

Biyolojik Aktiv Bazı Maddelerin Teorik Olarak İncelenmesi

Hava EYDEMİR

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Kimya Anabilim Dalı

Ocak 2010

A Theoretical Study On The Biologically Active Some Substances

Hava EYDEMİR

MASTER OF SCIENCE THESIS

Department Of Chemistry

January 2010

Biyolojik Aktif Bazı Maddelerin Teorik Olarak İncelenmesi

Hava Eydemir

Eskişehir Osmangazi Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Lisansüstü Yönetmeliği Uyarınca
Kimya Anabilim Dalı
Biyokimya Bilim Dalında
YÜKSEK LİSANS TEZİ
Olarak Hazırlanmıştır

Danışman: Yrd. Doç. Dr. Temir Ali DEMİR

Ocak 2010

ONAY

Kimya Anabilim Dalı Yüksek Lisans öğrencisi Hava Eydemir'in YÜKSEK LİSANS tezi olarak hazırladığı "Biyolojik Aktif Bazı Maddelerin Teorik Olarak İncelenmesi" başlıklı bu çalışma, jürimizce lisansüstü yönetmeliğin ilgili maddeleri uyarınca değerlendirilerek kabul edilmiştir.

Danışman : Yrd. Doç. Dr. Temir Ali DEMİR



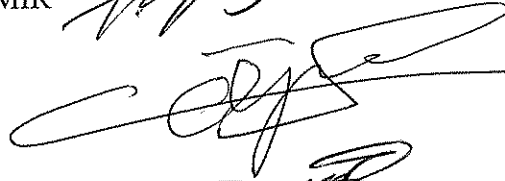
İkinci Danışman : -

Yüksek Lisans Tez Savunma Jürisi:

Üye : Yrd. Doç. Dr. Temir Ali DEMİR



Üye : Prof. Dr. Cemil ÖĞRETİR



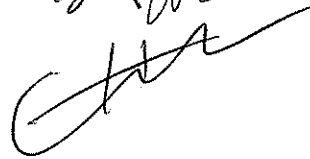
Üye : Yrd. Doç. Dr. Fahrettin AKYÜZ



Üye : Yrd. Doç. Dr. Erol AÇIKKALP



Üye : Yrd. Doç. Dr. Halil BERBER



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

Prof. Dr. Nimetullah BURNAK

Enstitü Müdürü

ÖZET

Bu çalışmada biyolojik aktif olan, pürin katabolizmasında önemli rolleri bulunan adenozin, guanozin, guanin, inozin, hipoksantin, ksantin ve ürik asit teorik olarak incelendi.

Moleküllerin gaz, su ve kan fazında, fiziksel ve termodinamik özellikleri ile yapısal parametreleri Gaussian 03W programında Hartree-Fock (HF) metodu ve Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT/B3LYP) hibrit yaklaşımı ile 6-31G(d,p) ve 6-31+G(d,p) temel setleri kullanılarak hesaplandı.

Yapılan hesaplamalarda çalışılan moleküllerin yapılarını aydınlatmak için bağ uzunlukları, bağ açıları, dihedral açıları, dipol moment, en yüksek dolu moleküler orbital (HOMO), en düşük boş moleküler orbital (LUMO) enerjileri, nükleofilite(η) ve serbest enerji (ΔG) değerleri HF ve DFT metotları ile hesaplandı. Elde edilen sonuçlara göre herbir molekül için en kararlı tautomer bulundu. Sonra bu kararlı tautomerlere Se atomu bağlandı. Tekrar serbest enerji (ΔG) değerleri kontrol edildi. Sonuçta ürik asit miktarını kontrol etmek için, bizim çalışmamızda bulunan sonuçlara göre, Se atomunun bağlanması gereken en uygun molekülün hipoksantin olduğu saptandı.

Bu hesaplamalarda DFT yöntemi HF yöntemine göre daha başarılı bulundu.

Anahtar Kelimeler:pürin katabolizması,hipoksantin, ürik asit, tautomerizm,Se atomu, HF(Hartree-Fock), DFT

SUMMARY

In this study, some biologically active substances which plays important roles of adenosine, guanosine, guanin, inosine, hypoxanthine, xanthine and üric asid in the purins catabolism were investigated theoretically.

Gas, liquid and blood phase, structural parameters along with physical and thermodynamic properties of the studied molecules were calculated using Hartree-Fock (HF) and Density Function (DFT/B3LYP) methods with hybrid approach and 6-31G(d,p) basis set.

In the present work structural parameters such as bond lenth, bond angles, dihedral angles and dipole moments, HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital), LUMO(Lowest Unaccupied Molecular Orbital) energies; nükleofilite(η) and free energy (ΔG) values studied using B3LYP/6-31G(d,p) and HF/6-31G(d,p) methods. According to result for each molecule the most stable tautomer found. Then Se atoms determined to tautomers linked. Free energy (ΔG) values were checked again. As a result, to control the amount of uric acid, which result in our study, according to the most appropriate to connect the Se atoms of the molecule were identified as hypoxanthine.

That HF calculations according to the method of DFT methods were more successful.

Keywords: Purin catabolism, , hypoxanthine, uric asid, tautomerism, Selenium atoms, HF(Hartree-Fock), DFT

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım sırasında benden ilgilerini ve yardımlarını esirgemeyen hocalarım Sayın Yrd.Doç.Dr. Temir Ali DEMİR ve Yrd.Doç.Dr. Taner ARSLAN 'a sonsuz teşekkür ederim.

Ayrıca çalışmalarım sırasında bana yardımcı olan Sayın Prof. Dr. Cemil Öğretir , Sayın Yrd.Doç.Dr. Erol AÇIKKALP ve Sayın Yrd.Doç.Dr.Halil BERBER 'e çok teşekkür ederim.

Çalışmalarım sırasında bana destek olan eşim Turan EYDEMİR, çocuklarım Ali ve Beyza Nur EYDEMİR ve aileme sonsuz teşekkür ederim

Hava EYDEMİR

İÇİNDEKİLER

	<u>sayfa</u>
ÖZET	v
SUMMARY	vi
TEŞEKKÜR	vii
ŞEKİLLER DİZİNİ	x
ÇİZELGELER DİZİNİ	xii
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	xiii
1.GİRİŞ VE AMAÇ	1
2.GENEL BİLGİLER	2
2.1.Pürin katabolizması	2
2.1.1. Gut Hastalığı	8
2.1.2. Pürin Katabolizmasındaki Bazı Maddeler ve Özellikleri	8
2.2.Tautomerizm	13
2.2.1. Proton Tautomerizmi	15
2.2.2. Heterosiklik Bileşiklerde Tautomerizm	18
2.2.3. Annular Tautomerizmi	20
2.2.4. Non-prototropik Tautomerizm	23
2.3. Teorik hesaplamalar	25
2.3.1. Kuantum kimyasal yöntemler	27
2.3.1.1. Moleküler mekanik yöntem	27
2.3.1.2. Yarı deneysel moleküler orbital yöntemleri	27
2.3.1.3. Ab initio moleküler orbital yöntemleri	28
2.3.2. Gaussian03W programı	31
2.3.2.1. Gaussian03W programı hakkında genel bilgi	31
2.3.2.2. Moleküler Geometrinin Programa Tanıtılması	31
2.3.2.3. Temel Setler	32
2.3.2.4. Minimal temel setler	33
2.3.2.5. Split valance temel setler	34
2.3.2.6. Polarize temel setler	34

2.3.2.7. Diffuse fonksiyonlar	35
2.3.2.8. Açık ve kapalı kabuk seçimi	36
2.3.2.9. Teori düzeyi (yöntem)	37
2.3.2.10. Hartree-Fock teori	37
2.3.2.11. Möller -Plesset pertürbasyon teori	39
2.3.2.12. Yoğunluk fonksiyon teorisi (Density Functional Theory)	41
2.3.2.13. Periyodik tablonun üçüncü sıra atomlarından sonraki atomlar için taban kümeler	45
2.3.3. Bazı Kuantum Kimyasal Tanımlar	46
2.3.3.1. Atomik yükler	46
2.3.3.2. Moleküler orbital enerjileri	47
2.4. Bağlanma yeri	50
3. MATERYAL VE METOD	54
3.1. CS ChemOffice, Gaussian 03W, Gauss View 3.0	54
4. TARTIŞMA	56
4.1. Pürin Katabolizmasında incelenen maddeler	56
4.2. Pürin Katabolizmasında incelenen maddelerin HF ve DFT ile hesaplama sonuçları	77
5. SONUÇ	125
KAYNAKLAR DİZİNİ	131

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Sekil</u>	<u>Sayfa</u>
2.1.1 Pürin nükleotidlerinin ürik asite yıkımı	6
2.1.2 Azepinomisin ve analogları	10
2.1.3 Guanaz ile katalizlenen Guaninin Zn^{2+} yardımıyla ksantine hidrolizi reaksiyonu	11
2.2.1 Tautomerizm ve diğer izomerizm türleri	13
2.2.2 Çeşitli tautomer ve izomer çiftleri	14
2.2.3 Mezomerler (4a, 4b), Tautomerler (5a, 5b)	15
2.2.4 Proton tautomerizmi türleri	16
2.2.5 1,3-indandion ve 2-pridil-1,3-indandionun p-toluidin ile kondensasyon reaksiyonu	17
2.2.6 Okzazolidin-4-1, onun tiyo ve azo analogları	18
2.2.7 Annular ve yan zincir tautomerizmi	18
2.2.8 Benzilidenin DCL'ye göre yerdeğiştirme reaksiyonları	19
2.2.9 İndollerin tautomerizmi	20
2.2.10 İzindolün tautomerik dengesi	21
2.2.11 Ürik asit molekülü için mümkün tautomerik denge formları	22
2.2.12 Prototropik tautomerizm dışındaki bazı tautomerizm türleri	24
2.3.1 2-((fenilimino)metil)naftalin-1-ol	49
2.3.2 Bazı nükleotidler ve bağlanma yerleri	51
2.3.3 Katyon-I-tetrad kompleksinin atom sayıları ve yapısı	52
2.3.4 İnozin tetradları ve oktamerlerin optimize edilmiş geometrileri	53
4.1.1 Guanin Tautomer Yapıları	56
4.1.2 Gaussian 03W programında kullanılan Guanin tautomer yapılarının numaralandırılmış şekilleri	57
4.1.3 Guanozin Tautomer Yapıları	58
4.1.4 Gaussian 03W programında kullanılan Guanozinin tautomer yapılarının numaralandırılmış şekilleri	59
4.1.5 Adenozinin Tautomer Yapıları	61
4.1.6 Gaussian 03W programında kullanılan Adenozinin tautomer yapılarının numaralandırılmış şekilleri	62
4.1.7 İnozinin Tautomer Yapıları	63

ŞEKİLLER DİZİNİ(devamı)

	<u>sayfa</u>
4.1.8 Gaussian 03W programında kullanılan İnozinin Tautomer yapılarının numaralandırılmış şekilleri	64
4.1.9 Hipoksantin Tautomer Yapıları	65
4.1.10 Gaussian 03W programında kullanılan Hipoksantin Tautomer yapılarının numaralandırılmış şekilleri	66
4.1.11 Ksantin Tautomer Yapıları	67
4.1.12 Gaussian 03W programında kullanılan Ksantin Tautomer yapılarının numaralandırılmış şekilleri	68
4.1.13 Ürik asit Tautomer Yapıları	70
4.1.14 Gaussian 03W programında kullanılan Ürik asitin tautomer yapılarının numaralandırılmış şekilleri	72

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge	Sayfa
4.1. Pürin katabolizmasında incelenen maddeler için HF ve DFT ile hesaplanmış ΔG (serbest enerji) , e+ZPE (Sıfır nokta düzeltme enerjisi) ve E(Toplam enerji) değerleri	78
4.2. Pürin katabolizmasındaki bazı maddelerin Se bağlanmış yapılarının HF ve DFT ile hesaplanmış E(Toplam enerji),e+ZPE(Sıfır nokta düzeltme enerjisi), ΔG (Serbest enerji) değerleri	83
4.3. Pürin katabolizmasında incelenen bazı maddelerin gaz, su ve kan fazlarında hesaplanan E (Toplam enerji), HOMO, LUMO, nükleofilite (η), dipol moment $\mu(D)$ değerleri	84
4.4. Pürin katabolizmasında incelenen bazı maddelerin gaz, su ve kan fazlarında hesaplanan mulliken yükleri	91

KISALTMALAR

Kısaltmalar

HOMO	Highest Occupied Molecular Orbital (En yüksek dolu moleküler orbital)
LUMO	Lowest unoccupied Molecular Orbital (En Düşük Boş Moleküler Orbital)
ΔG	Serbest Enerji
η	Nükleofilite
ZPE	Zero Point Energy(Sıfır nokta düzeltme enerjisi)
GUT1	Guanin 1.Tautomeri
GZT1	Güanozin 1.Tautomeri
ADT1	Adenozin 1.Tautomeri
NT1	İnozin 1.Tautomeri
HPT1	Hipoksantin 1.Tautomeri
KT1	Ksantin 1.Tautomeri
UT1	Ürik Asit 1.Tautomeri

1.GİRİŞ VE AMAÇ

Birçok heterosiklik bileşik, doğal ürünlerin yapısında yer alır ve yaşamda çok çeşitli yerlerde kullanılmaları nedeniyle büyük öneme sahiptirler. Özellikle ilaç ve boya sanayinde kullanılmaları, ayrıca birçoğunun sentetik olarak elde edilmeleri önemlerini daha da arttırmıştır. Karbohidratlar, nükleik asitler, peptidler ve proteinler heterosiklik moleküllere örnek olarak gösterilebilir.

