (Organik Işık Yayan Diyot) aygıt teknolojileri; günümüzde fizikçilerin ve kimyacıların ilgilendiği başlıca bilimsel çalışma konuları arasında yer almaktadır.

Günümüzde; OLED'ler sahip oldukları düşük maliyet, üretim kolaylığı, parlaklık, hız, geniş görüntüleme açısı, düşük güç tüketimi ve yüksek kontrast oranı özellikleri nedeniyle; ışık yayan diyotlar (LED'ler) ve sıvı kristal ekran (LCD) aygıtlara oranla daha umut veren bir teknolojidir.

OLED çalışmalarının geçmişi, bu teknolojiadaki önemli atılımlar ve kilometre taşları ile birlikte 30 (otuz) yılı aşkın bir süreyi kapsamaktadır. Bu alanda yapılan bilimsel çalışmalarda, aygıtların verimliliğini geliştirmek en önemli motivasyonu oluşturmaktadır. 30 yılı aşan çalışmalar sonucunda; OLED endüstrisi hızla gelişmiştir. Bunun sonucu olarak; akademik ve endüstriyel alanda yoğun çalışmalar yürütülmektedir. Bu alanda ilerlemelere rağmen, OLED'lerle ilgili bazı iyileştirilmesi gereken problem sahaları halen bulunmaktadır.

Yüksek performanslı OLED'leri yapmanın zorluklarından biri; enerji dönüşümü için singlet ve triplet eksitonları tümüyle kullanmaya uygun elektriksel ve optik özelliklere sahip gelişmiş küçük molekül ve polimer emisyon malzemelerin tasarımı ve sentezidir (Zou vd. 2020). Ayrıca; yüklerin kullanımı, esas olarak iletim malzemesi ve aygıt mimarisi özellikleri ile belirlenen yük enjeksiyon sürecinden de etkilenir. Aynı zamanda, cihaz mimarisinin OLED'lerin çalışma voltajı ve parlaklık verimliliği üzerindeki eşzamanlı etkisi nedeniyle, uygun bir mimarinin tasarımı bir diğer büyük zorluktur. Bununla birlikte; çoklu ince film yapısına sahip tüm verimli OLED'lerin değişken aygıt mimarisine rağmen, üretilen fotonların büyük bir kısmı düz fonksiyonel filmler arasındaki kırılma indisi uyumsuzluğu nedeniyle aygıt içinde hapsolması OLED'lerin diğer bir dezavantajını ortaya çıkarır (Zou vd. 2020). Sonuçta, enerjinin yalnızca %20-30'luk kısmı aygıt yayınlanabilir ve bu da yüksek verimli OLED'lerin geliştirilmesini sınırlar. Bu doğrultuda; aygıttan yayılan ışığın verimli bir şekilde aygıttan çıkarılması yüksek verimli aygıtların geliştirilmesindeki ana zorluklardan biridir.

Bu amaç doğrultusunda; birçok organik molekül ve metal kompleks verimli ve faydalı OLED malzemesi olarak önerilmiştir.

Bu alanda yapılan önemli çalışmalar, gelişmeler ve değişiklikler yıllara göre aşağıda Çizelge 1.1'de verilmektedir.

OLED teknolojisindeki gelişmeler, ilerlemeler üç nesil olarak sınıflandırılmaktadır. 30 yılı aşkın bir süredir üzerinde araştırmalar yapılan/çalışılan OLED teknolojisi, kimyasal malzemeler alanındaki gelişmeler sayesinde çok ilerlemiştir. “Floresan ışık yayıcılar” birinci nesil olarak, “fosforesans ışık yayıcılar” ikinci nesil olarak ve ışık yayan TADF (termal olarak etkinleştirilen ve gecikmeli floresans ışımaya yapan) araştırmacılar tarafından üçüncü nesil olarak adlandırılmaktadır.

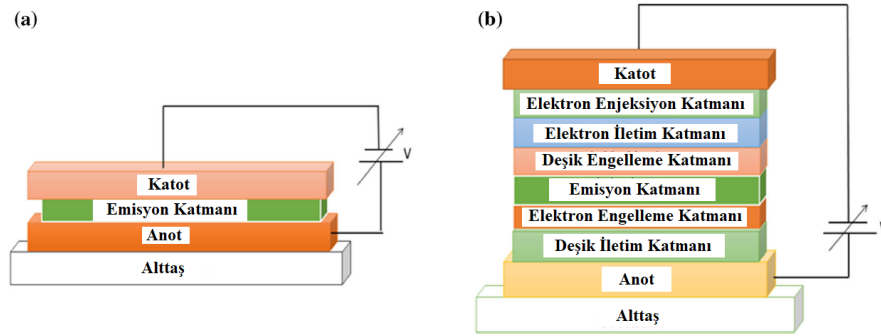
Çizelge 1.1 OLED Teknolojisinin tarihsel gelişimi

Dönem	Olay
1950	OLED teknolojisinin temelini oluşturan elektrolüminesans olayı gözlenmiştir. André Bernanose; havadaki akridin turuncusuna yüksek voltaj uygulayarak elektriğin organik maddenin parlamasına neden olduğunu keşfetmiştir.
1960	Martin Pope ve meslektaşları,deşik (+ yük)ve elektron (- yük) enjekte edildiği zaman oluşacak elektrot kontağı için gereken minimum enerjiyi tanımladılar. “Omega Dark Enjeksiyon Elektrodu” olarak adlandırılan husus tüm OLED'lerin geliştirilmesinin temelini atmıştır.
1963	1963 yılında Pope ve grubu; doğru akımın vakum altında bir antrasen kristalini aydınlattığını bulmuştur.
1987	Ching Tang and Steven Van Slyke tarafından düşük voltajda çalışabilen ilk OLED aygıtı üretilmiştir ve bu OLED teknolojisinin keşfi olarak tanımlanmıştır.
1990	Cambridge Üniversitesi Cavendish Laboratuvarında, daha kararlı ve uzun ömürlü OLED’lerin geliştirilmesinin yolunu açan, yeşil renk yayımlayan polimer OLED aygıt geliştirilmiştir.
1990’lar	İlk ticari OLED aygıtlar geliştirilmiş ve teknoloji, tüketici elektroniği endüstrisinin dikkatini çekmeye başlamıştır
1995	Yamagata Üniversitesinden J.Kido tarafından, arkadan aydınlatmalı ekranlar ve aydınlatma uygulaması OLED’lerin yolunu açan Beyaz OLED çalışmalarına öncülük edilmiştir.
1997	Pioneer şirketi tarafından küçük molekül OLED üretimi başlamıştır.
1998	OLED teknoloji tarihinde önemli bir kilometre taşı olan ilk OLED ekranlar piyasaya sürülmüştür.
2002	Kodak ve Sanyo teknoloji firmaları dünyanın ilk 2.4 inch aktif-matrisli tam renkli OLED ekranını tanıtmışlardır.
2007	İlk OLED TV XEL-1 Sony firması tarafından piyasaya sürülmüştür.
Günümüz	OLED teknolojileri cep telefonları TV ve giyilebilir aygıt gibi çok çeşitli aygıtlarda yaygın olarak kullanılmaktadır. Günümüzde, OLED çalışmaları verimlilik, ömür ve esneklik üzerine odaklanmıştır. Esneyebilir ve gerilebilir ekranları içeren dördüncü nesil OLED çalışmaları günümüzde araştırılmaktadır.

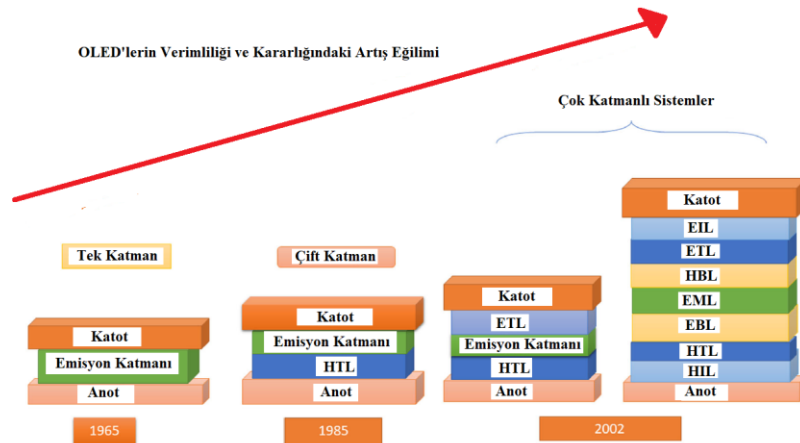
1.4 OLED Katman Yapısı ve Kullanılan Malzemeler

Organik elektrolimünesans olayı yaklaşık 50 yıldır bilinmektedir; fakat ilk verimli ince film OLED 1987 yılında Ching Tang ve Steven Van Slyke tarafından üretilmiştir. Tek katmanlı OLED'ler, daha basit tasarım ve üretimleri sebebiyle dikkat çekmiştir. Bununla birlikte; tek katmanlı aygıtlar, zayıf yük dengesi nedeniyle genellikle verimsizdirler. Sonuç olarak; tek katmanlı OLED'lerin ilgili bu sorunu ele almak adına çok katmanlı OLED'ler geliştirilmiştir. Günümüzdeki OLED'ler, emisyon katmanında yük taşıyıcıları arasında daha fazla denge yaratmak için iki elektrot arasına yerleştirilmiş birçok organik katman içerebilir. Tek katmanlı ve çok katmanlı OLED aygıt yapısı Şekil 1.15'de sunulmuştur.

OLED aygıt yapısı; aygıt verimliliğini artırmak için önemli bir rol oynamaktadır. Araştırmacılar yıllar boyunca, Şekil 1.16'da gösterildiği gibi, verimliliği ve kararlılığı artmış OLED yapılarını geliştirmeye çalışmışlardır. OLED gelişimi, görüleceği üzere kullanılan bileşenlere bağlıdır.



Şekil 1.15 a) Tek (Single) katmanlı b) Çok katmanlı OLED'in yapısı (Bauri vd. 2021)



Şekil 1.16 OLED aygıt yapısının gelişimi (Bauri vd. 2021)

OLED aygıtlar yapılarına göre dört kategoriye ayrılabilir.

- Tek Katmanlı (Single-layer) OLED
- Çift Katmanlı (Bilayer) OLED
- Üç Katmanlı (Three-layer) OLED
- Çok Katmanlı (Multilayer) OLED

İki elektrottan (anot-katot) oluşan deşik ve elektron hareketini sağlayan sadece bir aktif organik katmandan oluşan tek katmanlı OLED aygıtlar, verimlilik açısından ideal değildir. Çift katmanlı OLED'de, iki katman, örnek olarak deşik iletim katmanı (HTL) ve elektron iletim katmanı (ETL) aktif organik emisyon katmanı yerine yerleştirilir ve rekombinasyon mekanizması (deşik ve elektronların yrniden birleşmesi) bu katmanların arayüzünde olur. Üç katmanlı OLED'de HTL ve ETL arasında, bir tane daha ince organik katman vardır. Şekil 1.16'daki üç katmanlı organik kısım, tüm eksitonların toplandığı ve görünür bölgede foton olarak enerjinin ortama salındığı emisyon katmanı olarak kullanılır. En gelişmiş OLED aygıtlar, çok katmanlı OLED aygıtlarıdır. Çok katmanlı OLED aygıtlar; farklı fonksiyona sahip iki ilave katman HBL/EBL ve HIL/EIL karşılıklı olarak yerleştirilerek oluşturulur. OLED aygıtlarda kullanılan bileşen ve Şekil 1.16'da verilmektedir.

1.4.1 Alt tabaka (Substrate)

Katı (rigid) OLED aygıtlardan esnek OLED (katlanabilir ekranlar gibi) aygıtlara geçişte, alt katman diğer OLED bileşenlerinden daha önemli bir bileşen olmuştur. OLED'lerin esnek özellikleri; değişik organik malzemeler ve organik-inorganik gibi melez (polimer ve polimer yarı iletken) malzemelerin kullanımı ile sağlanmaktadır. Anot ve katot elektrotları da dahil olmak üzere tüm organik katmanlar alt tabaka üzerine istiflenir. Alttaş olarak cam (sert ve ultra ince esnek cam), metal folyo ve plastik folyo gibi malzemeler kullanılmaktadır.

1.4.2 Elektrotlar

OLED aygıtlarının temel parçaları olan yüksek elektriksel potansiyeldeki anot ve düşük potansiyeldeki katot elektrot olarak isimlendirilir. OLED aygıtının parlaklığı veya ortamı

aydınlatması (lümİnesansı) ve çalışma voltajı, anot ve katot malzemelerinin iş fonksiyonlarına bağılıdır.

1.4.2.1 Anot

OLED'deki anot, ışık emisyonu sürecini başlatmada kritik bir rol oynar. Anot, OLED aygıtlarda elektriksel olarak pozitif yüklü elektrottur. Anotun esas fonksiyonu, organik katmana deşik enjeksiyonu sağlamaktır. Anot, bağılı olduğı HTL'ye kıyasla yüksek bir iş fonksiyonuna sahip olarak bunu başarır. Bu, deşiklerin anottan HTL'ye akışını destekleyen enerjik bir gradyan yaratır. Anodu yüksek potansiyel enerjiye sahip bir tepe, HTL'yi ise daha düşük potansiyel enerjiye sahip bir vadi olarak düşünölebilir Deşikler, tıpkı yüksek iş fonksiyonlu anottan HTL'ye doğru hareket ettikleri gibi, doğal olarak yokuş aşağı yuvarlanma eğilimindedir. Anot özellikleri, OLED'e ne kadar verimli şekilde deşikleri enjekte edileceğini belirleyerek aygıt performansını etkiler. Anot, deşiklerin organik malzemeye geçişini sağlayan şeffaf yapıya sahip bir elektrottur. Anotta oluşturulan ince film yüzeyi düzgün ve büyük iş fonksiyonuna (ϕ_w) sahip olmalıdır. (örnek olarak; ITO malzemenin $\phi_w = 4.7$ eV) İndiyum katkılı kalay oksit (ITO), OLED aygıtlarında en çok kullanılan anot elektrodu malzemesidir. ITO, özellikle indiyum rezerv kıtlığı ve mekaniksel dayanım problemleri nedeniyle son zamanlarda ITO'nun yerine farklı malzeme seçenekler önerilmeye çalışılmaktadır.

1.4.2.2 Katot

OLED'deki katot, elektron enjeksiyon noktası görevi görerek ışık emisyonu sürecinde kritik bir rol oynar. Katot, OLED aygıtlarda negatif yüklü elektrottur. Temel fonksiyonu, aygıtın organik katmanına elektronları enjekte etmektir. Katot bu işlevini, bağılı olduğı ETL göre düşük bir iş fonksiyonuna sahip olarak gerçekleştirir. İş fonksiyonu, bir malzemedan bir elektronu çıkarmak için gereken minimum enerjiyi ifade eder. Katodu düşük enerji seviyesine sahip bir basamak olarak düşünölebilir. Bu, elektronların enerji bariyerini kolayca aşmasına ve ETL'ye daha yüksek bir enerji seviyesiyle enjekte edilmesine olanak tanır. Verimli elektron enjeksiyonu çok önemlidir, çünkü yeterli elektron olmadığında, emisyon katmandaki deşiklerle yeterince karşılaşılmayacak ve bu da ışık oluşumunu engellemeyecektir. Katottan çıkan elektronlar anoda doğru göç eder

ve emisyon katmanında deşikler ile birleşerek ışık emisyonuna neden olur. Katot materyalleri genel olarak; yüksek iletkenlik özellikli saf metal veya metal alaşımlarıdır. Katotların; düşük iş fonksiyonuna sahip olması ($\phi_w = 2.9-4.0$ eV), çalışma kararlılığı iyi olmalı, organik malzemelerle iyi kontak yapan metaller olması arzu edilir.

1.4.3 Emisyon katmanı (EML)

Elektron emisyonu katmanı, OLED aygıtlarda ışık yayınımindan sorumludur. Emisyon katmanı, HTL ile ETL arasında bulunur. Fosferesans ya da floresans ışıması olayı bu katmanlarda olur. Emisyon katmanı için, düşük molekül ağırlıklı az sayıda atomlardan oluşan moleküllerden veya molekül ağırlığı büyük olan polimerlerden yararlanılır. EML katmanı, elektronların ve deşiklerin bulunduğu yani yeniden birleştiği, ışığın yayılmasına yol açılan bölgedir. Elektronlar katottan organik katmana enjekte edilir ve HTL boyunca hareket ederler. Deşikler ise anottan ara bölgeye enjekte edilirler ve HTL boyunca ilerlerler. Bir elektron ve bir deşik EML'de bulunduğu yeniden birleşirler. Elektron ve deşğin rekombinasyonu sırasında ortaya çıkan enerji, foton yani ışık formundadır. Yayılan ışığın rengi, uyarılmış elektron ve elektronun terkettiği yerdeki deşik arasındaki enerji farkına ve EML malzemelerinin özelliklerine yakından bağlıdır. OLED'in en önemli katmanı ışık emisyonunun yapıldığı katmanıdır. Bu emisyon katmanı ışık emisyonunun rengi, kontrast yeni renk farklılıkların keskinliği ve harici verimliliği emisyon katmanının malzemelerine bağlıdır. Emisyon katmanının ışık üretiminin verimliliği (ne kadar enerjinin ışığa dönüştürüldüğü) büyük ölçüde EML malzemelerine bağlıdır. EML'de verimli rekombinasyon ve minimum enerji kaybı, yüksek performanslı OLED cihazlar için çok önemlidir. Tercihen, OLED'de tüm elektron ve deşik birleşiminin burada yani EML bölgesinde olması istenir. EML malzemesi, eksitonları verimli bir şekilde sınırlamalı ve optimum ışık çıkışı için bunların ışımsal rekombinasyonunu (ışığa dönüşüm) desteklemelidir. Bununla birlikte; EML'in kalınlığının da ışıma üzerinde bir rolü vardır. Çok ince bir EML, verimli eksiton oluşumuna ve rekombinasyona izin vermeyebilirken, çok kalın bir EML, katman içinde yayılan ışığın yeniden yayılmasının artmasına yol açabilir. EML malzemeleri, ışık emisyonunun rengini ve verimliliğini belirlemede önemli bir rol oynadığı literatür çalışmalarından ortaya çıkmaktadır.

1.4.4 Deşik ve elektron iletim katmanı (HTL/ETL)

Farklı malzemelerden yapılmış organik yarı iletkenlerde, elektron ve deşik mobilitesi farklıdır. OLED aygıtlarda, dengeli bir yük enjeksiyonuna ihtiyaç duyulur ve bu amaç doğrultusunda; elektron ve deşik mobilitesinin mümkün olduğunca birbirlerine yakın olması istenir. OLED’lerde iletim katmanının veya LUMO seviyesinin oluşturulmasının amacı, yük taşıyıcılarının emisyon katmanına taşınımını kolaylaştırmaktır. Bu katmanlar, tercihen, yüksek mobiliteye sahip olmalı ve deşikler için HOMO ve elektronlar için LUMO enerji seviyeleri, EML katmanının enerji seviyeleri ile eşleşebilmelidir. Tris(3-methylphenyl) phenylamino triphenylamine (m-MTDATA), 1,1-bis[(di-4-tolylamino)phenyl]-cyclohexane (TAPC), N, NO-diphenylbenzine (TPD) vb. malzemeler HTL’ye örnek malzemelerdir. Konjuge içsel polimer bazlı organik–inorganik (PPV/ZnO, PMMA/ZnO, PANI/GO/Mo2S, PANI/PPY/ZnO, vb.) nanokompozit ETL malzemesi olarak kullanılır.

1.4.5 Deşik ve elektron enjeksiyon katmanları (HIL/EIL)

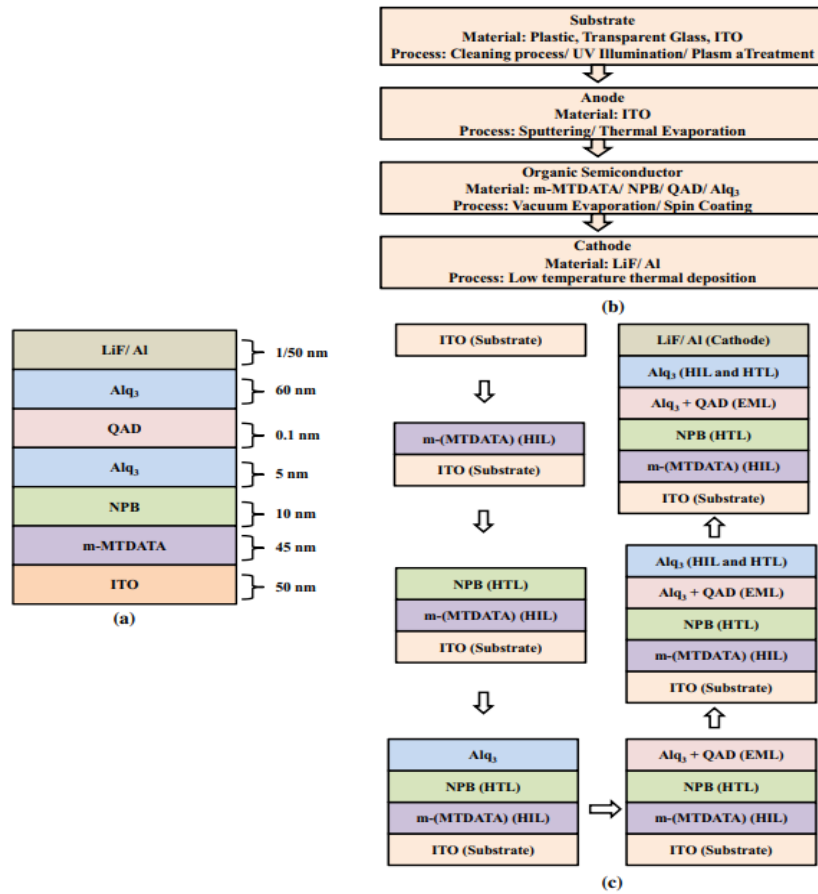
OLED aygıtlardaki EIL ve HIL katmanları, elektrotlar ve yük taşıma katmanları (ETL ve HTL) arasındaki arayüzde ayarlayıcı görevi görür. Bunların birincil işlevi, elektrotlardan ilgili taşıma katmanlarına yük enjeksiyonunun verimliliğini arttırmaktır. EIL, katottan (negatif elektrot) ETL’ye elektron enjeksiyonunu kolaylaştırıcı bir görevi vardır. Katot malzemesinin iş fonksiyonu genellikle ETL’ye verimli elektron enjeksiyonu için ideal enerji seviyesinden daha yüksektir. EIL malzemesi, katottan daha düşük bir iş fonksiyonuna sahip olacak ve ETL’nin iletim bandı (elektron taşınması için enerji seviyesi) ile hizalanacak şekilde seçilir. Bu, elektronların katottan ETL’ye geçerken üstesinden gelmeleri için daha kademeli bir enerji adımı yaratır. Uygun enerji seviyesi hizalamasına sahip bir EIL, elektron enjeksiyonu için enerji bariyerini azaltarak ETL’ye daha verimli bir elektron akışı sağlar. Bu sonuçta genel cihaz performansının iyileştirilmesine katkıda bulunur. HIL, anottan (pozitif elektrot) HTL’ye deşik enjeksiyonu için kolaylaştırıcı görevi görür. Anot malzemesinin iş fonksiyonu genellikle HTL’ye verimli deşik enjeksiyonu için ideal enerji seviyesinden düşüktür. HIL malzemesi, anottan daha yüksek bir iş fonksiyonuna sahip olacak ve HTL’nin değerlik bandıyla (deşik taşınması için enerji seviyesi) hizalanacak şekilde seçilir. Bu, anottan

HTL'ye geçerken deşiklerin üstesinden gelinmesi için daha kademeli bir enerji adımı yaratır. Uygun enerji seviyesi hizalamasına sahip bir HIL, deşik enjeksiyonu için enerji bariyerini azaltarak HTL'ye daha verimli deşik akışını sağlayacaktır. Bu, sonuçta genel cihaz performansının iyileştirilmesine katkıda bulunur. EIL ve HIL, enerji bariyerini azaltarak, elektronların ve deşiklerin ilgili taşıma katmanlarına daha düzgün akışını destekler. Bazı durumlarda EIL ve HIL, elektronların ve deşiklerin enjeksiyonunu dengelemeye yardımcı olarak, ışık üretimi için EML'de verimli rekombinasyonu sağlayabilir. Genel olarak EIL ve HIL, OLED'ler içindeki şarj enjeksiyonunun optimize edilmesinde destekleyici bir rol oynayarak cihaz performansının ve verimliliğinin artmasına yol açar.

1.4.6 Deşik ve elektron engelleme katmanı (HBL/EBL)

Daha yüksek hareketli yük taşıyıcının karşı elektroda vardığı ve orada tükendiği “charge carrier quenching” önemli bir sorundur. Bu yük taşıyıcıları yüklerin yeniden birleşmesi olayına yardım etmez ve bu durum aygıt verimliliğini azaltır. Bu nedenle; yük taşıyıcılarının karşı elektroda varmasının önlenmesine ihtiyaç duyulur. Engelleme katmanları bu amaçla vardır. Bu katmanlar ilgili yük taşıyıcılarını engeller. Bu, katmanların enerji seviyelerinin modellenmesiyle başılır. EBL ve HBL elektronların ve deşiklerin hareketini yöneterek verimli ışık emisyonu sağlar. EBL, öncelikle elektronların ETL'den HTL'ye doğru serbestçe hareket etmesini önleme görevi görür. Bu, ışığın üretildiği EML'de deşiklerle verimli bir şekilde yeniden birleşme için elektronların belirlenen alan (ETL) içinde kalmasını sağlar. EBL malzemesi yüksek elektron hareketlilik bariyerine sahip olacak şekilde seçilmiştir. Bu aslında elektronlar için enerjik bir engel oluşturarak onların ETL'den HTL'ye geçmelerini zorlaştırır. EBL ayrıca uygun bir enerji seviyesi hizalamasına da sahiptir. İletim bandı (elektron taşınması için enerji seviyesi), ETL ile karşılaştırıldığında enerji açısından daha yüksek ve ideal olarak HTL'nin iletim bandından daha düşük olmalıdır. Bu, HTL'ye doğru hareket etmeye çalışan elektronlar için enerjide bir artış yaratır. Etkili bir EBL, elektronları ETL içinde sınırlandırarak ışık üretimi için EML'deki deliklerle karşılaşmalarını teşvik eder. Uygun bir EBL olmadan, elektronlar HTL'ye girip oradaki deliklerle yeniden birleşerek istenmeyen ışık veya kaçak akım üreterek cihazın verimliliğini azaltabilir. HBL, deşiklerin HTL'den ETL'ye doğru serbestçe hareket etmesini önler. Bu, ışık üretimi için

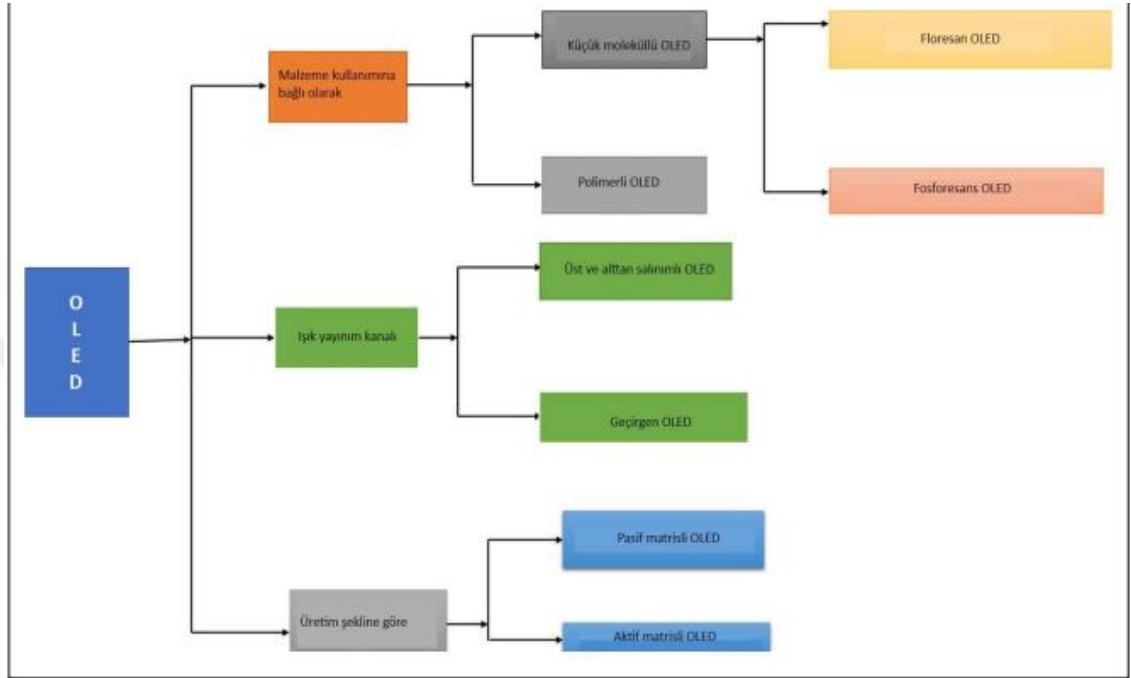
EML'deki elektronlarla verimli rekombinasyon için deşiklerin belirlenen alan (HTL) içinde kalmasını sağlar. EBL'ye benzer şekilde HBL malzemesi yüksek deşik hareketlilik bariyerine sahiptir. Bu, deşiklerin HTL'den ETL'ye hareket etmesini enerji açısından elverişsiz hale getirir. Değerlik bandı (deşik taşınması için enerji seviyesi), HTL'ye kıyasla enerji açısından daha düşük ve ideal olarak ETL'nin değerlik bandından daha yüksek olmalıdır. Bu, ETL'ye doğru ilerlemeye çalışan deşikler için enerjide bir artış yaratır. Etkili bir HBL, HTL içindeki deşikleri sınırlandırarak ışık üretimi için EML'deki elektronlarla karşılaşmalarını teşvik eder. Uygun bir HBL katmanını olmadan deşikler ETL'ye girip oradaki elektronlarla yeniden birleşerek istenmeyen ışık veya kaçak akım üreterek cihazın verimliliğini azaltabilir. OLED'lerde EBL ve HBL için doğru malzemelerin seçilmesi, verimli ışık emisyonu ve genel cihaz performansı elde etmek açısından kritik öneme sahiptir. Şekil 1.17'de kullanılan malzeme örneklerini de içeren çok katmanlı OLED örneği verilmektedir.



Şekil 1.17 a) Çok katmanlı OLED yapı örneği b) OLED üretim akış diyagramı
c) İmalat akışı

1.5 OLED Tipleri

OLED aygıtlar; kullanılan malzeme, ışık yayılım mekanizması ve çalışma teknikleri başlığı altında kategorize edilir (Şekil 1.18).

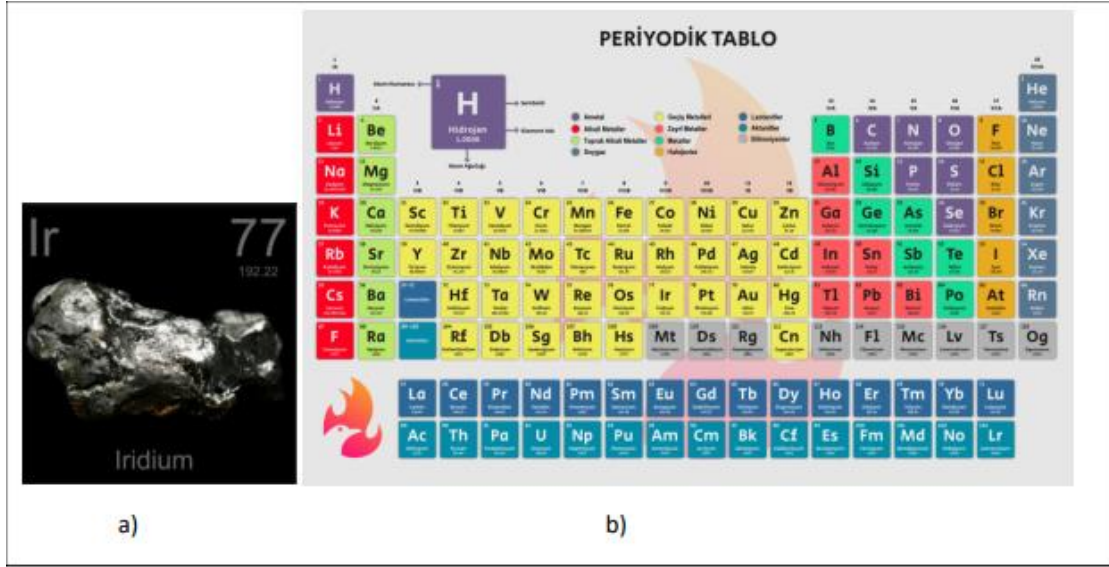


Şekil 1.18 OLED'lerin farklı tipleri

1.6 Iridium (III) Kompleksleri ve Özellikleri

Iridium elementi (Şekil 1.19) periyodik tabloda d blok geçiş metali elementi olarak adlandırılır ve iridium normal oda koşullarında gümüş-beyaz renkli, katı ve çok sert bir metaldir. Atom numarası 77, maddesel yoğunluğu 22.6 g/cm^3 , erime noktası 2719 K, elektron konfigürasyonu $[\text{Xe}]4f^{14}5d^76s^2$ olan iridium yer kabuğunda nadir bulunan elementlerdendir. Endüstriyel ve bilimsel uygulamalarda yaygın olarak kullanılmaktadır. İridyum son yıllarda geçiş metal kompleksi ile fosforesans olayının gerçekleştiği organik ışık yayan diyotlarda (OLED) kullanılmaktadır. Molekül ağırlığı az olan fosfor içeren bileşikler singlet geçişleri ile en fazla %25 kuantum verimi gösterirken, geçiş metali komplekslerinin kullanıldığı OLED'lerde teorik olarak kuantum veriminin yani triplet geçişleriyle fosforesansın %100 seviyesine ulaşması olasıdır. Fosforesans olayının yüksek kuantum verimleriyle gerçekleştirebilmesi için OLED malzemelerde Ir metal

elementini kullanmaktadırlar. Ir (III) komplekslerin başlıca özelliği elektro-optik özelliklerinin değişken olmasıdır. Metal-ligand temelli ışık salınımında, ligandların yerleri değiştirilerek tüm görünür bölge bandında çok seçenekli renklilik sağlanabilmektedir.



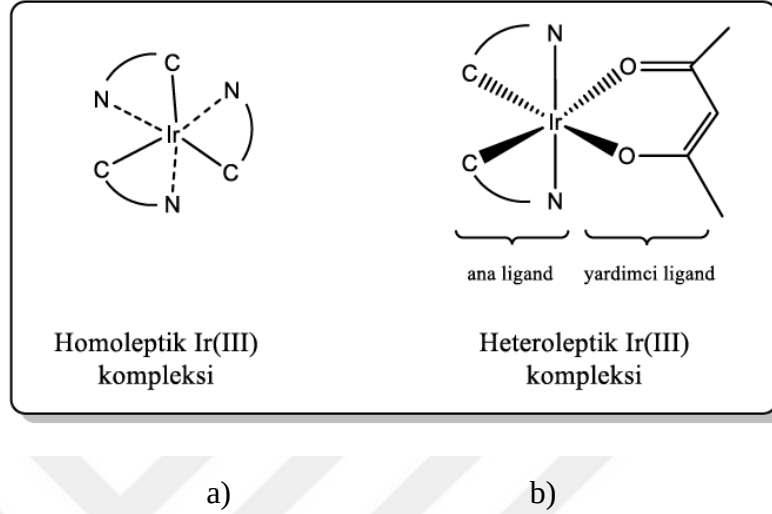
Şekil 1.19 a) İridyum elementi b) İridyum elementinin periyodik tabloda yeri (turchemsoc.org)

İridyum (III) içerikli bileşikler organik ışık yayan diyotlarda (OLED) emisyonunun olduğu katman olarak kullanılmaktadır. Diğer geçiş metali elementlerinden ziyade iridium metalinin OLED bileşiklerinde kullanılmasının bazı nedenleri aşağıda verilmektedir.

- Bu bileşikler ısı ve ışıpta yüksek kararlılığa sahiptirler,
- Bu bileşikler yüksek kuantum verimine sahiptirler,
- Fosforesans yarıömürleri kısadır,
- Bileşiklerde kullanılan liganların yapısı veya bu yapıya eklenen farklı gruplar ile emisyon renkleri kolayca ayarlanabilmektedir.

İridyum (III) kompleksleri, homoleptik ve heteroleptik kompleksler olmak üzere iki grup altında sınıflandırılmaktadır (Şekil 1.20). Homoleptik Ir(III) metal bileşikleri, iridium metaline ikişer dişi olan (Şekil 1.20 a)'da bu dişler C ve N atomlarıdır) üç ligandın

bağlanmasıyla oluşturulur. Heteroleptik Ir(III) bileşikleri ise geçiş metali iridiuma ana ligandlar (Şekil 1.20 b)'deki C ve N atomları) ve bir yardımcı ligandın (O atomlu grup) bağlanmasıyla oluşturulabilir.

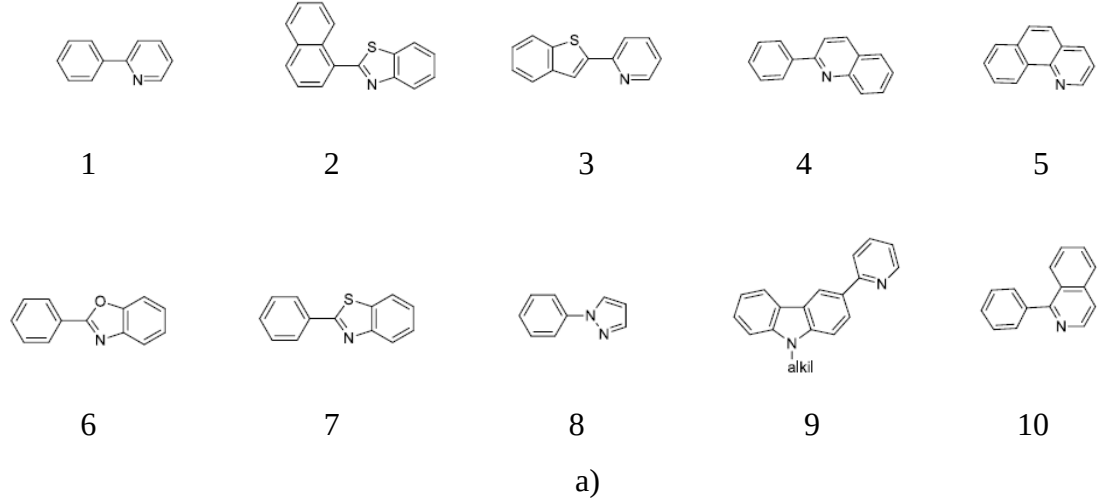


Şekil 1.20 a) Homoleptik Ir(III) Kompleksi b) Heteroleptik Ir(III) Kompleksi

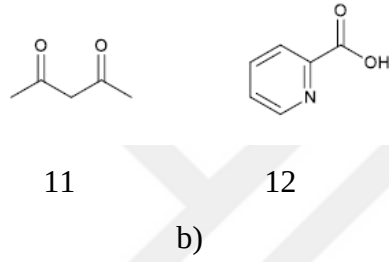
Ir(III) kompleksli OLED ile ilgili yapılar çalışmalar incelendiğinde; ana ligand olarak farklı hetero halkalı aromatik bileşikler (Şekil 1.21 a) ve b)) kullanıldığı ve bu aromatik bileşiklerin üzerine farklı elektron çekici (siyano, formil, triflorometil, flor, asetil vb.)/salıcı (metoksi, fenil, alkil grupları, amino vb.) gruplar takılarak bileşiğin fonksiyonel hale getirilebildiği görülmektedir. Yardımcı ligand olarak ise sıklıkla asetilaseton (Şekil 1.21 b).11) ve pikolinik asit ((Şekil 1-20 b).12) türevleri kullanıldığı görülmektedir.

Ir(III) bileşikleri fosforesans ışıma özelliği göstermektedir ve bu kompleksler organik ışık yayan diyotlarda (OLED), ışık yayan elektrokimyasal hücrelerde (LECs), biyosensör, organik güneş pilleri vb. birçok alanda kullanılmaktadır. Metal-ligandlardaki kuvvetli spin-yörünge eşleşmesi ile singlet ve triplet geçişleri elektriksel yük transferini ortaya çıkartır (MLCT). Metal ligand bileşikleri ışık emisyonunu, metalin bağlı olduğu ligandlar değiştirilerek ışık emisyonunun rengi ayarlanabilir. Ir(III) komplekslerinin ışık emisyonlarının rengi; HOMO ve LUMO enerji seviyeleri arasındaki fark ile kontrol edilebilir.

Ana Ligandlar :



Yardımcı Ligandlar :



Şekil 1.21 a) Çalışmalarda Kullanılan Ana Ligandlar (1-10) b) Yardımcı Ligandlar (11-12)

İridyum (III) komplekslerinin değiştirilebilir fotofiziksel özellikleri sayesinde, düz ekranlar gibi pratik uygulamalarda kullanımı dikkat çekmektedir. Görünür bölgede kırmızı, yeşil ve mavi renk veren çeşitli kompleksler sentezlenmiş olmasına rağmen, ihtiyaçlara yönelik özel absorpsiyon ve emisyon özellikleri taşıyan yeni iridium bileşikleri gerçekleştirebilmesi için çalışmalar devam etmektedir. Bu çerçevede; yeni iridium (III) komplekslerinin sentezi ve fotofiziksel karakterizasyonuna yönelik çalışmalar literatüre kazandırılmaktadır. Ayrıca; malzeme tasarımı için kuantum kimya hesaplama yazılımları yaygın şekilde kullanılmaktadır.

Floresans OLED'ler ile karşılaştırıldığında, elektrofosforesant malzeme olarak ağır metal kompleksi kullanan PHOLED'ler, aynı anda tekli ve üçlü eksitonları kullanarak teorik olarak %100 iç kuantum verimliliğine başarabilmeleri nedeniyle daha fazla araştırma konusu olmuştur. OLED'lerde kullanılan fosforesant malzemeler arasında İridyum (III)

kompleksler; kısa uyarılmış durum ömürleri, yüksek lüminesans verimliliği, görünür bölgede ayarlanabilir emisyon dalgaboyu ve kimyasal kararlılıkları nedeniyle, yüksek verimli OLED elde edebilmek için yoğun bir şekilde çalışılmıştır.

1.7 Hesaplamalı Kimya Yöntemleri

Hesaplamalı kimya, kuantum kimyası, moleküler dinamiği, moleküler modellemesi, moleküler mekaniği ve kimya bilgilerini birlikte kullanarak kimyasal bir olguyu kurgulayabilmektir. Kimya bilgisi, çok büyük kimya veritabanlarını ve kimyasal bilginin işlenmesini ve kimyasal veri madenciliğini kapsar. Hesaplamalı kimyada problemlerin çözümleri için çeşitli nümerik yöntemler kullanılarak bilgisayar programları geliştirilmiş Hesaplamalı kimya ile moleküler düzeydeki molekül sistem veya sistemlerinin kimyasala ve fiziksel özellikleri ve davranışları ortaya konulabilir veya tahmin edilebilir. Hesaplanan bu fiziksel ve kimyasal özelliklerden bir kısmı aşağıda verilmektedir.

- Molekül düzeyinde enerjileri ve yapısal özellikleri,
- Molekül sistemine ait elektronların yörünge enerjileri ve geçiş durumları,
- Atomlar arası bağ uzunlukları,
- Kimyasal reaksiyon enerjileri,
- Bağlı atom başına elektriksel yük değerleri,
- Moleküler yörüngeler ve şekilleri,
- Elektrostatik potansiyel dağılımı,
- NMR spektrumu,
- Elektronik geçişler (UV-spektrumu),
- Entropi, entalpi gibi termokimyasal özellikler
- Titreşim frekansları (IR-R spektrumu),

Bir molekülün sentezi için o molekülün IR, UV ve NMR spektrumlarının teorik olarak hesabının yapılması bu konuda çalışan araştırmacılar için önemlidir.

Moleküler mekaniği (MM) : Birbirine yaylarla (atomik bağları temsilen) bağlı küresel toplar (atomlar) topluluğunun bir molekül modelidir. Yayın esneme uzunluklarını ve yaylar arasındaki bağ açılarını ve yayları germek ve bükmek için ne kadarlık enerji gerektiği bilinirse, bilye ve yaylardan oluşan sistemin, bir molekülün oluşum enerjisi

hesaplanabilir. Molekölün oluşum enerjisinin en düşük değeri bulunana kadar molekül geometrisini değiştirmek, bağları temsil eden yayları germek ve bükme için ne kadar enerji gerektiğini hesaplanmasını sağlar. Bu işleme geometri optimizasyonu denir, yani molekül için en uygun geometrinin hesaplanması demektir.

Moleküler Dinamiği (MD) : Bir molekül/moleküller sistemi içerisindeki atom ve moleküllerin hareketlerini dinamiğin temel yasalarına göre modeller. Molekül dinamiğinde atom ve moleküllerin yörüngeleri ortaya çıkartılarak atom veya moleküllerin hareket ettirilerek birbirlerine etkileri Newton'un hareket yasaları ile çözülmesini sağlar.

Kuantum Kimyasal Yöntemler: Moleküllerin yapıları ve enerjilerinin belirlenmesi için kuantum mekaniği kurallarının kullanıldığı yöntemlerdir.

a) Ab initio hesaplamaları: (*ab initio* Latince'de: "ilk prensipler") Schrödinger diferensiyel denkleminin yaklaşımlar yapmadan yalın çözümlenmesine dayanmaktadır. Bu denklem, modern fiziğin temel denklemlerinden biridir ve diferensiyel denklemin bir atom veya molekül için çözümlenmesi ile atomdaki veya moleküldeki elektronların davranışlarını ortaya koyar. Ab initio yöntemi, Schrödinger diferensiyel denklemini bir molekül veya molekül grupları için çözer. Çözüm sonucu elde edilen değerler ve fonksiyonlar moleküle ait enerji ve dalga fonksiyonlarını verir. Dalga fonksiyonları elektron yükü dağılımını (ve teoride en azından moleküle ilgili başka herhangi bir şeyi) hesaplamak için kullanılabilecek matematiksel fonksiyonlardır. Elektron yükünün dağılımından molekülün elektriksel olarak ne kadar kutuplandığı ve molekülün hangi kısımlarının nükleofiller veya elektrofiller bağ yapmasının muhtemel olduğu gibi bilgiler ifade edilebilir.

b) Yarı deneysel (Semi Empirical-SE) hesaplamalar: Schrödinger denkleminin çözümünü kullanan ab initio yöntemleri gibidir. Bununla birlikte, SE ile Schrödinger denklemini çözerken daha fazla yaklaşım yapılır ve ab initio yönteminde hesaplanması gereken çok karmaşık integraller aslında SE yöntem hesaplamalarında dikkate alınmaz. Bunun yerine SE yöntemleri, geometri veya enerji gibi bazı hesaplanmış veya deneysel değerlerden veya parametrelerden en uygun olanını derlenmiş bir tür integral kütüphanesinden alır (oluşum ısısı). Hesaplamalardan en iyi değerleri elde etmek için

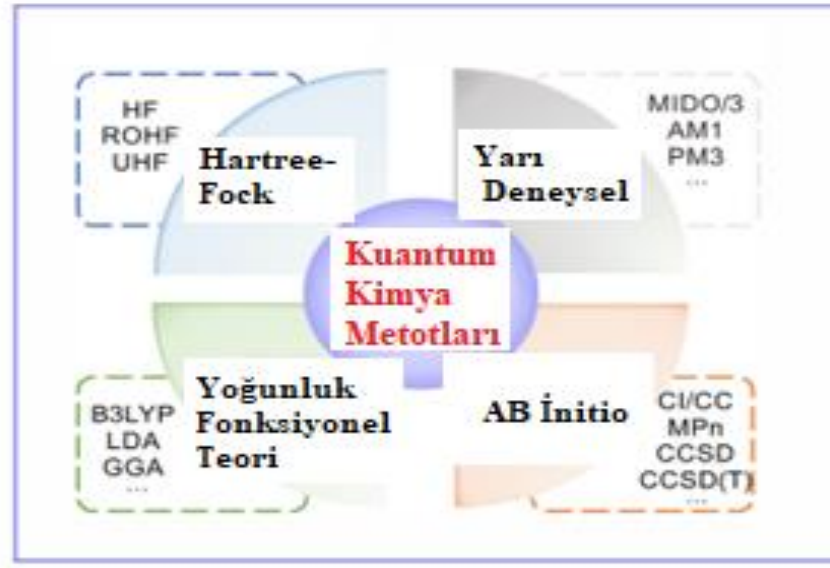
deneysel deęerlerin matematiksel iřlemlerden geęirilmesine parametreleme (veya parametrizasyon) denir. Yöntemi "yarı deneysel" yapan teori ve deneyin karışımıdır: yöntemler Schrödinger denkleminin yaklaşık çözümüne dayanır. Yaklaşık çözümler için deneysel deęerler bilgisayar programı parametrelendirilerek Schrödinger denklemi çözülür. Yarı-deneysel SE hesaplamalarının daha iyi sonuçlar verebilmesi için programın deneysel verilerle iyi bir şekilde parametrelendirilmesi gerekir.

c) Yoęunluk fonksiyoneli hesaplamaları: Genellikle yoęunluk fonksiyoneli teorisi (DFT) hesaplamaları olarak isimlendirilir. DFT hesaplamaları Schrödinger denkleminin yaklaşımsız çözümüne dayanan ab initio hesaplamaları veya yarı deneysel-SE molekül orbital hesaplamaları gibidir. DFT hesaplamaları dięer iki yöntemin (ab-initio ve SE) aksine, bir dalga fonksiyonunu ortaya çıkarmaz, bunun yerine elektron yük dağılımını (elektron yük yoęunluğu fonksiyonunu) doğrudan türetir. Molekül üzerindeki elektron yük dağılımı, matematiksel fonksiyonlarla ilgilidir. Yoęunluk fonksiyonel teorisi ile ilgili hesaplamalar süre açısından genellikle ab initio hesaplamaların daha hızlı, ancak yarı-deneysel SE'lerden daha yavaştır. DFT hesaplamaları dięer yöntemlere göre daha yenidir (ab initio ve SE yaklaşımlarıyla hesaplamalı kimya 1960'lardan itibaren kullanılmaya başlamışken, DFT hesaplamalı kimya 1980'lerden itibaren yapılmaya başlanmıştır).

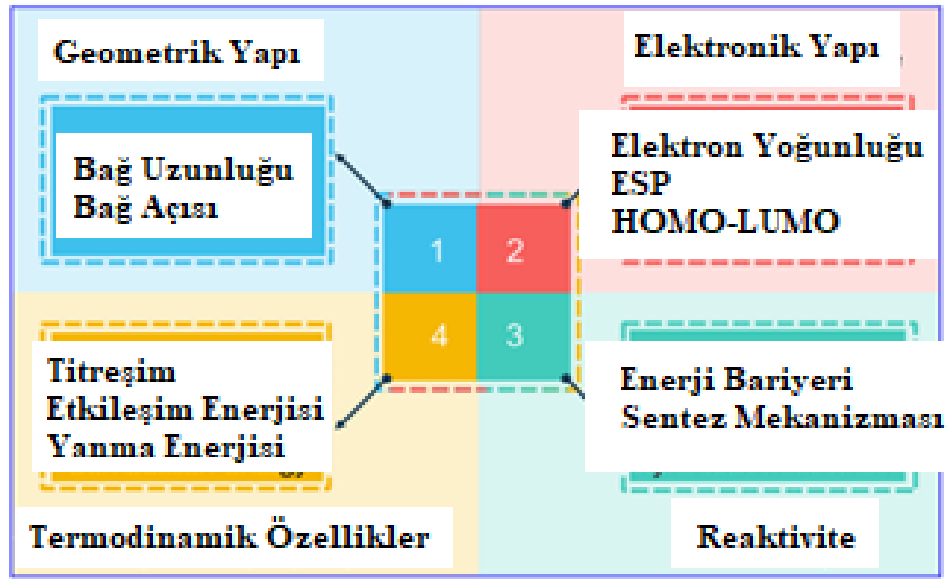
Atom veya molekülerin temel durum enerjileri ve özellikleri elektron yük yoęunluk fonksiyonları ile belirlenir.

B3LYP Karma Yoęunluk Fonksiyonu Teorisi

Dalga mekaniğine dayanan HF teorisinin deęiş tokuş enerjisi için iyi sonuç vermez ve bu metotla korelasyon enerjileri hesaplanamaz; fakat kinetik enerji için uygun bir ifade verir. DFT modelleri ise deęiş tokuş ve korelasyon enerjilerini daha iyi verir ve böylece tam enerji ifadesi için saf HF veya saf DFT modelleri yerine, bu modellerin her ikisinin enerji ifadelerinin, toplam elektronik enerji ifadesinde kullanılmaları sonucu, karma modeller üretilmiştir. Bu modeller toplam enerji, bağ uzunlukları, iyonizasyon enerjileri gibi birçok büyüklükleri saf modellerden daha iyi hesaplamaktadır. (Purtaş 2011)



a



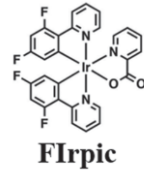
b

Şekil 1.22 a.Hesaplamalı kuantum kimya yöntemleri b.Kuantum kimya uygulama alanları

Moleküllerin elektronik yapısını incelemek için çok değişik bilgisayar yazılımları geliştirilmiştir. Kuantum mekaniği ve klasik mekanik ve kimya yasaları kullanılarak hazırlanan bu yazılımlar ile moleküllerin veya çevresi ile reaksiyonları veya fiziksel veya kimyasal birçok özellikleri teorik olarak hesaplanabilmektedir.

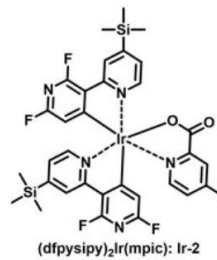
2. MATERYAL ve YÖNTEM

OLED teknolojisi; %100 elektrolüminesans iç kuantum verimliliği elde edilmesine neden olan, temel olarak hem singlet hem de triplet eksitonları kullanmayı imkan tanıyan geçiş metal fosforesent komplekslerin gelişimine bağlı olarak, ekran ve katı hal aydınlatma teknolojilerinde oldukça ilgi çekmiştir. Iridium (III) kompleksler yüksek PLQY değerleri, iyi termal ve kimyasal kararlılıkları çok yönlü renk ayarlanabilirlikleri nedeniyle en umut vaat eden triplet emisyon malzemelerden biri olduğunu ispatlamıştır. Günümüze kadar; kırmızı ve yeşil iridium emisyon malzemeleri yüksek EQE değerlerini elde etmiştir ki böylece ticarileşmede yaygın olarak kullanılmıştır. Bununla birlikte; günümüzde yüksek EQE değerlerini ve iyi renk saflığı sağlayan mavi iridium emisyon malzemelerini geliştirilmesi zor bir problemdir ve bu nedenle bu alan geride kalmıştır. Son yıllarda; mavi Ir (III) kompleksler yaygın şekilde çalışılmış ve kapsamlı bir biçimde raporlandırılmıştır. FIrpic en çok çalışılan gök-mavi fosforesent malzemelerden biridir ve cihazın maksimum EQE %34,1 varabilmektedir. (Shin 2016)



Şekil 2.1 FIrpic (Shin vd. 2016)

Kim ve arkadaşları 450 nm de emisyon piki ve %31,9 EQEmax gösteren (dfpysipy)₂Ir(mpica) saf mavi kompleksinin sentezlemiştir.

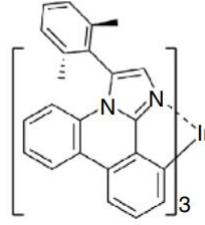


Şekil 2.2 (dfpysipy)₂Ir(mpica) (Shin vd. 2019)

Aromatik beş üyeli heterocycles ya da carbenic grup içeren mavi iridium komplekslerin çoğu tris siklometal koordinasyon konfigürasyonuna sahiptir.

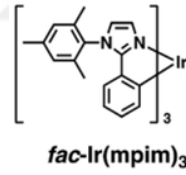
Zhang ve arkadaşları %18 EQEmax sahip Ir(dmp)₃ gök-mavi kompleksini rapor etmişlerdir. (Zhang vd. 2014)

Dopant: Ir(dmp)₃



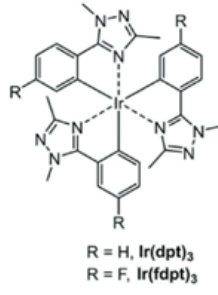
Şekil 2.3 Ir(dmp)₃ (Zhang vd. 2014)

Cihaz verimliliğini arttırmak için Udagawa ve arkadaşları, %29,6 EQEmax sahip Ir(mpim)₃ sentezlemişlerdir. (Udagawa vd. 2014)



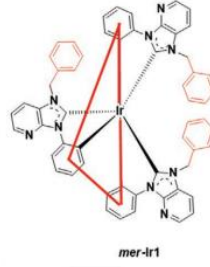
Şekil 2.4 Ir(mpim)₃ (Udagawa vd. 2014)

Huang ve arkadaşları, renk saflığını daha da iyileştirmek için, ana ligand olarak 4-fluorophenyl triazole Ir(fdpt)₃ sentezlemişlerdir ve bu 458 nm emisyon piki ve EQE max %22,5 göstermiştir. (Huang vd. 2018)



Şekil 2.5 Ir(fdp)₃ (Huang vd. 2018)

Carbene içeren iridium kompleksler genellikle koyu mavi emisyon elde etmek daha kolaydır ama cihaz verimliliği nispeten düşüktür. Jim ve arkadaşları, mavi karbenik iridium komplekse dayalı en yüksek aygıt verimliliğinden birine sahip mer-Ir1 koyu mavi karbenik iridium kompleksini elde etmiştir. (Park vd. 2020)



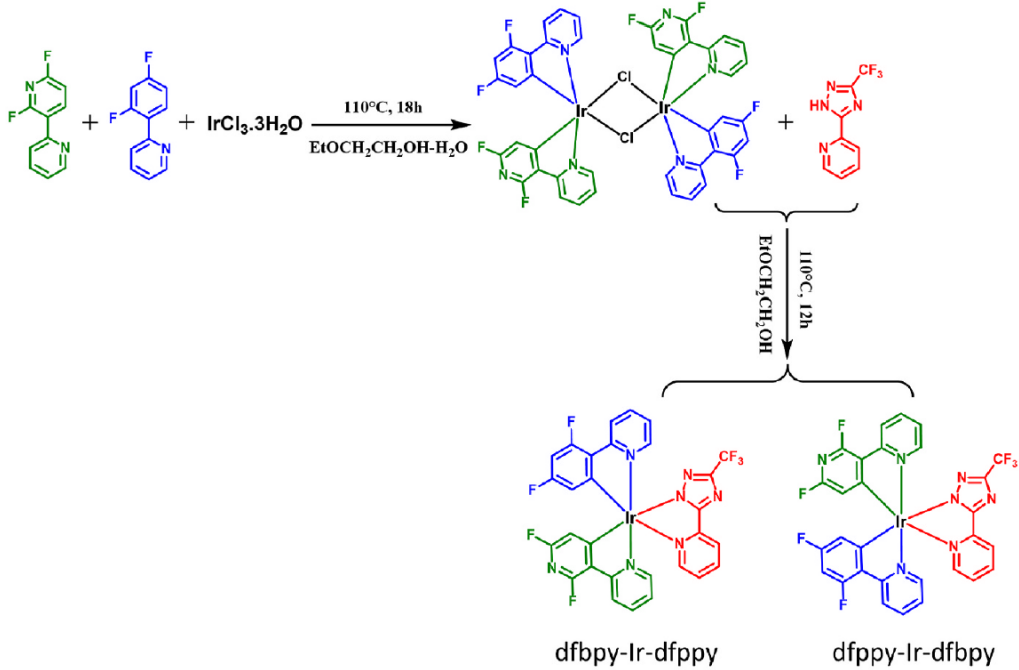
Şekil 2.6 mer-Ir1 (Park 2020)

Yukarıda görüldüğü üzere, raporlanan mavi emisyon yapan iridium kompleks iki ana yapı vardır. Bu yapılardan biri Ir(mpim)₃ gibi (C[^]N cyclometal ligand triscyclometal [Ir(C[^]N)₃]- komfigürasyonuna odaklanır.

Diğer yaygın yapı, Flrpic gibi yardımcı ligand LX olan Ir(C[^]N)₂(LX) bis-cyclometal komfigürasyonudur. Bununla birlikte; üç farklı ligand içeren asimetrik tris-heteroleptic [Ir(C¹[^]N¹) (C²[^]N²)(LX)]-nadiren raporlandırılmıştır. Bu nedenle; daha önce raporlandırılan [Ir(C[^]N)₃]- ve Ir(C[^]N)₂(LX) iridium kompleksleri arasındaki boşluğu doldurması gereken mavi Ir(III) kompleksine yeni moleküler mühendislik stratejsi büyük ilgi uyandırmıştır.

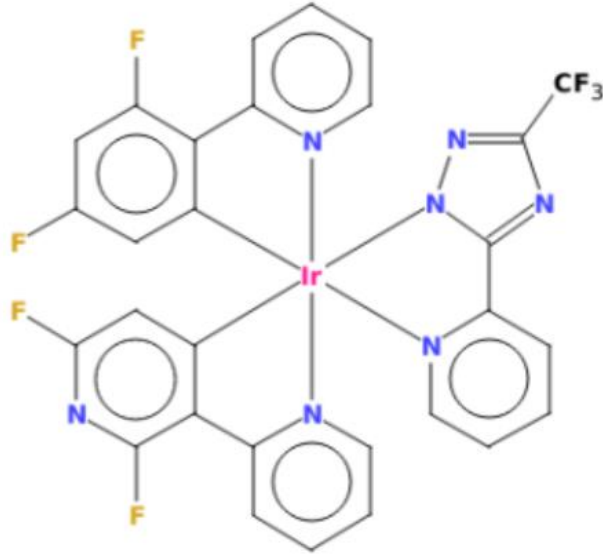
2.1 Materyal

Lua ve arkadaşları tarafından yürüten deneysel çalışmada (Lua, G. vd. 2023); Ar atmosfer altında, dfbpy (1.1 eşdeğer), dfppy (1.1 eşdeğer) ve $\text{IrCl}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (1.0 eşdeğer), 18 saat boyunca 2-etoksietanol ve H_2O (3: 1, v/v) karışık çözücüsünde 110°C 'ye ısıtılmıştır. Karışım oda sıcaklığına soğutulduktan sonra, Ar atmosferi altında 12 saat boyunca, 2-etoksietanolde fptz ve Na_2CO_3 ile doğrudan reaksiyona sokulan μ -kloro-köprülü dimer elde etmek için su eklenmiştir. Elde edilen çözücü, ham ürünü elde etmek için vakum altında uzaklaştırılmıştır. Sonuç olarak; izomer olan iki asimetric iridium kompleksi, dfbpy-Ir-dfppy ve dfppy-Ir-dfbpy, başarıyla elde edilmiştir. Yeni asimetric mavi Ir kompleks konfigürasyonunu esas alarak, dfbpy-Ir-dfppy ve dfppy-Ir-dfbpy olarak adlandırılan iki yeni mavi iridium kompleksi, iki farklı ana ligand olarak dfbpy (2',6'-difloro-2,3'-bipiridin) ve dfppy (2-(2,4-diflorofenil)piridin) geleneksel ppy tipi ligandları ve yardımcı ligand olarak fptz (2-(3-(triflorometil)-1H-1,2,4-triazol-5-il)piridin) kullanılarak tasarlanmış ve sentezlenmiştir (Şekil 2.7).

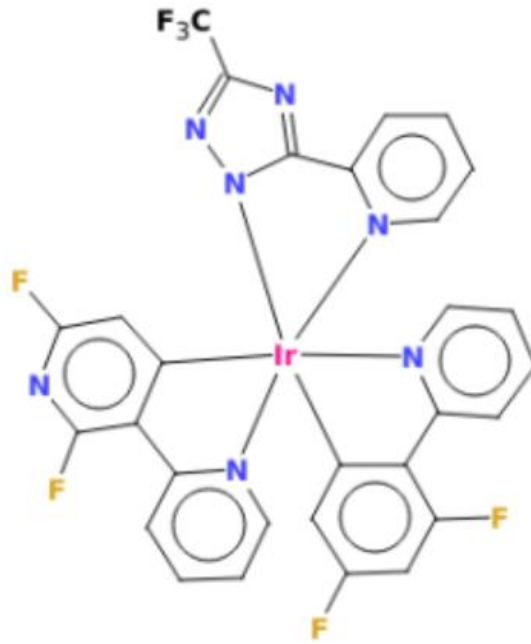


Şekil 2.7 dfbpy-Ir-dfppy ve dfppy-Ir-dfbpy sentezi

Hesaplamalarda kullanılan dfbpy-Ir-dfbpy (CCDC Nu.: 2243326) ve dfbpy-Ir-dfbpy (CCDC Nu.: 2243326) kimyasal yapıları aşağıda (Şekil 2.8 ve Şekil 2.9) verilmektedir.



Şekil 2.8 dfbpy-Ir-dfbpy (CCDC Nu.: 2243326) kimyasal diyagramı



Şekil 2.9 dfbpy-Ir-dfbpy (CCDC Nu.: 2243324) kimyasal diyagramı

Görüldüğü üzere molekül yapılarında Flor (F) atomu kullanılmıştır. F atomunun molekül ve ligandlarda kullanılmasının nedeni; kimyasal özelliklerinden kaynaklanmaktadır. F atomu, periyodik cetveldeki en elektronegatif elementtir. F atomunun yüksek elektronegatiflik değerine sahip olması, onun diğer atomlarla güçlü kovalent bağlar oluşturmasını sağlar. Bu özellik, flor atomunu birçok molekülde ve ligandda kullanışlı hale getirir, çünkü ardındaki atomlardan (örneğin, karbon veya metal atomları) elektron çekme yeteneği, molekülün kimyasal reaktivitesini ve bağlanma özelliklerini değiştirebilir. Kısaca bu özelliği, onu diğer elementlerle kolayca etkileşime girme ve çeşitli bileşikler oluşturma yeteneği sağlar. Başta bu özellik olmak üzere sahip olduğu diğer kimyasal özellikler F atomunun optoelektronik uygulamalarda önemli bir rol oynamasını sağlamıştır.

OLED aygıtların performansını ve verimliliğini artırmak için kullanılan malzemelerin yapısından F atomunun bulunmasının birkaç sebebi vardır.

- **Elektron Transfer Özellikleri :** F atomu, diğer atomlara göre elektronların daha kolay transfer edilmesine olanak sağlar. Bu özellik; OLED malzemelerinde deşik ve elektron taşınımını artırır ve böylece daha iyi ışık üretimi sağlar.

- **Optik ve Elektriksel Özelliklerin İyileştirilmesi :** F atomu içeren bileşiklerin optik özellikleri, genellikle daha iyi ışık emisyonuna imkan verir. F atomu içeren organik bileşikler, dah yüksek foton verimliliği sağlayarak OLED aygıtların parlaklığını artırabilir.

- **Termal Kararlılık :** F atomu içeren organik bileşiklerle genellikle daha iyi termal stabilite gösterirler. Bu özellik; OLED aygıtların çalışma sıcaklığının daha kararlı kalmasını ve ömürlerinin daha uzun olmasını sağlar.

- **Moleküler Yapı ve Hibridizasyon :** F atomunun sahip olduğu yüksek hidridizasyon yeteneği daha karmaşık organik yapılar yaratma olanağı sağlamaktadır. Bu durum; daha geniş optoelektronik özelliklere sahip çeşitli uygulamalara imkan tanır.

2.2 Yöntem

Gaussian (<https://gaussian.com/>), hesaplamalı kimya ve moleküler modelleme alanında kullanılan lisanslı bir yazılımdır. Kimyasal reaksiyonların mekanizmalarını, moleküllerin yapısal, elektronik özelliklerini ve moleküler düzeyde enerji seviyelerini hesaplamak için geniş bir uygulama yelpazesi sunar.

- Gaussian yazılımı ile aşağıda belirtilen birçok kimyasal problem incelenebilir;
- Geometri optimizasyonu ve frekans hesabı
- Moleküler enerjisi ve geçiş durumlarının yapısı hesabı
- Enerji geçiş seviyelerinin tahmini
- IRC hesabı ile reaksiyondaki geçiş konumunun ilgili reaktant ve ürüne bağlılığı
- Atomik yükler ve elektrostatik potansiyel enerjileri
- Molekül yörüngeleri
- QM/MM benzetimi (ONIOM)
- Spektroskopik verilerin hesaplanması (IR, NMR ve Raman spektrumları vb.)
- Elektron yoğunluklarının hesaplanması
- Titreşim frekansları
- Çok kutuplu momentler vb.

GaussView (<https://gaussian.com/>), Gaussian yazılımı için özel olarak geliştirilmiş Gaussian 16 yazılımının grafik arayüzüdür (GUI). Kimyasal modelleme ve hesaplamalı kimya çalışmalarını kolaylaştırmak amacıyla tasarlanmış olan GaussView, kullanıcıların kompleks moleküllerin yapılarının oluşturulması, görselleştirilmesi ve Gaussian hesaplamalarının yönetilmesi süreçlerinde büyük kolaylık sağlamaktadır.

Bu çalışmada Gaussian 16 paket programı ile hesaplamalar TÜBİTAK-ULAKBİM (<https://ulakbim.tubitak.gov.tr/>) bilgisayarları kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Hesaplamalar için girdi (input) dosyası GaussView 6 ile hazırlanmıştır. Molekülün teorik hesaplamaları, girdi dosyasında belirtilerek TDDFT yöntemi kullanılarak yapılmıştır. Yapılan hesaplamalarda Becke'nin üçparametrelili değiş-tokuş fonksiyoneli ve Lee, Yang ve Parr'ın korelasyon fonksiyoneli içeren B3LYP karma fonksiyoneli ve Hartree-

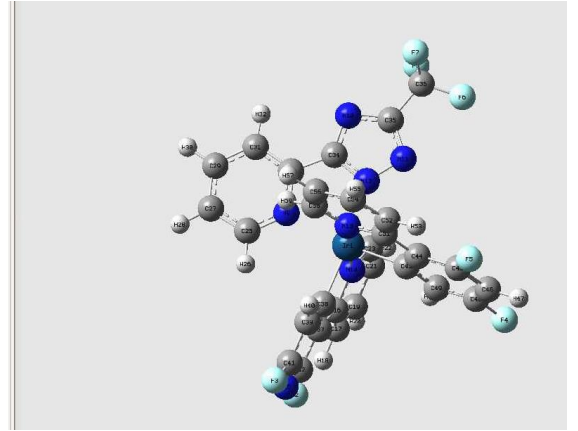
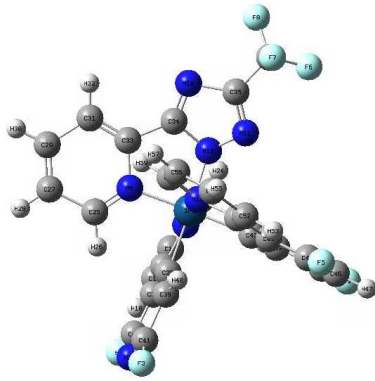
Fock (HF) kullanılmıştır. Yapıların hesaplamaları için; metal atomu için LANL2DZ, metal olmayan atomlar için 6-31G(*) ve 3-21G baz seti kullanılarak gerçekleştirilmiştir. Hesaplamalarımız için girdi olan *.mol dosyasını oluşturmak için; <https://www.ccdc.cam.ac.uk/structures/?> sitesinden ilgili CCDC numarasını girerek (2243324 ve 2243326 numaralı) hazır dosya indirilmiştir. İndirilen dosyalar CrystalExplorer ve GaussView programları ile incelenmiştir. Çözelti dahil edilen hesaplamalar için PCM modeli kullanılmıştır. Çözelti olarak su, etanol ve CH₂Cl₂ tanımlanmıştır.



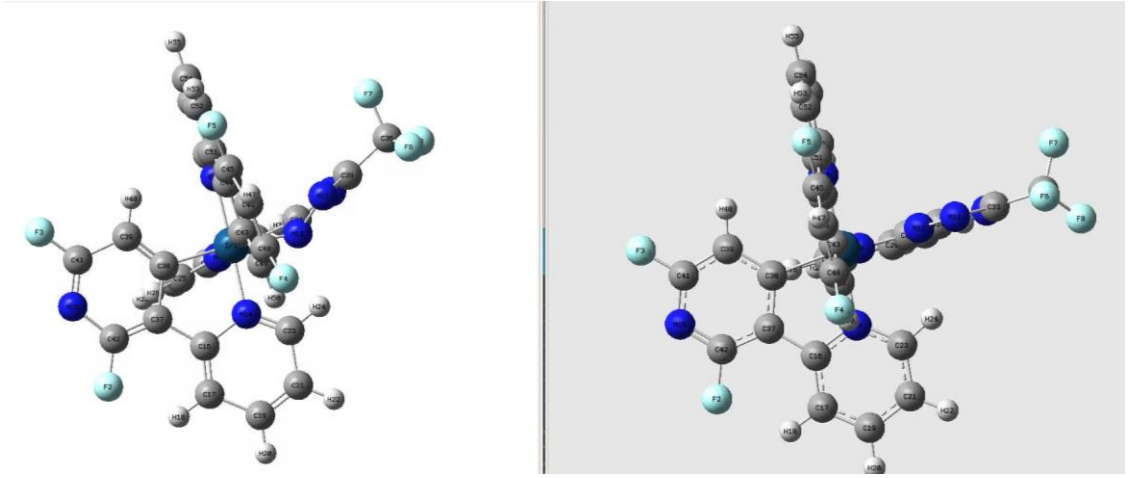
3. ARAŞTIRMA BULGULARI

Lua ve arkadaşları tarafından sentezlenen dfbpy-Ir-dfppy ve dfbpy-Ir-dfbpy moleküllerinin geometrisi GaussView 6 programında çizilerek Gaussian 16 paket programına giriş verisi olarak hazırlanmıştır. Bu program yardımıyla; moleküllerin kararlı haldeki (en düşük enerji düzeyi) geometrik optimizasyonu yapılarak bağ uzunlukları ve bağ açıları Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisinde B3LYP (Becke-3-Lee-Yang-Parr) ile Ab-initio HF (Hartree-Fock) teorisi kullanılarak hesaplanmıştır.

GaussView 6 programında görselleri oluşturulan ve teorik hesaplamalarımızda kullanılacak moleküler yapıları ve optimize edilmiş görselleri aşağıda (Şekil 3.1 ve 3.2) sunulmuştur. Bu girdi dosyaları oluşturulurken, <https://www.ccdc.cam.ac.uk/> elde edilen *.mol uzantılı dosyalardan yararlanılmıştır. Daha sonra; gerekli hesaplama parametrelerini GaussView 6 programı üzerinden tanımladıktan sonra Gaussian 16 programında çalıştırılacak olan *.gjf uzantılı dosyası oluşturulmuştur. Optimizasyon için; Ir atomu için LanL2DZ, Ir atomu dışındaki diğer atomlar için sırasıyla 6-31G* ve 3-21G baz seti tanımlamaları yapılmıştır.



Şekil 3.1 dfbpy-Ir-dfppy ve optimize yapısı



Şekil 3.2 dfbpy-Ir-dfbpy ve optimize yapısı

Her iki yapının da optimizasyonu yapıldıktan sonra çıktı dosyaları üzerinden bağ uzunluk ve bağ açısı değerleri, *.mol dosyasındaki deneysel veriler ile karşılaştırılması için Çizelge 3.1 - 3.8'e işlenmiştir. Daha sonra deneysel ve hesaplanan veriler arasındaki ilişkiyi değerlendirmek için korelasyon grafikleri çizilmiştir. Hesaplamalarımızda 4 farklı ortamda iki farklı metot (B3LYP ve HF) ve iki farklı baz seti kullanılmıştır. Çözelti dahil edilen hesaplamalar için PCM modeli kullanılmıştır. Çözelti olarak su, etanol ve CH_2Cl_2 tanımlanmıştır.

Çizelge 3.1 dfbpy-Ir-dfbpy yapısı bağ uzunluğu değerleri ile dört farklı ortamda B3LYP metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası

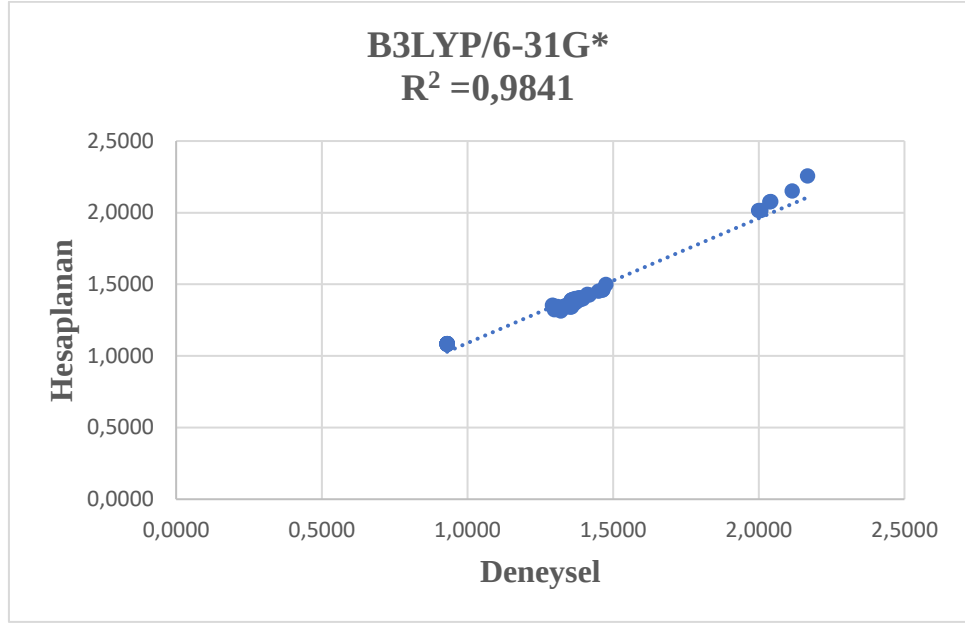
dfbpy-Ir-dfbpy		B3LYP							
		Gaz	Gaz	DCM	DCM	Etanol	Etanol	Su	Su
Bağ Adı	Deneysel Bağ Uzunluğu	6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G
		Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik
$\text{Ir}_1 - \text{N}_9$	2,1670	2,2552	2,2054	2,2480	2,1999	2,2466	2,1988	2,2460	2,1983
$\text{Ir}_1 - \text{N}_{12}$	2,1140	2,1516	2,1121	2,1582	2,1173	2,1595	2,1178	2,1600	2,1179
$\text{Ir}_1 - \text{N}_{13}$	2,0370	2,0742	2,0635	2,0760	2,0650	2,0763	2,0653	2,0765	2,0655
$\text{Ir}_1 - \text{N}_{14}$	2,0410	2,0770	2,0632	2,0811	2,0675	2,0817	2,0681	2,0819	2,0684
$\text{Ir}_1 - \text{C}_{38}$	1,9990	2,0150	2,0216	2,0121	2,0191	2,0118	2,0189	2,0118	2,0188
$\text{Ir}_1 - \text{C}_{43}$	2,0070	2,0152	2,0214	2,0168	2,0233	2,0172	2,0236	2,0173	2,0237

Çizelge 3.1 dfbpy-Ir-dfppy yapısı bağ uzunluğu değerleri ile dört farklı ortamda B3LYP metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası (devam)

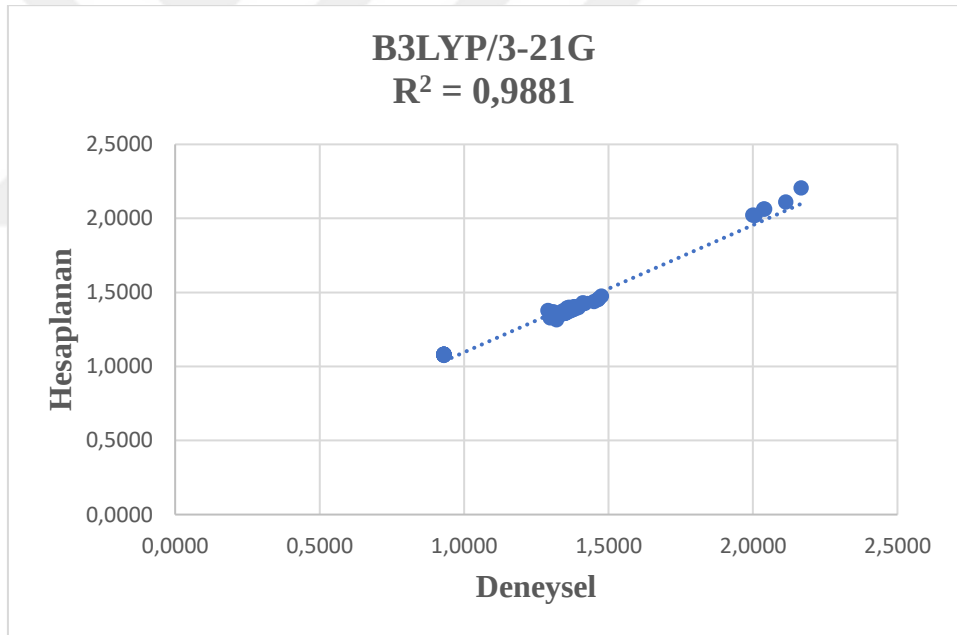
F ₂ - C ₄₂	1,3430	1,3499	1,3760	1,3504	1,3759	1,3505	1,3759	1,3505	1,3758
F ₃ - C ₄₁	1,3530	1,3400	1,3610	1,3444	1,3642	1,3448	1,3645	1,3450	1,3647
F ₄ - C ₄₈	1,3540	1,3468	1,3671	1,3504	1,3697	1,3507	1,3699	1,3509	1,3700
F ₅ - C ₄₅	1,3520	1,3558	1,3797	1,3561	1,3794	1,3561	1,3793	1,3561	1,3792
F ₆ - C ₃₆	1,3090	1,3444	1,3694	1,3463	1,3708	1,3467	1,3710	1,3468	1,3712
F ₇ - C ₃₆	1,2910	1,3530	1,3780	1,3551	1,3802	1,3554	1,3804	1,3555	1,3805
F ₈ - C ₃₆	1,2940	1,3514	1,3735	1,3536	1,3748	1,3535	1,3748	1,3535	1,3747
N ₉ - C ₂₅	1,3470	1,3450	1,3580	1,3449	1,3577	1,3448	1,3576	1,3448	1,3576
N ₉ - C ₃₃	1,3600	1,3614	1,3707	1,3609	1,3704	1,3608	1,3704	1,3608	1,3704
N ₁₀ - C ₃₄	1,3330	1,3387	1,3487	1,3406	1,3502	1,3409	1,3504	1,3410	1,3505
N ₁₀ - C ₃₅	1,3510	1,3477	1,3643	1,3487	1,3650	1,3487	1,3650	1,3487	1,3650
N ₁₁ - N ₁₂	1,3570	1,3433	1,3961	1,3469	1,3994	1,3476	1,4000	1,3479	1,4002
N ₁₁ - C ₃₅	1,3290	1,3436	1,3602	1,3407	1,3566	1,3403	1,3562	1,3402	1,3560
N ₁₂ - C ₃₄	1,3400	1,3540	1,3687	1,3513	1,3665	1,3509	1,3661	1,3507	1,3660
N ₁₃ - C ₅₁	1,3700	1,3704	1,3787	1,3700	1,3784	1,3700	1,3784	1,3699	1,3784
N ₁₃ - C ₅₈	1,3490	1,3466	1,3584	1,3471	1,3588	1,3471	1,3588	1,3472	1,3589
N ₁₄ - C ₁₆	1,3670	1,3697	1,3771	1,3694	1,3771	1,3693	1,3771	1,3693	1,3771
N ₁₄ - C ₂₃	1,3370	1,3470	1,3586	1,3470	1,3586	1,3470	1,3587	1,3470	1,3587
N ₁₅ - C ₄₁	1,2980	1,3233	1,3287	1,3237	1,3289	1,3237	1,3289	1,3238	1,3289
N ₁₅ - C ₄₂	1,3200	1,3143	1,3156	1,3171	1,3182	1,3174	1,3185	1,3175	1,3186
C ₁₆ - C ₁₇	1,3810	1,4033	1,4010	1,4018	1,3998	1,4017	1,3997	1,4016	1,3996
C ₁₆ - C ₃₇	1,4650	1,4626	1,4555	1,4647	1,4574	1,4648	1,4576	1,4649	1,4577
C ₁₇ - H ₁₈	0,9300	1,0802	1,0767	1,0801	1,0766	1,0800	1,0766	1,0800	1,0765
C ₁₇ - C ₁₉	1,3690	1,3899	1,3901	1,3907	1,3910	1,3908	1,3911	1,3908	1,3911
C ₁₉ - H ₂₀	0,9300	1,0861	1,0830	1,0855	1,0826	1,0854	1,0825	1,0854	1,0825
C ₁₉ - C ₂₁	1,3690	1,3959	1,3987	1,3953	1,3982	1,3953	1,3982	1,3953	1,3981
C ₂₁ - H ₂₂	0,9300	1,0844	1,0815	1,0840	1,0812	1,0840	1,0811	1,0840	1,0811
C ₂₁ - C ₂₃	1,3550	1,3879	1,3878	1,3881	1,3882	1,3881	1,3882	1,3881	1,3882
C ₂₃ - H ₂₄	0,9300	1,0830	1,0802	1,0825	1,0796	1,0825	1,0795	1,0825	1,0795
C ₂₅ - H ₂₆	0,9300	1,0849	1,0811	1,0842	1,0805	1,0841	1,0805	1,0840	1,0804
C ₂₅ - C ₂₇	1,3590	1,3903	1,3897	1,3912	1,3907	1,3913	1,3908	1,3914	1,3909
C ₂₇ - H ₂₈	0,9300	1,0847	1,0817	1,0843	1,0813	1,0842	1,0812	1,0842	1,0812
C ₂₇ - C ₂₉	1,3790	1,3993	1,4015	1,3973	1,3995	1,3970	1,3992	1,3968	1,3991