Kimyasal araştırmalarda bilgisayar kullanılarak yapılan kimyasal hesaplamalar, deneysel yöntemlerle elde edilen birçok maddenin; oluşum ısısı, dipol moment, iyonlaşma potansiyeli, yük yoğunlukları, bağ uzunlukları, elektron yoğunlukları gibi çok sayıda özelliğinin daha kısa sürede ve daha güvenilir bir şekilde elde edilmesini sağlar.

Teorik yöntemler kullanılarak standart değerler elde edilmiş ve bu değerler temel alınarak deneysel çalışmalar arttırılmıştır.

Bu çalışmada ChemOffice, Gaussian 03W ve GaussView kullanarak pürin katabolizmasındaki adenosin, guanosin, guanin, inosin, hipoksantin, ksantin ve ürik asit maddelerinin HF yönteminin 6-31G(d,p) temel setini ve DFT yönteminin B3LY P/6-31G(d,p) temel setini kullanarak teorik hesaplamasını yaparak fizikokimyasal özelliklerini inceledik.

Bu çalışmadaki amaç, pürin katabolizmasındaki incelenen maddelerden hangisinin Se atomu bağlanması için en uygun olduğunun bulunmasıdır. Burada Se atomunun seçilmesinin sebebi, Se atomunun antioksidan olarak davranmasıdır. Yani serbest oksijen radikallerinde (SOR) bulunan yüksek enerjili elektronları yapısına alarak SOR'nin meydana getireceği oksidatif hasarın azaltılmasına katkıda bulunur.(Aslan, 1985). Organizmada süperoksit radikalleri enzimatik dismutasyonla temizlenirken, antioksidan olarak bilinen bileşikler de oksijen radikallerinin yok edilmesini sağlarlar. selenyum (Se) bu savunmada önemli rol oynamaktadır.(Jain and Levine, 1995)

Elde edilen sonuçlara göre ürik asit oluşum miktarını etkileyebilecek faktörleri bulmaya çalıştık.

2.GENEL BİLGİLER

2.1. PÜRİN KATABOLİZMASI

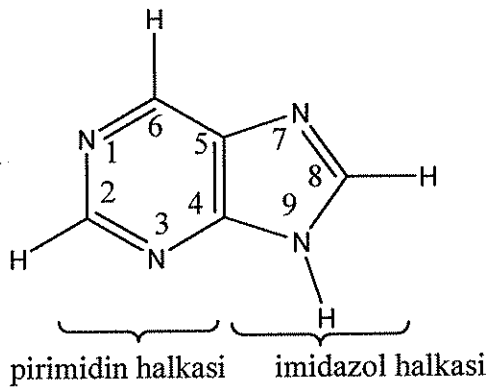
Ribonükleozid ve deoksiribonükleozid fosfatlar (nükleotidler) bütün hücreler için mutlaka gerekli (esansiyel) olan maddelerdir. Bunlar olmadan ne DNA ne de RNA sentezlenebilir. Bunun sonucunda da proteinler sentezlenemez ve hücreler prolifer olamazlar. Ayrıca bazı karbohidratların, lipidlerin ve proteinlerin sentezinde de nükleotidler aktifleştirilmiş ara bileşiklerin taşıyıcıları olarak görev yaparlar. Koenzim A, FAD, NAD^+ , $NADP^+$ gibi bazı esansiyel koenzimlerin yapısal bileşenleridirler. Bunlara ek olarak, hücre içinde nükleotidler enerji taşıyıcısıdır. Bir de ara metabolizmadaki metabolik yolların çoğunda anahtar görevi olan enzimleri aktive veya inhibe ederek düzenleyici rol oynarlar. Nükleotidlerde bulunan pürin ve pirimidin bazları yeniden sentezlenebilir veya yan yollardan elde edilebilir. Normal hücre ölümü veya diyetin içerdiği maddelerde bulunan ve daha önce sentezlenmiş bazlar böylece tekrar kullanılabilir. (Tokullugil vd., 1997).

Nükleotidlerin yapısında bir azotlu baz, bir pentoz monosakkariti ve bir, iki veya üç tane fosfat grubu bulunur. Azot içeren bazlar ikiye ayrılır; pürinler ve pirimidinler.

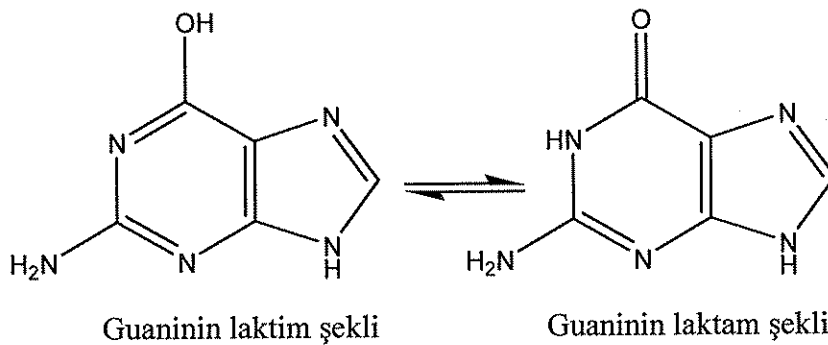
Nükleobazlar (veya nükleotid bazları), RNA ve DNA'daki şekerlere bağlı olan moleküllerdir. Bunlara adenin, guanin, sitozin, (yalnızca DNA'da bulunan) timin ve (yalnızca RNA'da bulunan) urasil dahildir. Bunlar sırasıyla A, G, C, T ve U olarak kısaltılır. Genetikte bunlara genelde baz olarak değinilir. Bir DNA dizisi RNA'ya kopyalandığında timinin yerini urasil alır. Adenin ve guanin, pürin olarak adlandırılan çift halkalı bazlar sınıfına aittirler, sitozin, timin ve urasil ise pirimidin olarak adlandırılan tek halkalı bazlar sınıfına aittirler. DNA ve RNA dizilerinde pürinler R, pirimidinler Y harfi ile gösterilebilir. Bir riboz veya deoksiriboz şekerinin 1' karbonuna bağlı bir baz nükleozid olarak adlandırılır. Bir nükleozidin 5' karbonuna bir veya daha fazla fosfat grubu bağlanmış hali nükleotid olarak adlandırılır. Adenin (A), guanin (G), sitozin (C), timin (T) ve urasil (U) bazlarını taşıyan nükleozidler, sırasıyla adenozin, guanozin, sitidin, timidin ve uridin olarak adlandırılır.(Nguyen., et al., 1992)

Pürin, heterosiklik, aromatik organik bir bileşiktir. Birbiriyle kaynaşmış imidazol ve pirimidin halkalarından oluşur. Pürin türevleri genel olarak 'pürinler' olarak

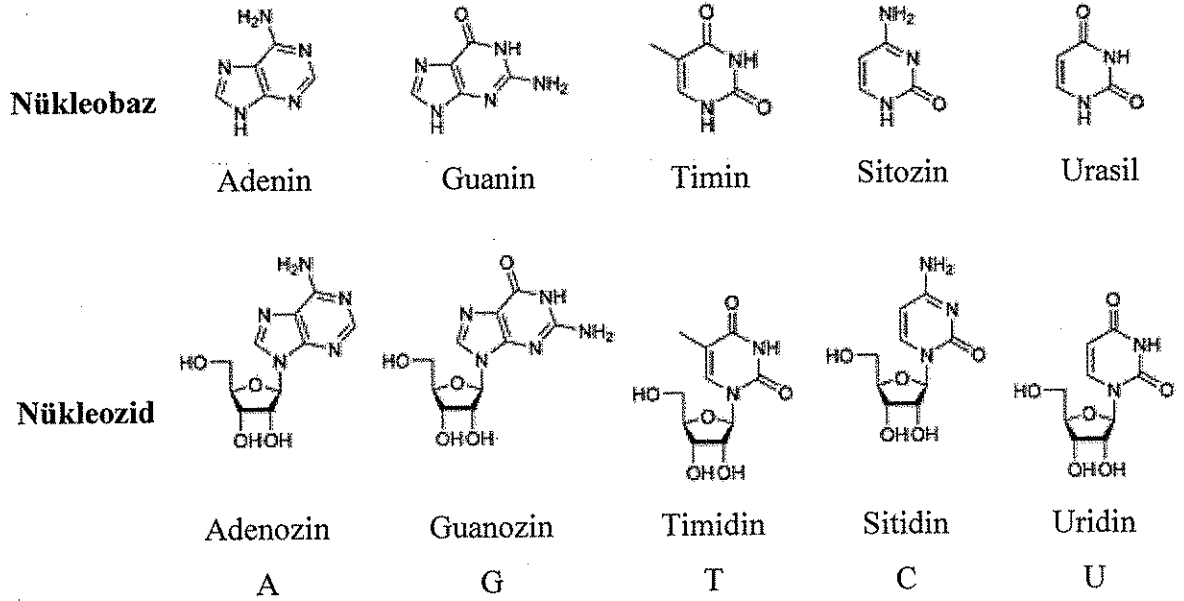
adlandırılır. Pürinler ve pirimidinler (pirimidin türevleri) azotlu bazlar arasında yer alan iki gruptur. Bu bazlar deoksiribonükleotidler ve ribonükleotidlerin içinde yer alarak hücrelerdeki genetik bilginin kodlanmasında önemli bir rol oynarlar. DNA ve RNA'nın canlılardaki yaygınlığı nedeniyle, pürinler doğada en çok görülen azotlu heterosiklik bileşiklerdir. (Rosemeyer, 2004)



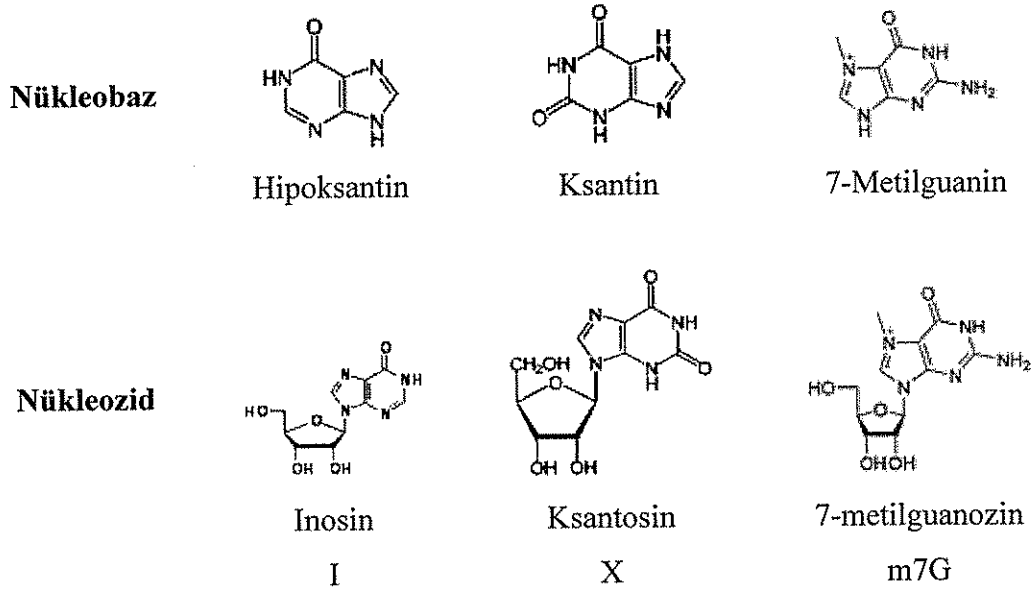
Pirimidin halkasının bazlılığının zayıf olmasına karşın beş üyeli imidazol halkası baziktir. Pürin bazları keto-enol tautomerisinin bir türü olan laktam-laktim tautomerisine uğrayabilirler. Nötral ve asidik ortamlarda, bu bazların laktam şekli egemendir. (Uyar, 1990)



Hipoksantin ve ksantin, mutagen etkisiyle meydana gelen pekçok bazdan ikisidir. Her ikisi de deaminasyon (bir amin grubunun hidroksil grubu ile değişmesi) ürünleridir. Hipoksantin adeninden, ksantin ise guaninden meydana gelir. Hipoksantin $C_5H_4N_4O$ genel formüllü ve molekül ağırlığı 136,112g/mol'dür. Ksantin $C_5H_4N_4O_2$ genel formüllü ve molekül ağırlığı 152,11g/mol. (Nguyen., et al., 1992).