Çizelge 3.1 dfbpy-Ir-dfppy yapısı bağ uzunluğu değerleri ile dört farklı ortamda B3LYP metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası (devam)

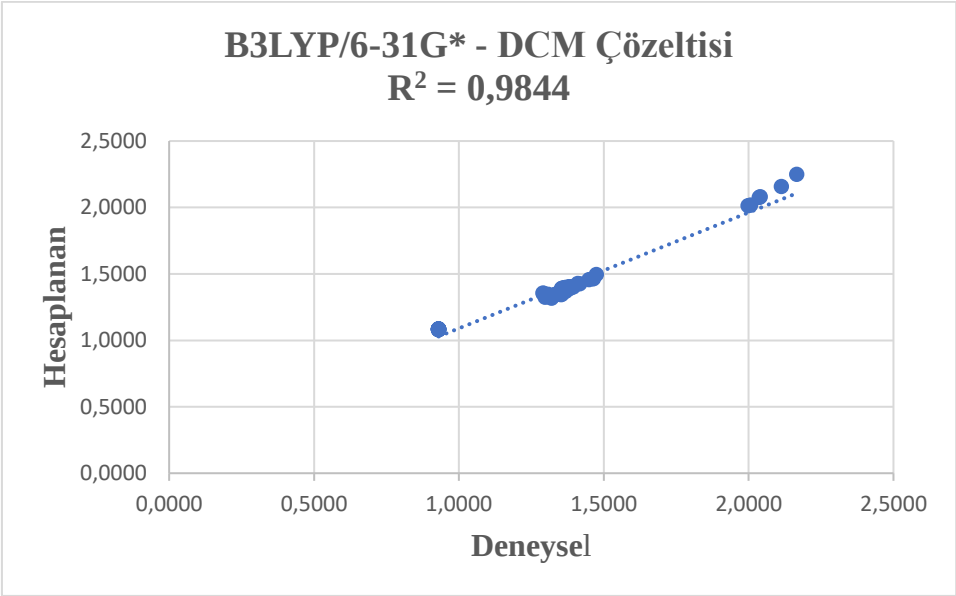
C ₂₉ - H ₃₀	0,9300	1,0862	1,0830	1,0855	1,0824	1,0854	1,0823	1,0854	1,0823
C ₂₉ - C ₃₁	1,3840	1,3889	1,3899	1,3910	1,3921	1,3913	1,3924	1,3914	1,3925
C ₃₁ - H ₃₂	0,9300	1,0843	1,0815	1,0840	1,0811	1,0840	1,0811	1,0839	1,0811
C ₃₁ - C ₃₃	1,3710	1,4005	1,3967	1,3975	1,3940	1,3970	1,3936	1,3968	1,3935
C ₃₃ - C ₃₄	1,4500	1,4507	1,4380	1,4562	1,4433	1,4569	1,4440	1,4571	1,4443
C ₃₅ - C ₃₆	1,4750	1,4984	1,4751	1,4953	1,4724	1,4950	1,4722	1,4949	1,4721
C ₃₇ - C ₃₈	1,4110	1,4293	1,4309	1,4285	1,4302	1,4284	1,4301	1,4283	1,4300
C ₃₇ - C ₄₂	1,3840	1,3998	1,3949	1,3978	1,3931	1,3975	1,3929	1,3974	1,3928
C ₃₈ - C ₃₉	1,3880	1,4016	1,4029	1,4028	1,4038	1,4029	1,4039	1,4029	1,4040
C ₃₉ - H ₄₀	0,9300	1,0838	1,0803	1,0836	1,0801	1,0835	1,0801	1,0835	1,0801
C ₃₉ - C ₄₁	1,3710	1,3896	1,3887	1,3873	1,3867	1,3870	1,3865	1,3869	1,3864
C ₄₃ - C ₄₄	1,4180	1,4256	1,4251	1,4260	1,4256	1,4262	1,4258	1,4263	1,4259
C ₄₃ - C ₄₉	1,3960	1,3989	1,3974	1,4005	1,3992	1,4008	1,3996	1,4010	1,3998
C ₄₄ - C ₄₅	1,3880	1,4039	1,3994	1,4032	1,3988	1,4032	1,3988	1,4032	1,3988
C ₄₄ - C ₅₁	1,4630	1,4587	1,4529	1,4628	1,4572	1,4635	1,4579	1,4638	1,4582
C ₄₅ - C ₄₆	1,3670	1,3838	1,3806	1,3854	1,3825	1,3857	1,3828	1,3858	1,3829
C ₄₆ - H ₄₇	0,9300	1,0827	1,0788	1,0830	1,0791	1,0830	1,0791	1,0830	1,0791
C ₄₆ - C ₄₈	1,3570	1,3915	1,3901	1,3908	1,3895	1,3907	1,3895	1,3907	1,3895
C ₄₈ - C ₄₉	1,3770	1,3892	1,3881	1,3894	1,3886	1,3895	1,3888	1,3895	1,3889
C ₄₉ - H ₅₀	0,9300	1,0837	1,0805	1,0840	1,0810	1,0841	1,0811	1,0842	1,0812
C ₅₁ - C ₅₂	1,3820	1,4059	1,4045	1,4040	1,4026	1,4038	1,4023	1,4036	1,4022
C ₅₂ - H ₅₃	0,9300	1,0795	1,0760	1,0795	1,0760	1,0795	1,0760	1,0795	1,0760
C ₅₂ - C ₅₄	1,3670	1,3877	1,3876	1,3894	1,3895	1,3897	1,3899	1,3898	1,3900
C ₅₄ - H ₅₅	0,9300	1,0861	1,0830	1,0856	1,0826	1,0855	1,0826	1,0855	1,0825
C ₅₄ - C ₅₆	1,3640	1,3967	1,3993	1,3959	1,3985	1,3957	1,3984	1,3957	1,3983
C ₅₆ - H ₅₇	0,9300	1,0844	1,0815	1,0841	1,0812	1,0840	1,0811	1,0840	1,0811
C ₅₆ - C ₅₈	1,3780	1,3862	1,3858	1,3871	1,3869	1,3873	1,3871	1,3874	1,3872
C ₅₈ - H ₅₉	0,9300	1,0827	1,0794	1,0823	1,0792	1,0823	1,0792	1,0822	1,0792



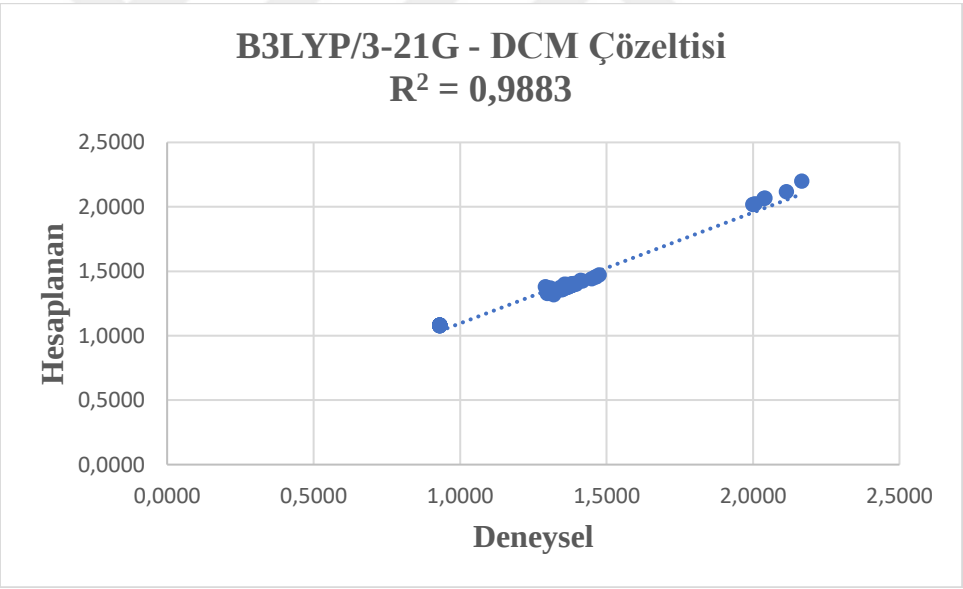
Şekil 3.3 B3LYP/6-31G*'ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (çözelti olmayan ortam)



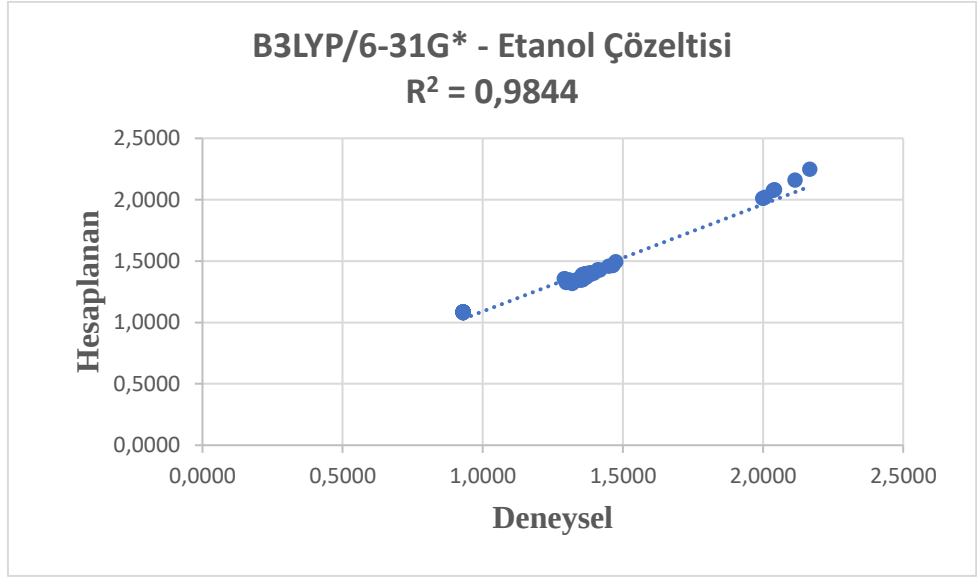
Şekil 3.4 B3LYP/3-21G'ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (çözelti olmayan ortam)



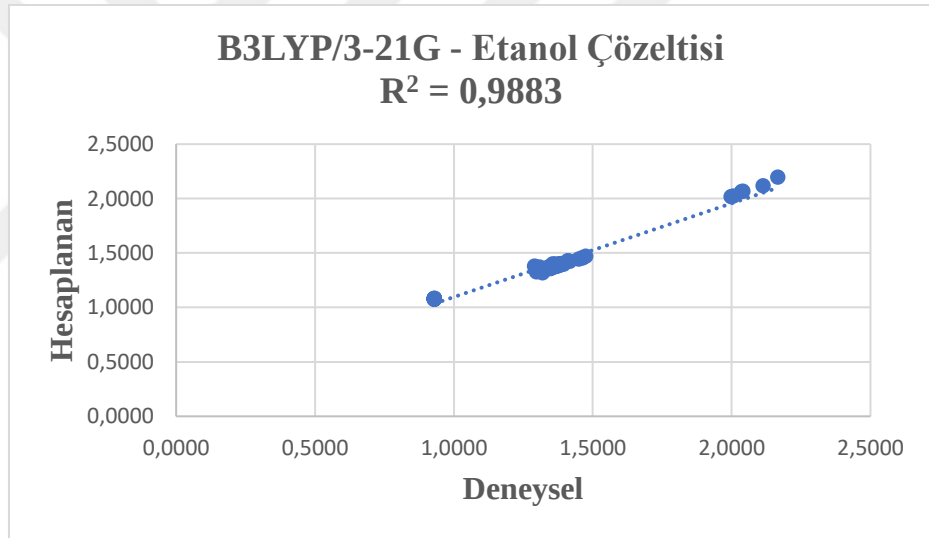
Şekil 3.5 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde)



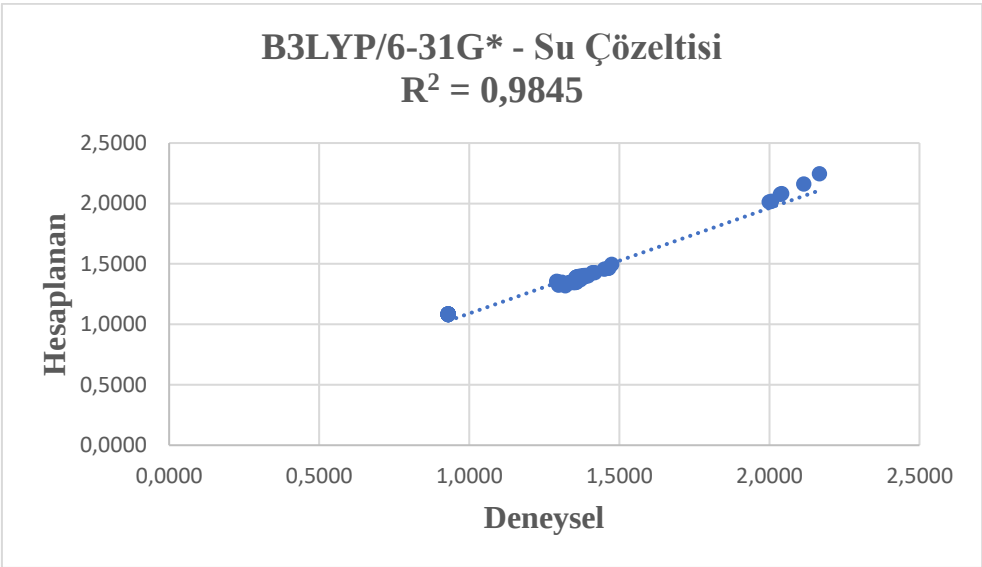
Şekil 3.6 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde)



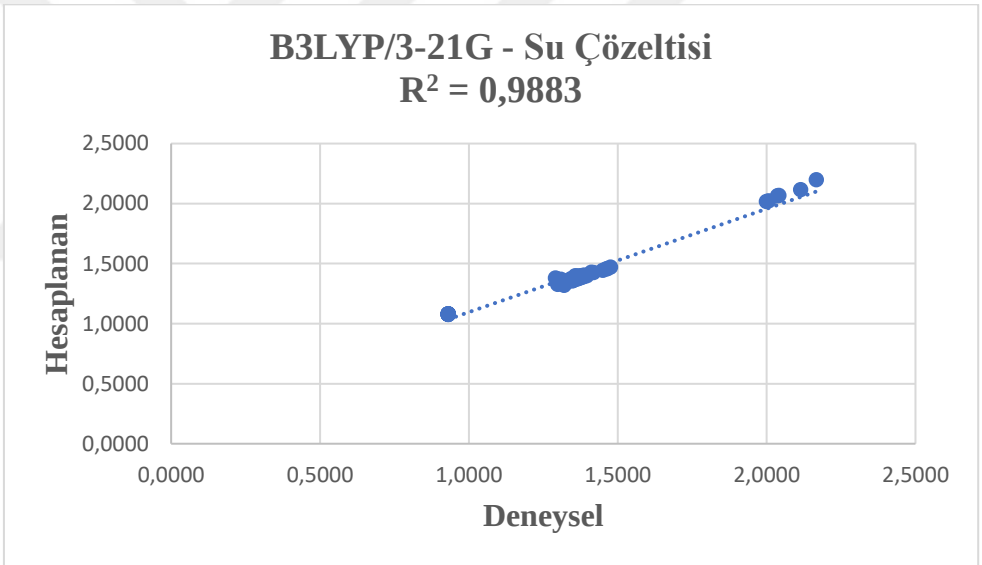
Şekil 3.7 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde)



Şekil 3.8 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde)



Şekil 3.9 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde)



Şekil 3.10 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde)

Çizelge 3.2 dfbpy-Ir-dfppy yapısı bağ uzunluğu değerleri ile dört farklı ortamda HF metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası

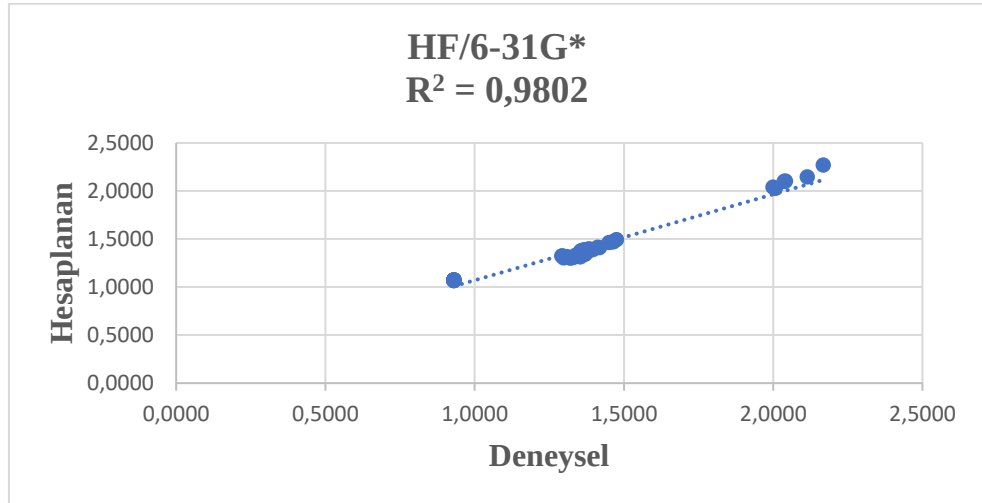
dfbpy-Ir-dfppy		HF							
		Gaz	Gaz	DCM	DCM	Etanol	Etanol	Su	Su
Bağ Adı	Deneyisel Bağ Uzunluğu	6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G
		Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik
Ir ₁ - N ₉	2,1670	2,2698	2,2201	2,2586	2,2096	2,2562	2,2077	2,2551	2,2069
Ir ₁ - N ₁₂	2,1140	2,1481	2,1139	2,1551	2,1193	2,1561	2,1196	2,1565	2,1196
Ir ₁ - N ₁₃	2,0370	2,1016	2,0879	2,1017	2,0879	2,1018	2,0879	2,1017	2,0879
Ir ₁ - N ₁₄	2,0410	2,1038	2,0875	2,1067	2,0904	2,1070	2,0908	2,1071	2,0909
Ir ₁ - C ₃₈	1,9990	2,0409	2,0452	2,0382	2,0425	2,0377	2,0422	2,0375	2,0421
Ir ₁ - C ₄₃	2,0070	2,0286	2,0332	2,0319	2,0369	2,0326	2,0375	2,0329	2,0377
F ₂ - C ₄₂	1,3430	1,3205	1,3513	1,3213	1,3523	1,3214	1,3524	1,3215	1,3525
F ₃ - C ₄₁	1,3530	1,3145	1,3417	1,3191	1,3460	1,3196	1,3465	1,3197	1,3467
F ₄ - C ₄₈	1,3540	1,3256	1,3536	1,3296	1,3572	1,3299	1,3575	1,3300	1,3576
F ₅ - C ₄₅	1,3520	1,3320	1,3625	1,3324	1,3629	1,3323	1,3629	1,3323	1,3628
F ₆ - C ₃₆	1,3090	1,3171	1,3443	1,3191	1,3459	1,3194	1,3462	1,3196	1,3463
F ₇ - C ₃₆	1,2910	1,3237	1,3505	1,3255	1,3530	1,3255	1,3530	1,3256	1,3530
F ₈ - C ₃₆	1,2940	1,3250	1,3533	1,3257	1,3534	1,3257	1,3535	1,3256	1,3535
N ₉ - C ₂₅	1,3470	1,3281	1,3375	1,3267	1,3362	1,3265	1,3360	1,3264	1,3359
N ₉ - C ₃₃	1,3600	1,3364	1,3429	1,3383	1,3449	1,3387	1,3453	1,3389	1,3455
N ₁₀ - C ₃₄	1,3330	1,3142	1,3211	1,3181	1,3246	1,3187	1,3251	1,3190	1,3254
N ₁₀ - C ₃₅	1,3510	1,3348	1,3510	1,3344	1,3503	1,3342	1,3501	1,3342	1,3500
N ₁₁ - N ₁₂	1,3570	1,3262	1,3688	1,3299	1,3721	1,3305	1,3726	1,3308	1,3728
N ₁₁ - C ₃₅	1,3290	1,3072	1,3204	1,3048	1,3176	1,3046	1,3173	1,3044	1,3171
N ₁₂ - C ₃₄	1,3400	1,3219	1,3382	1,3193	1,3359	1,3189	1,3355	1,3187	1,3353
N ₁₃ - C ₅₁	1,3700	1,3427	1,3487	1,3438	1,3499	1,3440	1,3501	1,3442	1,3502
N ₁₃ - C ₅₈	1,3490	1,3305	1,3389	1,3304	1,3387	1,3303	1,3386	1,3303	1,3386
N ₁₄ - C ₁₆	1,3670	1,3436	1,3490	1,3442	1,3498	1,3443	1,3499	1,3443	1,3499

Çizelge 3.2 dfbpy-Ir-dfppy yapısı bağ uzunluğu değerleri ile dört farklı ortamda HF metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası (devam)

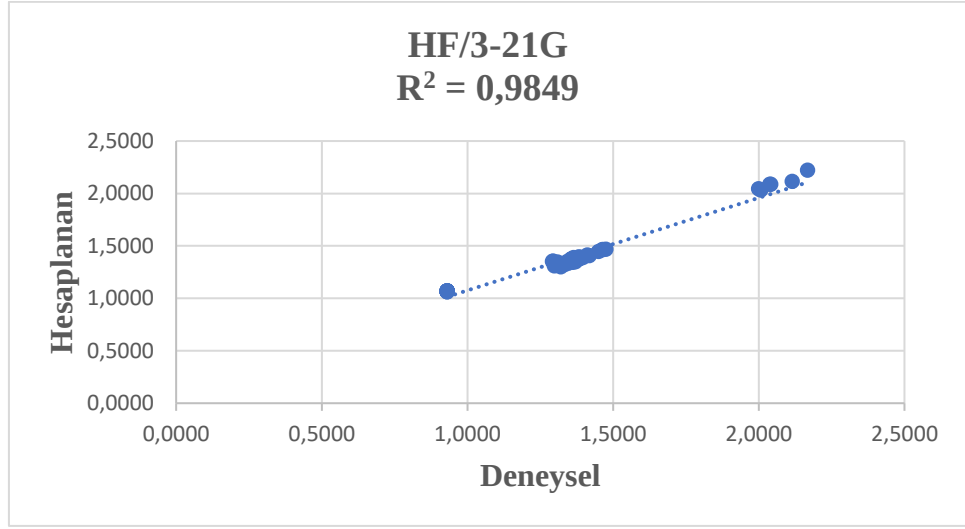
N ₁₄ - C ₂₃	1,3370	1,3302	1,3382	1,3302	1,3382	1,3302	1,3382	1,3303	1,3382
N ₁₅ - C ₄₁	1,2980	1,3058	1,3097	1,3063	1,3097	1,3064	1,3098	1,3065	1,3098
N ₁₅ - C ₄₂	1,3200	1,2995	1,3002	1,3021	1,3027	1,3025	1,3030	1,3025	1,3031
C ₁₆ - C ₁₇	1,3810	1,3936	1,3893	1,3913	1,3871	1,3910	1,3869	1,3910	1,3868
C ₁₆ - C ₃₇	1,4650	1,4745	1,4655	1,4765	1,4673	1,4767	1,4674	1,4768	1,4675
C ₁₇ - H ₁₈	0,9300	1,0674	1,0633	1,0672	1,0632	1,0672	1,0632	1,0672	1,0632
C ₁₇ - C ₁₉	1,3690	1,3791	1,3785	1,3807	1,3800	1,3808	1,3802	1,3809	1,3802
C ₁₉ - H ₂₀	0,9300	1,0748	1,0713	1,0741	1,0708	1,0741	1,0707	1,0740	1,0707
C ₁₉ - C ₂₁	1,3690	1,3857	1,3854	1,3849	1,3845	1,3849	1,3845	1,3849	1,3845
C ₂₁ - H ₂₂	0,9300	1,0726	1,0690	1,0722	1,0688	1,0722	1,0687	1,0722	1,0687
C ₂₁ - C ₂₃	1,3550	1,3748	1,3739	1,3753	1,3746	1,3753	1,3746	1,3753	1,3746
C ₂₃ - H ₂₄	0,9300	1,0706	1,0669	1,0701	1,0664	1,0701	1,0664	1,0701	1,0664
C ₂₅ - H ₂₆	0,9300	1,0722	1,0678	1,0716	1,0672	1,0715	1,0672	1,0714	1,0671
C ₂₅ - C ₂₇	1,3590	1,3786	1,3775	1,3810	1,3796	1,3814	1,3799	1,3816	1,3801
C ₂₇ - H ₂₈	0,9300	1,0730	1,0694	1,0725	1,0690	1,0724	1,0689	1,0724	1,0689
C ₂₇ - C ₂₉	1,3790	1,3880	1,3874	1,3847	1,3844	1,3842	1,3840	1,3839	1,3837
C ₂₉ - H ₃₀	0,9300	1,0746	1,0710	1,0739	1,0704	1,0738	1,0703	1,0738	1,0703
C ₂₉ - C ₃₁	1,3840	1,3800	1,3800	1,3838	1,3835	1,3844	1,3840	1,3846	1,3842
C ₃₁ - H ₃₂	0,9300	1,0721	1,0688	1,0718	1,0684	1,0718	1,0684	1,0718	1,0684
C ₃₁ - C ₃₃	1,3710	1,3866	1,3810	1,3820	1,3770	1,3812	1,3764	1,3809	1,3761
C ₃₃ - C ₃₄	1,4500	1,4644	1,4472	1,4686	1,4516	1,4691	1,4521	1,4693	1,4523
C ₃₅ - C ₃₆	1,4750	1,4946	1,4679	1,4929	1,4660	1,4928	1,4659	1,4927	1,4658
C ₃₇ - C ₃₈	1,4110	1,4144	1,4139	1,4135	1,4133	1,4134	1,4132	1,4133	1,4132
C ₃₇ - C ₄₂	1,3840	1,3864	1,3797	1,3842	1,3776	1,3840	1,3774	1,3839	1,3773
C ₃₈ - C ₃₉	1,3880	1,3911	1,3923	1,3927	1,3935	1,3928	1,3936	1,3929	1,3937
C ₃₉ - H ₄₀	0,9300	1,0719	1,0675	1,0717	1,0673	1,0716	1,0673	1,0716	1,0673
C ₃₉ - C ₄₁	1,3710	1,3763	1,3722	1,3736	1,3698	1,3732	1,3695	1,3730	1,3693
C ₄₃ - C ₄₄	1,4180	1,4104	1,4078	1,4110	1,4087	1,4112	1,4090	1,4113	1,4092
C ₄₃ - C ₄₉	1,3960	1,3902	1,3882	1,3917	1,3898	1,3920	1,3901	1,3922	1,3902

Çizelge 3.2 dfbpy-Ir-dfppy yapısı bağ uzunluğu değerleri ile dört farklı ortamda HF metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası (devam)

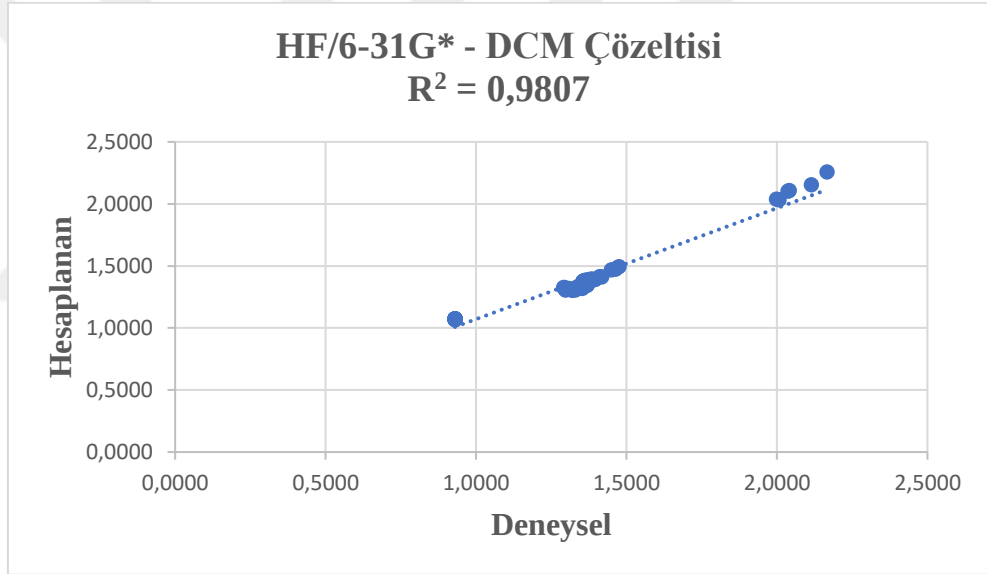
$C_{44} - C_{45}$	1,3880	1,3908	1,3835	1,3901	1,3829	1,3901	1,3828	1,3901	1,3828
$C_{44} - C_{51}$	1,4630	1,4718	1,4642	1,4762	1,4688	1,4769	1,4695	1,4773	1,4698
$C_{45} - C_{46}$	1,3670	1,3728	1,3678	1,3747	1,3698	1,3750	1,3701	1,3751	1,3703
$C_{46} - H_{47}$	0,9300	1,0716	1,0666	1,0718	1,0670	1,0719	1,0671	1,0719	1,0671
$C_{46} - C_{48}$	1,3570	1,3790	1,3747	1,3780	1,3739	1,3780	1,3738	1,3779	1,3738
$C_{48} - C_{49}$	1,3770	1,3760	1,3718	1,3762	1,3721	1,3763	1,3723	1,3763	1,3724
$C_{49} - H_{50}$	0,9300	1,0719	1,0680	1,0724	1,0685	1,0725	1,0686	1,0725	1,0687
$C_{51} - C_{52}$	1,3820	1,3975	1,3939	1,3938	1,3902	1,3932	1,3897	1,3930	1,3894
$C_{52} - H_{53}$	0,9300	1,0666	1,0625	1,0666	1,0624	1,0666	1,0625	1,0666	1,0625
$C_{52} - C_{54}$	1,3670	1,3756	1,3747	1,3790	1,3780	1,3796	1,3786	1,3799	1,3789
$C_{54} - H_{55}$	0,9300	1,0747	1,0712	1,0742	1,0708	1,0741	1,0708	1,0741	1,0708
$C_{54} - C_{56}$	1,3640	1,3879	1,3875	1,3859	1,3855	1,3855	1,3851	1,3854	1,3849
$C_{56} - H_{57}$	0,9300	1,0727	1,0691	1,0723	1,0688	1,0722	1,0688	1,0722	1,0688
$C_{56} - C_{58}$	1,3780	1,3718	1,3706	1,3739	1,3728	1,3743	1,3732	1,3744	1,3734
$C_{58} - H_{59}$	0,9300	1,0705	1,0666	1,0700	1,0663	1,0699	1,0662	1,0699	1,0662



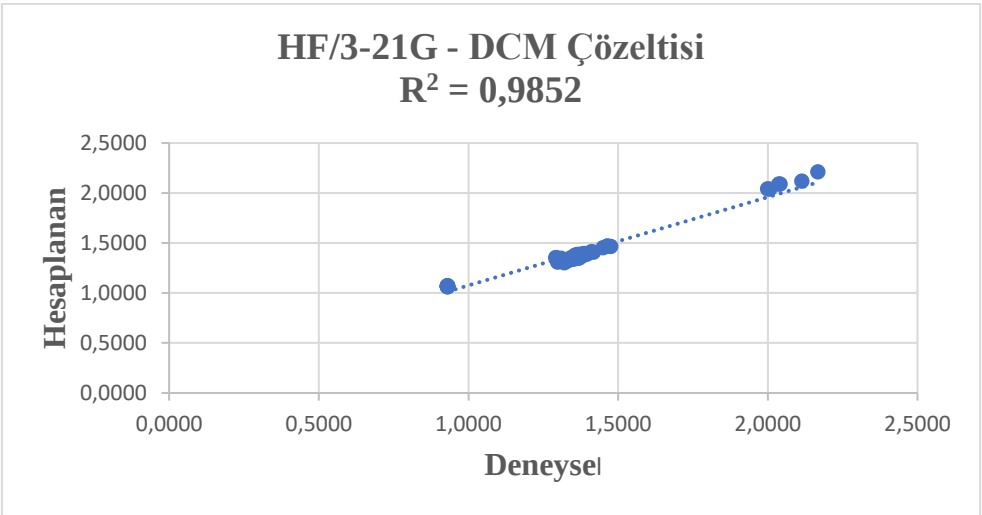
Şekil 3.11 HF/6-31G*'ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği



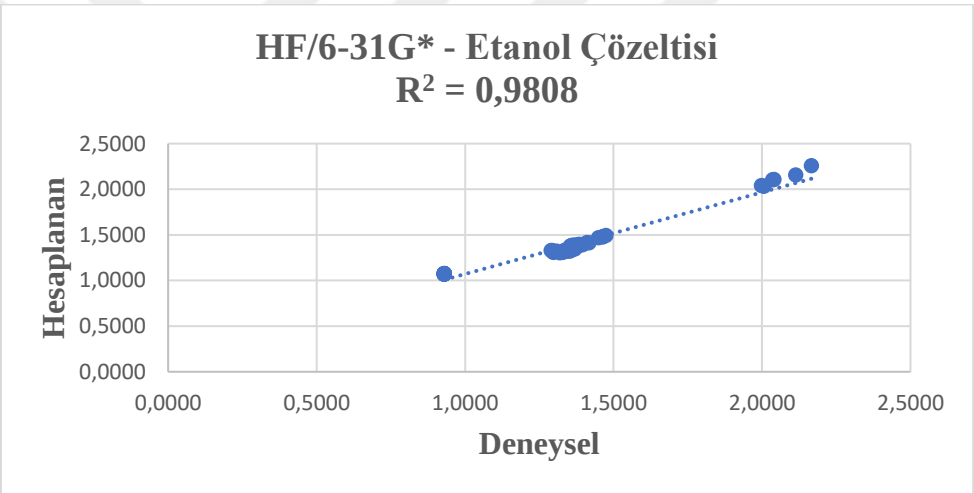
Şekil 3.12 HF/3-21G'ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği



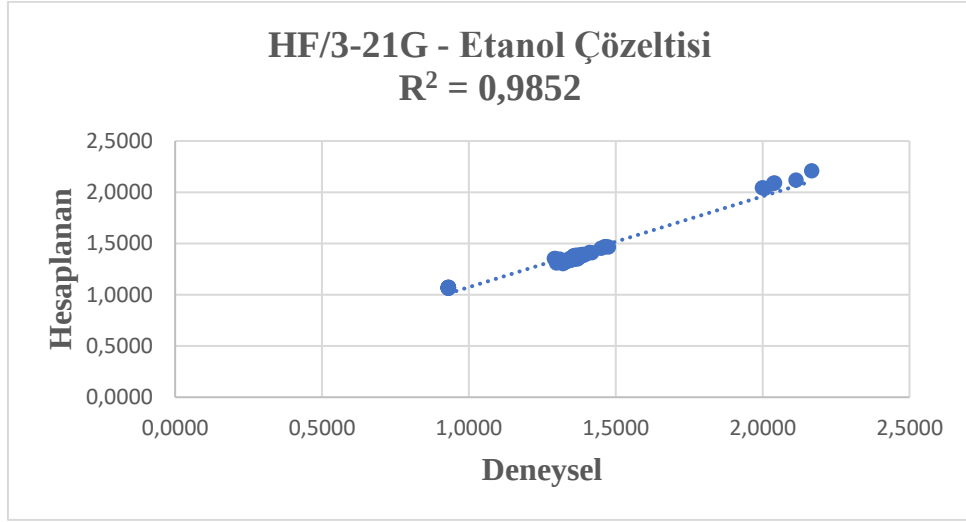
Şekil 3.13 HF/6-31G*'ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde)



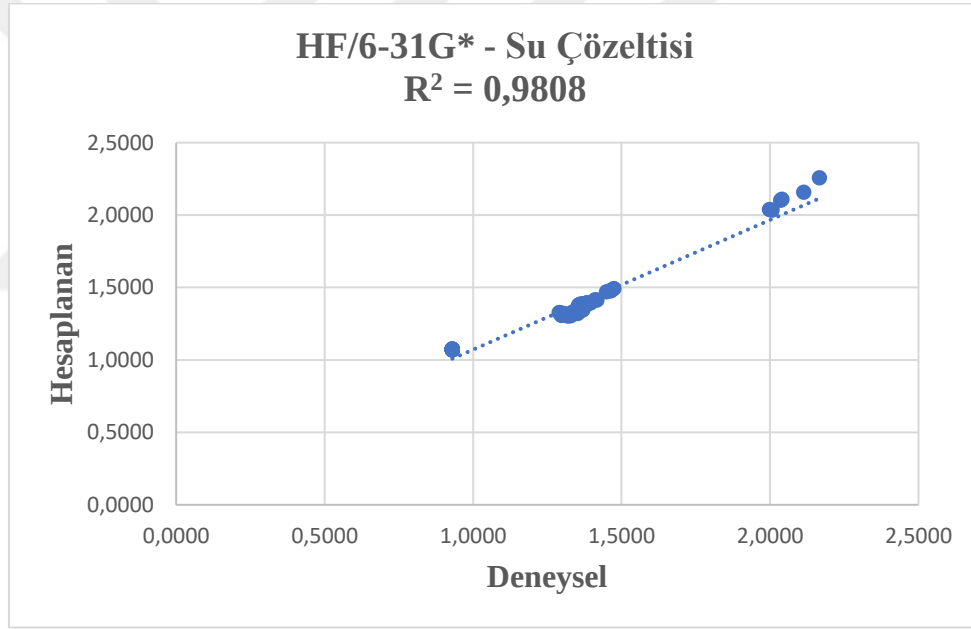
Şekil 3.14 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde)



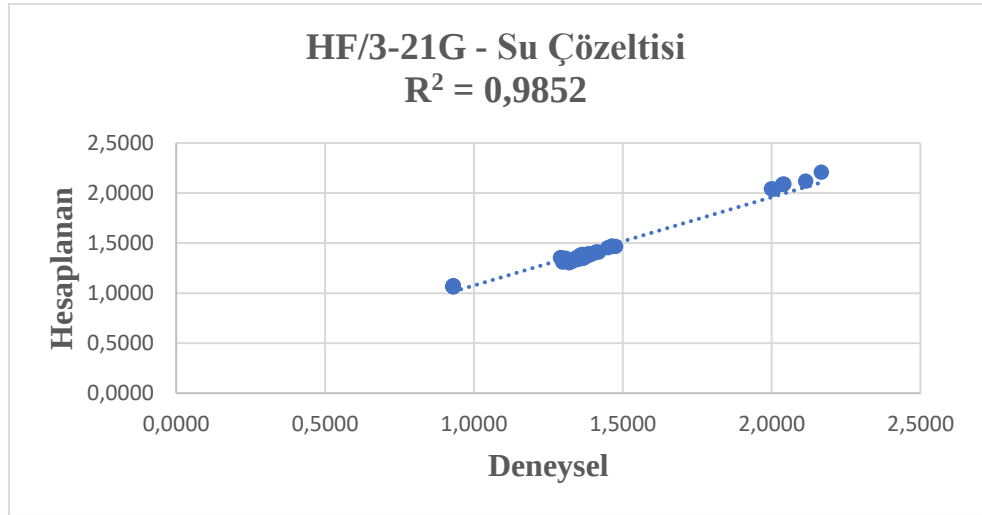
Şekil 3.15 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde)



Şekil 3.16 HF/3-21G'ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde)



Şekil 3.17 HF/6-31G*'ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde)



Şekil 3.18 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde)