Değişmiş pürin bazlar; adenozin ve guanozin örnek verilebilir.

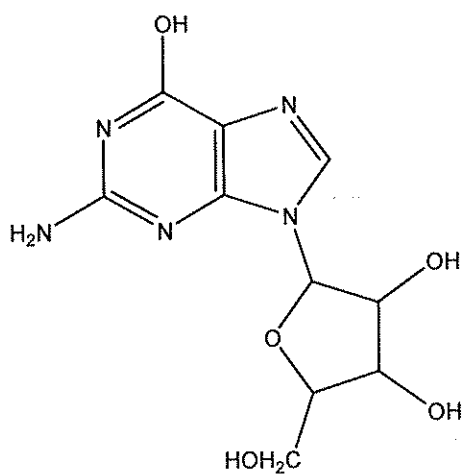


Tıpta çeşitli nükleozid türevleri antikanser veya antiviral ilaç olarak kullanılmaktadır. Bu nükleozidler hücre içine alındıktan sonra nükleotidlere dönüşürler, viral polimeraz bu bazları viral nükleik aside dahil edince zincirin uzaması durur, virüs artık kendini çoğaltamaz.(Nguyen., et al., 1992)

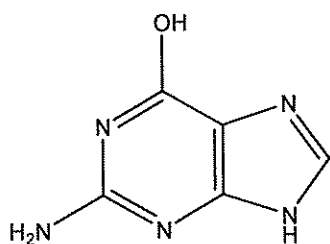
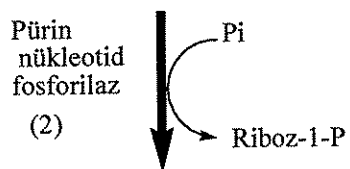
Pürin nükleotidleri, nükleotidleri oluşturan bileşenlerin sırayla ayrılması sonucu yıkılır. İnsanlarda pürinlerin katabolizması sonucu oluşan son ürün ürik asittir. Primatların dışındaki memelilerde ürik asit allantoin'e oksitlenir. Allantoin ise bazı memelilerde üre hatta amonyağa kadar parçalanabilir.

Şekil 2.1.1'da ürik asit sentezinde yer alan reaksiyonlar verilmiştir.

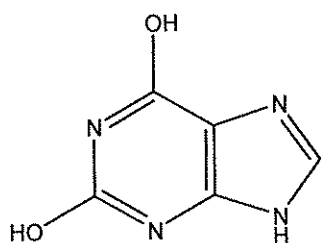
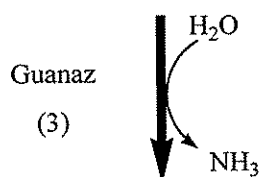
- (1) İnozin (hipoksantin-riboz) sentezi için adenzinden bir amino grubu uzaklaştırılır.
- (2) ve (4) Pürin nükleozid fosforilaz enzimi inozin ve guanozini, kendi pürin bazlarına (hipoksantin ve guanin) çevirir. (3) Guanin deaminasyona uğrayarak ksantin oluşturur.
- (5) Hipoksantin ksantin oksidaz enzimiyle ksantin'e oksitlenir. Ksantin ise yine ksantin oksidazla bir kez daha oksitlenerek, ürik asiti oluşturur. Ürik asit insanlarda pürin yıkımı son ürünüdür. Ürik asit idrarla dışarı atılır. (Tokullugil vd., 1997). (parantez içindeki numaralar ve açıklamalar şekilde gösterilen özgün reaksiyonlara aittir.)



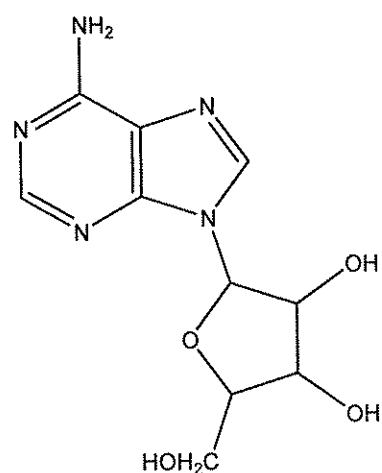
Guanozin



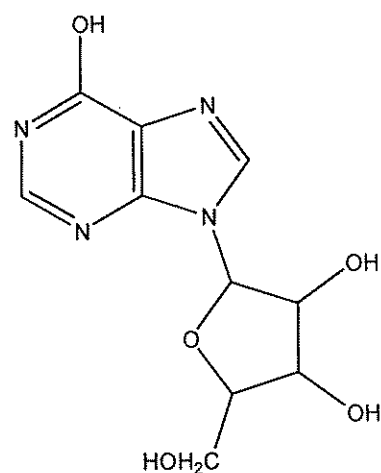
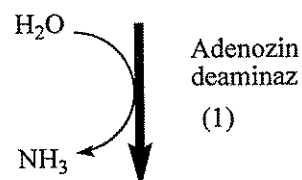
Guanin



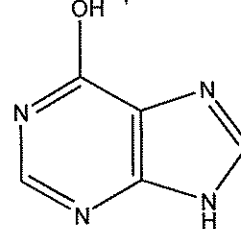
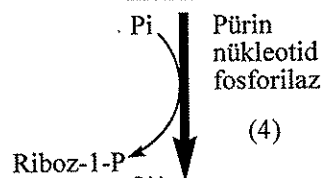
Ksantin



Adenozin



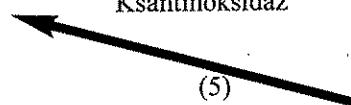
Inozin

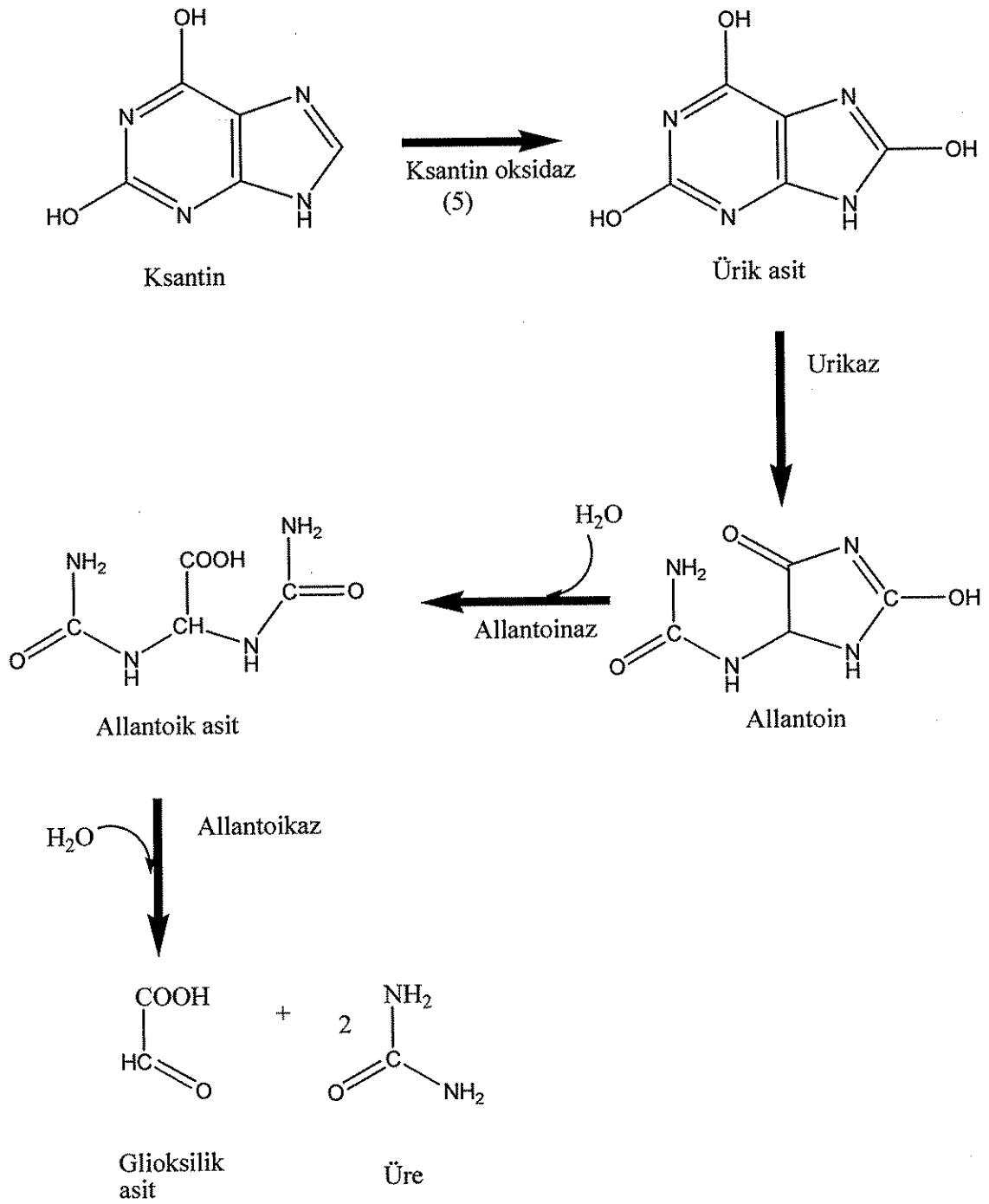


Hipoksantin

Ksantinoksidaz

(5)





Şekil 2.1.1. Pürin nükleotidlerinin ürik asite yıkımı

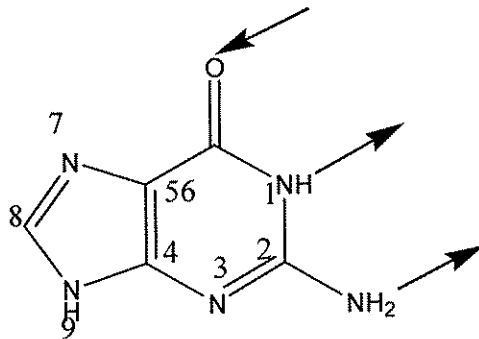
2.1.1. Gut Hastalığı

Gut metabolik bir eklem hastalığıdır. Damarda protein metabolizmasının son ürünlerinden biri olan ürik asit artışı (hiperürisemi) ile karakterizedir. Artan ürik asit özellikle eklemlerde birikerek ağrı ve iltihaba yol açar. Primer gut (hiperürisemi) doğuştan metabolik bir hastalıktır. Sekonder hiperürisemi başka hastalıklara bağlı olarak görülür. Örneğin; kanser, kronik böbrek yetmezliği v.b. Kralların hastalığı ve hastalıkların kralı olarak da bilinir. Tüm romatizma türleri içerisinde en ağırlı olanıdır. Alkollü içecekler de gut hastalığı oluşumunda önemli bir etkidir. Hastalıkta eklem ağrıları görülür. Gut hastalarının protein ağırlıklı beslenmeleri krizi tetikleyebilir.

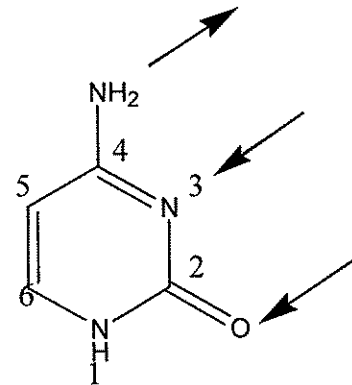
Gut tedavisinde 'allopurinol' kullanılır. Allopurinol ksantin oksidazı inhibe ederek hipoksantin ve ksantin birikmesine yol açar. Ama bunlar ürik asit'e kıyasla daha kolay çözünür maddelerdir. (Tokullugil vd., 1997).

2.1.2. Pürin Katabolizmasındaki Bazı Maddeler ve Özellikleri

Guanin veya (2-amino-6-hidroksipürin) DNA ve RNA nükleik asitlerinde bulunan, azotlu bazlardan biridir. Molekül ağırlığı 151,13g/mol ve $C_5H_5N_5O$ formüllü bir pürin türevidir. Watson-Crick baz eşleşmesinde sitozin ile 3'lü H-bağı kurar. Çift bağlarla eşlenmiş bir pirimidin-imidazol çember sistemi içerir ve doymamış bisiklik hali düzlemseldir. Guanin nükleosidine guanozin denir.



Guanin



Sitozin

Timin genellikle DNA'da, urasil ise yalnızca RNA'da görülmesine karşın guanine, adenin ve sitozinle beraber hem RNA hem de DNA'da bulunur. Guaninin esas keto ve ender endo form olmak üzere iki formu bulunmaktadır. Sitozin'e 3 hidrojen bağı ile

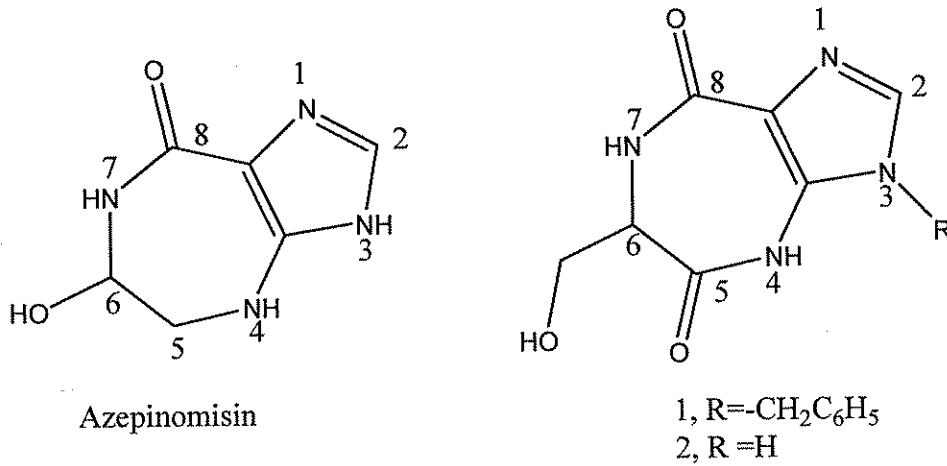
bağlanır. Bu bağlanmada sitozinde amino grubu hidrojen vericisi, C-2 karbonil ve N-3 amin hidrojen bağ alıcısıdır. Guaninde ise C-6 grubu hidrojen alıcısı, N-1 grubu ve C-2'de bulunan amino grubu hidrojen vericisidir. Guanin ilk kez 1844 yılında, İspanyolcada guano olarak isimlendirilen deniz kuşlarının dışkılarından izole edilmiş ve gübre olarak kullanılmıştır. Bundan yaklaşık elli yıl sonra Fischer guaninin yapısını belirlemiş ve ürik asitin guanine çevrilebileceğini göstermiştir. Guanin kuvvetli asit ile glisin, amonyak, karbondioksit ve karbonmonoksit hidrolize edilebilir ve ilk kez ksantine deamine edilmiştir. Guanin, DNA'daki diğer pürin türevi olan adeninden daha kolay okside olabilir. Erime noktası 350°C gibi yüksek bir değerdir ki bu, okso ve amino grupları arasındaki molekül içi hidrojen bağlarının kristalize bir şekilde düzenli olduğunu gösterir. Bu molekül için bağlar dolayısıyla guanin suda tam olarak çözünmez ancak seyreltik asit ve bazlar ile çözünebilir. Guanin ayrıca bazı balıkların pullarında, memelilerin karaciğer ve pankreasında ve kuş pisliğinde bulunan beyaz, şekilsiz bir maddenin de ismidir.

Diğer kullanım alanları, 1656 yılında, Paris'te François Jaquin (gül üreticisi) inci esansı olarak adlandırdığı, guanini bazı balıkların pullarından ayıklamıştır. Kozmetik endüstrisinde, kristalize guanin bir çok üründe parlak inci etkisi veren katkı maddesi olarak kullanılmıştır.(şampuan v.b). Ayrıca, plastik, metalik boya ve sahte incilerde de parlaklık ve renk vericisi olarak, rimel ve tırnak cilası ürünlerinde de parlaklaştırmayı sağlamak üzere kullanılmıştır. Sprey, boya ve daldırılacak sıvı madde (oje) olarak kullanılabilir. Alternatifleri ise mika, alüminyum, bronz partiküller ve suni incidir. Örümcek ve akrepler daha az su kaybı sağlamak için atık metabolizma ürünü olarak hücre içinde amonyağı guanine çevirir ve vücut dışına bu şekilde atarlar.

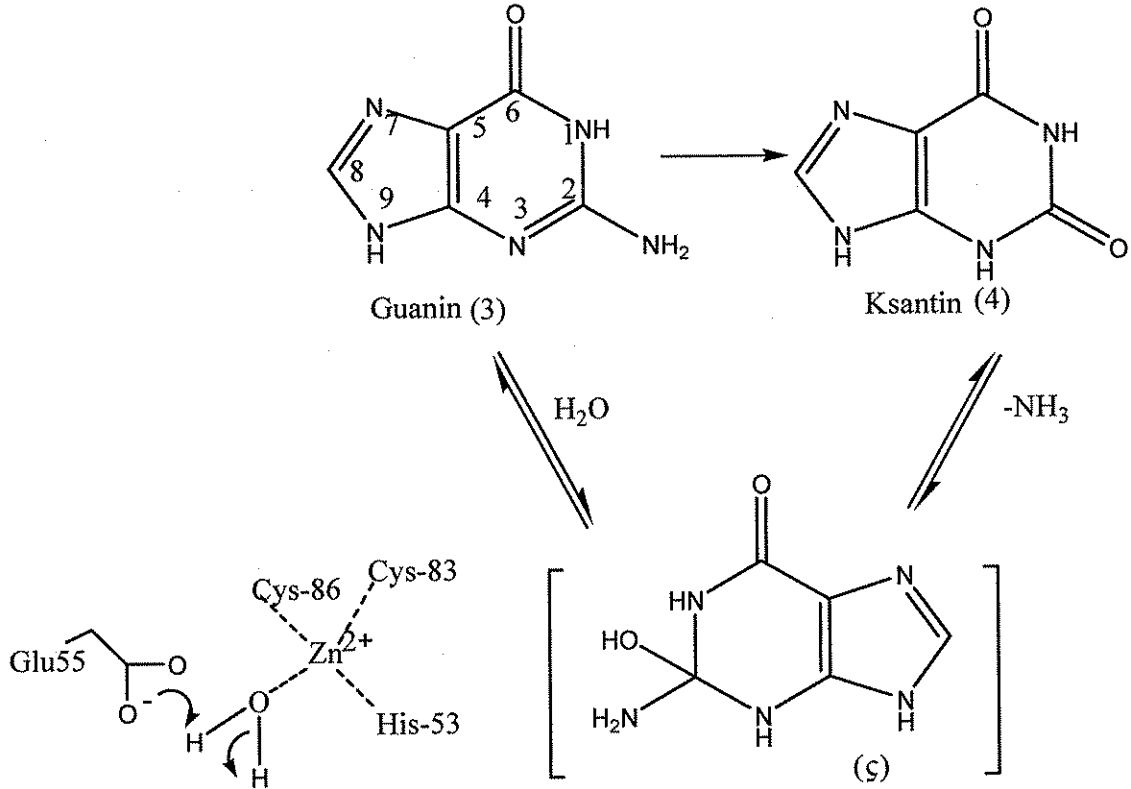
Adenozin, $C_{10}H_{13}N_5O_4$ genel formülü ile gösterilir ve molekül ağırlığı 267,241g/mol'dür. Adenozin omurilikte ağrı işleme düzenleyicisi olarak kullanılır. Adenozin, adenozin kinaz ve adenozin deaminaz tarafından metabolize edilir. Bu çalışmada bu mekanizmanın sıçanların omuriliğinde adenozin düzeylerinin düzenlenmesi için daha önemli olduğunu belirlemişlerdir. Adenozin kinaz inhibitörleri, 5'-deoksiadenozin (NH_2dAD) ve iyodotübersidin (IOT), ve adenozin deaminaz inhibitörü, 2'-dioksikoformisin (DCF) omurilik süperfusyon modelinde adenozinin serbest bırakılması üzerine etkileri incelenmiştir. Bu konuda perfusatesde bazal

adenozin düzeylerindeki artma NH_2dAD ve IOT 'e göre DCF'de daha belirgin olduğu tespit edilmiştir. NH_2Dad 'lı DCF'nin coadministration ürettiği gelişmiş etki tek başına inhibitörlerle kıyaslanmıştır. Morfin-uyarılmış adenozin NH_2dAD 'da bırakılmış fakat DCF'de bırakılmamıştır. Bu sonuçlar, bu deneysel modelde adenozin deaminazın adenozin metabolizması için baskın yolu olabileceğini düşündürmektedir. . (Ujjinamatada, et al., 2006)

Rasyonel mekanizma tasarımı için bir programın parçası olarak guanaz tabanlı inhibitörleri, burada azepinomisinin (1 ve 2) iki analoglarının sentez ve biyokimyasal taraması, guanazın meydana gelen doğal bir inhibitörü, enzim-kataliz reaksiyonunun geçiş halini taklitinin bilindiği rapor edilmiştir. Elde edilen sonuçlar gösteriyor ki, 1 ve 2 bileşikleri $2,01 \pm 0,16 \times 10^{-5}$ ve $5,36 \pm 0,14 \times 10^{-5}$ M sırasıyla rekabetçi inhibitörleri olduğunu göstermektedir. (Ujjinamatada, et al., 2006)



Şekil 2.1.2 Azepinomisin ve analogları



Şekil 2.1.3 Guanaz ile katalizlenen Guaninin Zn^{2+} yardımıyla ksantine hidrolizi reaksiyonu

Ürik asit $C_5H_4N_4O_3$ genel formüllü ve molekül ağırlığı 168g/mol'dür. Bir zar olan *Manduca sexta* (larva) içinde ürik asit araştırılmıştır. HPCL analizi ve epidermal dokulardaki etiketli malzemenin ürikaz aktivitesi ürik asit olduğunu doğrulamıştır. Ürik asit hareketinin hormonal kontrol olasılığı tartışılmaktadır. (Buckner and Newman, 1990)

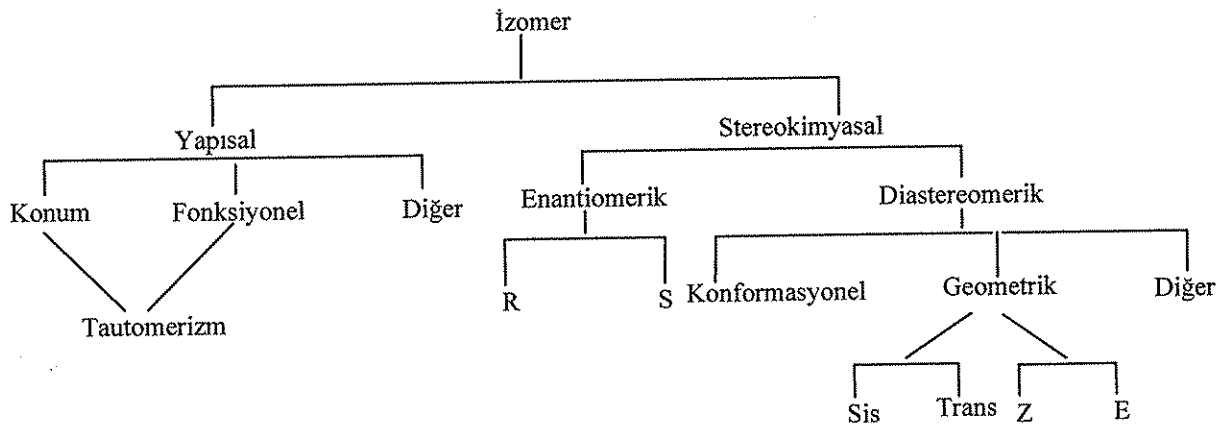
Ürik asit metabolizması *Pieris Brassicae* 'nin öğrencilik ve yetişkinlik aşamaları sırasında araştırılmıştır. Ürik asit ve ana metaboliti, allantoinik asit, sentez, yıkım ve taşınımı sırasında çeşitli organlarda (vücut yağ, gut, kanat) gelişimi belirlemek amacıyla sayısallaştırılmıştır. Her iki etiketleme, deneyler ($2-14C$ ürik asit, guanin, guanozin için kullanılan) ve enzimatik çalışmalar (ksantin dehidrogenaz, guanin deaminaz ve ürikaz) için yapılmıştır. Etiketli ürik asit, bir genç pupaya enjekte edildiği zaman tercihen vücut yağında biriken ve model yapılar (kanat, kafa, gövde duvarı) esas olan allantoinik asitin artışı onun bozulmasına yol açmıştır. Sadece düşük seviyelerde pupal aşamasında

ürrikaz varsa ürik asitin sadece küçük bir kısmı metabolize edilir. Yetişkin pharete gelişirken, ürik asit vücut yağından bağırsak ve kanatlara hemoglobin yoluyla taşınır. Erkek kanatlarında kadın kanatlarına göre daha fazla ürik asit birikir. Görünüşte ürik asitin büyük miktarı ve allontoik asitin çoğu mekanyumun içine atılır. Fakat birlikte değil; ürik asit sözde ommokrom içeren mekanyum-1 içine atılır oysa onun metaboliti renksiz sıvı olan mekanyum-2 içerisine genişleme yanı elenir. Kısa bir süre önce “Mekanyum-1” içine atılan bir kısım ürik asitin sentezlenebilmesi vücut yağını artırır. Yetişkin yaşam boyunca, ürik asit sentezinin, vücut yağı ve yumurtalıklarda özellikle bol olduğu görülür. Yaşlanma organlarında (kanatlar, başlar, testisler) belirgin bir şekilde birikir. Küçük bir kısım allontoik asitle birlikte kelebek yardımı ile içine atılır. Pürin katabolizmasındaki yollar araştırılmıştır. Sonuç gösteriyor ki guanin , türevleri içinde guaninin serbest bazıyla hızlıca ürik asite (ve onun metabolitleri) dönüşür. Oysa ki 14C-guanozin nükleotidlerin içine doğru taşınmış olabilir ve yetişkin pigmentasyon enjekte edildiği anda verimli bir şekilde kanadın içine doğru taşındığı görülmüştür. Başka bir pürin türevi adenosin kanıtlanmıştır ki yetişkin erkek vücut yağı ortaya çıkmasında adenosin önce birikir. Belirgin yetişkin yaşamının ilk günlerinde onun miktarını artırır ve pürin katabolizma alternatif bir yola karşılık gelir. Kadınlardaki adenosin yokluğu yumurtalıkların gelişimi ile ilişkilidir. (Lafont and Penner, 1975).