Çizelge 3.3 dfbpy-Ir-dfppy yapısı bağ açıları değerleri ile dört farklı ortamda B3LYP metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası

dfbpy-Ir-dfppy		B3LYP							
		Gaz	Gaz	DCM	DCM	Etanol	Etanol	Su	Su
		6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G
Bağ Adı	Deneysel Bağ Açısı	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik
N ₉ - Ir ₁ -	76,4800	75,2020	76,2522	75,1286	76,1744	75,1168	76,1659	75,1116	76,1630
N ₉ - Ir ₁ -	96,3500	96,2610	95,6826	96,3895	95,9253	96,4227	95,9667	96,4428	95,9860
N ₉ - Ir ₁ -	87,1700	88,4071	89,4373	87,9507	88,7986	87,8723	88,7034	87,8300	88,6591
N ₉ - Ir ₁ -	96,0400	96,1177	95,8156	96,6497	96,3086	96,7040	96,3397	96,7321	96,3528
N ₁₂ - Ir ₁ -	86,8800	88,6980	89,9154	88,6561	89,7107	88,6770	89,7317	88,6755	89,7409
N ₁₂ - Ir ₁ -	95,3000	94,9202	93,9652	95,4639	94,6380	95,5289	94,6998	95,5642	94,7216
N ₁₂ - Ir ₁ -	100,1600	97,6862	97,9248	97,6506	98,0605	97,6914	98,0301	97,7074	98,0105
N ₁₃ - Ir ₁ -	97,9100	96,7315	96,0562	96,1567	95,5230	96,0617	95,4327	96,0243	95,3981
N ₁₃ - Ir ₁ -	80,2400	80,2550	80,5809	80,2138	80,5309	80,2121	80,5259	80,2114	80,5241
N ₁₄ - Ir ₁ -	80,3100	80,2460	80,6671	80,2249	80,6354	80,2223	80,6321	80,2203	80,6311
N ₁₄ - Ir ₁ -	96,3200	95,4097	94,5932	95,8546	95,0883	95,9114	95,1590	95,9384	95,1911
C ₃₈ - Ir ₁ -	87,5100	91,2046	90,2946	90,7489	89,6897	90,6606	89,6912	90,6188	89,6980
Ir ₁ - N ₉ -	126,3000	126,6850	126,5898	126,3118	126,2493	126,2492	126,1986	126,2226	126,1763
Ir ₁ - N ₉ -	115,5000	114,3980	114,4987	114,8405	114,8810	114,9121	114,9325	114,9424	114,9540
C ₂₅ - N ₉ -	118,2000	118,9036	118,9011	118,8326	118,8556	118,8223	118,8537	118,8178	118,8538

Çizelge 3.3 dfbpy-Ir-dfppy yapısı bağ açıları değerleri ile dört farklı ortamda B3LYP metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası (devam)

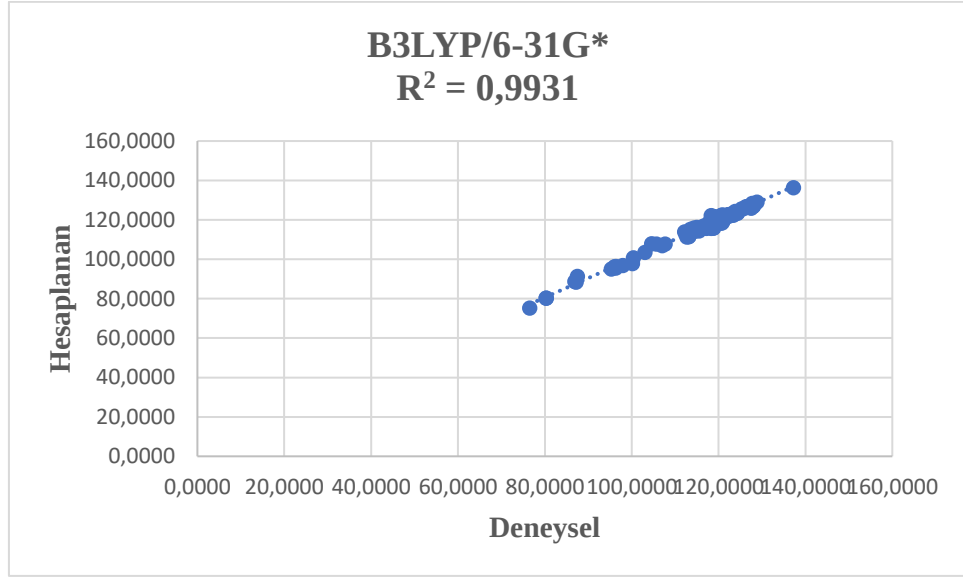
C ₃₄ - N ₁₀ - C ₃₅	100,4000	100,7402	101,898	100,763	101,920	100,779	101,934	100,787	101,942
N ₁₂ - N ₁₁ - C ₃₅	103,0000	103,4806	102,814	103,445	102,812	103,448	102,814	103,450	102,815
Ir ₁ - N ₁₂ - N ₁₁	137,2000	136,2068	136,662	136,194	136,652	136,212	136,638	136,217	136,631
Ir ₁ - N ₁₂ - C ₃₄	115,0000	116,0574	115,935	116,009	115,951	115,992	115,963	115,989	115,969
N ₁₁ - N ₁₂ - C ₃₄	107,7000	107,7358	107,389	107,789	107,396	107,787	107,398	107,785	107,399
Ir ₁ - N ₁₃ - C ₅₁	117,2000	115,6426	115,297	115,800	115,467	115,822	115,491	115,831	115,500
Ir ₁ - N ₁₃ - C ₅₈	123,8000	124,2286	124,751	124,085	124,583	124,067	124,564	124,061	124,558
C ₅₁ - N ₁₃ - C ₅₈	118,8000	120,0981	119,933	120,104	119,944	120,103	119,941	120,101	119,938
Ir ₁ - N ₁₄ - C ₁₆	116,7000	115,9480	115,602	115,903	115,557	115,895	115,546	115,892	115,541
Ir ₁ - N ₁₄ - C ₂₃	124,4000	123,7677	124,234	124,006	124,471	124,039	124,508	124,052	124,525
C ₁₆ - N ₁₄ - C ₂₃	118,9000	120,2815	120,151	120,089	119,970	120,064	119,944	120,054	119,933
C ₄₁ - N ₁₅ - C ₄₂	114,3000	115,7366	117,687	115,600	117,515	115,591	117,503	115,589	117,499
N ₁₄ - C ₁₆ - C ₁₇	119,4000	119,5747	119,833	119,736	119,965	119,756	119,981	119,764	119,988
N ₁₄ - C ₁₆ - C ₃₇	112,6000	113,4245	113,883	113,346	113,821	113,340	113,819	113,337	113,818
C ₁₇ - C ₁₆ - C ₃₇	128,0000	126,9937	126,272	126,914	126,209	126,900	126,196	126,895	126,190
C ₁₆ - C ₁₇ - H ₁₈	119,9000	119,2440	118,010	119,486	118,287	119,514	118,320	119,524	118,333
C ₁₆ - C ₁₇ - C ₁₉	120,1000	119,9126	119,838	119,923	119,867	119,924	119,871	119,925	119,873
H ₁₈ - C ₁₇ - C ₁₉	119,9000	120,8415	122,148	120,589	121,844	120,561	121,807	120,549	121,792
C ₁₇ - C ₁₉ - H ₂₀	120,1000	119,8567	119,992	119,906	120,038	119,911	120,045	119,913	120,047
C ₁₇ - C ₁₉ - C ₂₁	119,9000	119,5518	119,599	119,456	119,508	119,445	119,497	119,441	119,492
H ₂₀ - C ₁₉ - C ₂₁	120,1000	120,5901	120,405	120,636	120,451	120,641	120,456	120,645	120,459
C ₁₉ - C ₂₁ - H ₂₂	120,9000	121,8757	121,504	121,841	121,474	121,834	121,469	121,833	121,468
C ₁₉ - C ₂₁ - C ₂₃	118,2000	118,4311	118,943	118,449	118,945	118,450	118,945	118,450	118,944
H ₂₂ - C ₂₁ - C ₂₃	120,9000	119,6928	119,551	119,708	119,579	119,715	119,585	119,716	119,587
N ₁₄ - C ₂₃ - C ₂₁	123,4000	122,2383	121,617	122,340	121,736	122,354	121,754	122,361	121,761
N ₁₄ - C ₂₃ - H ₂₄	118,3000	115,6331	115,936	115,802	116,141	115,825	116,176	115,835	116,192
C ₂₁ - C ₂₃ - H ₂₄	118,3000	122,1237	122,439	121,854	122,119	121,818	122,067	121,802	122,043
N ₉ - C ₂₅ - H ₂₆	118,9000	115,7848	115,988	116,017	116,279	116,057	116,321	116,074	116,338
N ₉ - C ₂₅ - C ₂₇	122,1000	122,6001	121,969	122,539	121,920	122,523	121,904	122,516	121,896
H ₂₆ - C ₂₅ - C ₂₇	118,9000	121,6147	122,041	121,442	121,799	121,418	121,773	121,408	121,764
C ₂₅ - C ₂₇ - H ₂₈	120,2000	119,8027	119,675	119,725	119,605	119,707	119,590	119,699	119,583
C ₂₅ - C ₂₇ - C ₂₉	119,6000	118,6605	119,101	118,760	119,176	118,781	119,192	118,790	119,199
H ₂₈ - C ₂₇ - C ₂₉	120,2000	121,5368	121,223	121,514	121,218	121,510	121,217	121,510	121,217
C ₂₇ - C ₂₉ - H ₃₀	120,3000	120,4897	120,334	120,587	120,425	120,599	120,434	120,604	120,437
C ₂₇ - C ₂₉ - C ₃₁	119,3000	119,2411	119,328	119,130	119,243	119,114	119,233	119,108	119,230
H ₃₀ - C ₂₉ - C ₃₁	120,3000	120,2692	120,337	120,281	120,331	120,286	120,331	120,287	120,331
C ₂₉ - C ₃₁ - H ₃₂	120,8000	122,5086	122,840	121,976	122,277	121,912	122,207	121,886	122,178
C ₂₉ - C ₃₁ - C ₃₃	118,5000	119,0338	119,131	119,035	119,130	119,031	119,125	119,029	119,123
H ₃₂ - C ₃₁ - C ₃₃	120,8000	118,4574	118,027	118,988	118,592	119,055	118,666	119,083	118,698
N ₉ - C ₃₃ - C ₃₁	122,2000	121,5600	121,566	121,700	121,672	121,725	121,688	121,736	121,695
N ₉ - C ₃₃ - C ₃₄	113,5000	115,2046	114,989	114,947	114,762	114,915	114,732	114,901	114,719
C ₃₁ - C ₃₃ - C ₃₄	124,3000	123,2349	123,441	123,352	123,563	123,358	123,577	123,361	123,584
N ₁₀ - C ₃₄ - N ₁₂	112,9000	112,5212	112,475	112,449	112,409	112,438	112,393	112,434	112,385

Çizelge 3.3 dfbpy-Ir-dfppy yapısı bağ açıları değerleri ile dört farklı ortamda B3LYP metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası (devam)

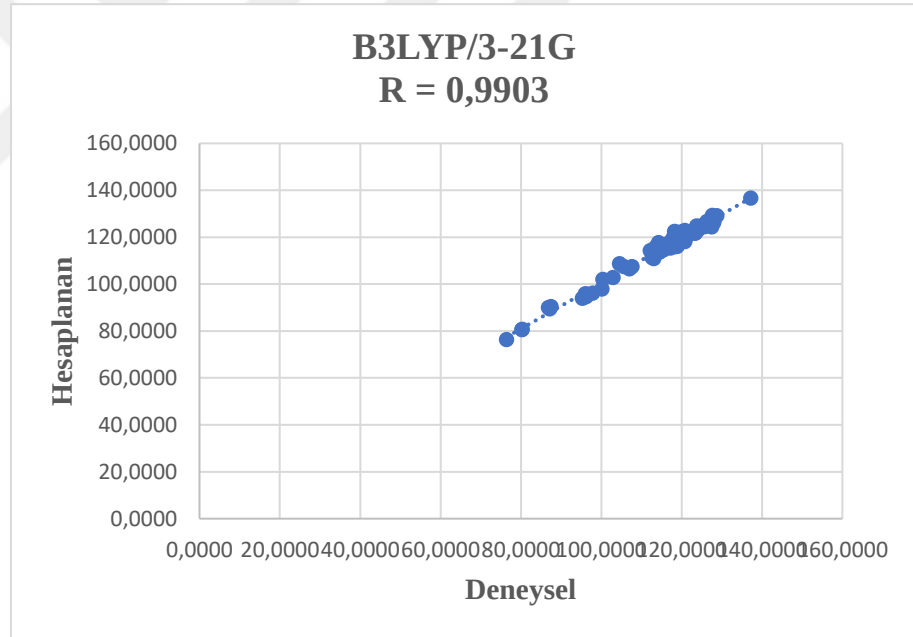
N ₁₀ - C ₃₄ - C ₃₃	127,7000	128,3398	129,179	128,489	129,361	128,513	129,403	128,526	129,423
N ₁₂ - C ₃₄ - C ₃₃	119,2000	119,1273	118,319	119,057	118,220	119,045	118,195	119,036	118,183
N ₁₀ - C ₃₅ - N ₁₁	116,0000	115,5222	115,419	115,552	115,459	115,546	115,456	115,542	115,455
N ₁₀ - C ₃₅ - C ₃₆	121,5000	122,1219	122,266	121,988	122,159	121,992	122,170	121,994	122,179
N ₁₁ - C ₃₅ - C ₃₆	122,6000	122,3423	122,219	122,450	122,289	122,452	122,282	122,453	122,275
F ₆ - C ₃₆ - F ₇	105,7000	107,6130	107,472	107,409	107,222	107,378	107,197	107,365	107,185
F ₆ - C ₃₆ - F ₈	104,6000	107,8770	108,581	107,648	108,464	107,639	108,465	107,637	108,468
F ₆ - C ₃₆ - C ₃₅	113,1000	111,6048	110,808	111,811	110,946	111,815	110,935	111,813	110,927
F ₇ - C ₃₆ - F ₈	107,0000	106,8070	106,489	106,444	106,142	106,420	106,119	106,413	106,113
F ₇ - C ₃₆ - C ₃₅	113,1000	111,4729	112,106	111,692	112,347	111,712	112,360	111,718	112,365
F ₈ - C ₃₆ - C ₃₅	112,7000	111,2394	111,182	111,552	111,471	111,588	111,513	111,603	111,531
C ₁₆ - C ₃₇ - C ₃₈	115,9000	116,1567	116,153	116,183	116,163	116,189	116,170	116,192	116,173
C ₁₆ - C ₃₇ - C ₄₂	126,3000	126,3594	126,025	126,408	126,072	126,417	126,077	126,420	126,077
C ₃₈ - C ₃₇ - C ₄₂	117,8000	117,4814	117,808	117,407	117,760	117,392	117,751	117,386	117,746
Ir ₁ - C ₃₈ - C ₃₇	114,5000	114,1254	113,594	114,283	113,774	114,301	113,791	114,308	113,796
Ir ₁ - C ₃₈ - C ₃₉	128,8000	128,9924	129,173	128,691	128,896	128,641	128,856	128,618	128,841
C ₃₇ - C ₃₈ - C ₃₉	116,7000	116,8435	117,199	117,004	117,314	117,040	117,339	117,056	117,350
C ₃₈ - C ₃₉ - H ₄₀	121,0000	122,3563	121,952	122,428	122,043	122,448	122,062	122,458	122,071
C ₃₈ - C ₃₉ - C ₄₁	117,9000	118,3504	118,567	118,191	118,436	118,162	118,414	118,149	118,404
H ₄₀ - C ₃₉ - C ₄₁	121,0000	119,2924	119,476	119,380	119,519	119,388	119,522	119,392	119,523
F ₃ - C ₄₁ - N ₁₅	114,6000	115,3144	116,186	115,007	115,869	114,966	115,826	114,950	115,808
F ₃ - C ₄₁ - C ₃₉	117,9000	118,8504	119,494	118,997	119,636	119,020	119,662	119,029	119,673
N ₁₅ - C ₄₁ - C ₃₉	127,5000	125,8345	124,318	125,995	124,494	126,012	124,511	126,019	124,518
F ₂ - C ₄₂ - N ₁₅	113,6000	114,4644	115,696	114,146	115,354	114,106	115,312	114,089	115,295
F ₂ - C ₄₂ - C ₃₇	120,6000	119,7828	119,885	120,053	120,166	120,094	120,207	120,112	120,224
N ₁₅ - C ₄₂ - C ₃₇	125,8000	125,7518	124,417	125,799	124,478	125,799	124,480	125,798	124,480
Ir ₁ - C ₄₃ - C ₄₄	114,1000	114,2610	113,931	114,303	113,987	114,307	113,995	114,309	113,998
Ir ₁ - C ₄₃ - C ₄₉	127,4000	126,8568	127,250	126,786	127,188	126,786	127,189	126,788	127,191
C ₄₄ - C ₄₃ - C ₄₉	118,4000	118,8690	118,810	118,896	118,818	118,891	118,807	118,887	118,801
C ₄₃ - C ₄₄ - C ₄₅	118,6000	118,5764	119,003	118,518	118,983	118,513	118,984	118,512	118,986
C ₄₃ - C ₄₄ - C ₅₁	116,1000	115,9441	115,929	115,943	115,906	115,941	115,899	115,940	115,896
C ₄₅ - C ₄₄ - C ₅₁	125,3000	125,4792	125,067	125,537	125,110	125,544	125,116	125,547	125,117
F ₅ - C ₄₅ - C ₄₄	120,1000	120,3222	120,346	120,375	120,414	120,383	120,424	120,387	120,428
F ₅ - C ₄₅ - C ₄₆	117,1000	116,7053	117,670	116,562	117,546	116,542	117,530	116,534	117,523
C ₄₄ - C ₄₅ - C ₄₆	122,9000	122,9723	121,983	123,062	122,039	123,073	122,045	123,078	122,048
C ₄₅ - C ₄₆ - H ₄₇	121,3000	121,2182	120,601	121,198	120,564	121,192	120,555	121,189	120,551
C ₄₅ - C ₄₆ - C ₄₈	117,4000	116,8940	118,251	116,812	118,193	116,807	118,192	116,805	118,193
H ₄₇ - C ₄₆ - C ₄₈	121,3000	121,8877	121,147	121,989	121,242	122,000	121,251	122,005	121,255
F ₄ - C ₄₈ - C ₄₆	118,3000	118,1173	118,591	118,076	118,568	118,074	118,569	118,074	118,570
F ₄ - C ₄₈ - C ₄₉	118,2000	118,9990	119,525	118,951	119,479	118,949	119,476	118,948	119,475
C ₄₆ - C ₄₈ - C ₄₉	123,5000	122,8835	121,883	122,971	121,951	122,975	121,953	122,976	121,953
C ₄₃ - C ₄₉ - C ₄₈	119,3000	119,8010	120,066	119,735	120,013	119,736	120,015	119,737	120,016

Çizelge 3.3 dfbpy-Ir-dfppy yapısı bağ açıları değerleri ile dört farklı ortamda B3LYP metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası (devam)

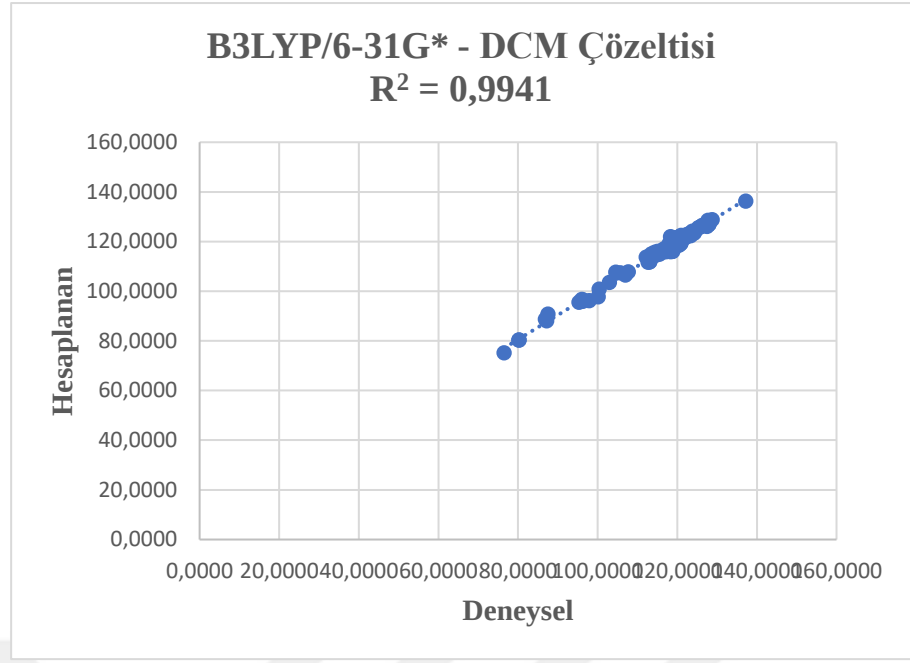
C ₄₃ - C ₄₉ - H ₅₀	120,4000	121,9456	121,568	121,807	121,430	121,782	121,406	121,771	121,395
C ₄₈ - C ₄₉ - H ₅₀	120,4000	118,2508	118,363	118,455	118,555	118,479	118,577	118,489	118,586
N ₁₃ - C ₅₁ - C ₄₄	112,2000	113,8192	114,219	113,682	114,083	113,666	114,063	113,659	114,055
N ₁₃ - C ₅₁ - C ₅₂	119,8000	119,3278	119,512	119,451	119,634	119,474	119,659	119,486	119,671
C ₄₄ - C ₅₁ - C ₅₂	128,0000	126,8523	126,267	126,864	126,281	126,858	126,276	126,853	126,272
C ₅₁ - C ₅₂ - H ₅₃	119,9000	119,1338	117,963	119,396	118,263	119,437	118,312	119,455	118,333
C ₅₁ - C ₅₂ - C ₅₄	120,2000	120,1920	120,176	120,134	120,117	120,122	120,105	120,117	120,099
H ₅₃ - C ₅₂ - C ₅₄	119,9000	120,6741	121,859	120,469	121,618	120,439	121,582	120,427	121,567
C ₅₂ - C ₅₄ - H ₅₅	119,8000	119,8901	120,022	119,902	120,029	119,903	120,028	119,903	120,027
C ₅₂ - C ₅₄ - C ₅₆	120,4000	119,5010	119,551	119,459	119,512	119,452	119,506	119,448	119,502
H ₅₅ - C ₅₄ - C ₅₆	119,8000	120,6088	120,425	120,637	120,458	120,644	120,465	120,648	120,469
C ₅₄ - C ₅₆ - H ₅₇	121,0000	121,9386	121,563	121,930	121,568	121,931	121,569	121,932	121,570
C ₅₄ - C ₅₆ - C ₅₈	118,1000	118,1934	118,678	118,287	118,768	118,306	118,787	118,316	118,796
H ₅₇ - C ₅₆ - C ₅₈	121,0000	119,8675	119,757	119,782	119,663	119,761	119,643	119,751	119,633
N ₁₃ - C ₅₈ - C ₅₆	122,7000	122,6869	122,146	122,562	122,021	122,539	121,999	122,529	121,990
N ₁₃ - C ₅₈ - H ₅₉	118,7000	115,7186	116,186	115,926	116,411	115,966	116,450	115,985	116,469
C ₅₆ - C ₅₈ - H ₅₉	118,7000	121,5944	121,667	121,511	121,567	121,493	121,549	121,485	121,540



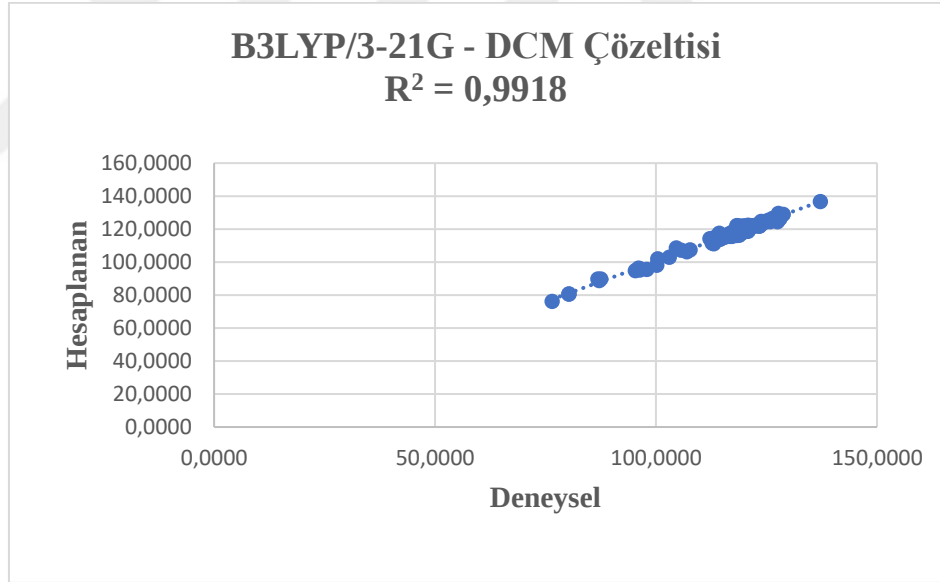
Şekil 3.19 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (çözelti olmayan ortam)



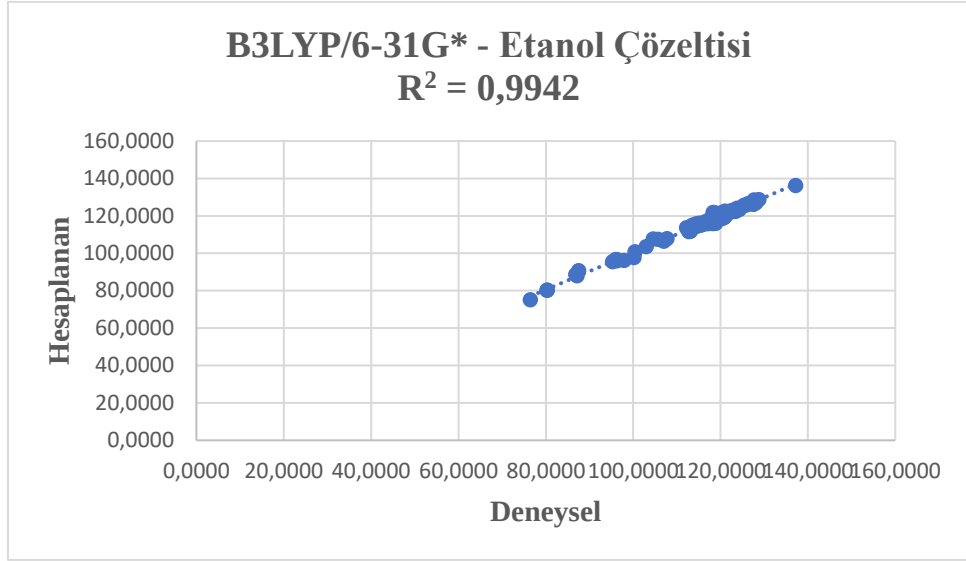
Şekil 3.20 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (çözelti olmayan ortam)



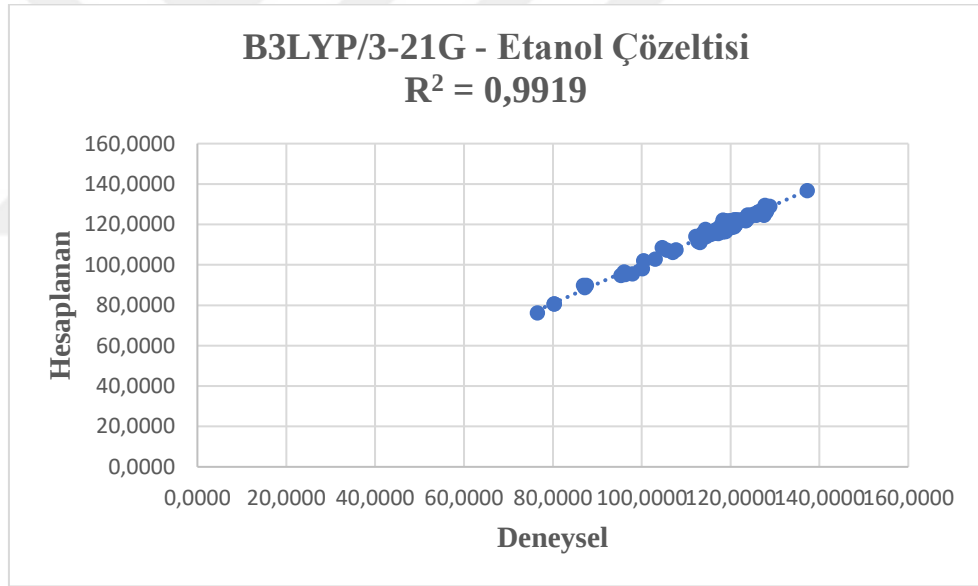
Şekil 3.21 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde)



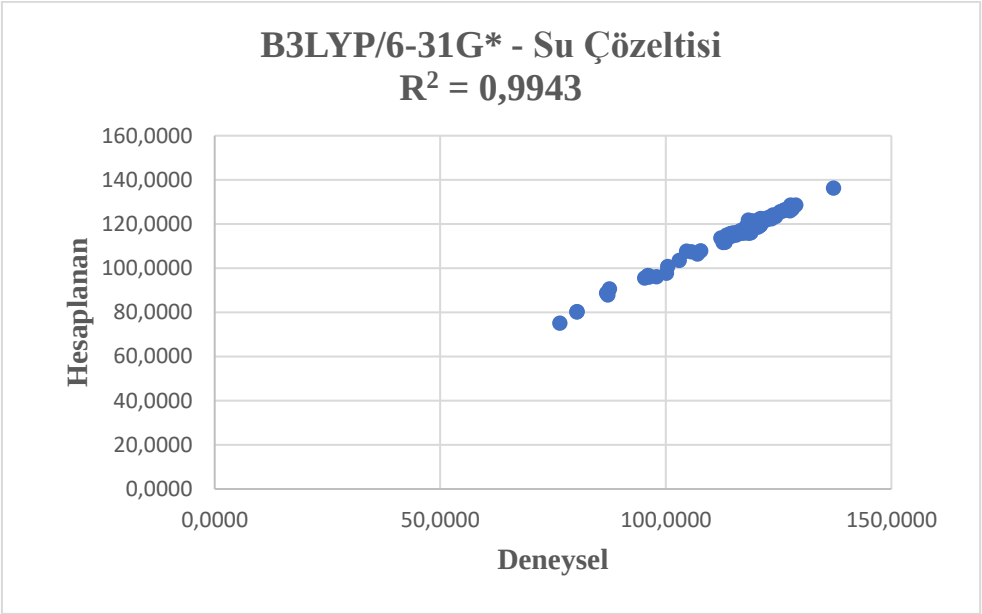
Şekil 3.22 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde)



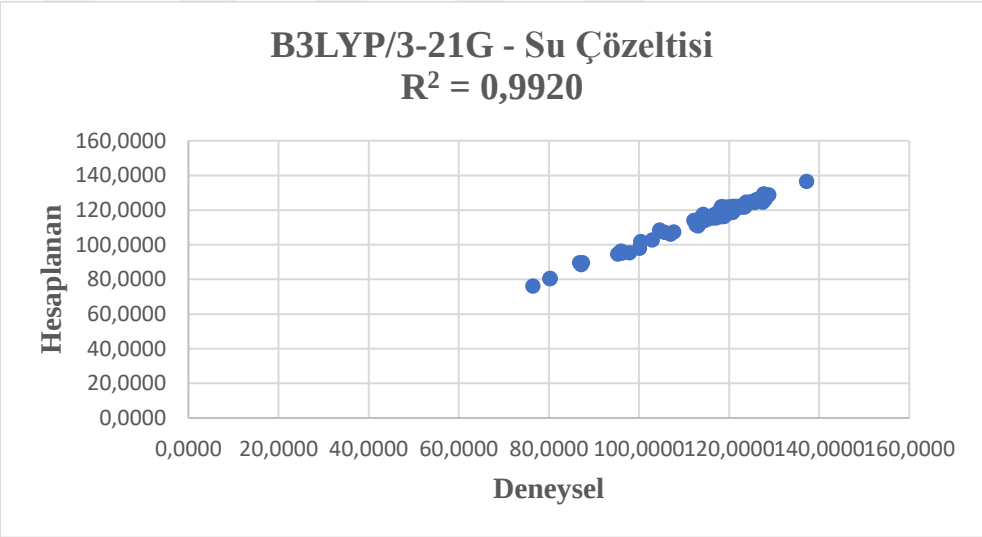
Şekil 3.23 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde)



Şekil 3.24 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde)



Şekil 3.25 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde)



Şekil 3.26 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde)

Çizelge 3.4 dfbpy-Ir-dfppy yapısı bağ açıları değerleri ile dört farklı ortamda HF metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası

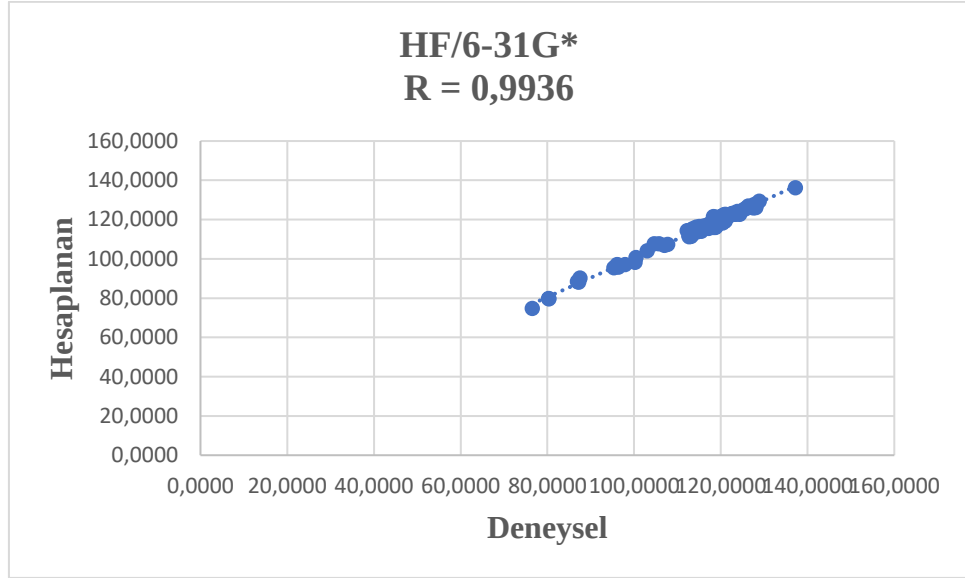
dfbpy-Ir-dfppy		HF							
		Gaz	Gaz	DCM	DCM	Etanol	Etanol	Su	Su
Bağ Adı	DeneySEL Bağ Açısı	6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G
		Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik
N ₉ - Ir ₁ - N ₁₂	76,4800	74,7898	75,9531	74,7807	75,9475	74,7816	75,9445	74,7836	75,9411
N ₉ - Ir ₁ - N ₁₃	96,3500	96,7468	96,4951	96,7505	96,5625	96,7498	96,5695	96,7593	96,5756
N ₉ - Ir ₁ - N ₁₄	87,1700	88,0726	88,3932	87,7991	88,0281	87,7575	87,9616	87,7229	87,9210
N ₉ - Ir ₁ - C ₃₈	96,0400	97,1143	96,6931	97,6903	97,1992	97,7751	97,2965	97,8228	97,3565
N ₁₂ - Ir ₁ - N ₁₃	86,8800	88,3877	88,7287	88,3423	88,6751	88,3621	88,6996	88,3974	88,7021
N ₁₂ - Ir ₁ - N ₁₄	95,3000	95,4410	94,9914	95,9372	95,5499	96,0019	95,6148	96,0324	95,6463
N ₁₂ - Ir ₁ - C ₄₃	100,160	98,1499	98,0755	97,9634	98,0311	97,9187	97,9323	97,8708	97,8665
N ₁₃ - Ir ₁ - C ₃₈	97,9100	97,0443	96,6937	96,5307	96,1288	96,4314	96,0220	96,3496	95,9770
N ₁₃ - Ir ₁ - C ₄₃	80,2400	79,7890	80,1406	79,7546	80,0902	79,7529	80,0861	79,7542	80,0846
N ₁₄ - Ir ₁ - C ₃₈	80,3100	79,6871	80,1096	79,6616	80,0862	79,6630	80,0883	79,6708	80,0905
N ₁₄ - Ir ₁ - C ₄₃	96,3200	95,7384	95,2557	96,1162	95,6639	96,1748	95,7444	96,2108	95,7894
C ₃₈ - Ir ₁ - C ₄₃	87,5100	90,1518	89,4952	89,7507	89,0116	89,7067	89,0124	89,7026	89,0194
Ir ₁ - N ₉ - C ₂₅	126,300	126,829	126,311	126,510	126,0043	126,446	125,954	126,418	125,932
Ir ₁ - N ₉ - C ₃₃	115,500	114,054	114,030	114,514	114,4597	114,593	114,520	114,625	114,547
C ₂₅ - N ₉ - C ₃₃	118,200	119,098	119,637	118,954	119,5118	118,938	119,499	118,934	119,494
C ₃₄ - N ₁₀ - C ₃₅	100,400	100,559	102,287	100,586	102,2867	100,600	102,294	100,607	102,298
N ₁₂ - N ₁₁ -	103,000	104,064	103,915	103,955	103,8107	103,946	103,797	103,946	103,791
Ir ₁ - N ₁₂ - N ₁₁	137,200	136,205	137,038	136,158	136,9604	136,161	136,922	136,161	136,898
Ir ₁ - N ₁₂ - C ₃₄	115,000	116,460	115,800	116,351	115,7528	116,332	115,770	116,328	115,783
N ₁₁ - N ₁₂ -	107,700	107,328	107,150	107,472	107,2613	107,486	107,279	107,488	107,288
Ir ₁ - N ₁₃ - C ₅₁	117,200	115,385	114,996	115,613	115,2508	115,647	115,286	115,662	115,302
Ir ₁ - N ₁₃ - C ₅₈	123,800	124,167	124,255	124,026	124,0744	123,999	124,043	123,985	124,030
C ₅₁ - N ₁₃ - C ₅₈	118,800	120,413	120,721	120,350	120,6680	120,347	120,665	120,348	120,665
Ir ₁ - N ₁₄ - C ₁₆	116,700	115,889	115,504	115,876	115,4787	115,868	115,468	115,857	115,463
Ir ₁ - N ₁₄ - C ₂₃	124,400	123,503	123,561	123,785	123,8461	123,826	123,888	123,850	123,905
C ₁₆ - N ₁₄ - C ₂₃	118,900	120,595	120,914	120,336	120,6730	120,304	120,642	120,292	120,630
C ₄₁ - N ₁₅ - C ₄₂	114,300	116,074	118,440	115,952	118,2315	115,945	118,213	115,945	118,205
N ₁₄ - C ₁₆ -	119,400	119,733	119,677	119,936	119,8481	119,960	119,867	119,968	119,875
N ₁₄ - C ₁₆ -	112,600	113,992	114,508	113,879	114,4191	113,869	114,413	113,871	114,411
C ₁₇ - C ₁₆ - C ₃₇	128,000	126,269	125,808	126,181	125,7310	126,167	125,717	126,158	125,712
C ₁₆ - C ₁₇ - H ₁₈	119,900	120,274	119,244	120,484	119,4854	120,506	119,512	120,517	119,522
C ₁₆ - C ₁₇ - C ₁₉	120,100	119,429	119,428	119,465	119,4811	119,469	119,487	119,469	119,490
H ₁₈ - C ₁₇ -	119,900	120,294	121,325	120,049	121,0328	120,023	120,999	120,012	120,986
C ₁₇ - C ₁₉ - H ₂₀	120,100	119,639	119,692	119,711	119,7544	119,719	119,761	119,723	119,763
C ₁₇ - C ₁₉ - C ₂₁	119,900	119,926	119,991	119,774	119,8496	119,757	119,834	119,752	119,828
H ₂₀ - C ₁₉ -	120,100	120,433	120,313	120,513	120,3954	120,522	120,404	120,523	120,407
C ₁₉ - C ₂₁ - H ₂₂	120,900	122,093	121,700	122,050	121,6663	122,041	121,660	122,033	121,658
C ₁₉ - C ₂₁ - C ₂₃	118,200	117,693	118,262	117,750	118,3104	117,754	118,314	117,757	118,315
H ₂₂ - C ₂₁ -	120,900	120,211	120,035	120,199	120,0230	120,203	120,025	120,208	120,026

Çizelge 3.4 dfbpy-Ir-dfppy yapısı bağ açıları değerleri ile dört farklı ortamda HF metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası (devam)