2.2. TAUTOMERİZM

Tautomerizm kelime anlamı olarak Latince tauto (aynı) ve meros (parça) kelimelerinin birleşmesiyle oluşmuş bir tür yapı izomeridir. Tautomerler, atomlarının farklı bir düzende yerleşmiş olmalarına rağmen, birbirlerine hızlı bir şekilde dönüşebilen izomerlerdir. İzomerler arasındaki farklılık, yapıdaki bir atom veya grubun farklı konumlarda olmasıdır.

Tautomerizm, bir molekül için dengede olan yapısal izomerleri olarak da tanımlanır.

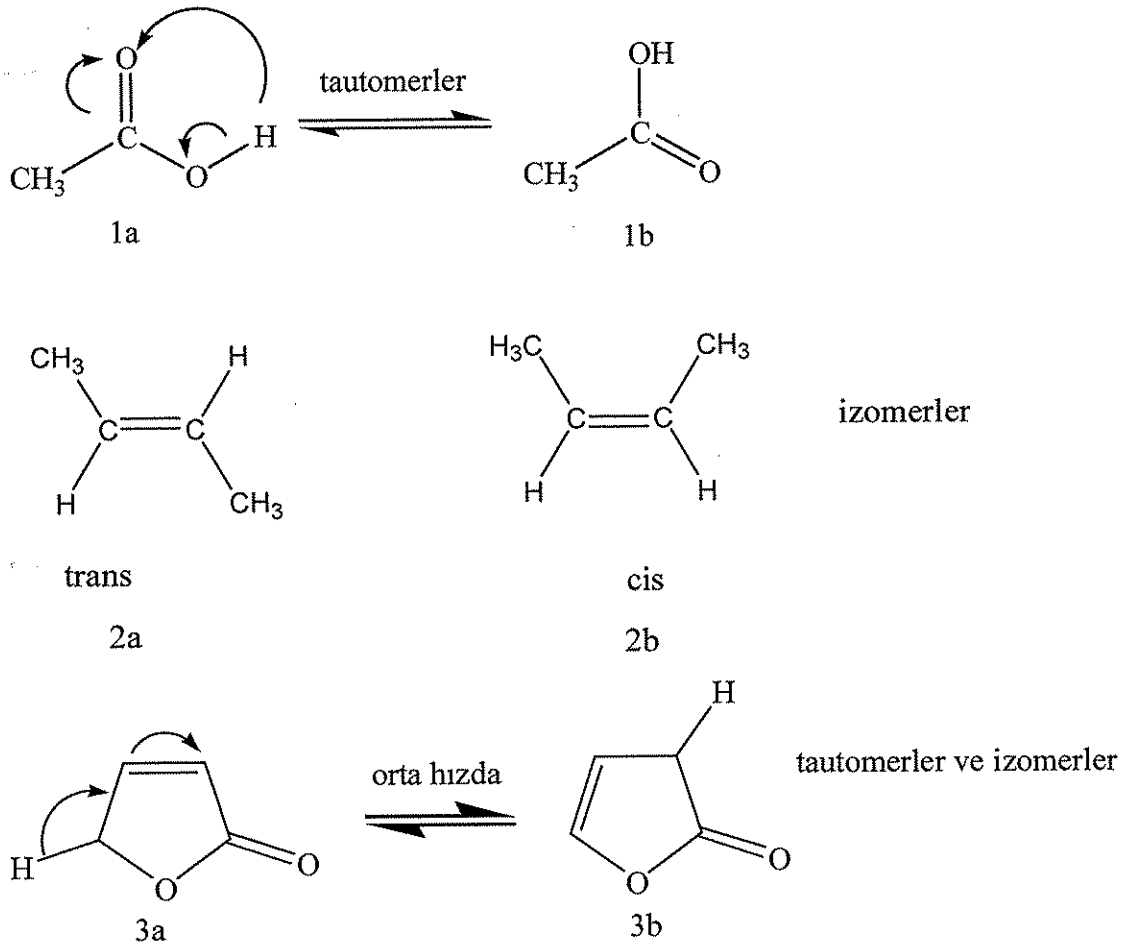


Şekil 2.2.1. Tautomerizm ve diğer izomerizm türleri

Tautomerik dönüşüm, (aynı tip atomların varlıklarını ayırmak için farzedilen) kimyasal bağların oluşumu ve ayrılmasını içeren ve biçimsel olarak tek moleküler sistemde dinamik bir yöntemdir, her iki tautomerik formun analizi fizikokimyasal metotlar ile belirlenebilir. (Katritzky., et al.,2000)

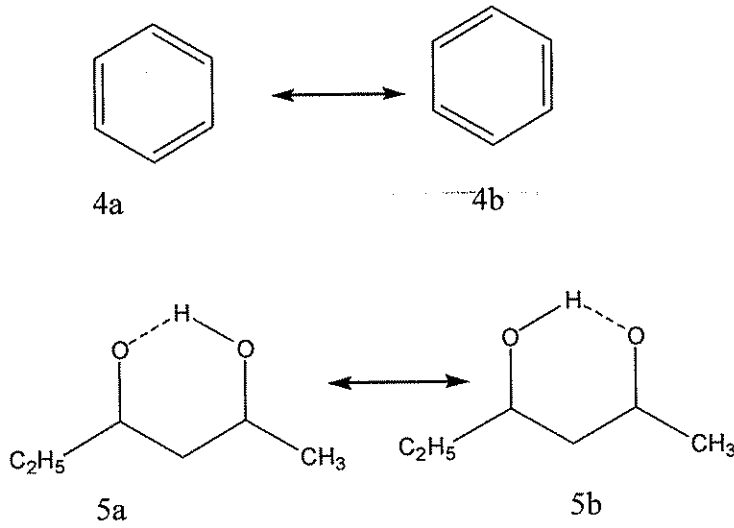
Tautomerizm ve izomerizm arasında kesin bir sınırlama yoktur. Ancak, izomerlerin birbirine dönüşümü, tautomerlerin birbirine dönüşümünden çok daha zor ve yavaştır. Örneğin, bir karboksilik asitin (1) iki formda tautomerik dengede iken, 1-büten (2c) ve 2-büten (2a ve 2b) kolay ayrılabilirdikleri için izomer oluştururlar (Şekil 2.2.2).

Bazı bileşiklerde ise izomer ayırımına gidilememektedir. Örneğin, Butirolakton (3)' un birbirine kolayca dönüşebilen iki ayrı formu izole edilebilmiştir. Bu yüzden bu çift tautomer ve izomer olabilir. (Şekil 2.2.2).



Şekil 2.2.2. Çeşitli tautomer ve izomer çiftleri

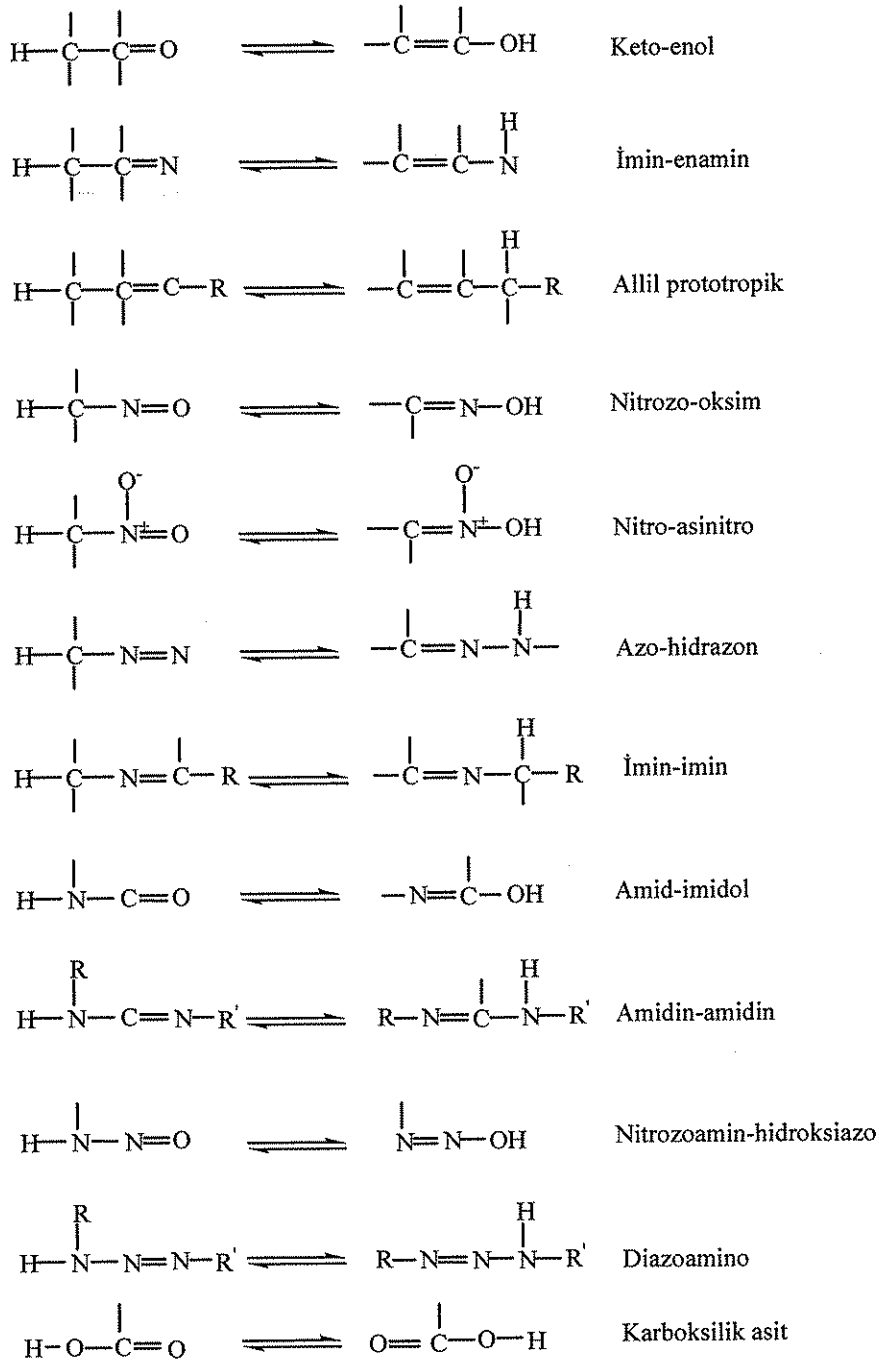
Diğer yandan, tautomerizm ve izomerizm arasındaki fark karşılaştırıldığında, iki tautomer bir enerji bariyeri ile ayrılmış tek bir bileşiktir. Tek yapı gösteren mezomerizm ise, gerçek yapıya katkıda bulunan iki veya daha fazla kanonik form arasındaki minimum enerjiden oluşur. Bu sınırlamaları aşan bazı durumlarda olabilir. Örneğin heksan-2, 4-dion'un enol formu hidrojen bağı içerir ve diğer hidrojen bağı tautomerler arasında küçük bir enerji farkı vardır. Simetrik hidrojen bağlarının bu durumu nedeniyle tautomerizm ve izomerizm iç içe girmiş kavramlardır. (şekil 2.2.3) (Katritzky,1989)



Şekil 2.2.3 Mezomerler(4a, 4b), Tautomerler (5a, 5b)