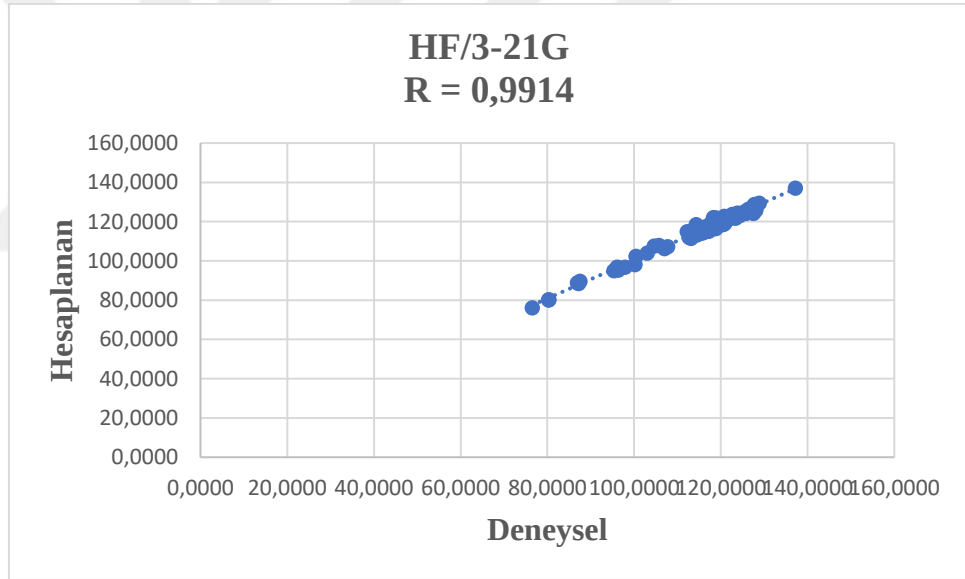
N ₁₄ - C ₂₃ -	123,400	122,613	121,713	122,733	121,8332	122,748	121,850	122,755	121,857
N ₁₄ - C ₂₃ -	118,300	115,898	116,250	116,071	116,4738	116,091	116,503	116,097	116,516
C ₂₁ - C ₂₃ - H ₂₄	118,300	121,483	122,030	121,193	121,6909	121,157	121,644	121,146	121,625
N ₉ - C ₂₅ - H ₂₆	118,900	116,206	116,511	116,454	116,8067	116,490	116,846	116,508	116,862
N ₉ - C ₂₅ - C ₂₇	122,100	122,652	121,690	122,647	121,6948	122,636	121,686	122,628	121,682
H ₂₆ - C ₂₅ -	118,900	121,140	121,798	120,897	121,4982	120,872	121,466	120,862	121,454
C ₂₅ - C ₂₇ - H ₂₈	120,200	120,064	119,911	119,956	119,8081	119,935	119,788	119,925	119,780
C ₂₅ - C ₂₇ - C ₂₉	119,600	118,311	118,783	118,414	118,8676	118,434	118,883	118,444	118,890
H ₂₈ - C ₂₇ -	120,200	121,623	121,305	121,629	121,3243	121,630	121,327	121,630	121,329
C ₂₇ - C ₂₉ - H ₃₀	120,300	120,393	120,291	120,527	120,4173	120,544	120,432	120,548	120,437
C ₂₇ - C ₂₉ - C ₃₁	119,300	119,388	119,531	119,244	119,4209	119,227	119,409	119,222	119,405
H ₃₀ - C ₂₉ -	120,300	120,218	120,176	120,228	120,1618	120,228	120,158	120,228	120,156
C ₂₉ - C ₃₁ - H ₃₂	120,800	122,431	122,695	121,851	122,0933	121,779	122,019	121,752	121,988
C ₂₉ - C ₃₁ - C ₃₃	118,500	118,456	118,611	118,498	118,6408	118,498	118,639	118,495	118,638
H ₃₂ - C ₃₁ -	120,800	119,112	118,693	119,650	119,2657	119,722	119,341	119,752	119,372
N ₉ - C ₃₃ - C ₃₁	122,200	122,092	121,743	122,241	121,8635	122,264	121,880	122,274	121,888
N ₉ - C ₃₃ - C ₃₄	113,500	115,261	115,255	114,972	114,9723	114,932	114,931	114,915	114,913
C ₃₁ - C ₃₃ - C ₃₄	124,300	122,645	122,999	122,785	123,1635	122,802	123,187	122,809	123,197
N ₁₀ - C ₃₄ -	112,900	112,932	112,301	112,748	112,1427	112,720	112,114	112,711	112,102
N ₁₀ - C ₃₄ -	127,700	127,644	128,755	127,895	129,0182	127,944	129,082	127,968	129,114
N ₁₂ - C ₃₄ -	119,200	119,418	118,938	119,354	118,8373	119,333	118,801	119,318	118,781
N ₁₀ - C ₃₅ -	116,000	115,114	114,344	115,238	114,4985	115,245	114,513	115,246	114,519
N ₁₀ - C ₃₅ -	121,500	121,890	121,957	121,780	121,8696	121,802	121,904	121,813	121,924
N ₁₁ - C ₃₅ -	122,600	122,995	123,691	122,981	123,6319	122,951	123,581	122,939	123,555
F ₆ - C ₃₆ - F ₇	105,700	107,708	107,826	107,490	107,4777	107,474	107,498	107,471	107,504
F ₆ - C ₃₆ - F ₈	104,600	107,603	107,443	107,478	107,4506	107,470	107,415	107,473	107,402
F ₆ - C ₃₆ - C ₃₅	113,100	111,791	111,456	111,958	111,5787	111,945	111,554	111,936	111,540
F ₇ - C ₃₆ - F ₈	107,000	106,859	106,158	106,602	105,8209	106,595	105,800	106,599	105,797
F ₇ - C ₃₆ - C ₃₅	113,100	111,374	111,835	111,532	112,1099	111,539	112,098	111,537	112,092
F ₈ - C ₃₆ - C ₃₅	112,700	111,267	111,835	111,500	112,0686	111,535	112,137	111,543	112,166
C ₁₆ - C ₃₇ - C ₃₈	115,900	116,661	116,650	116,673	116,6413	116,673	116,643	116,673	116,645
C ₁₆ - C ₃₇ - C ₄₂	126,300	125,998	125,683	126,073	125,7826	126,086	125,793	126,093	125,796
C ₃₈ - C ₃₇ - C ₄₂	117,800	117,336	117,652	117,252	117,5733	117,239	117,561	117,232	117,556
Ir ₁ - C ₃₈ - C ₃₇	114,500	113,714	113,177	113,887	113,3614	113,906	113,375	113,910	113,379
Ir ₁ - C ₃₈ - C ₃₉	128,800	129,237	129,286	128,903	128,9733	128,852	128,936	128,835	128,923
C ₃₇ - C ₃₈ - C ₃₉	116,700	117,018	117,518	117,199	117,6614	117,232	117,685	117,247	117,695
C ₃₈ - C ₃₉ - H ₄₀	121,000	122,705	122,222	122,761	122,3038	122,775	122,316	122,780	122,321
C ₃₈ - C ₃₉ - C ₄₁	117,900	118,083	118,282	117,909	118,1034	117,880	118,077	117,866	118,066
H ₄₀ - C ₃₉ -	121,000	119,207	119,489	119,329	119,5924	119,344	119,605	119,353	119,612
F ₃ - C ₄₁ - N ₁₅	114,600	115,341	116,317	114,989	115,8792	114,939	115,816	114,911	115,790
F ₃ - C ₄₁ - C ₃₉	117,900	118,828	119,610	119,022	119,8185	119,055	119,855	119,072	119,871
N ₁₅ - C ₄₁ -	127,500	125,828	124,069	125,987	124,3020	126,005	124,327	126,015	124,337
F ₂ - C ₄₂ - N ₁₅	113,600	114,290	115,561	113,925	115,0810	113,878	115,018	113,861	114,992
F ₂ - C ₄₂ - C ₃₇	120,600	120,050	120,401	120,374	120,7908	120,424	120,846	120,446	120,869
N ₁₅ - C ₄₂ -	125,800	125,657	124,034	125,699	124,1278	125,697	124,135	125,692	124,138

Çizelge 3.4 dfbpy-Ir-dfppy yapısı bağ açıları değerleri ile dört farklı ortamda HF metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası (devam)

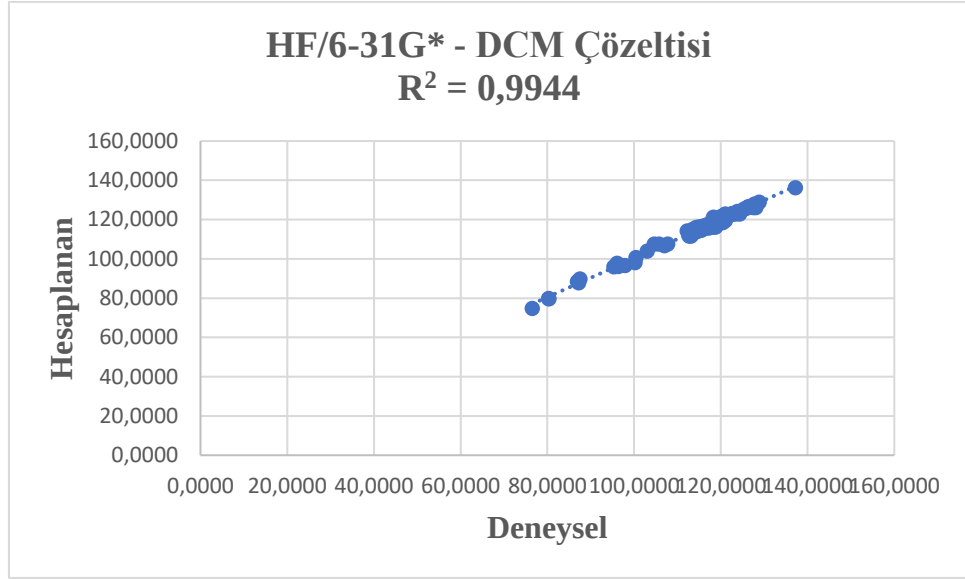
Ir ₁ - C ₄₃ - C ₄₄	114,100	114,165	113,761	114,177	113,7843	114,172	113,783	114,170	113,783
Ir ₁ - C ₄₃ - C ₄₉	127,400	127,056	127,504	127,008	127,4584	127,013	127,458	127,012	127,458
C ₄₄ - C ₄₃ - C ₄₉	118,400	118,770	118,731	118,805	118,7541	118,804	118,752	118,804	118,752
C ₄₃ - C ₄₄ - C ₄₅	118,600	118,646	118,956	118,573	118,9010	118,564	118,893	118,558	118,889
C ₄₃ - C ₄₄ - C ₅₁	116,100	116,204	116,209	116,221	116,2037	116,225	116,201	116,220	116,200
C ₄₅ - C ₄₄ - C ₅₁	125,300	125,148	124,833	125,204	124,8952	125,209	124,905	125,221	124,910
F ₅ - C ₄₅ - C ₄₄	120,100	120,548	120,539	120,640	120,6732	120,651	120,687	120,661	120,693
F ₅ - C ₄₅ - C ₄₆	117,100	116,366	117,098	116,182	116,8828	116,160	116,858	116,148	116,849
C ₄₄ - C ₄₅ - C ₄₆	122,900	123,085	122,361	123,176	122,4440	123,188	122,453	123,190	122,457
C ₄₅ - C ₄₆ - H ₄₇	121,300	121,248	120,747	121,224	120,7191	121,217	120,711	121,215	120,707
C ₄₅ - C ₄₆ - C ₄₈	117,400	116,729	117,766	116,653	117,6876	116,650	117,685	116,653	117,686
H ₄₇ - C ₄₆ - C ₄₈	121,300	122,022	121,485	122,122	121,5933	122,132	121,602	122,131	121,606
F ₄ - C ₄₈ - C ₄₆	118,300	118,058	118,358	118,021	118,3061	118,022	118,305	118,020	118,306
F ₄ - C ₄₈ - C ₄₉	118,200	118,965	119,362	118,919	119,3164	118,915	119,312	118,916	119,310
C ₄₆ - C ₄₈ - C ₄₉	123,500	122,975	122,278	123,059	122,3775	123,061	122,382	123,062	122,383
C ₄₃ - C ₄₉ - C ₄₈	119,300	119,792	119,904	119,730	119,8356	119,730	119,832	119,730	119,831
C ₄₃ - C ₄₉ - H ₅₀	120,400	122,003	121,709	121,850	121,5450	121,825	121,519	121,813	121,507
C ₄₈ - C ₄₉ - H ₅₀	120,400	118,202	118,385	118,418	118,6190	118,443	118,648	118,456	118,660
N ₁₃ - C ₅₁ - C ₄₄	112,200	114,396	114,851	114,199	114,6515	114,172	114,622	114,163	114,608
N ₁₃ - C ₅₁ - C ₅₂	119,800	119,503	119,383	119,682	119,5509	119,710	119,577	119,719	119,590
C ₄₄ - C ₅₁ - C ₅₂	128,000	126,099	125,764	126,117	125,7975	126,116	125,799	126,116	125,800
C ₅₁ - C ₅₂ - H ₅₃	119,900	120,097	119,064	120,371	119,3856	120,416	119,437	120,437	119,460
C ₅₁ - C ₅₂ - C ₅₄	120,200	119,699	119,736	119,661	119,7000	119,650	119,687	119,643	119,681
H ₅₃ - C ₅₂ - C ₅₄	119,900	120,203	121,199	119,966	120,9143	119,932	120,874	119,919	120,858
C ₅₂ - C ₅₄ - H ₅₅	119,800	119,704	119,755	119,728	119,7657	119,727	119,763	119,728	119,761
C ₅₂ - C ₅₄ - C ₅₆	120,400	119,844	119,931	119,755	119,8483	119,745	119,840	119,743	119,837
H ₅₅ - C ₅₄ - C ₅₆	119,800	120,450	120,313	120,516	120,3860	120,526	120,396	120,527	120,401
C ₅₄ - C ₅₆ - H ₅₇	121,000	122,117	121,713	122,115	121,7361	122,115	121,737	122,111	121,737
C ₅₄ - C ₅₆ - C ₅₈	118,100	117,470	118,021	117,601	118,1455	117,626	118,168	117,638	118,179
H ₅₇ - C ₅₆ - C ₅₈	121,000	120,411	120,264	120,282	120,1184	120,258	120,093	120,249	120,082
N ₁₃ - C ₅₈ - C ₅₆	122,700	123,067	122,205	122,947	122,0869	122,920	122,059	122,906	122,045
N ₁₃ - C ₅₈ -	118,700	115,972	116,450	116,181	116,6771	116,219	116,717	116,237	116,735
C ₅₆ - C ₅₈ - H ₅₉	118,700	120,959	121,344	120,871	121,2359	120,859	121,222	120,855	121,218



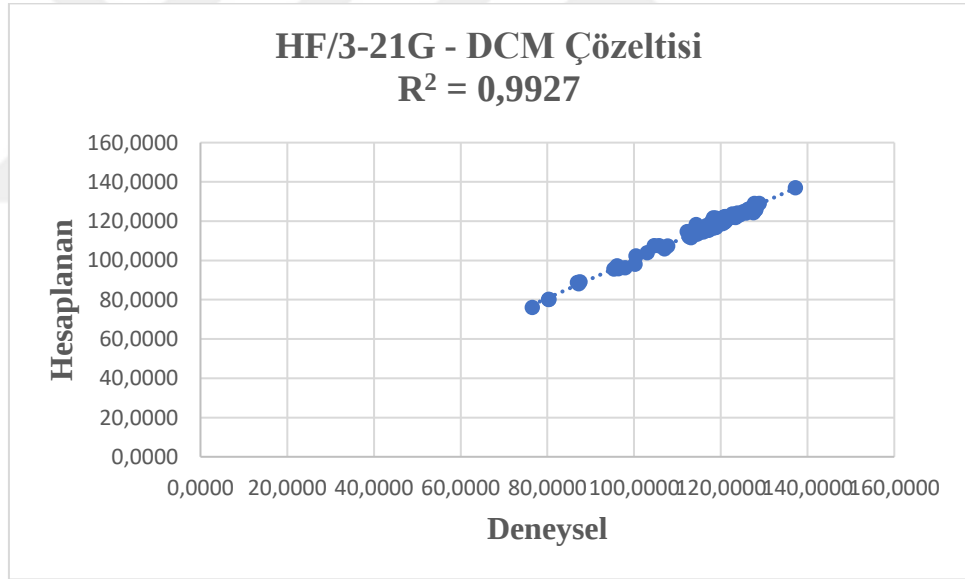
Şekil 3.27 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği



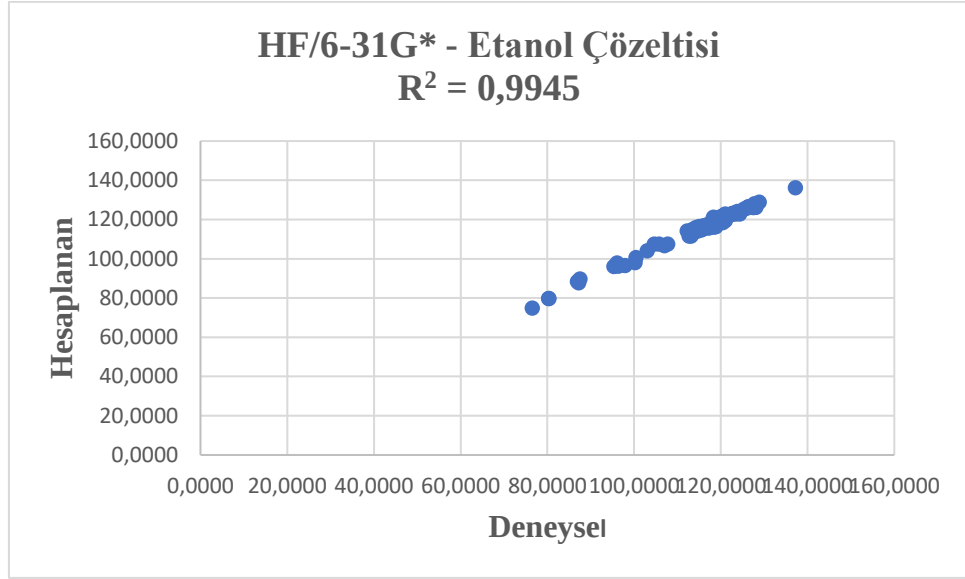
Şekil 3.28 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği



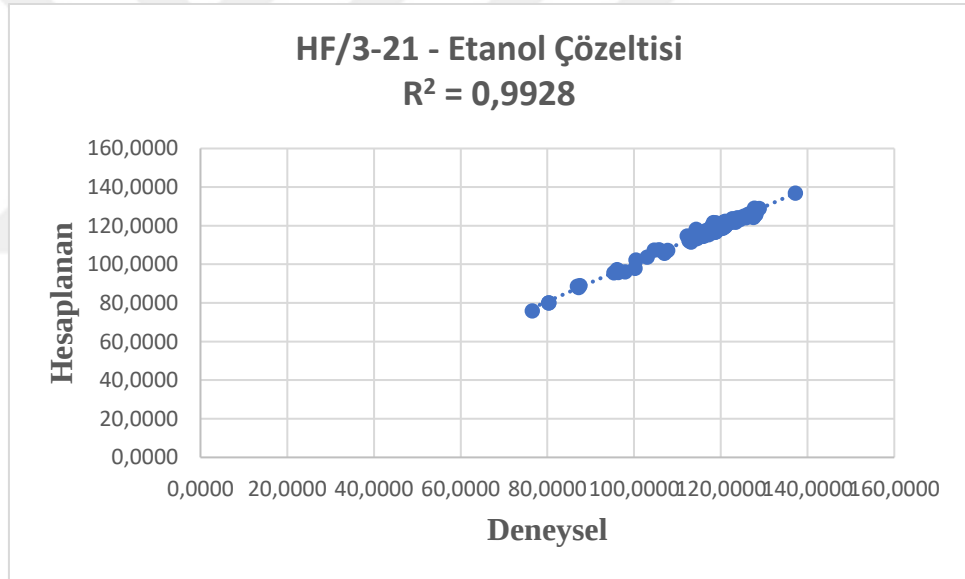
Şekil 3.29 HF/6-31G*'ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde)



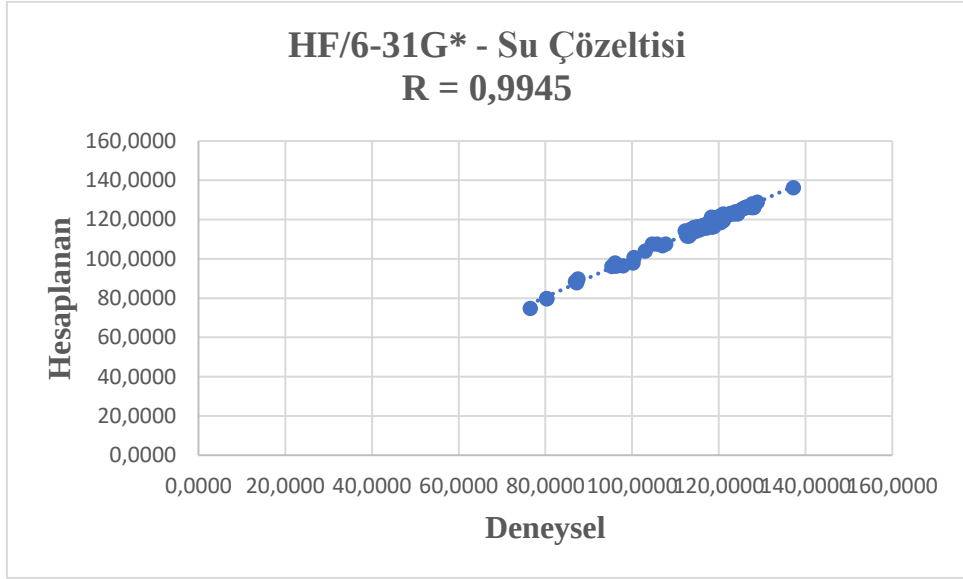
Şekil 3.30 HF/3-21G'ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde)



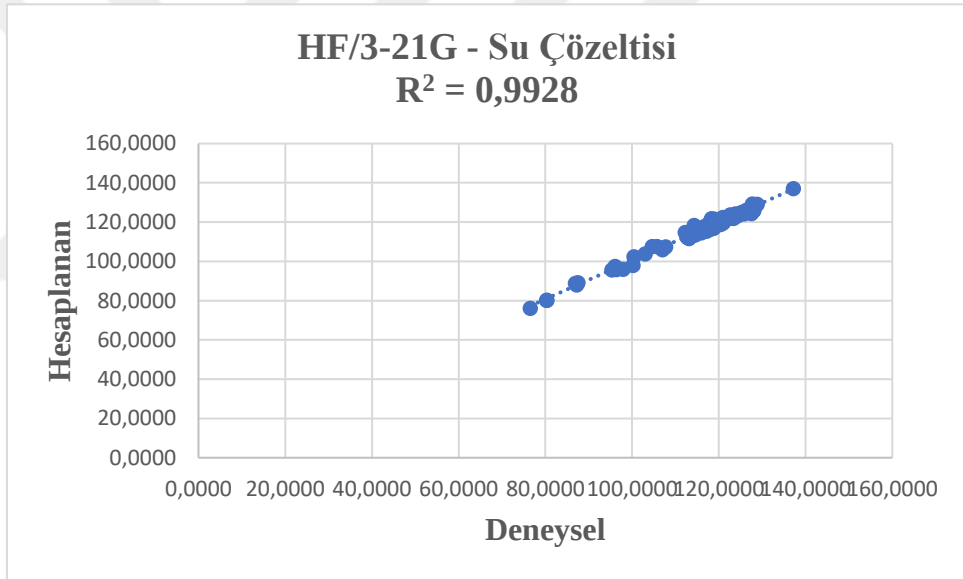
Şekil 3.31 HF/6-31G*'ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde)



Şekil 3.32 HF/3-21G'ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde)



Şekil 3.33 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde)



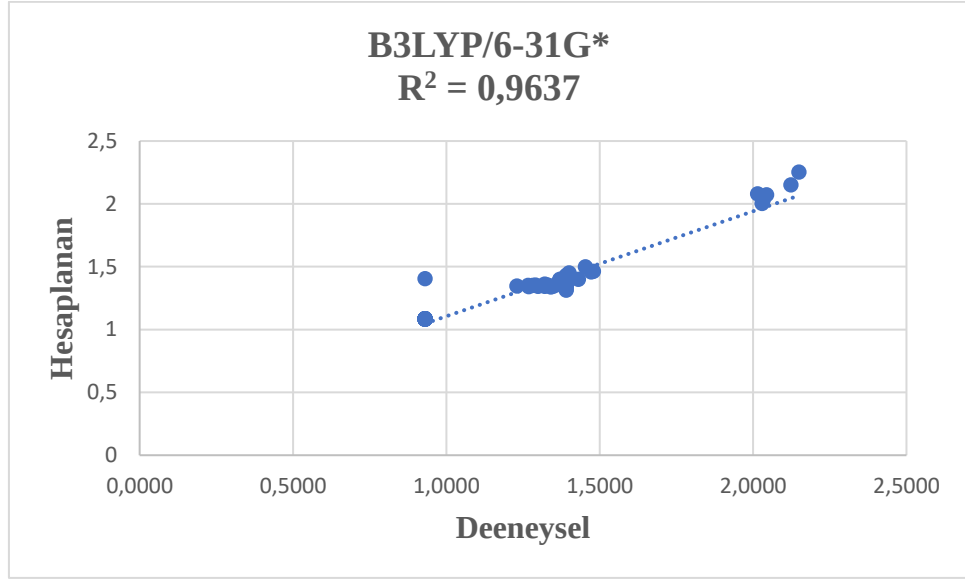
Şekil 3.34 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde)

Çizelge 3.5 dfppy-Ir-dfbpy yapısı bağ uzunluğu değerleri ile dört farklı ortamda B3LYP metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası

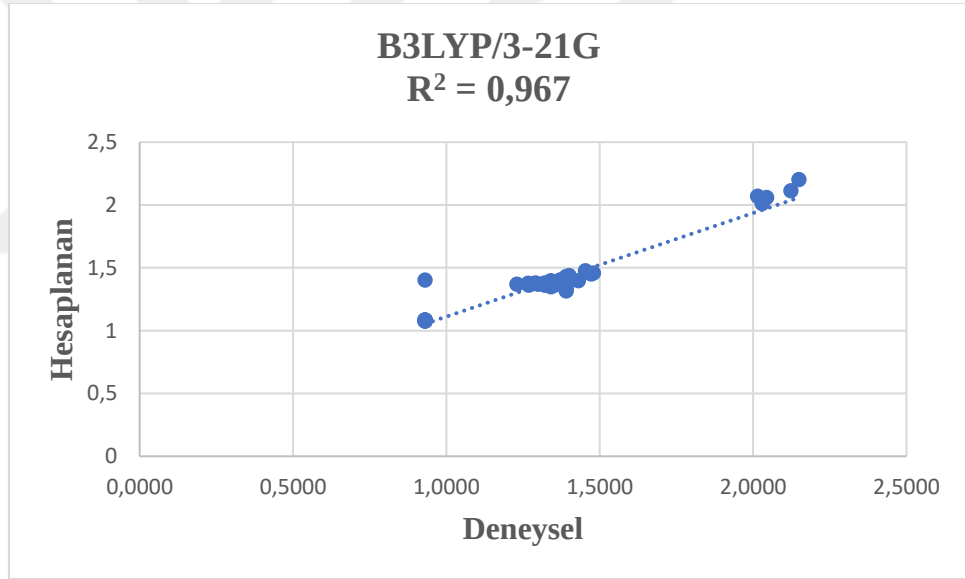
dfppy-Ir-dfbpy		B3LYP							
		Gaz	Gaz	DCM	DCM	Etanol	Etanol	Su	Su
Bağ Adı	DeneySEL Bağ Uzunluğu	6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G
		Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik
Ir ₁ - N ₉	2,1490	2,2527	2,2018	2,2454	2,1964	2,2440	2,1954	2,2433	2,1950
Ir ₁ - N ₁₂	2,1230	2,1517	2,1127	2,1587	2,1178	2,1600	2,1183	2,1606	2,1185
Ir ₁ - N ₁₃	2,0150	2,0797	2,0681	2,0815	2,0696	2,0818	2,0699	2,0819	2,0701
Ir ₁ - N ₁₄	2,0440	2,0718	2,0588	2,0757	2,0629	2,0763	2,0635	2,0765	2,0638
Ir ₁ - C ₃₇	2,0320	2,0277	2,0323	2,0272	2,0320	2,0272	2,0321	2,0272	2,0321
Ir ₁ - C ₄₂	2,0290	2,0025	2,0111	2,0012	2,0102	2,0012	2,0101	2,0011	2,0101
F ₂ - C ₄₁	1,3210	1,3562	1,3798	1,3561	1,3792	1,3560	1,3790	1,3560	1,3790
F ₃ - C ₄₀	1,2300	1,347	1,3675	1,3502	1,3695	1,3506	1,3697	1,3507	1,3697
F ₄ - C ₄₅	1,2680	1,3398	1,3606	1,3446	1,3644	1,3451	1,3648	1,3453	1,3649
F ₅ - C ₄₄	1,2660	1,3496	1,3760	1,3505	1,3761	1,3506	1,3761	1,3506	1,3761
F ₆ - C ₃₅	1,2990	1,3441	1,3692	1,3463	1,3708	1,3467	1,3710	1,3469	1,3712
F ₇ - C ₃₅	1,2900	1,353	1,3779	1,3551	1,3801	1,3554	1,3804	1,3554	1,3805
F ₈ - C ₃₅	1,2820	1,3514	1,3736	1,3535	1,3747	1,3535	1,3747	1,3534	1,3747
N ₉ - C ₂₄	1,3500	1,345	1,3579	1,3448	1,3576	1,3447	1,3575	1,3447	1,3575
N ₉ - C ₃₂	1,3200	1,3615	1,3708	1,3610	1,3705	1,3610	1,3706	1,3609	1,3706
N ₁₀ - C ₃₃	1,3400	1,3387	1,3487	1,3406	1,3502	1,3409	1,3505	1,3410	1,3506
N ₁₀ - C ₃₄	1,3800	1,3477	1,3643	1,3487	1,3650	1,3487	1,3650	1,3487	1,3650
N ₁₁ - N ₁₂	1,3400	1,3434	1,3963	1,3470	1,3995	1,3477	1,4000	1,3479	1,4003
N ₁₁ - C ₃₄	1,3200	1,3436	1,3602	1,3408	1,3568	1,3404	1,3564	1,3403	1,3562
N ₁₂ - C ₃₃	1,3300	1,3539	1,3685	1,3511	1,3663	1,3507	1,3659	1,3505	1,3658
N ₁₃ - C ₄₈	1,3900	1,3700	1,3780	1,3693	1,3775	1,3693	1,3776	1,3692	1,3776
N ₁₃ - C ₅₅	1,3900	1,3465	1,3583	1,3467	1,3585	1,3468	1,3586	1,3468	1,3586
N ₁₄ - C ₁₅	1,3900	1,3701	1,3777	1,3700	1,3779	1,3700	1,3779	1,3700	1,3779
N ₁₄ - C ₂₂	1,3900	1,3472	1,3588	1,3473	1,3590	1,3474	1,3590	1,3474	1,3590
C ₁₅ - C ₁₆	1,3900	1,4046	1,4030	1,4036	1,4021	1,4035	1,4020	1,4035	1,4020
N ₁₅ - C ₃₆	1,4790	1,4640	1,4585	1,4655	1,4600	1,4656	1,4601	1,4657	1,4602
C ₁₆ - C ₁₇	0,9300	1,0798	1,0762	1,0796	1,0761	1,0796	1,0760	1,0795	1,0760
C ₁₆ - C ₁₈	1,3900	1,3895	1,3896	1,3901	1,3904	1,3902	1,3905	1,3902	1,3905
C ₁₈ - H ₁₉	0,9300	1,0862	1,0831	1,0856	1,0827	1,0856	1,0826	1,0855	1,0826
C ₁₈ - C ₂₀	1,3900	1,3959	1,3986	1,3956	1,3984	1,3956	1,3984	1,3956	1,3984
C ₂₀ - H ₂₁	0,9300	1,0844	1,0814	1,0840	1,0811	1,0840	1,0811	1,0840	1,0811
C ₂₀ - C ₂₂	1,3900	1,3876	1,3872	1,3876	1,3874	1,3875	1,3874	1,3875	1,3873
C ₂₂ - H ₂₃	0,9300	1,0830	1,0802	1,0825	1,0796	1,0825	1,0795	1,0825	1,0795
C ₂₄ - C ₂₅	0,9300	1,0848	1,0811	1,0841	1,0805	1,0840	1,0804	1,0840	1,0804
C ₂₄ - H ₂₆	1,3700	1,3903	1,3898	1,3913	1,3908	1,3914	1,3909	1,3915	1,3910

Çizelge 3.5 dfppy-Ir-dfbpy yapısı bağ uzunluğu değerleri ile dört farklı ortamda B3LYP metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası (devam)

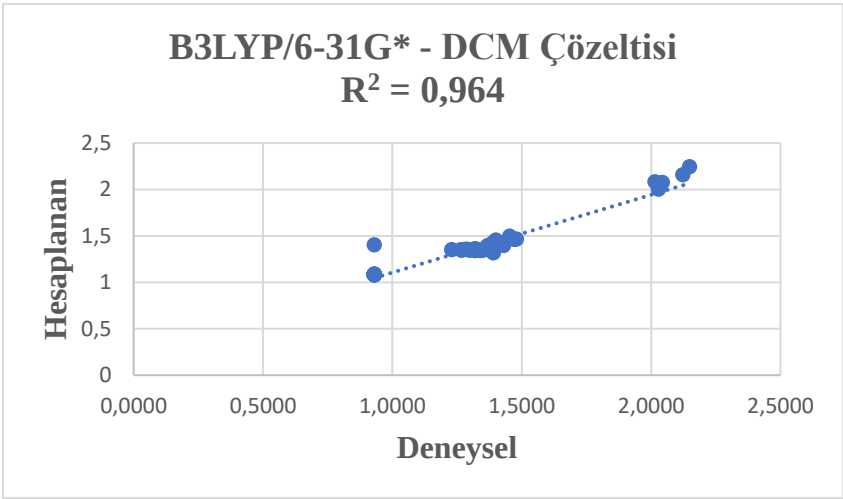
C ₂₆ - H ₂₇	0,9300	1,0848	1,0817	1,0843	1,0813	1,0842	1,0812	1,0842	1,0812
C ₂₆ - C ₂₈	1,3700	1,3993	1,4014	1,3972	1,3995	1,3969	1,3992	1,3968	1,3991
C ₂₈ - H ₂₉	0,9300	1,0862	1,0830	1,0855	1,0824	1,0854	1,0823	1,0854	1,0823
C ₂₈ - C ₃₀	1,3700	1,389	1,3900	1,3911	1,3922	1,3914	1,3925	1,3915	1,3926
C ₃₀ - H ₃₁	0,9300	1,0843	1,0815	1,0840	1,0811	1,0840	1,0811	1,0839	1,0811
C ₃₀ - C ₃₂	1,4300	1,4004	1,3966	1,3974	1,3939	1,3969	1,3935	1,3967	1,3934
C ₃₂ - H ₃₃	1,4000	1,4508	1,4381	1,4563	1,4435	1,4569	1,4441	1,4572	1,4444
C ₃₄ - C ₃₅	1,4530	1,4985	1,4752	1,4953	1,4724	1,4950	1,4722	1,4949	1,4721
C ₃₆ - C ₃₇	1,3900	1,4289	1,4290	1,4277	1,4279	1,4276	1,4278	1,4275	1,4277
C ₃₆ - C ₄₁	1,3900	1,4034	1,3986	1,4032	1,3986	1,4032	1,3987	1,4032	1,3987
C ₃₇ - C ₃₈	1,3900	1,4013	1,4002	1,4015	1,4004	1,4015	1,4004	1,4015	1,4004
C ₃₈ - H ₃₉	0,9300	1,0848	1,0817	1,0847	1,0816	1,0846	1,0816	1,0846	1,0816
C ₃₈ - C ₄₀	1,3900	1,3903	1,3895	1,3901	1,3896	1,3901	1,3896	1,3901	1,3896
C ₄₀ - H ₅₈	1,3900	1,3916	1,3901	1,3907	1,3894	1,3905	1,3893	1,3905	1,3893
C ₄₁ - C ₅₈	1,3900	1,3853	1,3824	1,3861	1,3832	1,3861	1,3833	1,3862	1,3834
C ₄₂ - C ₄₃	1,3900	1,4259	1,4268	1,4268	1,4279	1,4271	1,4283	1,4272	1,4284
C ₄₂ - C ₄₆	1,3900	1,3994	1,4003	1,4020	1,4029	1,4025	1,4034	1,4027	1,4036
C ₄₃ - C ₄₄	1,3900	1,4001	1,3955	1,3976	1,3931	1,3973	1,3928	1,3972	1,3927
C ₄₃ - C ₄₈	1,4720	1,4576	1,4503	1,4622	1,4548	1,4628	1,4555	1,4631	1,4558
C ₄₄ - N ₅₇	1,3900	1,3130	1,3138	1,3166	1,3175	1,3171	1,3181	1,3173	1,3183
C ₄₅ - C ₄₆	1,3900	1,3886	1,3874	1,3866	1,3857	1,3863	1,3855	1,3863	1,3855
C ₄₅ - C ₅₇	1,3900	1,3232	1,3289	1,3239	1,3292	1,3240	1,3293	1,3241	1,3294
C ₄₆ - C ₄₇	0,9300	1,0828	1,0792	1,0830	1,0795	1,0831	1,0796	1,0831	1,0797
C ₄₈ - H ₄₉	0,9300	1,4044	1,4024	1,4022	1,4002	1,4019	1,3999	1,4017	1,3998
C ₄₉ - C ₅₀	0,9300	1,0800	1,0765	1,0800	1,0765	1,0800	1,0765	1,0800	1,0765
C ₄₉ - C ₅₁	1,3900	1,3882	1,3881	1,3900	1,3902	1,3903	1,3905	1,3905	1,3907
C ₅₁ - H ₅₂	0,9300	0,1086	1,0829	1,0855	1,0825	1,0854	1,0824	1,0854	1,0824
C ₅₁ - H ₅₃	1,3900	1,3966	1,3993	1,3956	1,3983	1,3954	1,3981	1,3953	1,3980
C ₅₃ - C ₅₄	0,9300	1,0844	1,0815	1,0841	1,0812	1,0840	1,0812	1,0840	1,0811
C ₅₃ - H ₅₅	1,3900	1,3867	1,3865	1,3877	1,3877	1,3879	1,3880	1,3880	1,3881
C ₅₅ - C ₅₆	0,9300	1,0827	1,0794	1,0823	1,0792	1,0823	1,0792	1,0822	1,0792
C ₅₈ - H ₅₉	0,9300	1,0829	1,0789	1,0830	1,0791	1,0830	1,0792	1,0830	1,0792



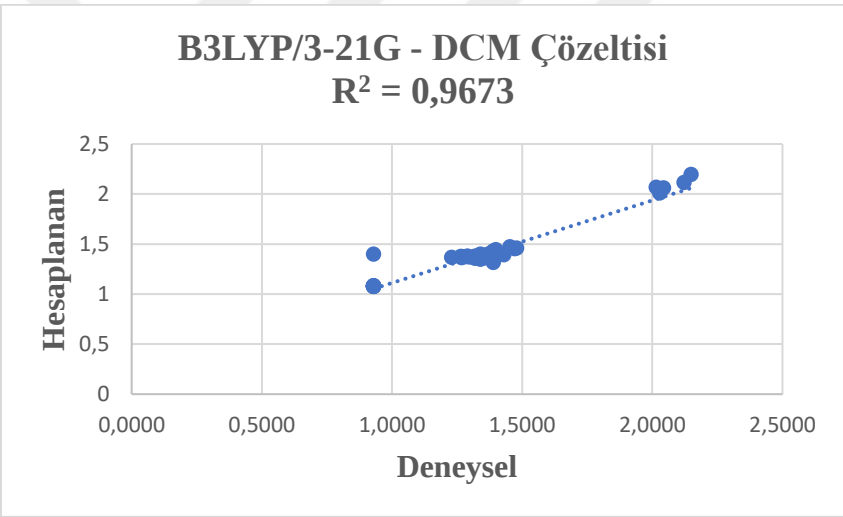
Şekil 3.35 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği



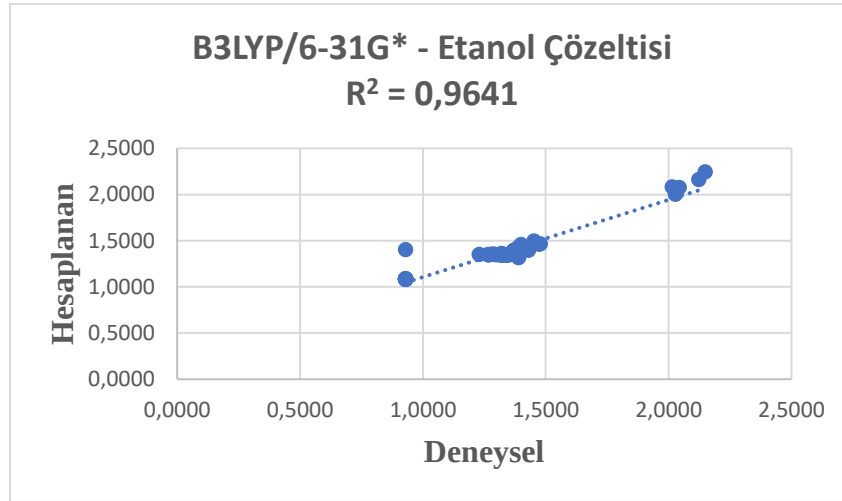
Şekil 3.36 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği



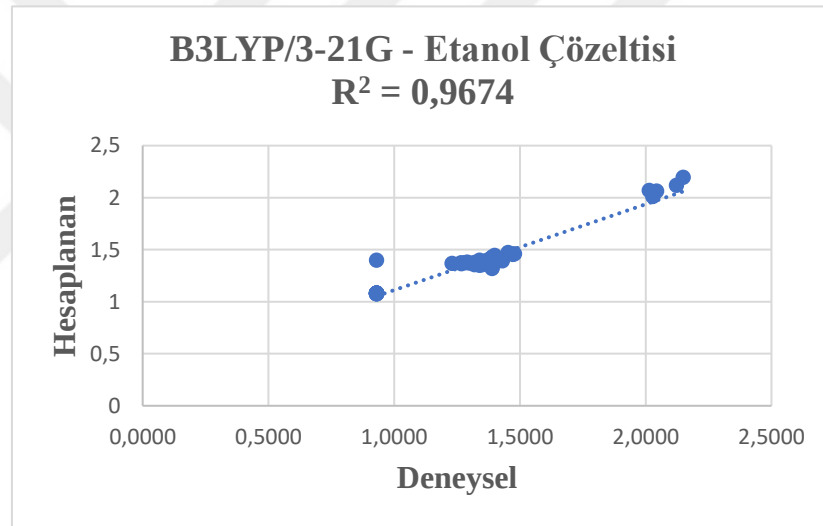
Şekil 3.37 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (DCM Çözeltisi)



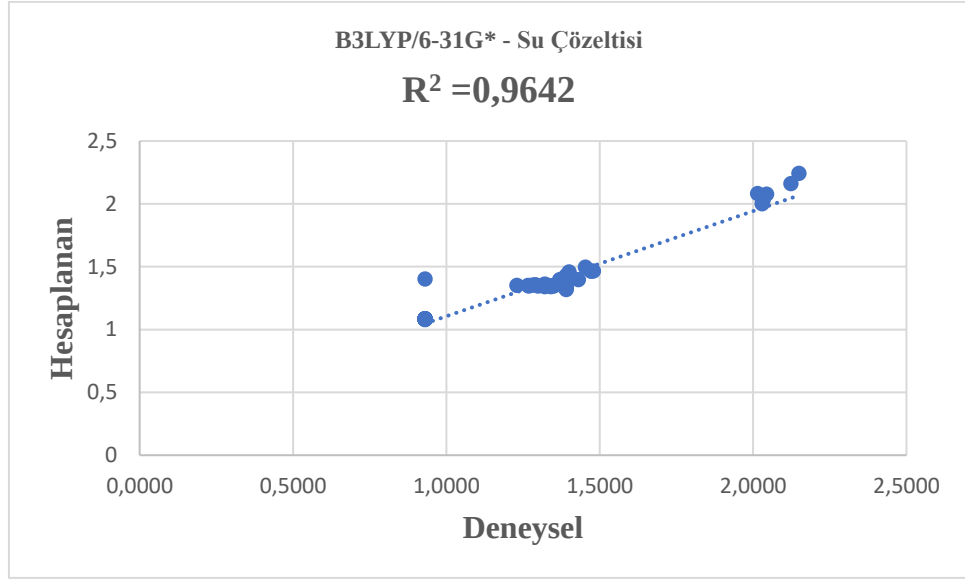
Şekil 3.38 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (DCM Çözeltisi)