2.2.1. Proton Tautomerizmi

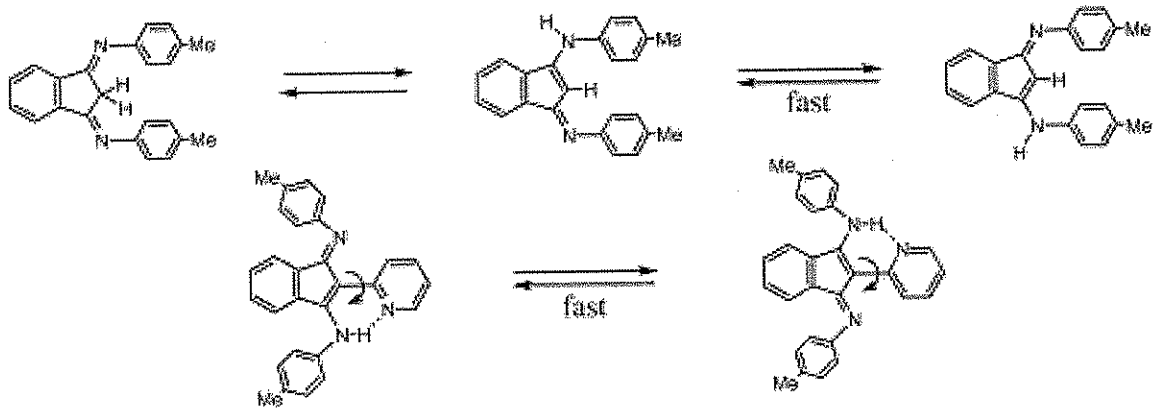
Proton tautomerizmi, oynak hidrojenin birden fazla farklı merkezde yer alabilmesiyle oluşur. Bu olgunun doğal bir sonucu olarak, farklı veya özdeş yapıda tautomerler ortaya çıkar. Ancak bu durum heteroaromatik proton tautomerizmi olarak adlandırılabilmesi için, tautomerlerden en az birinin heteroaromatik yapıda olması gereklidir. Kuşkusuz söz konusu tautomerlerin birbirine göreceli dağılım oranları ise, bu tautomer farklarına paralel olmasıdır. (Katritzky, 1963)



Şekil 2.2.4 Proton tautomerizmi türleri

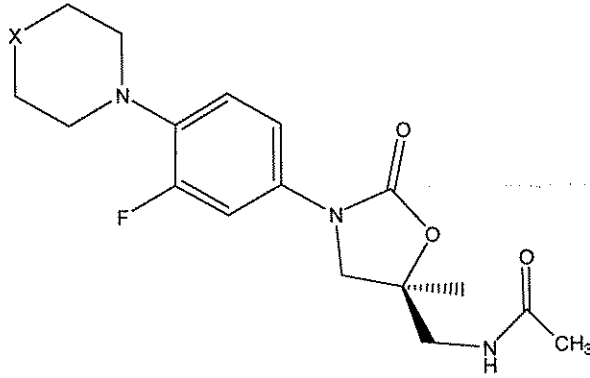
Tautomerik yapılar ve 1,3- indandion ve 2-piridil-1,3-indandion' nun p-toluidin ile kondensasyon reaksiyonu ile elde edilen 1 ve 2 ürünlerinin dinamik prototropik davranışları sırasıyla ^1H NMR spektroskopisi ve X-ray analiziyle açıklanmıştır. Katı durumda bileşik 1 imino-enamin tautomerik formda, oysa çözelti durumunda, imino-imino tautomerik formuyla birlikte bulunmuştur. İmino-enamin formunun dinamik

1,5- prototropik yer değişiminin sıcaklığa bağlı ^1H NMR spektroskopisi oda sıcaklığında çok hızlı gerçekleşir. 2 için, imino-enamin formu sadece çözelti içinde mevcuttur. Enaminin NH hidrojeni piridin halkasındaki N ile H-bağı yapar. Sıcaklık yükseltildiğinde H-bağının yönünü değiştiren, bağ eksenini etrafında döndürerek eşlik eden NH protonu dinamik 1,5- göçü olmuştur. Kondensasyon ürünü 3 için; 2-(2-kinolil)-1,3 indandion ile p-bütil anilin ^{13}C NMR spektroskopisinde 2 ile dinamik benzer davranışları bulunmuştur. (Mukano, et al., 2010)



Şekil 2.2.5 1,3-indandion ve 2-piridinil-1,3-indandionun p-toluidin ile kondensasyon reaksiyonu.

Biyolojik olarak aktif okzazolidin-4-1 ve onun tiyo ve azo analoglarının yalnız prototautomerizm ile bazlık ve nükleofiliklikleri yarı-deneysel metotlarla araştırılmıştır. Okzo ve tiyo protonasyonu, 4-okzo ve 4-tiyo türevleri için azo protonasyonuna göre daha kolay bulunmuştur. Oysa amino protonasyonu, 4-imino türevinde imino ve azo protonasyonundan daha kolay bulunmuştur. 4-okzo ve 4-tiyo türevleri için tercih edilen tautomerik form sırasıyla keto ve tiyo formları olarak bulunmuştur. Fakat 4-imino türevleri içinde tercih edilen amino formu bulunmuştur. Gaz fazı proton ilgisi ve sulu faz asitlik sabitleri arasında kabul edilebilir bir korelasyon, yanı sıra nükleofiliklik ve asitlik sabitleri arasında da korelasyon gözlenmiştir. (Öğretir, et al., 2005).



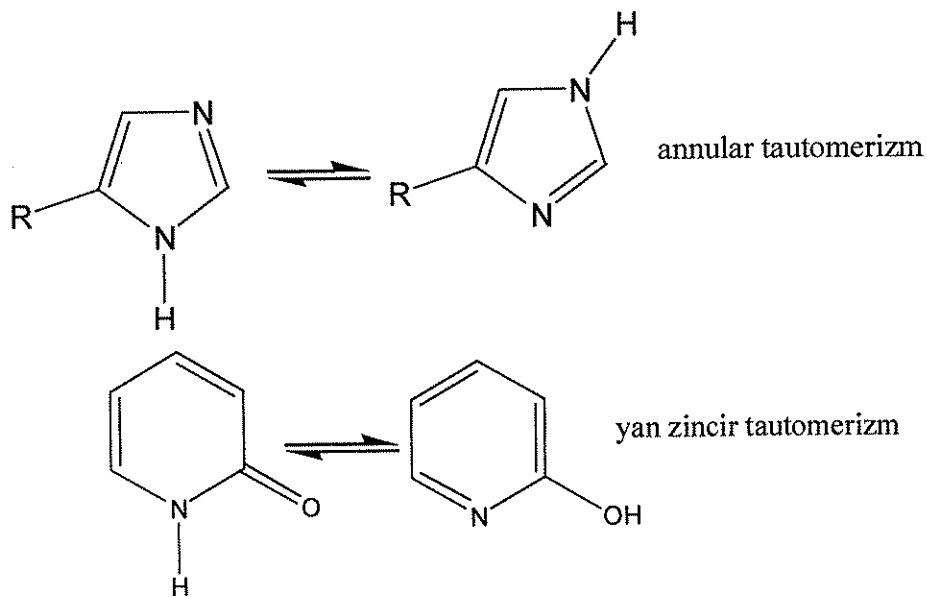
Eperezolid: $X=NC(O)CH_2O$

Linezolid: $X=O$

Şekil 2.2.6 Okzazolidin-4,1- tiyo ve azo analogları

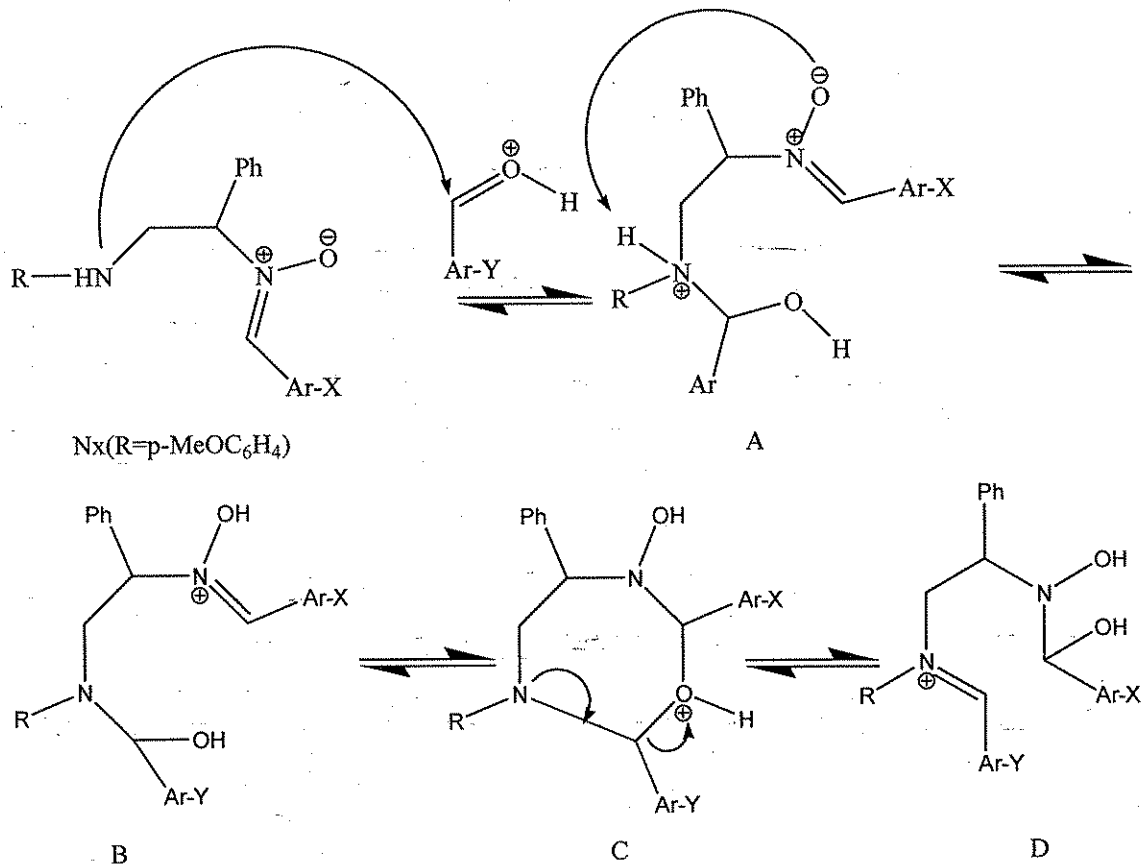
2.2.2. Heterosiklik Bileşiklerde Tautomerizm

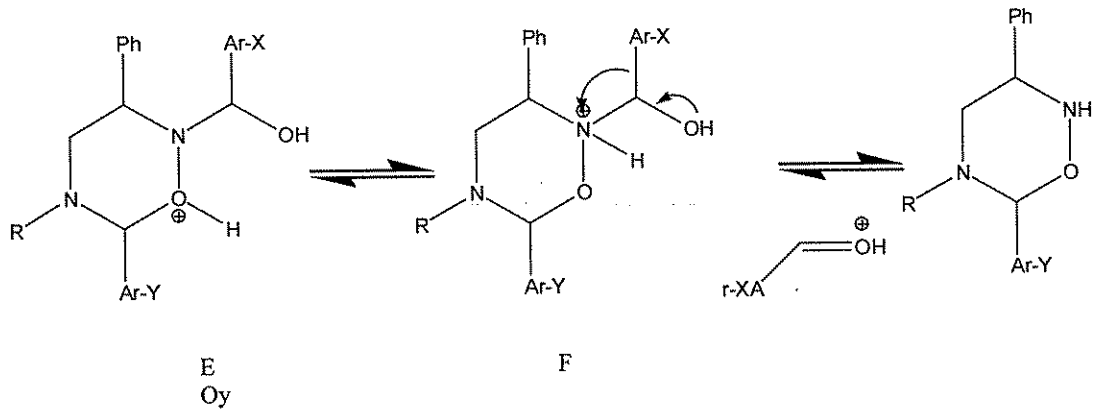
Heterosiklik bileşiklerde tautomerizm, halkadaki heteroatom ve substituent atom arasındaki protonun hareketini içerir. Heterosiklik bileşiklerde tautomerizm, annular ve yan zincir olmak üzere ikiye ayrılır. Annular (halkasal) tautomerizmde oynak hidrojen atomu halka atomları üzerinde yer değiştirir. Yan zincir tautomerizminde ise yer değiştirme bir halka veya yan zincir atomları arasında gerçekleşir. (Katritzky, et al., 1989), (Katritzky, et al., 1963).



Şekil 2.2.7 Annular ve yan zincir tautomerizmi

Benzilidenin yer deęiřtirme reaksiyonları DCL' ye g re (Dynamic Combinatorial Library) imidazolidin-1-ol, azot ve okzadiazin (INO) arasında, zincir-halka-zincir tautomeri oda sıcaklıęında oluřturmuřlardır. Reaksiyonun olası mekanizması Hammett t r  koralasyon analizine g re tartıřılmıřtır. DCL i indeki denge, INOAr-X ' in INOAr-Y ' ye karřılıklı deęiřmesini a ıklamıřlardır. Benzer aldehitlerle Y-ArCHO ve X-ArCHO ile birlikte reaksiyon sonucu g stermiřtir ki, s bstit entlerin σ sabitlerine baęlıdır ve basit bir denklemle $K_{xy} = \rho_{\text{odif}} + \log K_{xy(x=y)}$ a ıklanmıřtır. Herhangi bir INOAr-X ve INOAr-Y i in yer deęiřimi tahmini K_{xy} , s bstit entlerin σ sabitleri, ρ 'nin sadece deneysel verilerini gerektirmiřtir. Benzilidene baęlı s bstit entler imidazolidin-1-ol, azot ve okzadiazin INOAr-X(Y) arasında yer deęiřtirme reaksiyonu tautomerlik saęlar. (Cořkun ve Aksoy, 2009).