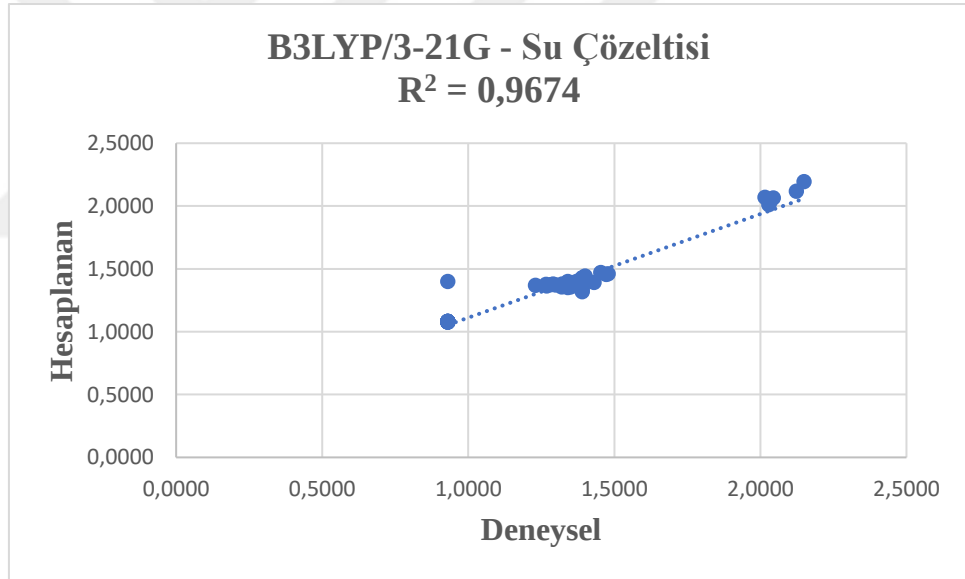
Şekil 3.39 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Etanol Çözeltisi)



Şekil 3.40 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Etanol Çözeltisi)



Şekil 3.41 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Su Çözeltisi)



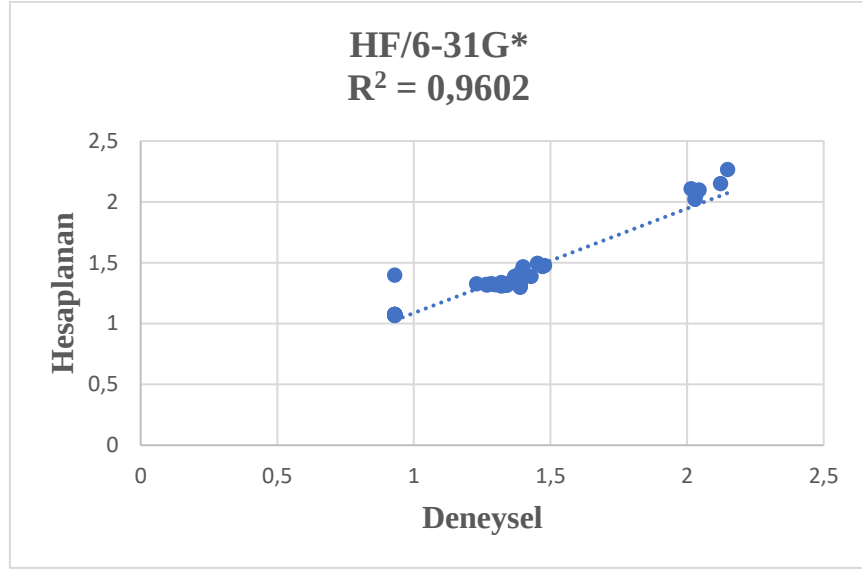
Şekil 3.42 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Su Çözeltisi)

Çizelge 3.6 dfppy-Ir-dfbpy yapısı bağ uzunluğu değerleri ile dört farklı ortamda HF metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası

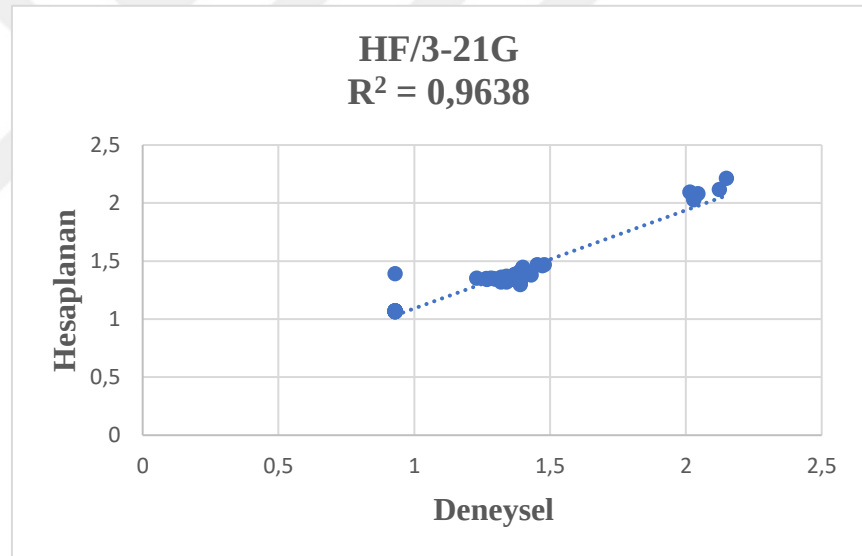
dfppy-Ir-dfbpy		HF							
Bağ Adı	Deneyisel Bağ Uzunluğu	Gaz	Gaz	DCM	DCM	Etanol	Etanol	Su	Su
		6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G
		Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik
Ir ₁ - N ₉	2,149	2,2652	2,2146	2,2531	2,2046	2,2510	2,2027	2,2501	2,2019
Ir ₁ - N ₁₂	2,123	2,1493	2,1157	2,1569	2,1210	2,1579	2,1214	2,1583	2,1215
Ir ₁ - N ₁₃	2,015	2,1084	2,0936	2,1087	2,0937	2,1088	2,0937	2,1088	2,0936
Ir ₁ - N ₁₄	2,044	2,0973	2,0822	2,0996	2,0847	2,0998	2,0850	2,0999	2,0850
Ir ₁ - C ₃₇	2,032	2,0493	2,0506	2,0474	2,0491	2,0472	2,0490	2,0471	2,0489
Ir ₁ - C ₄₂	2,029	2,0199	2,0277	2,0218	2,0299	2,0223	2,0303	2,0224	2,0304
F ₂ - C ₄₁	1,321	1,3320	1,3623	1,3323	1,3627	1,3323	1,3627	1,3323	1,3626
F ₃ - C ₄₀	1,23	1,3255	1,3535	1,3294	1,3569	1,3298	1,3572	1,3299	1,3573
F ₄ - C ₄₅	1,268	1,3146	1,3418	1,3193	1,3464	1,3198	1,3468	1,3199	1,3469
F ₅ - C ₄₄	1,266	1,3205	1,3516	1,3215	1,3526	1,3215	1,3527	1,3215	1,3527
F ₆ - C ₃₅	1,299	1,3170	1,3442	1,3191	1,3459	1,3194	1,3463	1,3196	1,3464
F ₇ - C ₃₅	1,29	1,3236	1,3506	1,3254	1,3530	1,3255	1,3536	1,3255	1,3539
F ₈ - C ₃₅	1,282	1,3249	1,3531	1,3257	1,3533	1,3256	1,3527	1,3256	1,3524
N ₉ - C ₂₄	1,35	1,3280	1,3373	1,3266	1,3361	1,3263	1,3359	1,3262	1,3358
N ₉ - C ₃₂	1,32	1,3366	1,3431	1,3386	1,3452	1,3389	1,3456	1,3391	1,3457
N ₁₀ - C ₃₃	1,34	1,3143	1,3212	1,3182	1,3247	1,3188	1,3253	1,3191	1,3255
N ₁₀ - C ₃₄	1,38	1,3348	1,3510	1,3344	1,3503	1,3342	1,3501	1,3342	1,3500
N ₁₁ - N ₁₂	1,34	1,3264	1,3690	1,3300	1,3721	1,3306	1,3725	1,3308	1,3728
N ₁₁ - C ₃₄	1,32	1,3073	1,3205	1,3049	1,3177	1,3047	1,3174	1,3046	1,3173
N ₁₂ - C ₃₃	1,33	1,3218	1,3380	1,3191	1,3357	1,3187	1,3353	1,3185	1,3351
N ₁₃ - C ₄₈	1,39	1,3425	1,3483	1,3433	1,3493	1,3435	1,3495	1,3436	1,3496
N ₁₃ - C ₅₅	1,39	1,3304	1,3386	1,3300	1,3382	1,3299	1,3381	1,3299	1,3381
N ₁₄ - C ₁₅	1,39	1,3439	1,3494	1,3447	1,3504	1,3448	1,3505	1,3448	1,3506
N ₁₄ - C ₂₂	1,39	1,3303	1,3385	1,3306	1,3387	1,3306	1,3387	1,3306	1,3388
N ₁₅ - C ₁₆	1,39	1,3945	1,3909	1,3927	1,3892	1,3926	1,3890	1,3925	1,3889
N ₁₅ - C ₃₆	1,479	1,4773	1,4699	1,4788	1,4714	1,4789	1,4716	1,4790	1,4716
C ₁₆ - C ₁₇	0,93	1,0668	1,0627	1,0667	1,0626	1,0667	1,0625	1,0666	1,0625
C ₁₆ - C ₁₈	1,39	1,3789	1,3780	1,3802	1,3793	1,3803	1,3795	1,3804	1,3795
C ₁₈ - H ₁₉	0,93	1,0748	1,0713	1,0742	1,0709	1,0741	1,0708	1,0741	1,0708
C ₁₈ - C ₂₀	1,39	1,3856	1,3854	1,3851	1,3849	1,3851	1,3848	1,3851	1,3848
C ₂₀ - H ₂₁	0,93	1,0726	1,0690	1,0722	1,0688	1,0722	1,0688	1,0722	1,0688
C ₂₀ - C ₂₂	1,39	1,3746	1,3733	1,3748	1,3737	1,3748	1,3737	1,3748	1,3737
C ₂₂ - H ₂₃	0,93	1,0705	1,0669	1,0701	1,0664	1,0701	1,0664	1,0700	1,0664
C ₂₄ - C ₂₅	0,93	1,0721	1,0677	1,0714	1,0672	1,0713	1,0671	1,0713	1,0671

Çizelge 3.6 dfppy-Ir-dfbpy yapısı bağ uzunluğu değerleri ile dört farklı ortamda HF metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası (devam)

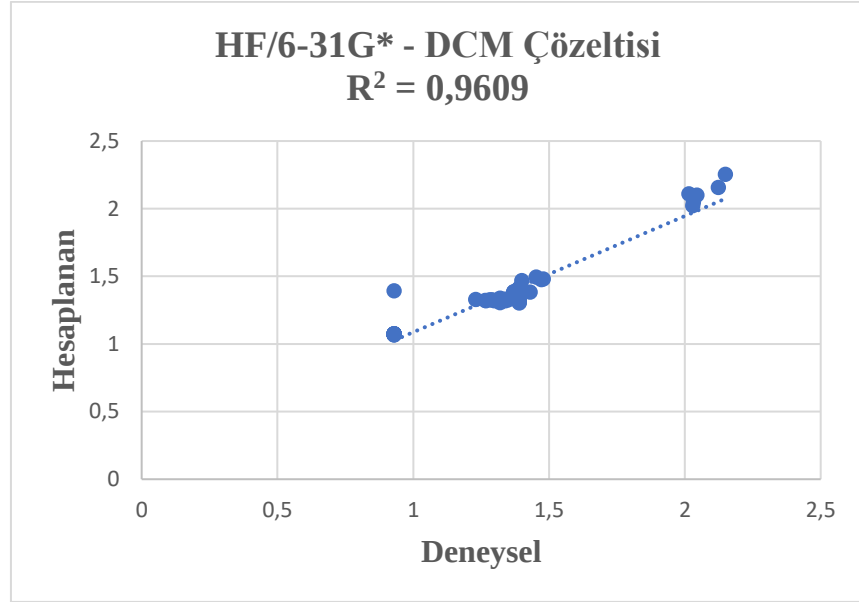
C ₂₄ - H ₂₆	1,37	1,3788	1,3777	1,3812	1,3798	1,3816	1,3801	1,3818	1,3802
C ₂₆ - H ₂₇	0,93	1,0730	1,0694	1,0725	1,0690	1,0724	1,0689	1,0724	1,0689
C ₂₆ - C ₂₈	1,37	1,3878	1,3872	1,3845	1,3843	1,3840	1,3838	1,3838	1,3836
C ₂₈ - H ₂₉	0,93	1,0747	1,0710	1,0739	1,0704	1,0738	1,0703	1,0738	1,0703
C ₂₈ - C ₃₀	1,37	1,3802	1,3802	1,3840	1,3836	1,3846	1,3841	1,3848	1,3843
C ₃₀ - H ₃₁	0,93	1,0721	1,0688	1,0718	1,0684	1,0718	1,0684	1,0718	1,0684
C ₃₀ - C ₃₂	1,43	1,3864	1,3807	1,3817	1,3768	1,3811	1,3762	1,3808	1,3760
C ₃₂ - H ₃₃	1,4	1,4645	1,4473	1,4687	1,4518	1,4691	1,4522	1,4693	1,4525
C ₃₄ - C ₃₅	1,453	1,4947	1,4681	1,4929	1,4660	1,4928	1,4659	1,4928	1,4659
C ₃₆ - C ₃₇	1,39	1,4135	1,4117	1,4125	1,4109	1,4124	1,4108	1,4123	1,4107
C ₃₆ - C ₄₁	1,39	1,3906	1,3832	1,3902	1,3829	1,3902	1,3829	1,3902	1,3829
C ₃₇ - C ₃₈	1,39	1,3919	1,3901	1,3924	1,3906	1,3924	1,3906	1,3924	1,3906
C ₃₈ - C ₃₉	0,93	1,0731	1,0691	1,0730	1,0691	1,0730	1,0691	1,0730	1,0691
C ₃₈ - C ₄₀	1,39	1,3773	1,3732	1,3769	1,3730	1,3769	1,3730	1,3768	1,3730
C ₄₀ - H ₅₈	1,39	1,3790	1,3746	1,3779	1,3737	1,3778	1,3736	1,3778	1,3736
C ₄₁ - C ₅₈	1,39	1,3744	1,3695	1,3753	1,3704	1,3754	1,3705	1,3754	1,3706
C ₄₂ - C ₄₃	1,39	1,4115	1,4101	1,4122	1,4114	1,4124	1,4117	1,4125	1,4118
C ₄₂ - C ₄₆	1,39	1,3897	1,3905	1,3923	1,3929	1,3927	1,3933	1,3929	1,3935
C ₄₃ - C ₄₄	1,39	1,3865	1,3799	1,3839	1,3774	1,3836	1,3771	1,3835	1,3770
C ₄₃ - C ₄₈	1,472	1,4691	1,4601	1,4741	1,4649	1,4748	1,4655	1,4751	1,4659
C ₄₄ - C ₅₇	1,39	1,2981	1,2987	1,3017	1,3023	1,3023	1,3028	1,3025	1,3030
C ₄₅ - H ₄₆	1,39	1,3751	1,3708	1,3728	1,3688	1,3726	1,3687	1,3725	1,3686
C ₄₅ - C ₅₇	1,39	1,3060	1,3100	1,3066	1,3100	1,3067	1,3100	1,3067	1,3101
C ₄₆ - C ₄₇	0,93	1,0708	1,0664	1,0711	1,0668	1,0711	1,0669	1,0712	1,0669
C ₄₈ - H ₄₉	0,93	1,3965	1,3921	1,3923	1,3881	1,3916	1,3875	1,3914	1,3872
C ₄₉ - C ₅₀	0,93	1,0671	1,0631	1,0672	1,0631	1,0672	1,0631	1,0672	1,0632
C ₄₉ - H ₅₁	1,39	1,3759	1,3752	1,3795	1,3788	1,3801	1,3794	1,3804	1,3796
C ₅₁ - C ₅₂	0,93	1,0747	1,0712	1,0741	1,0707	1,0740	1,0707	1,0740	1,0707
C ₅₁ - H ₅₃	1,39	1,3879	1,3874	1,3857	1,3851	1,3853	1,3847	1,3851	1,3846
C ₅₃ - C ₅₄	0,93	1,0726	1,0691	1,0723	1,0688	1,0722	1,0688	1,0722	1,0688
C ₅₃ - H ₅₅	1,39	1,3721	1,3712	1,3744	1,3737	1,3749	1,3741	1,3751	1,3743
C ₅₅ - C ₅₆	0,93	1,0705	1,0666	1,0701	1,0663	1,0700	1,0662	1,0699	1,0662
C ₅₈ - H ₅₉	0,93	1,0717	1,0668	1,0719	1,0671	1,0719	1,0671	1,0719	1,0671



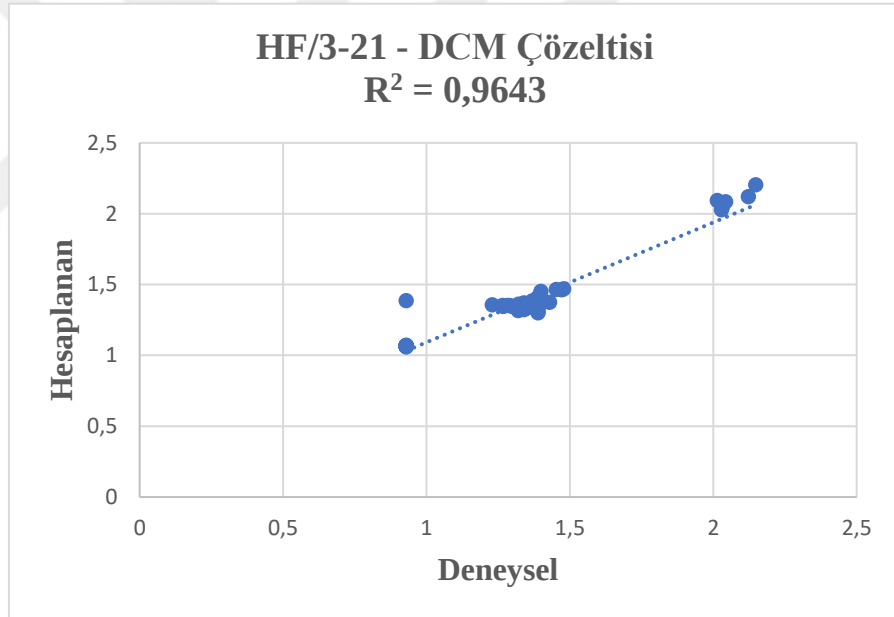
Şekil 3.43 HF/6-31G*'ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği



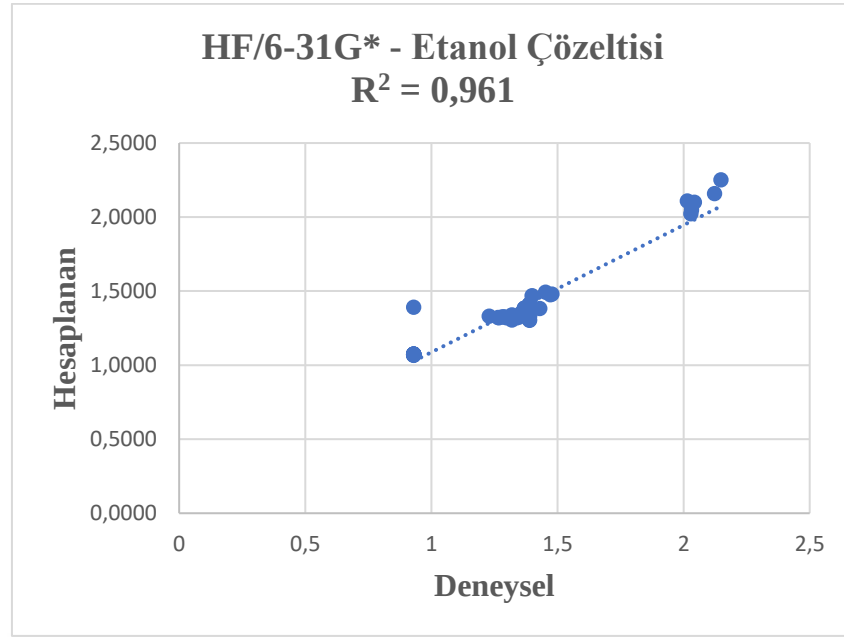
Şekil 3.44 HF/3-21G'ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği



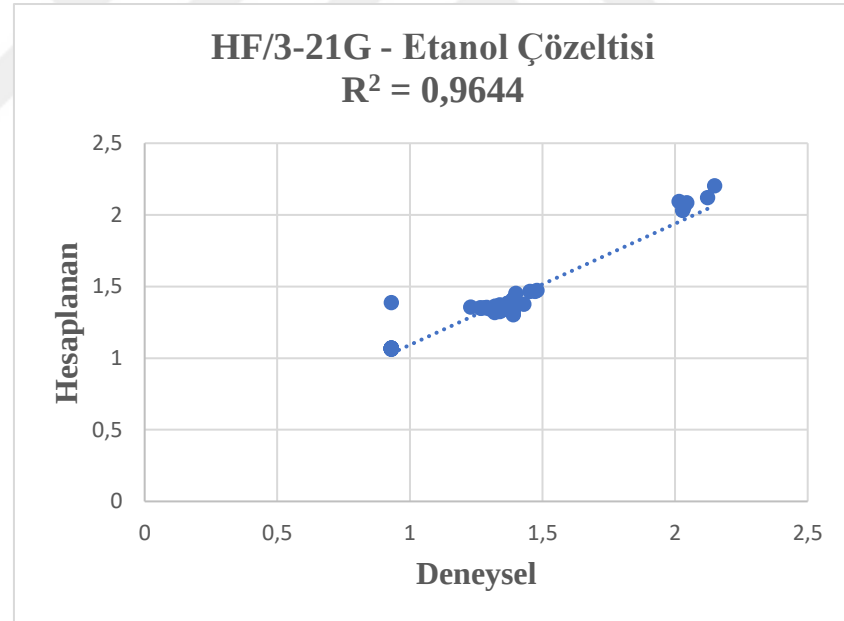
Şekil 3.45 HF/6-31G*'ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (DCM Çözültisi)



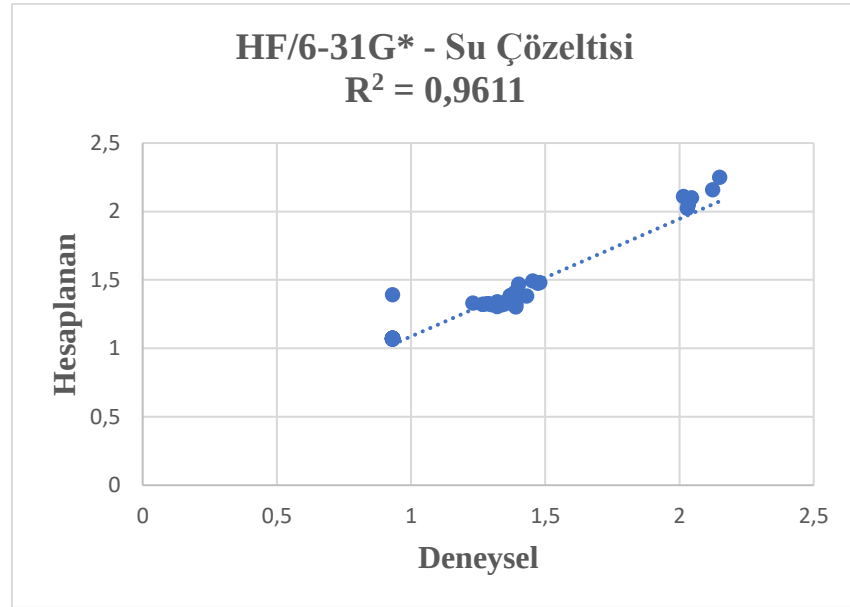
Şekil 3.46 HF/3-21G'ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (DCM Çözültisi)



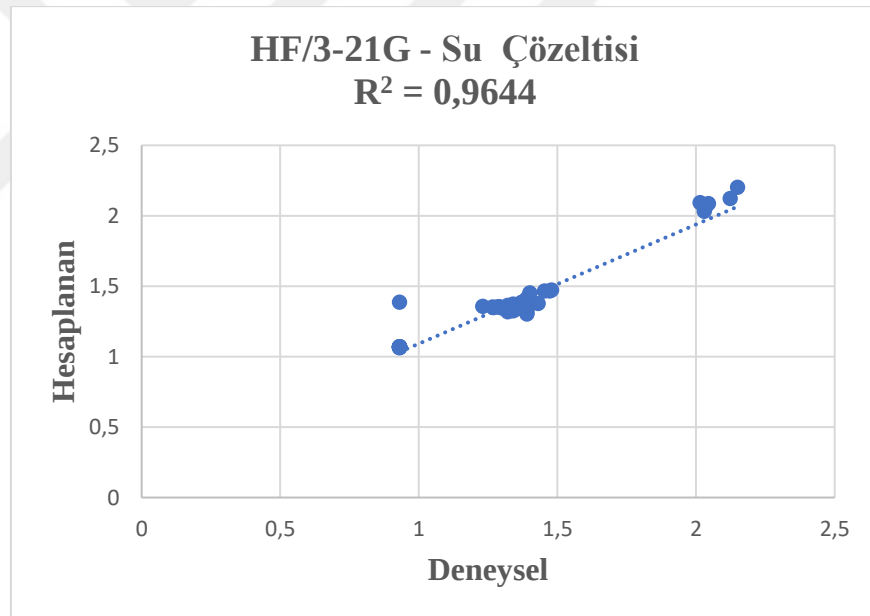
Şekil 3.47 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Etanol Çözeltisi)



Şekil 3.48 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Etanol Çözeltisi)



Şekil 3.49 HF/6-31G*'ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Su Çözeltisi)



Şekil 3.50 HF/3-21G'ye ait hesaplanan ve deneysel bağ uzunluklarının korelasyon grafiği (Su Çözeltisi)

Çizelge 3.7 dfppy-Ir-dfbpy yapısı bağ açıları değerleri ile dört farklı ortamda B3LYP metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası

dfppy-Ir-dfbpy		B3LYP							
		Gaz	Gaz	DCM	DCM	Etanol	Etanol	Su	Su
Bağ Adı	DeneySEL Bağ Açısı	6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G
		Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik
N ₉ - Ir ₁ - N ₁₂	74,8000	75,2128	76,2754	75,1413	76,1976	75,1291	76,1891	75,1229	76,1861
N ₉ - Ir ₁ - N ₁₃	95,3000	96,1715	95,5628	96,3721	95,8707	96,3833	95,8855	96,3817	95,8874
N ₉ - Ir ₁ - N ₁₄	87,8000	88,7177	89,7788	88,1494	89,0278	88,0806	88,9483	88,0544	88,9164
N ₉ - Ir ₁ - C ₃₇	94,8000	95,4246	95,0822	95,8026	95,4463	95,8218	95,4553	95,8286	95,4550
N ₁₂ - Ir ₁ - N ₁₃	43,8000	88,5233	89,7269	88,4541	89,5353	88,4923	89,5724	88,5151	89,5938
N ₁₂ - Ir ₁ - N ₁₄	94,9000	94,9748	94,0041	95,5558	94,6644	95,5944	94,7054	95,6019	94,7153
N ₁₂ - Ir ₁ - C ₄₂	101,5000	98,3947	98,5963	98,3760	98,6903	98,4218	98,6725	98,4487	98,6635
N ₁₃ - Ir ₁ - C ₃₇	143,6000	97,0031	96,4061	96,4313	95,8781	96,3454	95,7925	96,3107	95,7577
N ₁₃ - Ir ₁ - C ₄₂	80,3000	80,3046	80,6737	80,2870	80,6381	80,2896	80,6369	80,2914	80,6369
N ₁₄ - Ir ₁ - C ₃₇	80,5000	80,1876	80,5652	80,1507	80,5225	80,1479	80,5185	80,1470	80,5172
N ₁₄ - Ir ₁ - C ₄₂	95,0000	95,0821	94,2223	95,5369	94,7475	95,5998	94,8232	95,6284	94,8571
C ₃₇ - Ir ₁ - C ₄₂	89,0000	91,1842	90,3424	90,8542	89,9006	90,7989	89,9145	90,7712	89,9260
Ir ₁ - N ₉ - C ₂₄	125,1000	126,5922	126,4618	126,2266	126,1366	126,1627	126,0907	126,1331	126,0709
Ir ₁ - N ₉ - C ₃₂	116,4000	114,4594	114,5828	114,8987	114,9550	114,9715	115,0041	115,0044	115,0247
C ₂₄ - N ₉ - C ₃₂	118,4000	118,9350	118,9449	118,8570	118,8924	118,8476	118,8890	118,8443	118,8882
C ₃₃ - N ₁₀ - C ₃₄	99,9000	100,7526	101,9112	100,7721	101,9292	100,7868	101,9429	100,7944	101,9498
N ₁₂ - N ₁₁ - C ₃₄	103,9000	103,4747	102,8073	103,4314	102,7951	103,4331	102,7960	103,4352	102,7964
Ir ₁ - N ₁₂ - N ₁₁	135,9000	136,2091	136,6899	136,1969	136,6594	136,2136	136,6472	136,2227	136,6424
Ir ₁ - N ₁₂ - C ₃₃	115,3000	116,0447	115,8921	115,9894	115,9186	115,9730	115,9285	115,9662	115,9326
N ₁₁ - N ₁₂ - C ₃₃	108,7000	107,7456	107,3969	107,8084	107,4213	107,8080	107,4236	107,8059	107,4241
Ir ₁ - N ₁₃ - C ₄₈	117,2000	115,5389	115,1542	115,7005	115,3351	115,7211	115,3584	115,7291	115,3676
Ir ₁ - N ₁₃ - C ₅₅	122,3000	124,4843	125,0980	124,3675	124,9393	124,3534	124,9209	124,3486	124,9142
C ₄₈ - N ₁₃ - C ₅₅	120,0000	119,9414	119,7245	119,9202	119,7188	119,9168	119,7162	119,9149	119,7145
Ir ₁ - N ₁₄ - C ₁₅	116,7000	116,0647	115,7572	116,0038	115,6955	115,9935	115,6827	115,9890	115,6769
Ir ₁ - N ₁₄ - C ₂₂	123,2000	123,4983	123,8770	123,7180	124,1072	123,7482	124,1444	123,7609	124,1607
C ₁₅ - N ₁₄ - C ₂₂	120,0000	120,4316	120,3504	120,2782	120,1960	120,2581	120,1724	120,2499	120,1622
N ₁₄ - C ₁₅ - C ₁₆	120,0000	119,2916	119,4765	119,3930	119,5652	119,4057	119,5775	119,4106	119,5824
N ₁₄ - C ₁₅ - C ₃₆	111,3000	113,7442	114,0780	113,7273	114,0728	113,7267	114,0757	113,7265	114,0773
C ₁₆ - C ₁₅ - C ₃₆	128,7000	126,9566	126,4350	126,8762	126,3582	126,8648	126,3439	126,8604	126,3377
C ₁₅ - C ₁₆ - H ₁₇	120,0000	119,2990	118,1642	119,4731	118,3626	119,4951	118,3877	119,5040	118,3979

Çizelge 3.7 dfppy-Ir-dfbpy yapısı bağ açıları değerleri ile dört farklı ortamda B3LYP metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası (devam)

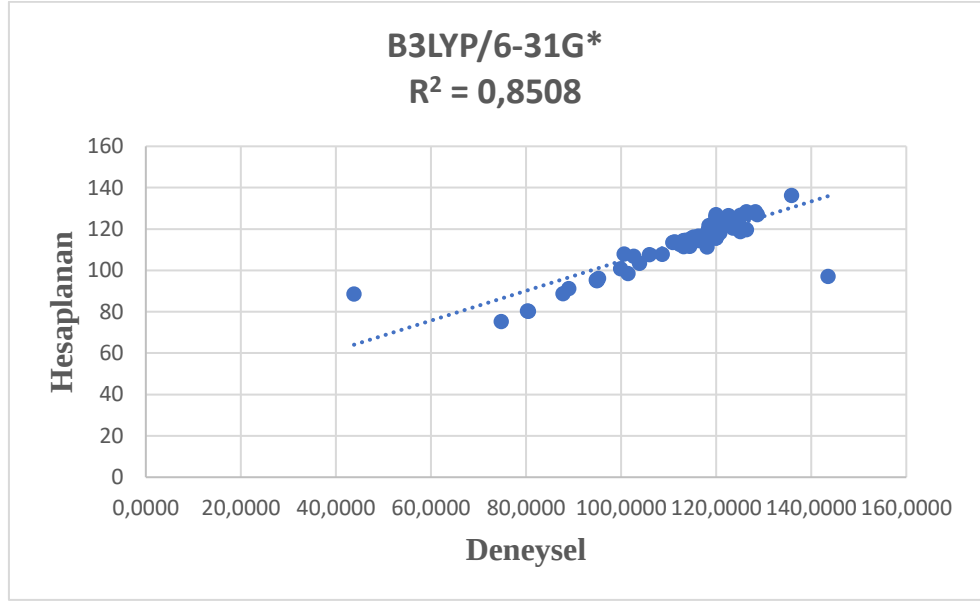
C ₁₅ - C ₁₆ - C ₁₈	120,0000	120,0619	119,9993	120,0911	120,0386	120,0945	120,0443	120,0960	120,0470
H ₁₇ - C ₁₆ - C ₁₈	120,0000	120,6370	121,8338	120,4350	121,5979	120,4099	121,5673	120,3996	121,5546
C ₁₆ - C ₁₈ - H ₁₉	120,0000	119,8252	119,9438	119,8656	119,9807	119,8694	119,9865	119,8708	119,9888
C ₁₆ - C ₁₈ - C ₂₀	120,0000	119,5865	119,6665	119,5138	119,5950	119,5053	119,5848	119,5020	119,5805
H ₁₉ - C ₁₈ - C ₂₀	120,0000	120,5868	120,3873	120,6201	120,4234	120,6248	120,4280	120,6269	120,4301
C ₁₈ - C ₂₀ - H ₂₁	120,0000	121,9402	121,5755	121,9114	121,5507	121,9060	121,5466	121,9040	121,5452
C ₁₈ - C ₂₀ - C ₂₂	120,0000	118,3342	118,8221	118,3312	118,8073	118,3301	118,8064	118,3293	118,8058
H ₂₁ - C ₂₀ - C ₂₂	120,0000	119,7252	119,6018	119,7573	119,6419	119,7639	119,6470	119,7667	119,6490
N ₁₄ - C ₂₂ - C ₂₀	120,0000	122,2833	121,6685	122,3882	121,7908	122,4023	121,8083	122,4085	121,8161
N ₁₄ - C ₂₂ - H ₂₃	120,0000	115,6143	115,9136	115,7610	116,0949	115,7825	116,1284	115,7923	116,1435
C ₂₀ - C ₂₂ - H ₂₃	120,0000	122,0977	122,4110	121,8491	122,1120	121,8139	122,0616	121,7981	122,0390
N ₉ - C ₂₄ - H ₂₅	118,5000	115,7125	115,9087	115,9389	116,1785	115,9746	116,2200	115,9901	116,2375
N ₉ - C ₂₄ - C ₂₆	123,0000	122,5569	121,9153	122,5076	121,8813	122,4944	121,8696	122,4876	121,8636
H ₂₅ - C ₂₄ - C ₂₆	118,5000	121,7303	122,1759	121,5530	121,9399	121,5304	121,9102	121,5217	121,8986
C ₂₄ - C ₂₆ - H ₂₇	120,1000	119,8009	119,6668	119,7203	119,5997	119,7032	119,5856	119,6948	119,5788
C ₂₄ - C ₂₆ - C ₂₈	119,7000	118,6850	119,1295	118,7792	119,1947	118,7970	119,2078	118,8052	119,2138
H ₂₇ - C ₂₆ - C ₂₈	120,1000	121,5141	121,2035	121,5005	121,2055	121,4998	121,2065	121,5000	121,2074
C ₂₆ - C ₂₈ - H ₂₉	120,8000	120,4953	120,3403	120,5909	120,4284	120,6013	120,4363	120,6056	120,4396
C ₂₆ - C ₂₈ - C ₃₀	118,3000	119,2430	119,3325	119,1315	119,2482	119,1168	119,2391	119,1110	119,2356
H ₂₉ - C ₂₈ - C ₃₀	120,8000	120,2617	120,3270	120,2776	120,3234	120,2819	120,3246	120,2834	120,3248
C ₂₈ - C ₃₀ - H ₃₁	120,1000	122,5117	122,8416	121,9771	122,2741	121,9127	122,2041	121,8864	122,1756
C ₂₈ - C ₃₀ - C ₃₂	119,9000	119,0206	119,1185	119,0281	119,1232	119,0254	119,1202	119,0236	119,1185
H ₃₁ - C ₃₀ - C ₃₂	120,1000	118,4676	118,0397	118,9947	118,6026	119,0619	118,6756	119,0900	118,7059
N ₉ - C ₃₂ - C ₃₀	120,1000	121,5588	121,5583	121,6959	121,6595	121,7181	121,6738	121,7278	121,6797
N ₉ - C ₃₂ - C ₃₃	115,0000	115,1787	114,9620	114,9321	114,7428	114,9001	114,7143	114,8866	114,7025
C ₃₀ - C ₃₂ - C ₃₃	124,7000	123,2621	123,4772	123,3720	123,5968	123,3817	123,6111	123,3855	123,6171
N ₁₀ - C ₃₃ - N ₁₂	112,4000	112,5136	112,4698	112,4385	112,3963	112,4275	112,3808	112,4232	112,3740
N ₁₀ - C ₃₃ - C ₃₂	128,3000	128,3800	129,2195	128,5360	129,4165	128,5602	129,4549	128,5710	129,4718
N ₁₂ - C ₃₃ - C ₃₂	118,3000	119,0950	118,2848	119,0224	118,1781	119,0096	118,1561	119,0031	118,1462
N ₁₀ - C ₃₄ - N ₁₁	114,8000	115,5134	115,4121	115,5496	115,4557	115,5446	115,4544	115,5411	115,4532
N ₁₀ - C ₃₄ - C ₃₅	122,8000	122,1181	122,2561	121,9949	122,1542	121,9970	122,1611	122,0013	122,1674
N ₁₁ - C ₃₄ - C ₃₅	122,4000	122,3552	122,2408	122,4467	122,2977	122,4488	122,2943	122,4478	122,2897
F ₆ - C ₃₅ - F ₇	106,0000	107,6345	107,5054	107,4145	107,2220	107,3787	107,1983	107,3637	107,1862

Çizelge 3.7 dfppy-Ir-dfbpy yapısı bağ açıları değerleri ile dört farklı ortamda B3LYP metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası (devam)

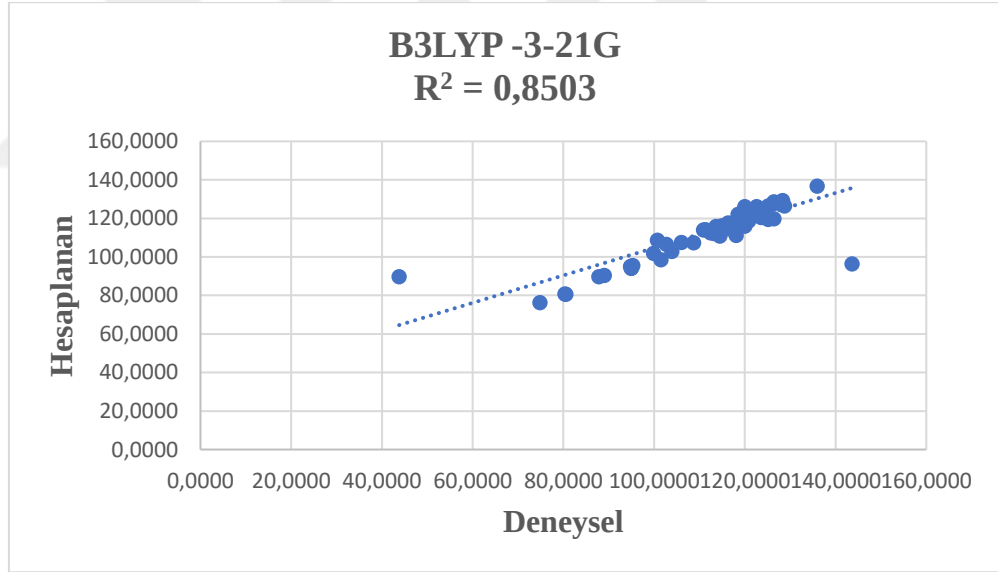
F ₆ - C ₃₅ - F ₈	100,7000	107,8906	108,5866	107,6527	108,4695	107,6436	108,4660	107,6398	108,4673
F ₆ - C ₃₅ - C ₃₄	114,5000	111,6020	110,7965	111,8045	110,9416	111,8093	110,9328	111,8083	110,9267
F ₇ - C ₃₅ - F ₈	102,7000	106,8123	106,4899	106,4480	106,1506	106,4233	106,1245	106,4167	106,1174
F ₇ - C ₃₅ - C ₃₄	113,2000	111,4537	112,0863	111,6898	112,3457	111,7130	112,3594	111,7220	112,3642
F ₈ - C ₃₅ - C ₃₄	118,1000	111,2234	111,1784	111,5503	111,4663	111,5870	111,5112	111,6026	111,5294
C ₁₅ - C ₃₆ - C ₃₇	117,8000	115,9160	115,9065	115,9491	115,9295	115,9587	115,9378	115,9635	115,9422
C ₁₅ - C ₃₆ - C ₄₁	122,2000	125,3555	124,9726	125,4233	125,0243	125,4299	125,0266	125,4324	125,0266
C ₃₇ - C ₃₆ - C ₄₁	120,0000	118,7258	119,1099	118,6274	119,0438	118,6113	119,0343	118,6041	119,0302
Ir ₁ - C ₃₇ - C ₃₆	113,5000	113,9864	113,5880	114,1039	113,7218	114,1129	113,7318	114,1154	113,7344
Ir ₁ - C ₃₇ - C ₃₈	126,5000	127,4404	127,8156	127,1902	127,5804	127,1538	127,5512	127,1388	127,5400
C ₃₆ - C ₃₇ - C ₃₈	120,0000	118,5293	118,5555	118,6773	118,6736	118,7060	118,6931	118,7191	118,7017
C ₃₇ - C ₃₈ - H ₃₉	120,0000	121,5513	121,1605	121,6339	121,2520	121,6507	121,2695	121,6583	121,2775
C ₃₇ - C ₃₈ - C ₄₀	120,0000	120,0633	120,2311	119,9098	120,1101	119,8845	120,0923	119,8733	120,0846
H ₃₉ - C ₃₈ - C ₄₀	120,0000	118,3843	118,6046	118,4563	118,6377	118,4647	118,6382	118,4681	118,6379
F ₃ - C ₄₀ - C ₃₈	119,2000	119,1451	119,6493	119,0273	119,5393	119,0133	119,5258	119,0076	119,5203
F ₃ - C ₄₀ - N ₅₈	120,8000	118,1043	118,5712	118,0883	118,5754	118,0877	118,5785	118,0874	118,5798
C ₃₈ - C ₄₀ - C ₅₈	120,0000	122,7503	121,7791	122,8844	121,8851	122,8990	121,8957	122,9050	121,8999
F ₂ - C ₄₁ - C ₃₆	123,6000	120,4396	120,4375	120,4614	120,4707	120,4644	120,4758	120,4656	120,4779
F ₂ - C ₄₁ - N ₅₈	116,3000	116,5949	117,5932	116,5023	117,5159	116,4944	117,5087	116,4916	117,5061
C ₃₆ - C ₄₁ - C ₅₈	120,0000	122,9649	121,9688	123,0361	122,0132	123,0411	122,0154	123,0427	122,0160
Ir ₁ - C ₄₂ - C ₄₃	113,1000	114,4240	113,9474	114,5117	114,0525	114,5187	114,0643	114,5207	114,0687
Ir ₁ - C ₄₂ - C ₄₆	126,4000	128,3842	128,5968	128,2724	128,5068	128,2670	128,5027	128,2659	128,5022
C ₄₃ - C ₄₂ - C ₄₆	120,0000	117,1857	117,4536	117,2076	117,4378	117,2055	117,4293	117,2042	117,4250
C ₄₂ - C ₄₃ - C ₄₄	120,0000	117,3287	117,7098	117,3064	117,7184	117,3024	117,7193	117,3002	117,7195
C ₄₂ - C ₄₃ - C ₄₈	117,4000	116,1768	116,1720	116,1579	116,1284	116,1550	116,1207	116,1540	116,1176
C ₄₄ - C ₄₃ - C ₄₈	122,6000	126,4943	126,1181	126,5357	126,1532	126,5426	126,1600	126,5458	126,1628
F ₅ - C ₄₄ - C ₄₃	126,4000	119,6674	119,7987	119,9728	120,1108	120,0172	120,1545	120,0357	120,1726
F ₅ - C ₄₄ - N ₅₇	113,6000	114,5707	115,7729	114,1938	115,3823	114,1405	115,3303	114,1181	115,3088
C ₄₃ - C ₄₄ - N ₅₇	120,0000	125,7614	124,4282	125,8333	124,5069	125,8423	124,5152	125,8462	124,5186
F ₄ - C ₄₅ - C ₄₆	125,1000	118,7165	119,4009	118,9255	119,5923	118,9588	119,6229	118,9728	119,6358
F ₄ - C ₄₅ - N ₅₇	114,9000	115,3335	116,2076	114,9919	115,8476	114,9491	115,8037	114,9322	115,7862
C ₄₆ - C ₄₅ - N ₅₇	120,0000	125,9494	124,3912	126,0825	124,5601	126,0920	124,5734	126,0950	124,5780
H ₄₂ - C ₄₆ - C ₄₅	120,0000	118,0946	118,4121	118,0261	118,3474	118,0240	118,3459	118,0239	118,3462
C ₄₂ - C ₄₆ - H ₄₇	120,0000	122,7265	122,3412	122,5948	122,2133	122,5738	122,1936	122,5645	122,1848
C ₄₅ - C ₄₆ - H ₄₇	120,0000	119,1774	119,2451	119,3780	119,4385	119,4013	119,4598	119,4108	119,4684

Çizelge 3.7 dfppy-Ir-dfbpy yapısı bağ açıları değerleri ile dört farklı ortamda B3LYP metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası (devam)

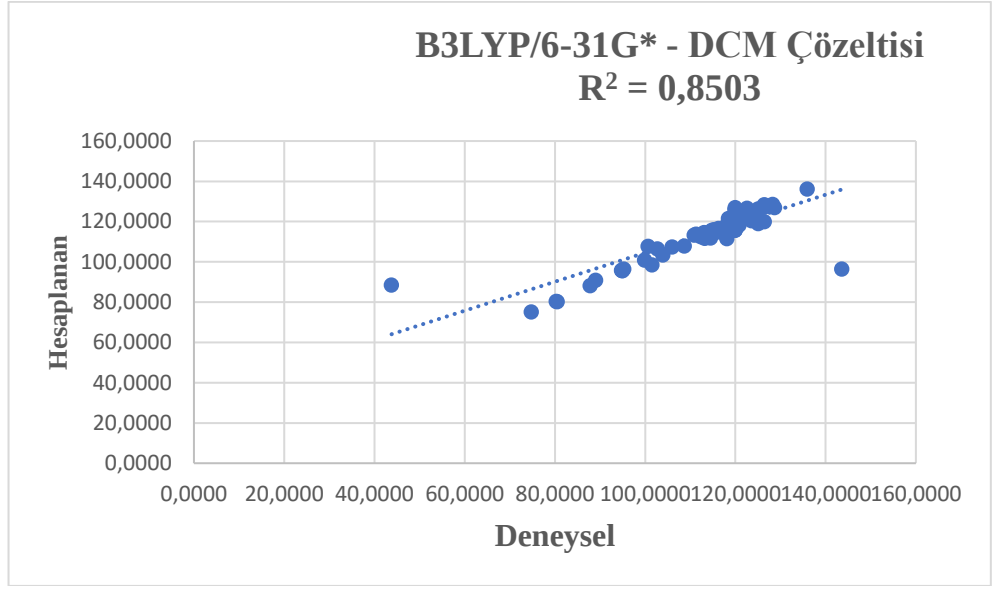
N ₁₃ - C ₄₈ - C ₄₃	110,9000	113,4944	114,0214	113,2994	113,8256	113,2755	113,7999	113,2660	113,7894
N ₁₃ - C ₄₈ - C ₄₉	120,0000	119,6231	119,8898	119,7954	120,0396	119,8233	120,0656	119,8360	120,0774
C ₄₃ - C ₄₈ - H ₄₉	120,0000	126,8823	126,0888	126,9047	126,1347	126,9005	126,1344	126,8972	126,1331
N ₄₈ - C ₄₉ - C ₅₀	120,0000	119,0853	117,8073	119,4188	118,1875	119,4673	118,2447	119,4880	118,2692
N ₄₈ - C ₄₉ - C ₅₁	120,0000	120,0393	120,0105	119,9645	119,9444	119,9504	119,9304	119,9439	119,9240
C ₅₀ - C ₄₉ - C ₅₁	120,0000	120,8751	122,1819	120,6167	121,8681	120,5823	121,8249	120,5681	121,8067
C ₄₉ - C ₅₁ - H ₅₂	120,0000	119,9218	120,0730	119,9412	120,0861	119,9426	120,0860	119,9428	120,0856
C ₄₉ - C ₅₁ - C ₅₃	120,0000	119,4618	119,4784	119,4035	119,4262	119,3955	119,4200	119,3920	119,4172
H ₅₂ - C ₅₁ - C ₅₃	120,0000	120,6163	120,4485	120,6552	120,4877	120,6619	120,4940	120,6652	120,4971
C ₅₁ - C ₅₃ - H ₅₄	120,0000	121,8760	121,4921	121,8591	121,4961	121,8575	121,4947	121,8567	121,4941
C ₅₁ - C ₅₃ - C ₅₅	120,0000	118,2988	118,8134	118,4077	118,9090	118,4289	118,9285	118,4389	118,9376
H ₅₄ - C ₅₃ - C ₅₅	120,0000	119,8246	119,6939	119,7332	119,5948	119,7136	119,5768	119,7045	119,5683
N ₁₃ - C ₅₅ - C ₅₃	120,0000	122,6351	122,0831	122,5080	121,9617	122,4844	121,9390	122,4737	121,9288
N ₁₃ - C ₅₅ - H ₅₆	120,0000	115,7502	116,2277	115,9701	116,4617	116,0107	116,5022	116,0294	116,5208
C ₅₃ - C ₅₅ - H ₅₆	120,0000	121,6147	121,6891	121,5215	121,5765	121,5043	121,5586	121,4964	121,5501
C ₄₄ - N ₅₇ - C ₄₅	120,0000	115,6780	117,6036	115,5424	117,4286	115,5321	117,4161	115,5289	117,4120
C ₄₀ - C ₅₈ - C ₄₁	120,0000	116,9655	118,3549	116,8643	118,2740	116,8575	118,2692	116,8552	118,2677
C ₄₀ - C ₅₈ - H ₅₉	120,0000	121,8743	121,1146	121,9766	121,2108	121,9872	121,2196	121,9915	121,2230
C ₄₁ - C ₅₈ - H ₅₉	120,0000	121,1595	120,5291	121,1589	120,5151	121,1552	120,5112	121,1533	120,5093



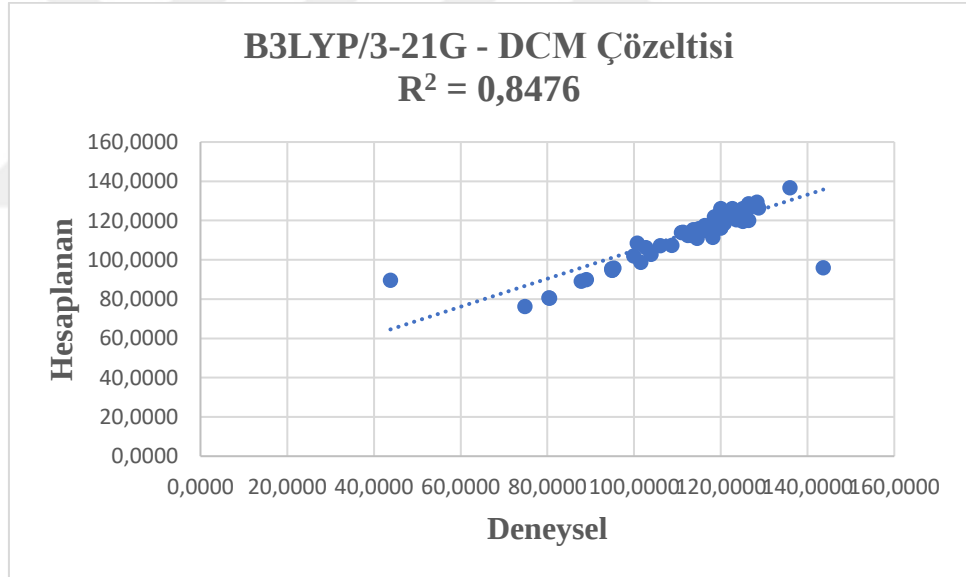
Şekil 3.51 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (çözelti olmayan ortam)



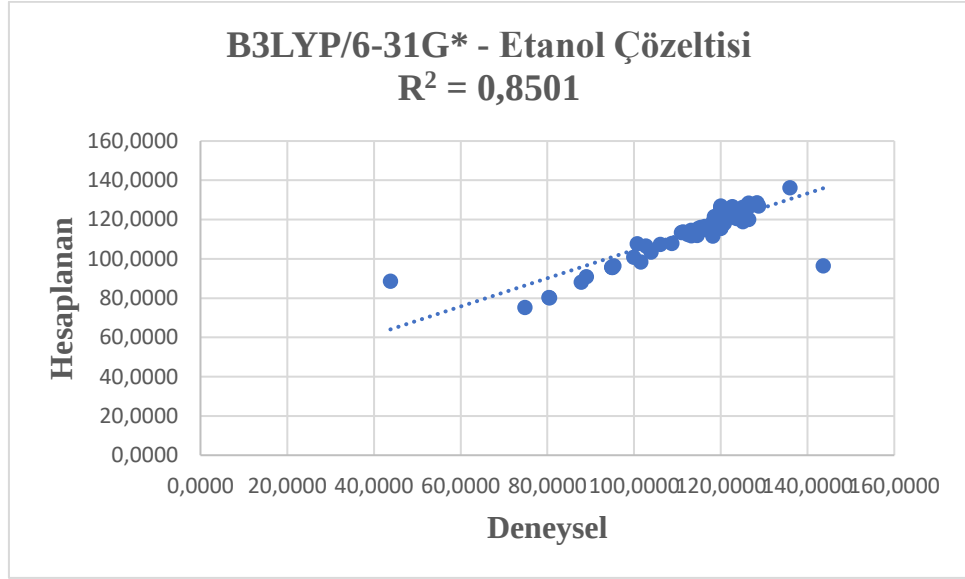
Şekil 3.52 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (çözelti olmayan ortam)



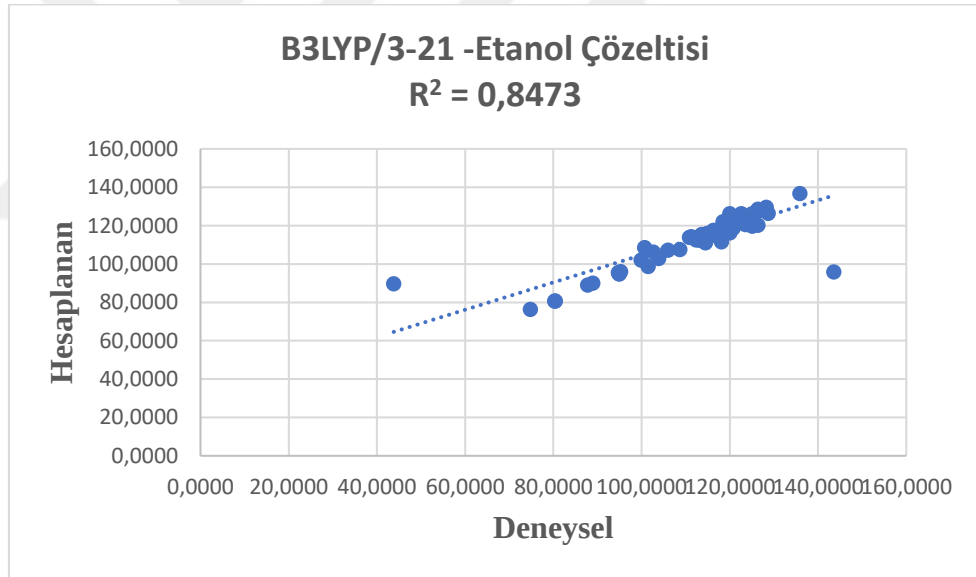
Şekil 3.53 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde)



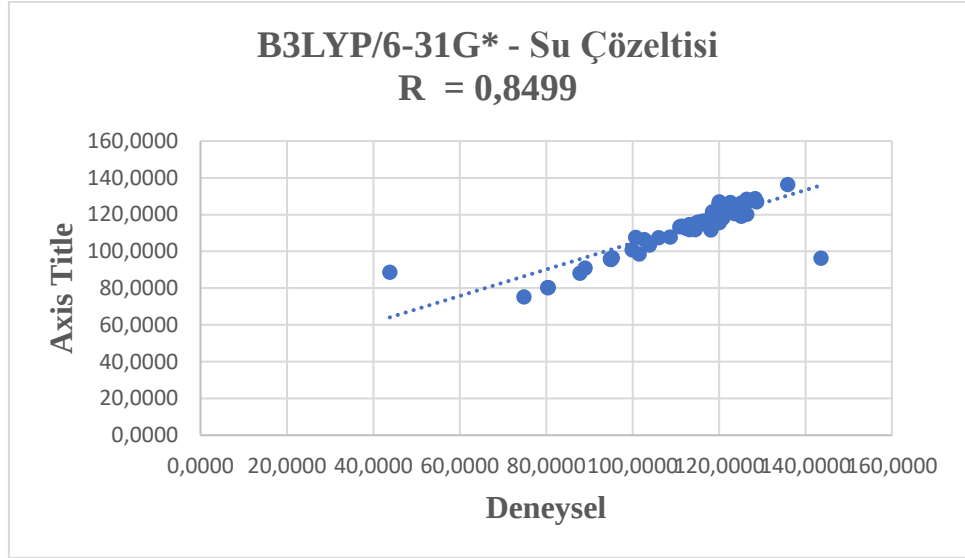
Şekil 3.54 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde)



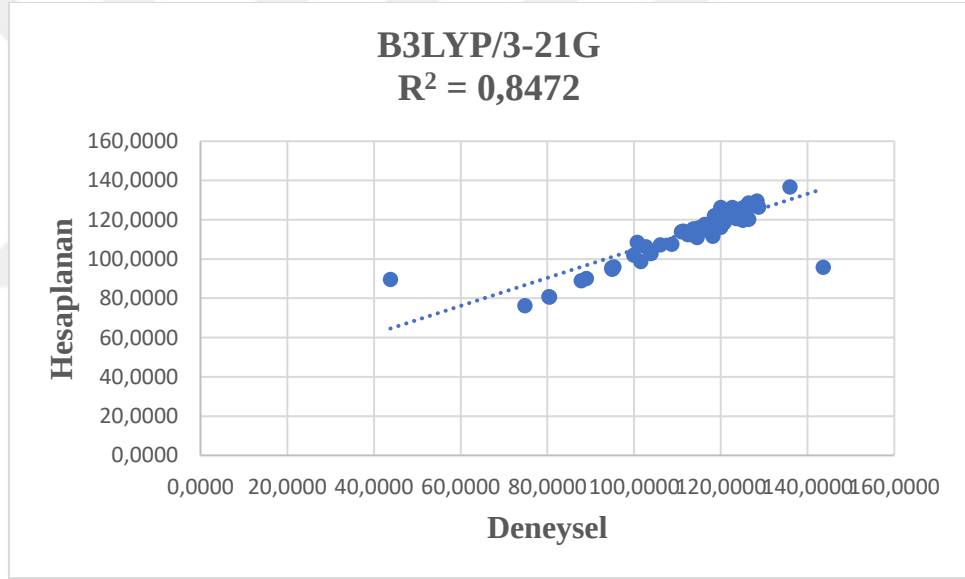
Şekil 3.55 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde)



Şekil 3.56 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde)



Şekil 3.57 B3LYP/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde)



Şekil 3.58 B3LYP/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde)

Çizelge 3.8 dfppy-Ir-dfbpy yapısı bağ açıları değerleri ile dört farklı ortamda HF metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası

dfppy-Ir-dfbpy		HF							
		Gaz	Gaz	DCM	DCM	Etanol	Etanol	Su	Su
Bağ Adı	DeneySEL Bağ Açısı	6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G	6-31G*	3-21G
		Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik	Teorik
N ₉ - Ir ₁ - N ₁₂	74,8000	74,8222	75,9999	74,8160	75,9831	74,8142	75,9839	74,8118	75,9889
N ₉ - Ir ₁ - N ₁₃	95,3000	96,6747	96,3996	96,7293	96,5331	96,7215	96,5154	96,7155	96,4932
N ₉ - Ir ₁ - N ₁₄	87,8000	88,3854	88,6850	88,0238	88,2084	87,9725	88,1578	87,9465	88,1446
N ₉ - Ir ₁ - C ₃₇	94,8000	96,5714	96,1554	97,0496	96,6584	97,1321	96,7394	97,1792	96,7757
N ₁₂ - Ir ₁ - N ₁₃	43,8000	88,2114	88,5430	88,1531	88,4476	88,1748	88,4509	88,1859	88,4657
N ₁₂ - Ir ₁ - N ₁₄	94,9000	95,4959	95,0656	96,0320	95,6593	96,0843	95,7289	96,1074	95,7453
N ₁₂ - Ir ₁ - C ₄₂	101,5000	98,5793	98,4320	98,3753	98,2895	98,3212	98,2093	98,2870	98,1607
N ₁₃ - Ir ₁ - C ₃₇	143,6000	97,2610	96,9223	96,7142	96,3555	96,6219	96,2669	96,5768	96,2220
N ₁₃ - Ir ₁ - C ₄₂	80,3000	79,8027	80,1846	79,7817	80,1403	79,7826	80,1393	79,7843	80,1392
N ₁₄ - Ir ₁ - C ₃₇	80,5000	79,6726	80,0624	79,6485	80,0372	79,6507	80,0369	79,6530	80,0426
N ₁₄ - Ir ₁ - C ₄₂	95,0000	95,4381	94,9790	95,8401	95,4293	95,9118	95,5118	95,9493	95,5538
C ₃₇ - Ir ₁ - C ₄₂	89,0000	90,2370	89,6334	89,9400	89,2534	89,9111	89,2494	89,8994	89,2571
Ir ₁ - N ₉ - C ₂₄	125,1000	126,6872	126,1488	126,3452	125,8618	126,2886	125,8183	126,2630	125,8008
Ir ₁ - N ₉ - C ₃₂	116,4000	114,1580	114,1501	114,6386	114,5663	114,7128	114,6236	114,7455	114,6450
C ₂₄ - N ₉ - C ₃₂	118,4000	119,1370	119,6809	118,9936	119,5453	118,9760	119,5320	118,9691	119,5290
C ₃₃ - N ₁₀ - C ₃₄	99,9000	100,5703	102,2984	100,5935	102,2912	100,6062	102,2971	100,6125	102,2981
N ₁₂ - N ₁₁ - C ₃₄	103,9000	104,0573	103,9056	103,9423	103,7974	103,9326	103,7851	103,9285	103,7810
Ir ₁ - N ₁₂ - N ₁₁	135,9000	136,2660	137,1379	136,2378	137,0184	136,2332	136,9902	136,2285	136,9895
Ir ₁ - N ₁₂ - C ₃₃	115,3000	116,3918	115,6949	116,2584	115,6734	116,2453	115,6801	116,2424	115,6761
N ₁₁ - N ₁₂ - C ₃₃	108,7000	107,3388	107,1596	107,4884	107,2844	107,5045	107,3021	107,5110	107,3050
Ir ₁ - N ₁₃ - C ₄₈	117,2000	115,3089	114,8880	115,5443	115,1539	115,5762	115,1885	115,5893	115,2058
Ir ₁ - N ₁₃ - C ₅₅	122,3000	124,3815	124,5276	124,2523	124,3487	124,2294	124,3205	124,2191	124,3090
C ₄₈ - N ₁₃ - C ₅₅	120,0000	120,2722	120,5549	120,1935	120,4903	120,1879	120,4864	120,1866	120,4818
Ir ₁ - N ₁₄ - C ₁₅	116,7000	115,9582	115,6092	115,9324	115,5739	115,9246	115,5667	115,9200	115,5620
Ir ₁ - N ₁₄ - C ₂₂	123,2000	123,2954	123,2920	123,5645	123,5673	123,6016	123,6035	123,6179	123,6227
C ₁₅ - N ₁₄ - C ₂₂	120,0000	120,7299	121,0754	120,5013	120,8562	120,4733	120,8290	120,4619	120,8149
N ₁₄ - C ₁₅ - C ₁₆	120,0000	119,4892	119,3819	119,6355	119,5107	119,6530	119,5264	119,6597	119,5346

Çizelge 3.8 dfppy-Ir-dfbpy yapısı bağ açıları değerleri ile dört farklı ortamda HF metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası (devam)

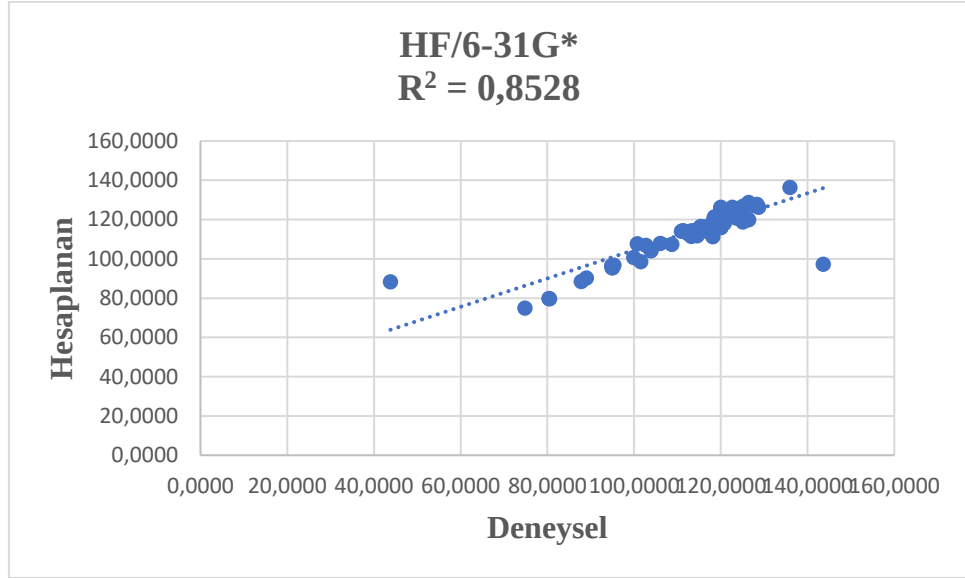
N ₁₄ - C ₁₅ - C ₃₆	111,3000	114,3137	114,6772	114,2448	114,6273	114,2388	114,6229	114,2371	114,6225
C ₁₆ - C ₁₅ - C ₃₆	128,7000	126,1906	125,9337	126,1170	125,8599	126,1062	125,8493	126,1014	125,8417
C ₁₅ - C ₁₆ - H ₁₇	120,0000	120,2749	119,2815	120,4373	119,4705	120,4574	119,4944	120,4653	119,5029
C ₁₅ - C ₁₆ - C ₁₈	120,0000	119,5689	119,5681	119,6255	119,6331	119,6317	119,6400	119,6343	119,6433
H ₁₇ - C ₁₆ - C ₁₈	120,0000	120,1538	121,1480	119,9365	120,8958	119,9105	120,8653	119,9000	120,8536
C ₁₆ - C ₁₈ - H ₁₉	120,0000	119,6240	119,6632	119,6874	119,7164	119,6934	119,7213	119,6955	119,7261
C ₁₆ - C ₁₈ - C ₂₀	120,0000	119,9382	120,0396	119,8057	119,9144	119,7911	119,9007	119,7853	119,8940
H ₁₉ - C ₁₈ - C ₂₀	120,0000	120,4363	120,2952	120,5063	120,3686	120,5151	120,3776	120,5188	120,3797
C ₁₈ - C ₂₀ - H ₂₁	120,0000	122,1443	121,7561	122,1037	121,7231	122,0963	121,7178	122,0931	121,7140
C ₁₈ - C ₂₀ - C ₂₂	120,0000	117,6229	118,1683	117,6600	118,2013	117,6632	118,2046	117,6642	118,2071
H ₂₁ - C ₂₀ - C ₂₂	120,0000	120,2316	120,0744	120,2361	120,0753	120,2404	120,0775	120,2427	120,0789
N ₁₄ - C ₂₂ - C ₂₀	120,0000	122,6423	121,7551	122,7685	121,8799	122,7849	121,8956	122,7918	121,9027
N ₁₄ - C ₂₂ - H ₂₃	120,0000	115,8907	116,2330	116,0443	116,4379	116,0628	116,4665	116,0705	116,4765
C ₂₀ - C ₂₂ - H ₂₃	120,0000	121,4628	122,0064	121,1855	121,6803	121,1510	121,6365	121,1366	121,6196
N ₉ - C ₂₄ - H ₂₅	118,5000	116,1455	116,4489	116,3819	116,7225	116,4148	116,7610	116,4286	116,7759
N ₉ - C ₂₄ - C ₂₆	123,0000	122,5974	121,6312	122,6035	121,6551	122,5982	121,6512	122,5952	121,6466
H ₂₅ - C ₂₄ - C ₂₆	118,5000	121,2567	121,9197	121,0142	121,6222	120,9865	121,5875	120,9757	121,5772
C ₂₄ - C ₂₆ - H ₂₇	120,1000	120,0548	119,8941	119,9497	119,7985	119,9306	119,7817	119,9221	119,7768
C ₂₄ - C ₂₆ - C ₂₈	119,7000	118,3401	118,8147	118,4330	118,8864	118,4495	118,8992	118,4566	118,9053
H ₂₇ - C ₂₆ - C ₂₈	120,1000	121,6051	121,2912	121,6173	121,3151	121,6199	121,3190	121,6213	121,3179
C ₂₆ - C ₂₈ - H ₂₉	120,8000	120,3979	120,2990	120,5293	120,4225	120,5446	120,4351	120,5506	120,4370
C ₂₆ - C ₂₈ - C ₃₀	118,3000	119,3925	119,5373	119,2515	119,4273	119,2346	119,4162	119,2280	119,4128
H ₂₉ - C ₂₈ - C ₃₀	120,8000	120,2096	120,1636	120,2192	120,1502	120,2208	120,1487	120,2214	120,1501
C ₂₈ - C ₃₀ - H ₃₁	120,1000	122,4342	122,6967	121,8495	122,0901	121,7776	122,0162	121,7482	121,9882
C ₂₈ - C ₃₀ - C ₃₂	119,9000	118,4425	118,5972	118,4893	118,6341	118,4910	118,6345	118,4911	118,6328
H ₃₁ - C ₃₀ - C ₃₂	120,1000	119,1233	118,7058	119,6612	119,2757	119,7314	119,3491	119,7607	119,3789
N ₉ - C ₃₂ - C ₃₀	120,1000	122,0898	121,7374	122,2288	121,8510	122,2504	121,8662	122,2597	121,8729
N ₉ - C ₃₂ - C ₃₃	115,0000	115,2365	115,2332	114,9526	114,9594	114,9133	114,9218	114,8961	114,9073
C ₃₀ - C ₃₂ - C ₃₃	124,7000	122,6735	123,0284	122,8185	123,1888	122,8362	123,2114	122,8441	123,2191
N ₁₀ - C ₃₃ - N ₁₂	112,4000	112,9265	112,2961	112,7399	112,1310	112,7121	112,1053	112,7001	112,0973
N ₁₀ - C ₃₃ - C ₃₂	128,3000	127,6929	128,7969	127,9493	129,0792	127,9984	129,1347	128,0214	129,1517
N ₁₂ - C ₃₃ - C ₃₂	118,3000	119,3765	118,9017	119,3094	118,7879	119,2884	118,7584	119,2775	118,7495

Çizelge 3.8 dfppy-Ir-dfbpy yapısı bağ açıları değerleri ile dört farklı ortamda HF metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası (devam)

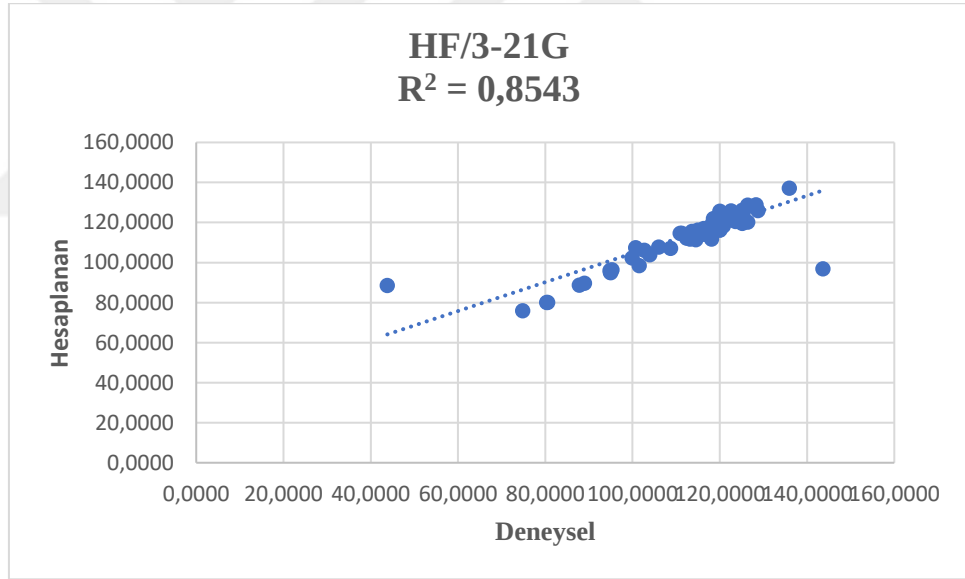
N ₁₀ - C ₃₄ - N ₁₁	114,8000	115,1071	114,3401	115,2358	114,4958	115,2446	114,5103	115,2478	114,5184
N ₁₀ - C ₃₄ - C ₃₅	122,8000	121,8912	121,9482	121,7877	121,8838	121,8048	121,9241	121,8150	121,9384
N ₁₁ - C ₃₄ - C ₃₅	122,4000	123,0012	123,7063	122,9765	123,6204	122,9506	123,5628	122,9372	123,5379
F ₆ - C ₃₅ - F ₇	106,0000	107,7237	107,8263	107,4937	107,4748	107,4768	107,3419	107,4708	107,2925
F ₆ - C ₃₅ - F ₈	100,7000	107,6166	107,4777	107,4811	107,4573	107,4712	107,5417	107,4675	107,5918
F ₆ - C ₃₅ - C ₃₄	114,5000	111,7827	111,4404	111,9482	111,5643	111,9393	111,5588	111,9320	111,5514
F ₇ - C ₃₅ - F ₈	102,7000	106,8676	106,1655	106,6109	105,8314	106,6011	105,8329	106,5997	105,8163
F ₇ - C ₃₅ - C ₃₄	113,2000	111,3633	111,8358	111,5349	112,1143	111,5424	112,1721	111,5438	112,1937
F ₈ - C ₃₅ - C ₃₄	118,1000	111,2529	111,8143	111,4950	112,0657	111,5307	112,0571	111,5471	112,0577
C ₁₅ - C ₃₆ - C ₃₇	117,8000	116,2614	116,2625	116,2576	116,2469	116,2601	116,2473	116,2618	116,2478
C ₁₅ - C ₃₆ - C ₄₁	122,2000	125,0185	124,7311	125,1067	124,8233	125,1151	124,8325	125,1179	124,8349
C ₃₇ - C ₃₆ - C ₄₁	120,0000	118,7164	118,9942	118,6354	118,9274	118,6247	118,9189	118,6203	118,9163
Ir ₁ - C ₃₇ - C ₃₆	113,5000	113,7327	113,3329	113,8879	113,4939	113,9004	113,5085	113,9039	113,5084
Ir ₁ - C ₃₇ - C ₃₈	126,5000	127,6761	128,0775	127,4246	127,8303	127,3954	127,8020	127,3846	127,7951
C ₃₆ - C ₃₇ - C ₃₈	120,0000	118,5571	118,5669	118,6707	118,6674	118,6895	118,6823	118,6978	118,6898
C ₃₇ - C ₃₈ - H ₃₉	120,0000	121,6496	121,3384	121,7028	121,4005	121,7114	121,4076	121,7150	121,4070
C ₃₇ - C ₃₈ - C ₄₀	120,0000	119,9907	120,0309	119,8556	119,9016	119,8356	119,8845	119,8269	119,8764
H ₃₉ - C ₃₈ - C ₄₀	120,0000	118,3578	118,6265	118,4416	118,6978	118,4529	118,7079	118,4580	118,7166
F ₃ - C ₄₀ - C ₃₈	119,2000	119,0990	119,4750	118,9884	119,3646	118,9768	119,3535	118,9723	119,3522
F ₃ - C ₄₀ - N ₅₈	120,8000	118,0680	118,3511	118,0399	118,3181	118,0358	118,3141	118,0336	118,3102
C ₃₈ - C ₄₀ - C ₅₈	120,0000	122,8322	122,1726	122,9716	122,3172	122,9874	122,3322	122,9940	122,3375
F ₂ - C ₄₁ - C ₃₆	123,6000	120,6621	120,6282	120,7188	120,7223	120,7265	120,7330	120,7299	120,7409
F ₂ - C ₄₁ - N ₅₈	116,3000	116,2683	117,0272	116,1396	116,8682	116,1271	116,8521	116,1223	116,8466
C ₃₆ - C ₄₁ - C ₅₈	120,0000	123,0684	122,3434	123,1413	122,4092	123,1463	122,4148	123,1478	122,4124
Ir ₁ - C ₄₂ - C ₄₃	113,1000	114,1707	113,6216	114,1954	113,6678	114,1909	113,6659	114,1875	113,6649
Ir ₁ - C ₄₂ - C ₄₆	126,4000	128,5943	128,7067	128,4832	128,6042	128,4757	128,5988	128,4734	128,5969
C ₄₃ - C ₄₂ - C ₄₆	120,0000	117,2324	117,6709	117,3160	117,7262	117,3265	117,7325	117,3314	117,7349
C ₄₂ - C ₄₃ - C ₄₄	120,0000	117,2641	117,6242	117,2037	117,5652	117,1926	117,5537	117,1870	117,5488
C ₄₂ - C ₄₃ - C ₄₈	117,4000	116,5907	116,5878	116,6130	116,5774	116,6180	116,5785	116,6202	116,5778
C ₄₄ - C ₄₃ - C ₄₈	122,6000	126,1448	125,7879	126,1832	125,8574	126,1894	125,8677	126,1928	125,8732
F ₅ - C ₄₄ - C ₄₃	126,4000	119,9415	120,3132	120,3056	120,7513	120,3559	120,8069	120,3768	120,8282
F ₅ - C ₄₄ - N ₅₇	113,6000	114,3786	115,6257	113,9574	115,0849	113,9011	115,0164	113,8777	114,9899

Çizelge 3.8 dfppy-Ir-dfbpy yapısı bağ açıları değerleri ile dört farklı ortamda HF metodu ve iki farklı temel set hesaplamalarından elde edilen teorik değerlerin kıyası (devam)

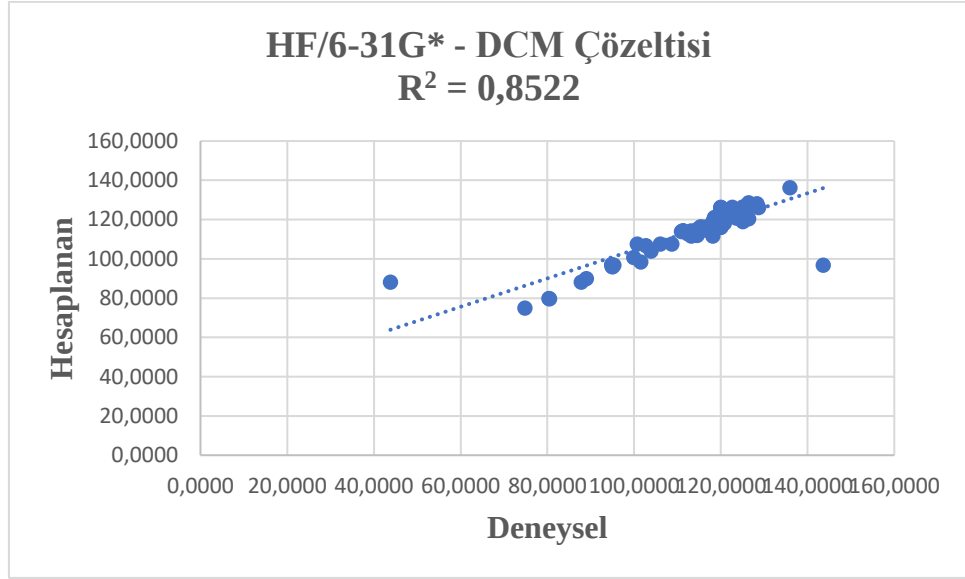
C ₄₃ - C ₄₄ - N ₅₇	120,0000	125,6792	124,0605	125,7369	124,1638	125,7431	124,1767	125,7455	124,1819
F ₄ - C ₄₅ - C ₄₆	125,1000	118,7034	119,5172	118,9550	119,7797	118,9927	119,8171	119,0085	119,8376
F ₄ - C ₄₅ - N ₅₇	114,9000	115,3321	116,3159	114,9631	115,8488	114,9199	115,7937	114,9033	115,7686
C ₄₆ - C ₄₅ - N ₅₇	120,0000	125,9640	124,1664	126,0819	124,3715	126,0874	124,3891	126,0883	124,3939
H ₄₂ - C ₄₆ - C ₄₅	120,0000	117,8904	118,1677	117,7895	118,0431	117,7813	118,0318	117,7783	118,0274
C ₄₂ - C ₄₆ - H ₄₇	120,0000	123,0396	122,5829	122,9110	122,4465	122,8932	122,4292	122,8853	122,4179
C ₄₅ - C ₄₆ - H ₄₇	120,0000	119,0694	119,2488	119,2992	119,5102	119,3253	119,5388	119,3362	119,5545
N ₁₃ - C ₄₈ - C ₄₃	110,9000	114,0781	114,6842	113,8395	114,4432	113,8080	114,4107	113,7946	114,3951
N ₁₃ - C ₄₈ - C ₄₉	120,0000	119,7568	119,6879	119,9818	119,8872	120,0156	119,9165	120,0305	119,9328
C ₄₃ - C ₄₈ - H ₄₉	120,0000	126,1647	125,6279	126,1783	125,6695	126,1759	125,6726	126,1742	125,6719
N ₄₈ - C ₄₉ - C ₅₀	120,0000	120,0962	119,0302	120,4199	119,4021	120,4687	119,4582	120,4896	119,4802
N ₄₈ - C ₄₉ - C ₅₁	120,0000	119,5574	119,5947	119,5009	119,5465	119,4866	119,5334	119,4795	119,5269
C ₅₀ - C ₄₉ - C ₅₁	120,0000	120,3460	121,3748	120,0792	121,0515	120,0447	121,0084	120,0309	120,9929
C ₄₉ - C ₅₁ - H ₅₂	120,0000	119,7220	119,7853	119,7517	119,8026	119,7521	119,8016	119,7517	119,8042
C ₄₉ - C ₅₁ - C ₅₃	120,0000	119,8295	119,8816	119,7256	119,7860	119,7147	119,7771	119,7105	119,7724
H ₅₂ - C ₅₁ - C ₅₃	120,0000	120,4485	120,3330	120,5227	120,4114	120,5332	120,4213	120,5377	120,4233
C ₅₁ - C ₅₃ - H ₅₄	120,0000	122,0675	121,6588	122,0600	121,6808	122,0567	121,6812	122,0547	121,6782
C ₅₁ - C ₅₃ - C ₅₅	120,0000	117,5483	118,1224	117,6955	118,2562	117,7214	118,2795	117,7333	118,2919
H ₅₄ - C ₅₃ - C ₅₅	120,0000	120,3835	120,2182	120,2445	120,0630	120,2219	120,0393	120,2120	120,0299
N ₁₃ - C ₅₅ - C ₅₃	120,0000	123,0352	122,1581	122,9023	122,0335	122,8734	122,0066	122,8591	121,9936
N ₁₃ - C ₅₅ - H ₅₆	120,0000	115,9896	116,4748	116,2139	116,7104	116,2528	116,7497	116,2702	116,7678
C ₅₃ - C ₅₅ - H ₅₆	120,0000	120,9751	121,3670	120,8833	121,2559	120,8733	121,2435	120,8701	121,2383
C ₄₄ - N ₅₇ - C ₄₅	120,0000	115,9690	118,3094	115,8719	118,1302	115,8690	118,1162	115,8695	118,1130
C ₄₀ - C ₅₈ - C ₄₁	120,0000	116,8348	117,8909	116,7254	117,7770	116,7164	117,7670	116,7132	117,7673
C ₄₀ - C ₅₈ - H ₅₉	120,0000	121,9911	121,4390	122,0958	121,5525	122,1062	121,5647	122,1102	121,5610
C ₄₁ - C ₅₈ - H ₅₉	120,0000	121,1735	120,6690	121,1788	120,6705	121,1774	120,6682	121,1766	120,6717