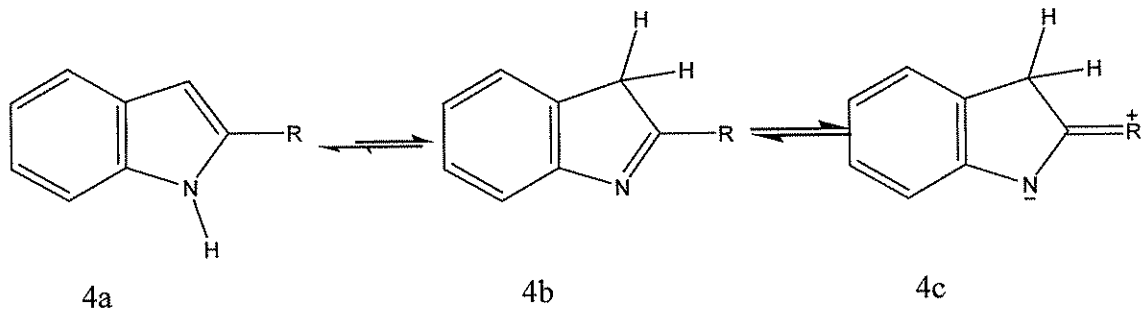




Şekil 2.2.8 Benzilidenin DCL'ye göre yerdeğiştirme reaksiyonları

2.2.3. Annular Tautomerizmi

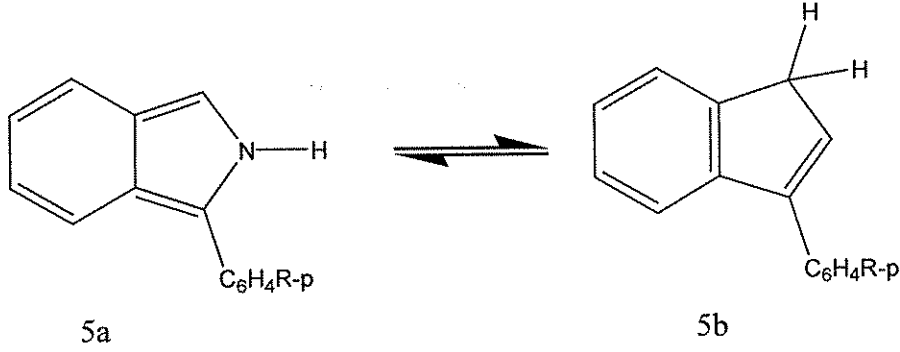
Rezonans enerjinin potansiyel kaybı indolenin (4b) karşılığı olan bir indolün tautomerizmi için çok daha azdır. Yine, çoğu indoller indol formunda bulunurlar, ama güçlü bir elektron verici grup C-2'nin varlığında dengeli olmak için devrilebilir. Bu yüzden, zwitter iyonik kanonikal (4c) form içeren, substitüent -SEt, -OEt, -NC₅H₁₀ artan elektron verici yeteneklerinden dolayı, denge (4a) ve (4b) de düzenli şekilde kaydırılmaktadır. (Kalandarışvılı and Terent'ev, 1996).



Şekil 2.2.9 İndollerin tautomerizmi

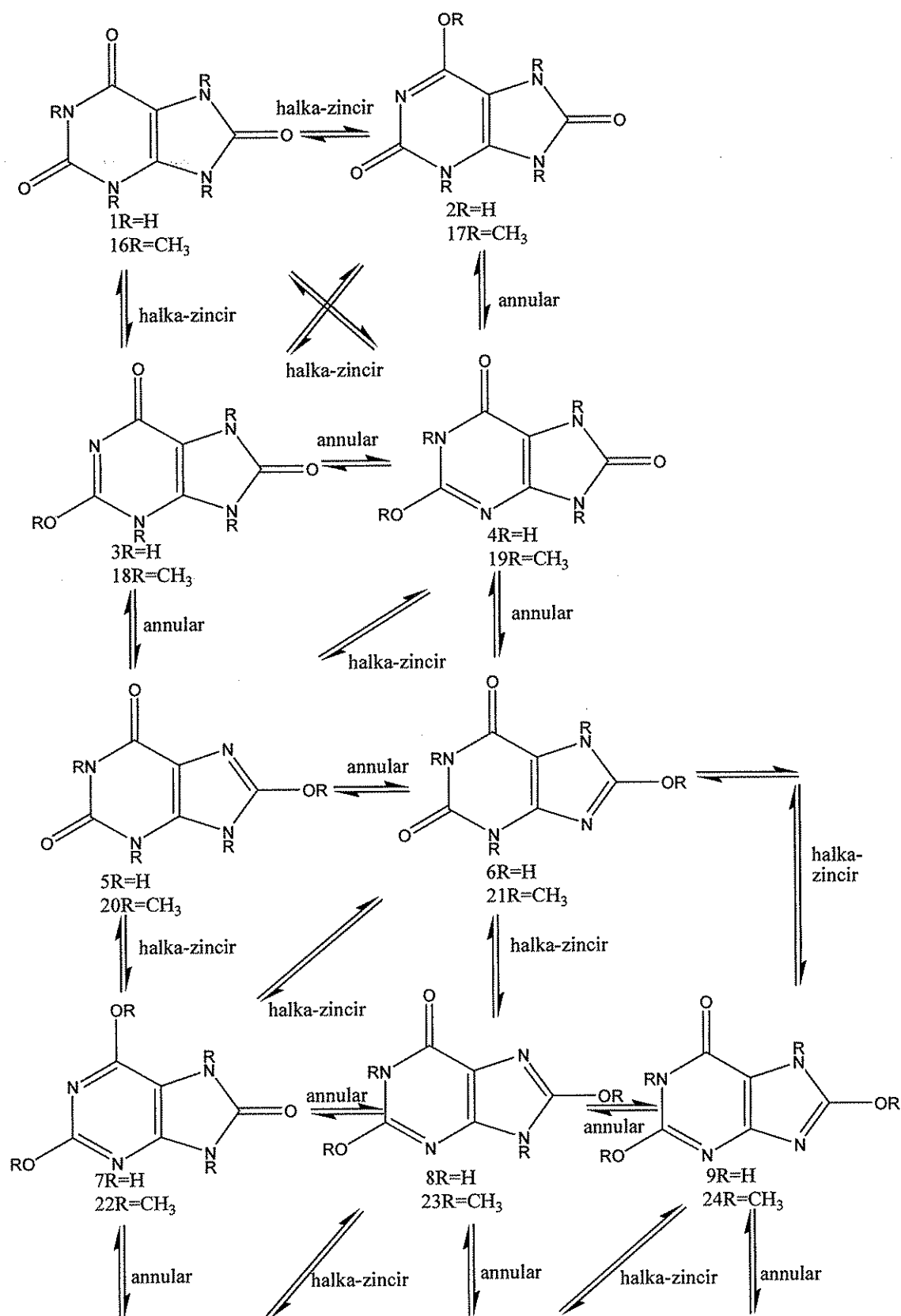
İzoindol, önceden bilinen MO (moleküler orbital) hesaplamaları gereğince tercihen (5a) olarak bulunmaktadır, izoindolün daha düşük rezonans enerjisi süstitüe edilmiş türevlerinin en son türlerinde izoindol-izoindolenin dengesi halinde bulunmaktadır. Bu nedenle, C=N ile bağlarının C-1 aril grubunun varlığında p-substituent (R), CDCl₃ de (%50) dimetilamin, (%31) metoksi ve (%9) hidrojen

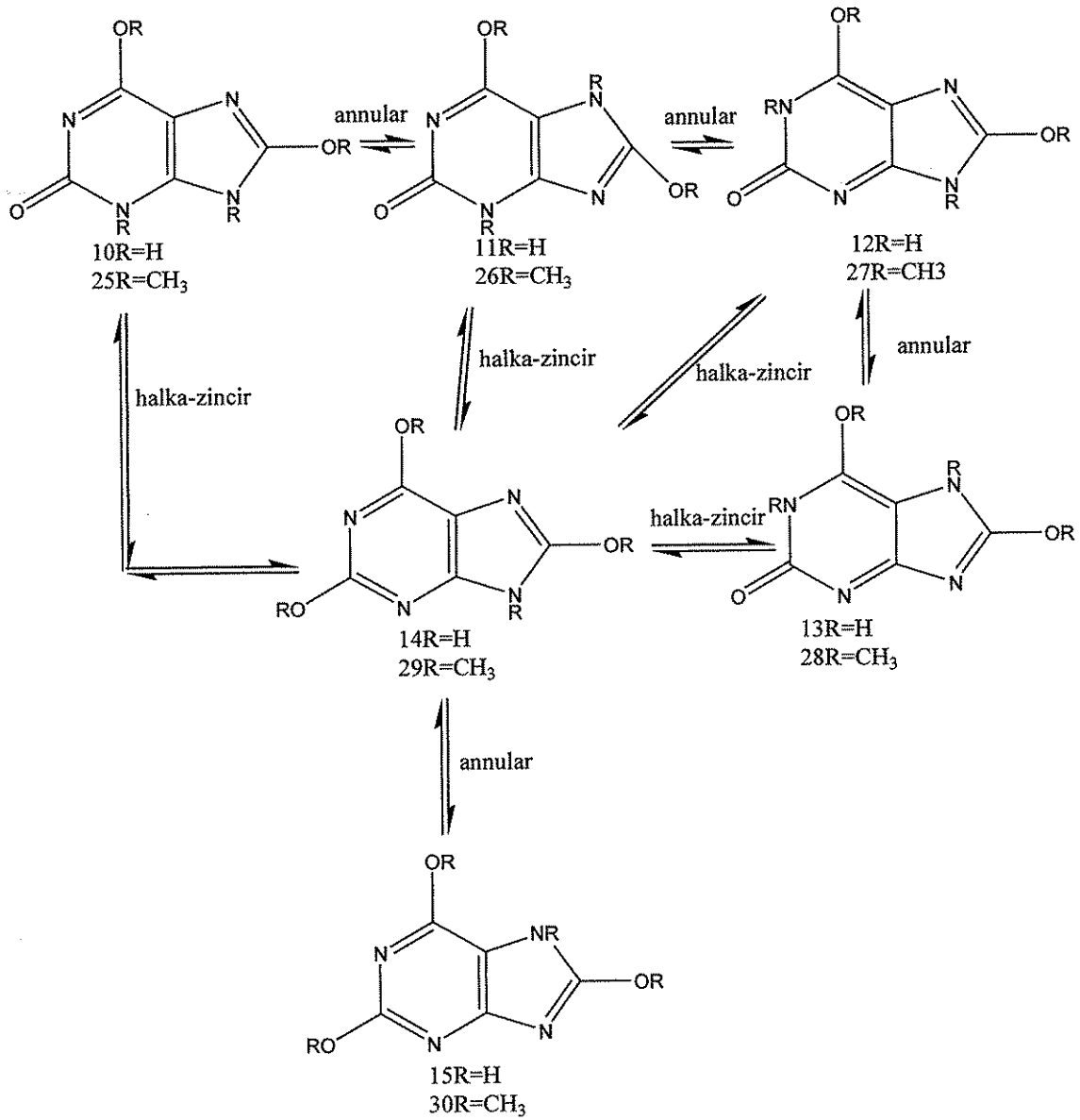
değiştirilmesi ile izoindolenin tautomer (5b)' in artan miktarları elde edilebilmektedir. (Kalandarishvili and Terent'ev, 1996).



Şekil 2.2.10 İzoindolün tautomerik dengesi

Biyolojik olarak aktif olan ürik asit molekülünün tercih edilen tautomerik formu, gaz faz kullanılarak, yarı deneysel hesaplanmış görelî stabiliteleri, sulu fazda asitlik sabitleri ve diğer moleküler özellikleri hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar triokso, diokso veya monookso formları, monohidroksi, dihidroksi veya trihidroksi üzerinde tautomerik olarak halka-zincir tautomerizminin var olduğunu belirtmiştir. Ancak aynı eğilim annular tautomerizmi için gözlenmemiştir. (Demir vd., 2004).