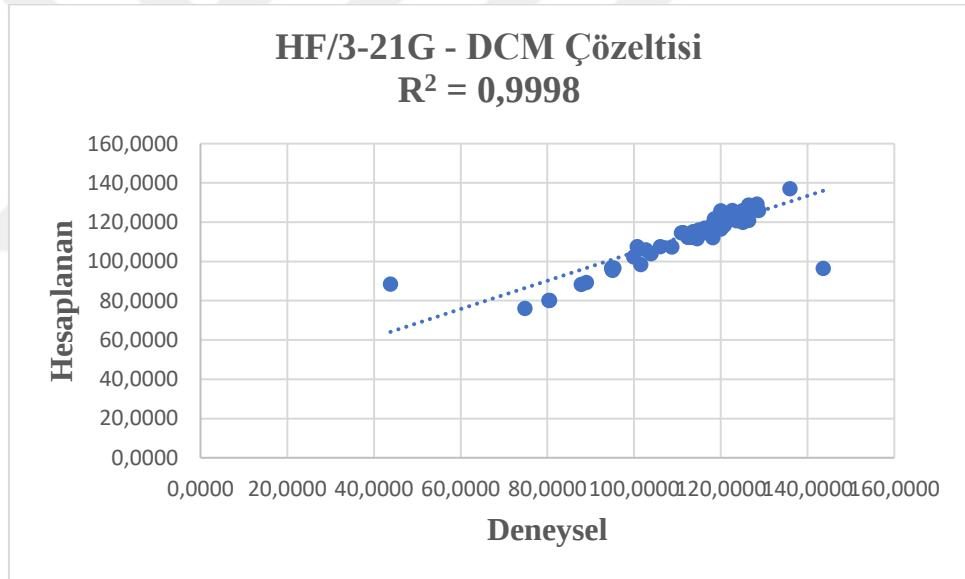
Şekil 3.59 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği



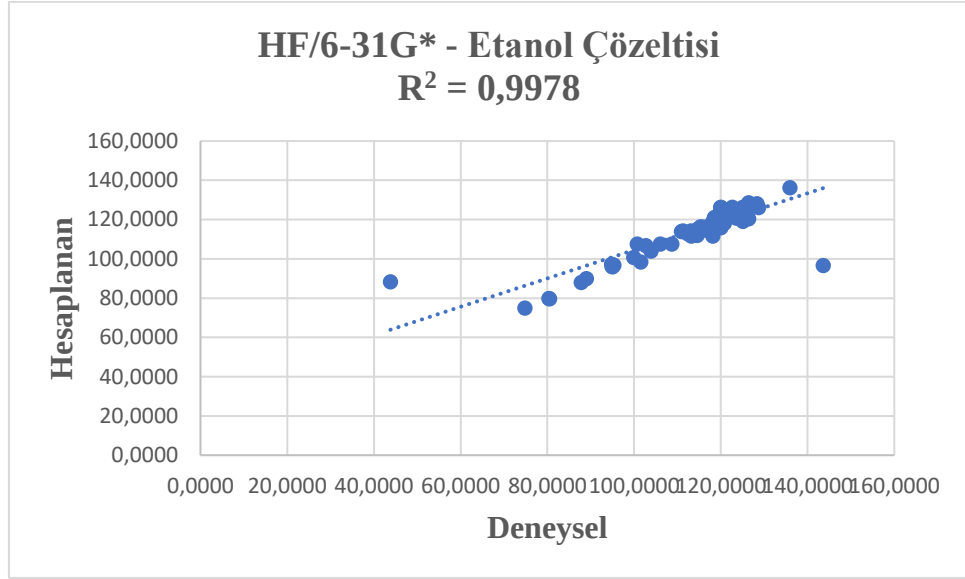
Şekil 3.60 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği



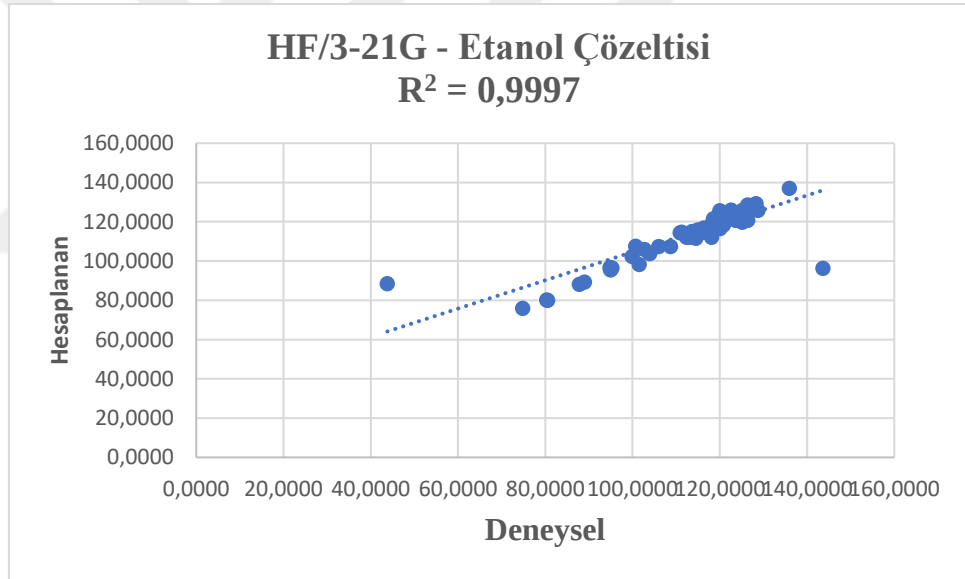
Şekil 3.61 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde)



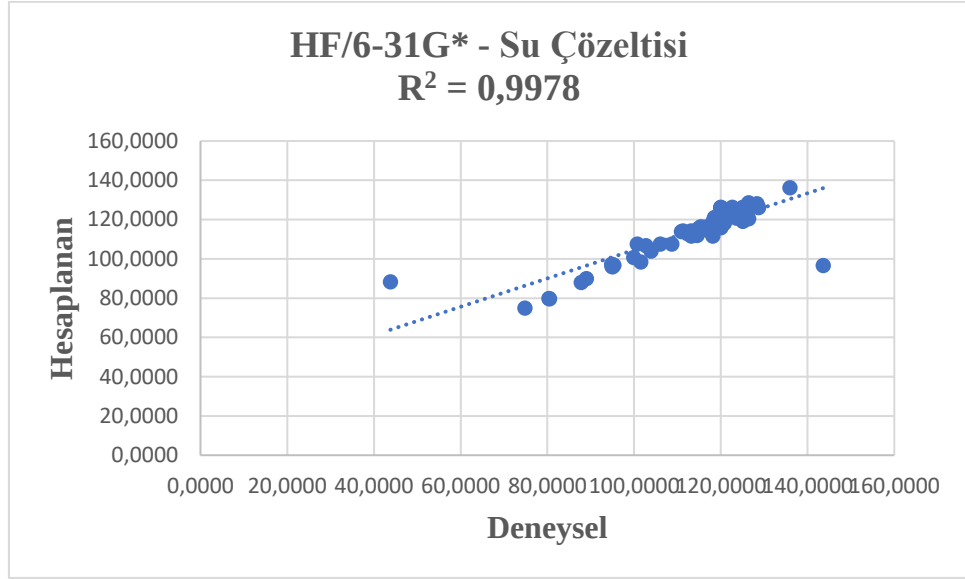
Şekil 3.62 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (DCM çözeltisinde)



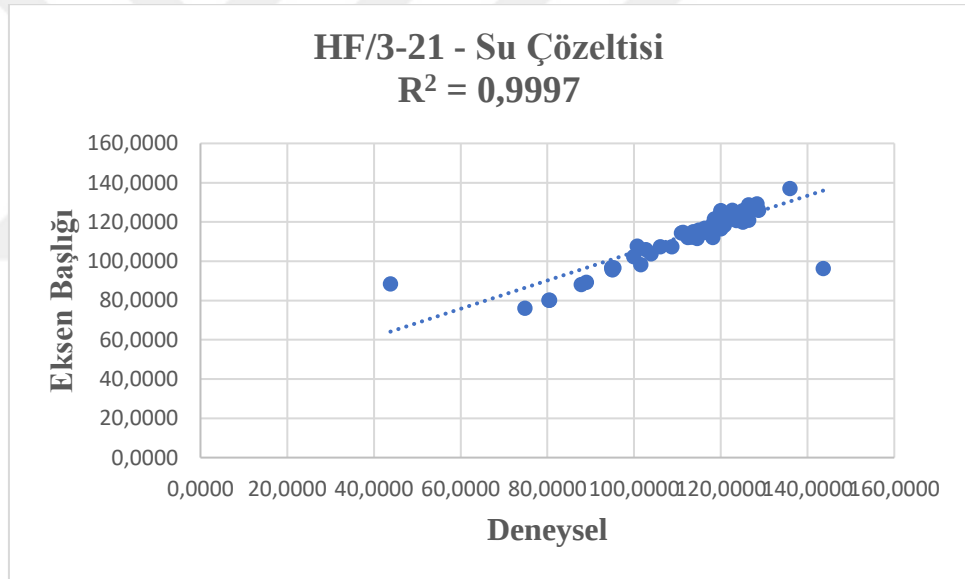
Şekil 3.63 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde)



Şekil 3.64 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Etanol çözeltisinde)



Şekil 3.65 HF/6-31G*’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde)



Şekil 3.66 HF/3-21G’ye ait hesaplanan ve deneysel bağ açılarının korelasyon grafiği (Su çözeltisinde)

Daha sonra yapılarımızın; singlet durum geçişleri dikkate alınarak soğurulan enerji ve dolayısıyla absorpsiyon dalgaboyu değeri elde edilmiştir.

Çözelti olmayan ortam için taban durumdan uyarılmış durumlara geçişlere karşılık gelen dalga boyları Çizelge 3.9’da verilmiştir.

Çizelge 3.9 dfbpy-Ir-dfppy yapısının; 4 farklı baz seti ile hesaplanan bazı enerji seviyeleri arası geçişlere karşılık dalga boyları (λ)

dfbpy-Ir-dfppy	B3LYP/6-31G*	B3LYP/3-21G	HF/6-31G*	HF/3-21G
S0-S1	383,77	387,84	278,23	269,72
S0-S2	370,71	382,34	276,89	268,88
S0-S3	363,01	360,96	253,35	244,28
S0-S4	355,07	359,58	247,24	238,51
S0-S5	344,55	354,93	238,46	229,17

DCM çözelti ortamı için taban durumdan uyarılmış durumlara geçişlere gelen dalga boyları Çizelge 3.10’da verilmiştir.

Çizelge 3.10 dfbpy-Ir-dfppy yapısının; 4 farklı baz seti ile hesaplanan bazı enerji seviyeleri arası geçişlere karşılık dalga boyları (λ) (DCM Çözeltisi)

dfbpy-Ir-dfppy	B3LYP/6-31G*	B3LYP/3-21G	HF/6-31G*	HF/3-21G
S0-S1	367,87	369,40	278,38	269,95
S0-S2	354,44	364,42	276,15	268,40
S0-S3	351,95	351,36	252,37	243,00
S0-S4	337,83	342,92	246,28	237,21
S0-S5	327,92	338,22	238,63	229,49

Etanol çözelti ortamı için taban durumdan uyarılmış durumlara geçişlere gelen dalga boyları Çizelge 3.11’de verilmiştir.

Çizelge 3.11 dfbpy-Ir-dfppy yapısının; 4 farklı baz seti ile hesaplanan bazı enerji seviyeleri arası geçişlere karşılık dalga boyları (λ) (Etanol Çözeltisi)

dfbpy-Ir-dfppy	B3LYP/6-31G*	B3LYP/3-21G	HF/6-31G*	HF/3-21G
S0-S1	365,15	366,53	278,42	269,98
S0-S2	351,62	360,87	276,02	268,30
S0-S3	350,00	350,21	251,81	242,49
S0-S4	335,45	340,60	245,75	236,67
S0-S5	325,15	335,36	238,21	229,15

Su çözelti ortamı için taban durumdan uyarılmış durumlara geçişlere gelen dalga boyları Çizelge 3.12’de verilmiştir.

Çizelge 3.12 dfbpy-Ir-dfppy yapısının; 4 farklı baz seti ile hesaplanan bazı enerji seviyeleri arası geçişlere karşılık dalga boyları (λ) (Su Çözeltisi)

dfbpy-Ir-dfppy	B3LYP/6-31G*	B3LYP/3-21G	HF/6-31G*	HF/3-21G
S0-S1	363,97	365,29	278,43	270,00
S0-S2	350,68	359,30	275,92	268,25
S0-S3	348,89	349,75	251,55	242,27
S0-S4	334,41	339,61	245,52	236,44
S0-S5	323,95	334,11	238,04	228,99

Çözelti olmayan ortam için taban durumdan uyarılmış durumlara geçişlere karşılık gelen dalga boyları Çizelge 3.13’da verilmiştir.

Çizelge 3.13 dfppy-Ir-dfbpy yapısının; 4 farklı baz seti ile hesaplanan bazı enerji seviyeleri arası geçişlere karşılık dalga boyları (λ)

dfppy-Ir-dfbpy	B3LYP/6-31G*	B3LYP/3-21G	HF/6-31G*	HF/3-21G
S0-S1	374,11	380,98	277,63	269,74
S0-S2	365,42	371,00	277,27	268,80
S0-S3	359,48	359,87	253,96	244,60
S0-S4	351,05	357,93	243,78	235,08
S0-S5	344,20	349,69	239,40	230,71

DCM çözelti ortamı için taban durumdan uyarılmış durumlara geçişlere gelen dalga boyları Çizelge 3.14’da verilmiştir.

Çizelge 3.14 dfppy-Ir-dfbpy yapısının; 4 farklı baz seti ile hesaplanan bazı enerji seviyeleri arası geçişlere karşılık dalga boyları (λ) (DCM Çözeltisi)

dfppy-Ir-dfbpy	B3LYP/6-31G*	B3LYP/3-21G	HF/6-31G*	HF/3-21G
S0-S1	361,59	364,25	277,60	269,73
S0-S2	352,95	359,72	276,42	268,33
S0-S3	352,13	353,30	253,58	243,86
S0-S4	331,80	340,70	243,57	234,88
S0-S5	328,24	333,33	238,98	230,20

Etanol çözelti ortamı için taban durumdan uyarılmış durumlara geçişlere gelen dalga boyları Çizelge 3.15’de verilmiştir.

Çizelge 3.15 dfppy-Ir-dfbpy yapısının; 4 farklı baz seti ile hesaplanan bazı enerji seviyeleri arası geçişlere karşılık dalga boyları (λ) (Etanol Çözeltisi)

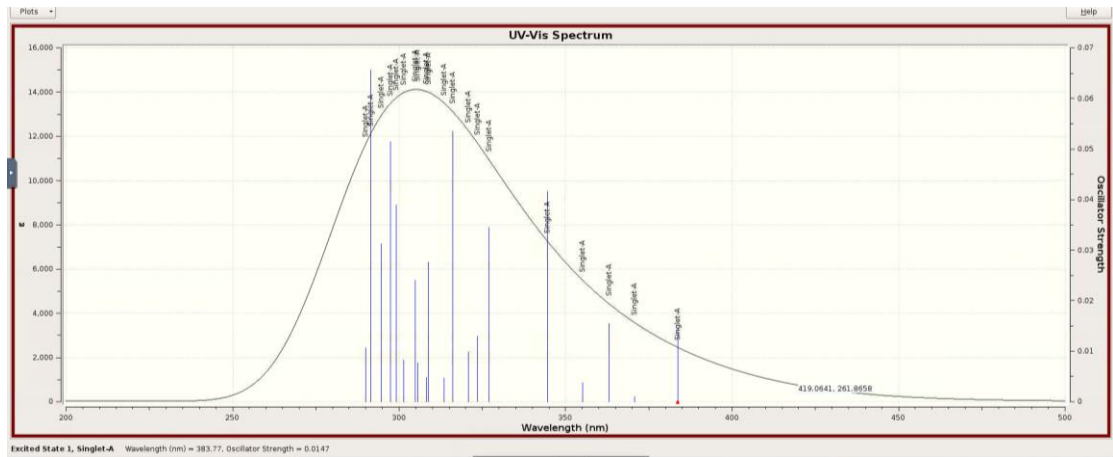
dfppy-Ir-dfbpy	B3LYP/6-31G*	B3LYP/3-21G	HF/6-31G*	HF/3-21G
S0-S1	360,53	362,13	277,63	269,73
S0-S2	351,32	358,28	276,27	268,23
S0-S3	349,89	351,67	253,16	243,47
S0-S4	329,58	337,54	243,14	234,51
S0-S5	325,90	331,18	238,47	229,73

Su çözelti ortamı için taban durumdan uyarılmış durumlara geçişlere gelen dalga boyları Çizelge 3.16’da verilmiştir.

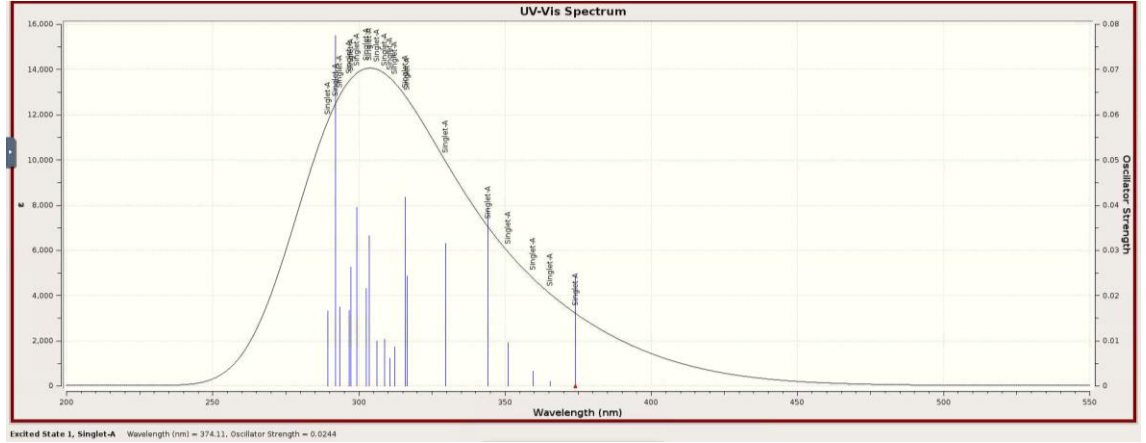
Çizelge 3.16 dfbpy-Ir-dfbpy yapısının; 4 farklı baz seti ile hesaplanan bazı enerji seviyeleri arası geçişlere karşılık dalga boyları (λ) (Su Çözeltisi)

dfppy-Ir-dfbpy	B3LYP/6-31G*	B3LYP/3-21G	HF/6-31G*	HF/3-21G
S0-S1	360,20	361,51	277,64	269,70
S0-S2	350,62	357,47	276,20	268,15
S0-S3	348,83	350,91	252,98	243,29
S0-S4	328,71	336,50	242,96	234,35
S0-S5	324,95	330,28	238,25	229,52

Daha sonra GaussView programı ile her iki yapının UV-VİS grafiği (çözelti olmayan ortam için) çizilmiştir. Her iki grafikte; B3LYP/6-31G* metodu hesaplamaları sonucu oluşturulan grafiklerdir.



Şekil 3.67 dfbpy-Ir-dfbpy UV-VİS grafiği



Şekil 3.68 dfppy-Ir-dfbpy UV-VİS grafiği

UV-VİS grafiğinden, singlet durumları arasındaki geçişlere karşılık dalgaboyları görülmektedir.

Ayrıca; her iki yapının fosforesent ışımaya denk gelen emisyon dalgaboyları hesaplama sonuçları Şekil 3.17’de sunulmuştur. Hesaplamalar için B3LYP/6-31G* metodu ve baz seti kullanılmıştır.

Şekil 3.17 dfbpy-Ir-dfppy ve dfppy-Ir-dfbpy emisyon dalga boyu

dfbpy-Ir-dfppy	$\lambda_{\text{Emisyon}} \text{ (nm)}$
Çözelti Olmayan Ortam	528,11
DCM Çözeltili Ortam	526,11
dfppy-Ir-dfbpy	
Çözelti Olmayan Ortam	528,22
DCM Çözeltili Ortam	526,69

4. TARTIŞMA VE SONUÇ

4.1 Değerlendirme

Bu tez çalışmasında; dfbpy-Ir-dfppy ve dfppy-Ir-dfbpy kimyasal yapıları, çözeltisiz ve çözelti ortamlarda kuantum mekaniksel hesaplama yöntemleri (DFT ve ab initio) ile incelenmiştir. Hesaplamalar ile; bağ uzunluğu ve bağ açısı değerleri ile emisyon ve absorpsiyon dalga dalgaboyları elde edilmiştir.

Her iki yapı içinde; bağ uzunluk ve bağ açısı değerleri çözelti ve çözeltisiz ortamda iki farklı yöntem (B3LYP ve HF) ve iki farklı baz seti (6-31G* ve 3-21G) ile incelenmiştir. Hesaplanan değerlerin, deneysel değerler ile uyumluluğunu incelemek için korelasyon grafikleri çizilmiştir. Örnek bir bağ uzunluğu üzerinden bir inceleme yaptığımızda; Ir1 - N12 için deneysel değere en yakın değeri B3LYP/3-21G metodunun verdiğini görüyoruz. Tüm değerlere ve korelasyon grafiklerine baktığımızda; B3LYP metodunun HF metoduna göre deneysel verilere daha yakın sonuç verdiği, baz set olarak ise 3-21G baz setinin 6-31G* baz setine göre deneysel verilere daha yakın sonuç verdiği görülmektedir. Ayrıca; farklı çözeltilerin kullanılarak yapılan hesaplamalarda yine aynı yaklaşıklık belirlenmiştir. Özet olarak; her iki yapı için bağ uzunluğu hesabında B3LYP metodu ve 3-21G baz setinin deneysel verilerle en iyi korelasyonu verdiği (>%99) verdiği, bağ açılarının hesabında ise tam ters şekilde HF/3-21G yöntemi ile yapılan hesaplamaların deneysel verilerle korelasyonu sağladığı görülmüştür. Genel bir değerlendirme yapıldığında; DFT ve HF metodu ile yapılan teorik hesaplamaların deneysel verilere olan yakınlığı tespit edilmiş, hesaplanan değerlerin deneysel değerlere olan yakınlığının, deneysel çalışmalar öncesinde kuantum mekaniksel hesaplama yöntemleri ile yapıların incelenmesinin ne kadar faydalı olabileceği göstermiştir.

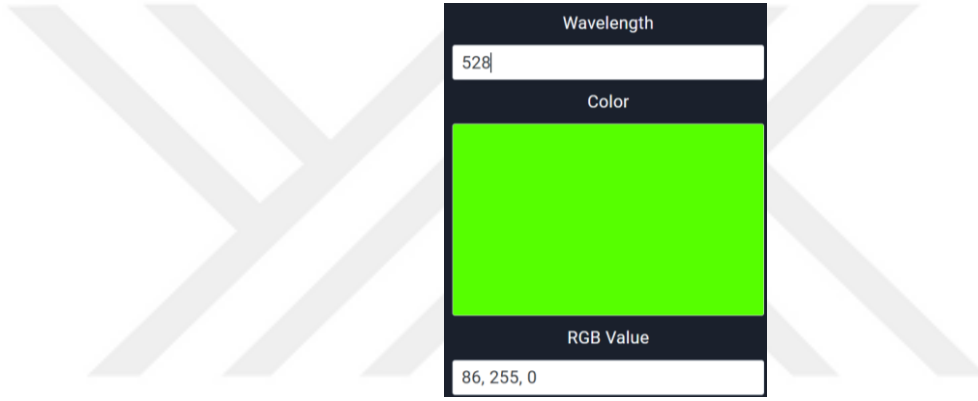
Lua ve arkadaşları tarafından yürütülen çalışmada iki yapının absorpsiyon davranışının DCM çözeltisinde TD-DFT ile incelendiği belirtilmektedir. Bununla birlikte; hangi yöntem ve baz setinin kullanıldığı belirtilmemektedir. Her iki kimyasal yapının absorpsiyon dalgaboyları aşağıda sunulmuştur.

dfbpy-Ir-dfppy için $\lambda_{\text{Absorpsiyon}} \text{ (nm)} = 254 \text{ nm}$

dfppy-Ir-dfbpy için $\lambda_{\text{Absorpsiyon}} \text{ (nm)} = 250 \text{ nm}$

Bu tez çalışmasında yapılan hesaplamal sonucunda; daha yüksek absorpsiyon dalgaboyu değerleri bulunmuştur

Lua ve arkadaşları tarafından yürütülen çalışmada; 360 nm UV ışına altında yapıların sırasıyla 450 nm ve 452 nm dalga boylarında belirgin mavi renk emisyon verdiği belirtilmektedir. Bu tez çalışmasında yapılan hesaplamalar sonucunda; sırasıyla 528nm ve 526 nm emisyon dalgaboyu değerleri bulunmuştur. Mavi renkten farklı bir renkte emisyon yaydığı hesaplamalar sonucunda çıkmıştır.



Şekil 4.1 Hesaplamalar sonucu bulunan renk değeri

Hesaplanan emisyon dalgaboyları değerlerine bakıldığında; referans alınan çalışmada sırasıyla 450 nm ve 450 nm değerleri ile elde ettiğimiz 528 nm değeri arasında farklılık görülmüştür. Referans alınan çalışmada mavi renkli OLED için sonuçlar çıkarken, bu tez çalışmasında farklı bir renk değeri elde edilmiştir. Referans çalışmada; hangi yöntem ve baz setinin kullanıldığı belirtilmiştir. Bu nedenle; ileride daha farklı yöntem ve baz setleri ile çalışmaların tekrarlanması yararlı sonuçlar vereceği değerlendirilmektedir. Aynı şekilde; referans alınan çalışmada absorpsiyon dalga boyu pik değerleri 250 nm ve 254 nm iken bu tez çalışmasında sırasıyla 383 nm ve 373 nm değerleri bulunmuştur. Bu nedenle; ileri daha farklı yöntem ve baz setleri ile çalışmaların tekrarlanarak çalışma sonucunda farklılıklarının tespitine yönelik ilave çalışma yapılmasına ihtiyaç duyulmaktadır.

4.1.1 Öneriler

Bu tez çalışmasında yapılan teorik hesaplamalara ilave olarak;

- Aynı yapıların farklı baz setleri ve/veya çözelti kullanımları ile de teorik hesaplamalarının yapılarak elde edilen sonuçların malzemenin fotofiziksel özelliklerine olan etkilerinin incelenmesinin,

- Böylece bu malzemelerin OLED aygıtların tasarım ve imalatında kullanılabilirliği üzerine daha detaylı yorum yapılmasının uygun olacağı değerlendirilmektedir.

Ayrıca; tez çalışmasında kullanılan yapıların farklı ligandlar ile etkileşimi sonucu ortaya çıkacak yeni malzemelerin OLED aygıtlarda kullanımına yönelik DFT/TDDFT metotlarının kullanılarak teorik çalışmalar yürütülebileceği ve böylece deneysel çalışmalara göre daha hızlı ve etkin bir şekilde OLED aygıtların üretimi için aday malzeme incelemesinin yapılabilceği değerlendirilmektedir.

Bu tez çalışması kapsamında yapılan literatür çalışmasında; Marmara Üniversitesi Kimya Anabilim dalında OLED uygulamalarına yönelik malzeme sentezi ve bu malzemelerin spektroskopik incelemesine yönelik deneysel çalışma içeren iki yüksek lisans tez çalışması yapıldığı tespit edilmiştir. Bahse konu çalışmalar kapsamında; Soyaltın (2022) ve Aydoğan (2022) tarafında ayrı ayrı yürütülen yüksek lisans tez çalışmaları incelendiğinde; deneysel çalışmalar sonucunda sentezlenen iridium bazlı komplekslerin floresans spektrumu, FT-IR spektrumu ve NMR spektrumlarının incelendiği görülmüştür. Bu çalışmaların kapsamı ve niteliği dikkate alındığında; tez çalışmalarında sentezlenen iridium bazlı komplekslerin özelliklerinin Gaussian ve GaussView programları kullanılarak DFT/TDDFT yöntemleri ile de incelenmesinin, deneysel ve teorik hesaplamaların ne kadar örtüştüğünün veya saptığının değerlendirilmesi adına faydalı bir çalışma olabileceği değerlendirilmektedir. Anılan çalışmayı gerçekleştiren araştırmacılar ile beraber de yürütülebilecek bu çalışmanın sonuçlarının yayın/makale/poster şeklinde yakın dönemde yapılacak fizik ve kimya konferanslarında sunulabileceği değerlendirilmektedir.

OLED aygıt teknolojilerinin sahip olduğu üstünlük ve bunun getirdiği bilimsel araştırma ve ticarileşme faaliyetleri göz önüne alındığında; üniversitelerimizin bu alanda çalışma yapmalarının teşvik edilmesinin hem bilimsel hem de ekonomik açıdan değer

yaratabileceği değerlendirilmektedir. Üniversitelerimizin özellikle, savunma ve güvenlik teknolojileri alanında OLED tasarım, test ve üretim çalışmalar yürütmesinin fayda sağlayacağı kıymetlendirilmektedir. Dünya genelinde sivil alanda yoğun ve yaygın kullanımı (tüketici elektroniği, aydınlatma teknolojileri gibi) olan OLED aygıt teknolojisinin sahip olduğu teknolojik üstünlükler dikkate alındığında, savunma ve güvenlik teknolojileri alanında da dikkate değer avantajlar sunabileceği, bu çerçevede; OLED teknolojisinin savunma ve güvenlik alanında sunduğu avantajlar ve potansiyel uygulamalarına yönelik değerlendirmeler aşağıda sunulmuştur.

- **Yüksek Görüntü Kalitesi :** OLED ekranlar; yüksek kontrast oranları ve canlı renk üretimi sayesinde sundukları görsel kalite; hareket ortamında hareket ve istihbarat analizi gibi kıymetli verilerin daha net ve etkili bir şekilde analiz edilmesine imkan verir.
- **Enerji Verimliliği :** OLED aygıt teknolojileri, geleneksel LCD ekranlara kıyasla daha düşük enerji tüketimi gerçekleştirir. Bu özellikleri; askeri araçlarda/sistemlerde enerji ihtiyacını azaltarak uzun süreli operasyon/görevler için avantaj sağlar. Enerji verimli sistemler, platform/sistemlerin taşıma kapasitesini artırarak gene sistem performansına olumlu katkılar sağlamaktadır.
- **İnce ve Hafif tasarım :** OLED paneller; geleneksel ekran teknolojilerine göre daha ince ve hafif tasarım özellikleri ile, genel sistem ağırlığını azaltırken, mobil platformların ve giyilebilir teknolojilerde kullanımını da kolaylaştırmaktadır. Özellikle askeri giyilebilir sisteme entegre edilen OLED ekranlar, taşılabilirlik ve kullanım esnekliği sağlar.
- **Dayanıklılık ve Esneklik :** Yeni nesil OLED ekranlar; zorlu askeri çevresel ortamlara dayanacak şekilde tasarlanabilmektedir. Bu özellik; darbe, nem ve sıcaklık değişimlerine karşı dirençli, uzun ömürlü ve güvenilir çözümler sunmaktadır.
- **Stratejik Üstünlük :** OLED teknolojisi, askeri birliklerin hareket ortamında bilgi üstünlüğü sağlamasında önemli bir araç olabilir. Anlık durum raporları, takım haberleşmesi ve hedef tespiti/işaretleme gibi uygulamalarda OLED ekranların hızlı tepki süresi ve yüksek çözünürlüğü, stratejik karar alma süreçlerini olumlu yönde etkilemektedir. Yukarıda sunulan hususlar dikkate alındığında, OLED aygıt teknolojilerinin askeri alanda potansiyel ve stratejik kullanım alanlarının olabileceği görülmektedir. Bu husus dikkate alındığında bu teknolojiye sahip ülkelerin ambargo, kısıtlama, yaptırım vb. yöntemler ile

ülkemin bu teknolojiye erişimi kısıtlayabileceği göz önünde bulundurulduğunda, OLED tasarım, test ve üretimine yönelik yurt içi savunma sanayi firmalarının önderliğinde üniversite, enstitü ve araştırma merkezlerinin katılımıyla ürüne dönüşebilecek Ar-Ge projelerinin yürütülebileceği değerlendirilmektedir. Böylece, hem stratejik bir ihtiyaç karşılanmış hem de ülkemize katma değeri yüksek bir ürün kazandırılmış olacaktır. Sivil uygulamaya yönelik ürünlerin teknoloji ve ticarileşme seviyesi ve gelişmiş ülkeleri bu alanda aldığı yol dikkate alındığında, ülkemizin insan gücü ve altyapısının askeri uygulamalara yönelik OLED çalışmalarına yönlendirilmesinin imkan ve kabiliyetlerin etkin kullanımı adına da faydalı olabileceği değerlendirilmektedir.



KAYNAKLAR

- Anonymous. 2024. Web Sitesi : <https://www.bloomtechz.com/info/what-is-nitroso-r-salt-83889588.html>, Erişim Tarihi: 18.09.2024.
- Anonymous. 2024. Web Sitesi: <https://www.ccdc.cam.ac.uk/>, Erişim Tarihi: 18.09.2024.
- Anonymous. 2024. <https://turchemsoc.org/dernegimizden-elementlerin-periyodik-tablosu-basimi/>, Erişim Tarihi: 14.09.2024.
- Anonymous. 2024. <https://ulakbim.tubitak.gov.tr>, Erişim Tarihi: 15.05.2024.
- Bauri, J. Choudhary, R.B. and Mandal, G. 2021. Recent advances in efficient emissive materials-based OLED applications: a review. J Mater Sci (2021) 56:18837–18866
- Demir, C. 2023. Koronen ve türevlerinin oled davranışlarının belirlenmesi. Yüksek Lisans Tezi. Sivas Cumhuriyet Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kimya Anabilim Dalı, 67, Sivas.
- Demir, N. 2014. Sarı ve mavi yapan konjuge polimer-CuInS₂ kuantum parçacığı hibritlerinde foto-fiziksel davranışların tespiti ve OLED uygulamaları. Yüksek Lisans Tezi. Ege Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Güneş Enerjisi Anabilim Dalı, 66, İzmir.
- Dhali, R. 2022. Thermally Activated Delayed Fluorescence: Excited State Engineering Towards Efficient Organic Light Emitting Diodes, Università degli Studi di Parma, 137, İtalya.
- Edinburgh Instruments, 2024, <https://www.edinst.com/> (Erişim Tarihi : 18.10.2024)
- Gaspar, D.J. and Polikarpov, E. 2015. OLED Fundamentals Materials, Devices, and Processing of Organic Light-Emitting Diodes, Taylor & Francis Group, 978-1- 4665-1519-2 (eBook - PDF), 478, New York.
- Gaussian, 2024, <https://gaussian.com/> (Erişim Tarihi : 10.02.2024)
- Havare A.K. 2011. Kendiliğinden organize tek katman tekniği (kot) kullanılarak organik led (OLED) veriminin artırılması ve karakterizasyonu. Doktora Tezi. Ege Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Güneş Enerjisi Anabilim Dalı, 143, İzmir.
- Jou, J.H., Agrawal, A. Li, T.H., Sahoo, S. and Kumar, S. 2015. Journal of Materials Chemistry Journal of Materials Chemistry C. DOI: 10.1039/C4TC02495H, 77p.
- Li, X., Zhang, J., Zhao, Z., Wang, L., Yang, H., and Chang, Q. et al. 2018. Deep blue phosphorescent organic light-emitting diodes with CIEy Value of 0.11 and external quantum efficiency up to 22.5. Adv Mater 2018;30(12):1705005., 8
- Li, Z. R. and Meng, H. 2015. Organic Light-Emitting Materials and Devices, Taylor & Francis Group, ISBN-13: 978-1-4398-8280-1, 63 , New York.

- Lua, G. Li S., Long Y. Li Y. Zhou C., Wang X. and Zhou L. 2023. Asymmetric tris-heteroleptic iridium(III) complexes towards blue phosphorescence: Synthesis, photophysics and OLED application. *Dyes and Pigments* 220 (2023) 111713
- Nazlı, A. 2023. OLED aydınlatma sistemleri için tiyofen-karbazol içeren yeni tür polimerin tasarımı ve sentezi. Yüksek Lisans Tezi. Çanakkale Onsekiz Mart Üniversitesi, Lisansüstü Eğitim Enstitüsü, Enerji Kaynakları ve Yönetimi Anabilim Dalı, 42, Çanakkale.
- Ongun, İ. 2005. OLED üretim denemelerinde yararlanılacak küçük ölçekli bir ince film laboratuvarı donanımının hazırlanması. Yüksek Lisans Tezi. Ege Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Güneş Enerjisi Anabilim Dalı, 103, İzmir.
- Öner, İ. 2015. Organometalik komplekslere dayalı beyaz oled aydınlatma aygıtı yapım ve karakterizasyonları. Doktora Tezi. Ege Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Güneş Enerjisi Anabilim Dalı, 117, İzmir.
- Park, HY., Maheshwaran, A., Moon, CK., Lee, H., Reddy, SS. and Sree VG, et al. 2020. External quantum efficiency exceeding 24% with CIEy value of 0.08 using a novel carbene-based iridium complex in deep-blue phosphorescent organic light-emitting diodes. *Adv Mater* 2020;32(29):2002120, 8.
- Pope, M., Kallman, H. and Magnante, P., 1963, Electroluminescence in Organic Crystals, *J. Chem. Phys.* 1963, 38, 2042p.
- Purtaş, S. 2011. Bazı imin bileşiklerinin teorik ve deneysel kristal yapı ve FT-IR titreşim Sonuçlarının ab initio ve dft metodları ile analiz edilmesi. Yüksek Lisans Tezi. Sütçü İmam Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Kimya Anabilim Dalı, 73, Kahramanmaraş
- Sahu, L.K. and Soni, V. 2022. OLED : New Generation Display Technology. *Journal of Ravishankar University (Part-B: Science)*, 35(1), pp. 01-08
- Samsung, 2024, <https://www.samsung.com/> (Erişim tarihi : 18 Eylül 2024))
- Shin, H., Lee, JH., Moon, CK., Huh, JS. and Sim BKim JJ. 2016. Sky-blue phosphorescent OLEDs with 34.1% external quantum efficiency using a low refractive index electron transporting layer. *Adv Mater* 2016;28(24):4920–5.
- Shin, H., Ha, YH., Kim, HG., Kim, R., Kwon, SK. and Kim, YH. et al. 2019. Controlling Horizontal dipole orientation and emission spectrum of Ir complexes by chemical design of ancillary ligands for efficient deep-blue organic light-emitting diodes. *Adv Mater* 2019;31(21):1808102.
- Tang, C. W. and VanSlyke, S. A., 1987, Organic electroluminescent diodes, *Appl. Phys. Lett.*, 51, 913p.
- Udagawa, K. Sasabe, H. Cai, C. and Kido, J. 2014. Low-driving-voltage blue phosphorescent organic light-emitting devices with external quantum efficiency of 30. *Adv Mater* 2014;26(29):5062–6

- Usluer, Ö. 2010. Dendrimerik Yapılı Fluoren Türevlerinin Sentezi ve OLED sistemlerinde elektron boşluğu iletim materyali olarak kullanılabilirliğinin araştırılması. Yüksek Lisans Tezi. Ege Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Güneş Enerjisi Anabilim Dalı, 95, İzmir.
- Yeter, O. 2020. Piren bazlı Organik Işık Yayan Diyotların (OLED) optoelektronik özelliklerinin incelenmesi. Yüksek Lisans Tezi. Giresun Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Enerji Sistemleri Mühendisliği, 51, Giresun.
- Zhang, Y. Lee, J. And Forrest, SR. 2014 Tenfold increase in the lifetime of blue phosphorescent organic light-emitting diodes. Nat Commun 2014;5:5008. [13] Udagawa K, Sasabe H, Cai C, Kido J. Low-driving-voltage, 7p.
- Zou, S., Shen, Y., Xie, F., Chen, J., Li, Y. And Tang, J. 2020, Recent Advances In Organic Light-Emitting Diodes: Toward Smart Lighting ve Displays, Materials Chemistry Frontiers, DOI: 10.1039/c9qm00716d, 788-820