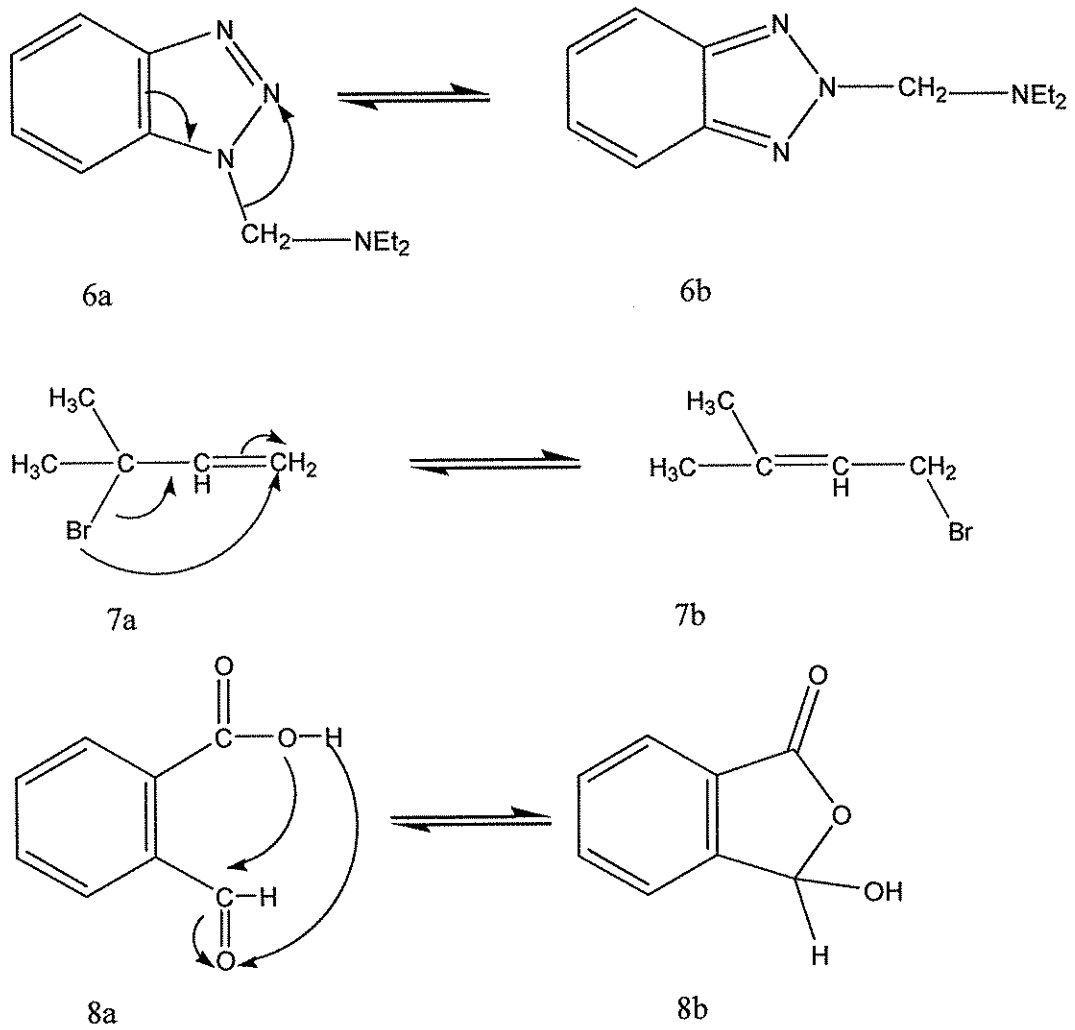




Şekil 2.2.11 Ürik asit molekülü için mümkün tautomerik denge formları

2.2.4. Non-prototropik Tautomerizm

Proton dışındaki grupların yapıda farklı yerlerde olması ile oluşan tautomerlere aşağıdaki örnekler verilmiştir. Sübstitüe olmuş bentriazollerin (6), 1-sübstitüe (6a) ve 2-sübstitüe (6b) formları arasında tautomerik bir denge vardır. Diğer taraftan alil katyonunun yer değiştirmesi iyi bilinen anyonotropi (7) örneğidir. Şekil 3.5.'de gösterilen (8a) ve (8b) bir halka-zincir tautomerizmidir. (Katritzky, 1989)



Şekil 2.2.12 Prototropik tautomerizm dışındaki bazı tautomerizm türleri

2.3. TEORİK HESAPLAMALAR

Günümüzde kullanılan teorik hesaplama yöntemleri ile moleküllerin bir çok özellikleri deney yapmaya gerek kalmadan hesaplanmaya başlanmıştır. Hatta bu hesaplamalar ile şimdiye kadar elde edilmemiş veya edilememiş ve gerçek koşullarda var olamayacak bileşikler için kolayca uygulanabilmekte ve istenen sonuçlar alınabilmektedir.

Bazı çalışmalarda deneysel yöntemden daha hassas ve güvenilir sonuçlar elde edilebilmektedir. Bir tek deneyle moleküler yapı, oluşum ısısı, dipol moment, iyonlaşma potansiyeli, elektron yükleri, elektron yoğunlukları, bağ uzunlukları, vb. bir

çok bilgiyi verebilecek bir yöntem yoktur. Bu tür verilerin deneysel yöntem ile hesaplanmasında sonuçların güvenilirliği göz önünde bulundurulursa, yaygınlaşmakta olan bir çok hesaplama yöntemi sonuçlarının, deneysel sonuçlara göre ne kadar güvenilir olduğu görülebilir. Ayrıca bir alkanın perisiklik oluşum ısısının deneysel yöntem ile hesaplanması uzun ve oldukça zor bir iş olup büyük bir deneysel duyarlılık ve örnek saflığı gerektirir. En hassas deneysel çalışmalarda bile elde edilen değerlerin doğruluğunun kişinin gözlem ve hassasiyeti doğrultusunda olacaktır. Reaksiyon ortamında oluşabilecek yan ürünlerin varlığı sonuçların güvenilirliğini daha da azaltacaktır. Ayrıca böyle bir çalışmanın maliyeti kıyaslanacak olursa, bilgisayarla birkaç dakika bilgisayar (computer) süresi ile birkaç dakika data hazırlama ile sonuçlanacaktır. Bilgisayarla yapılan teorik hesaplamalarda istenilen sonuçları almak oldukça kolaydır. Fakat hiçbir zaman teorik hesaplama deneysel hesaplamasının yerini alamaz. Zira önemli olan sonuçların güncel yaşamda kullanılabilirliği olduğundan, her araştırmacı için gerçek ve güvenilir sonuç deneysel veri olacaktır. Teorik veri her zaman deneysel çalışmayı yönlendirici ve aydınlatıcı olmakta ve birkaç istisna dışında teorik çalışma ile deneysel çalışma kıyaslamalı olarak kullanılmaktadır. İki sonuç yorumlanarak deneysel çalışmaların veya bulguların güvenilirliği artmakta veya yöntem desteklenmektedir. Ayrıca deneysel çalışmada açıklanamayan veya soru işareti halinde bulunan bir sonuç teorik çalışma ile rahatlıkla yorumlanıp aydınlatılmaktadır.

Heteroaromatik maddelerin yapı-etki ve yapı-enerji ilişkilerinin incelenmesi kimyanın birçok dalında önemli bir yer almaktadır. Heteroaromatik maddelerin birçok

fizikokimyasal özelliklerinin incelenmesi, maddenin sıvı bir ortamda çözünmesi ve reaktiflerin bu ortama eklenmesi veya ortamda oluşturulmasını gerektirir. Oluşan reaksiyonun birçok fizikokimyasal özellikleri, fiziksel organik kimyanın dönüştürülebilen teknikler ile ölçülmesini gerektirir. Bu teknikler çok miktarda güvenilir veriler elde edilmesine karşın birçok karmaşa bunların uygulanabilme alanını sınırlamakta ve elde edilen verilerin değerlendirilmesini güçleştirmektedir. Her şeyden önce verilen bir çözücünde incelenebilen yapısal etkiler heteroaromatik molekül ile reaksiyon ortamının etkileşmesi sonucu oluşan yan reaksiyonlar nedeniyle sınırlıdır.

Örneğin heteroaromatik maddelerin tautomerik dengeleri çözücünün proton donör veya proton akseptör özelliklerine sıkı bir şekilde bağlıdır. Diğer taraftan asitli ortam ve katalizör varlığı normal olarak elektrofilik heteroaromatik süstitüsyonda istenmeyen yan ürün oluşumuna ve birçok durumda kinetik olarak takip edilemeyecek bir mekanizma izlenmesine neden olur. Hatta birçok heteroaromatik nükleofilik süstitüsyon kuvvetli bazik ortamda bu reaksiyonun konjuge baz ve heteroaromatik substratın arasında oluşacak prototropik dengede etkilenebilir. Farklı çözücü sistemleri heteroaromatik süstitüsyon yönelmeleri saptar, ancak bu etkinin değerlendirilmesi çeşitli fiziksel olaylar tarafından engellenir. Örneğin, dipol moment gibi elektron yoğunluğu dağılımı ile ilgili bir özellik gözlenmek istendiğinde substrat molekülleri arasındaki olası hidrojen bağı göz önüne alınmalıdır.

Tüm bu güçlükleri yenmek için en iyi çözüm heteroaromatik maddelerin fizikokimyasal ölçümlerinin gaz fazında (vakum sistemlerinde) yapılmasıdır. Son yıllarda gaz fazında çok duyarlı incelemelerin yapılmasını sağlayan deneysel yöntemlerin, tatmin edici Moleküler Orbital hesaplama yöntemleri geliştirmek mümkün olmuştur. Gaz fazı reaktifliğinin çalışmasında iki yönlü yarar vardır. Birincisi, reaksiyonun hız sabitleri ve denge sabitlerinin gaz fazı değerleri ile sıvı fazdaki sabitlerinin direkt karşılaştırılması sonucu iyon solvasyonunun bulunabilmesi, ikincisi ise, gaz fazı reaktivlik verileri molekülün temel ve gerçek özelliklerinin elde edilmesine olanak sağlaması ve yeni moleküllerin yapıları ile diğer özelliklerinin önceden belirlenmesini sağlamasıdır.

2.3.1. Kuantum kimyasal yöntemler

Kuantum kimyasal hesaplama yöntemleri Schrödinger denkleminin çözümüne dayanır.

$$H\psi = E\psi$$

Ancak, en küçük sistemlerin dışında Schrödinger denkleminin tam çözümü mümkün değildir. Dolayısıyla problemler çeşitli yaklaşımlar ile çözülmeye çalışılır. Elektronik yapı yöntemleri, denklemin çözümü için kullanılan değişik matematiksel yaklaşımlarla tanımlanırlar.

2.3.1.1. Moleküler mekanik yöntem

Bir molekül yarı deneysel metodlar kullanılamayacak kadar büyük ise çözüm için Moleküler Mekanik Yöntemi kullanılabilir. Bu metotta, bir bileşiğin toplam enerjisinin bulunması için, dalga fonksiyonunun bilgisayarla hesaplanmasına gerek kalmadan, basit cebirsel açılımlar kullanır (Hinchliffe, 1997). Enerji açılımı, bağ gerilmesi, açı, hidrojen bağı gibi moleküller arası kuvvetlerle ilgili enerjiyi tanımlamak için harmonik osilatör denklemleri gibi klasik basit denklemlerden oluşur. Bu denklemlerdeki sabitlerin tümü deneysel verilerden veya *ab initio* hesaplamalarından elde edilmelidir.

Moleküler mekanikğin avantajı, çok büyük moleküllerin modelleştirilmesine olanak sağlayabilmesidir. Dezavantajı ise bazı kimyasal özellikleri örneğin uyarılmış elektronik durumlarla ilgili hesaplamaları içermemesidir.

2.3.1.2. Yarı deneysel moleküler orbital yöntemleri

MOPAC, HyperChem ve Gaussian gibi programların içinde yer alan AM1, MNDO, MINDO, PM3 gibi, "Yarı deneysel Yöntemler" de hesaplamaları basitleştirmek için deneysel bilgilerden elde edilen parametreler kullanılır. İncelenen sistem tipi için uygun parametreler bulunduğunda, Schrödinger denkleminin yaklaşık bir çözümü yapılır.

Hesaplamalarda yapılan yaklaşımlar sonucu doğacak hataları düzeltmek ve elde edilen sonucun deneysel sonuçlarla mümkün olabildiğince uyuşması için, hesaplama değerleri parametrize edilir.

Yarı deneysel Moleküler Orbital (MO) yöntemlerinde *ab initio* yöntemlerden farklı olarak, Fock matriksini oluşturan iki elektron integrallerinin büyük bir kısmı ihmal edilir (Hinchliffe, 1997). Hesaplamalarda sadece valans elektronları dikkate alınır ve temel fonksiyonlar Slater tipi orbitallerle tanımlanır. Bu metodlar çok büyük moleküllere uygulanır, genellikle büyük sistemlerde *ab initio* veya DFT (Yoğunluk Fonksiyonel Teori) optimizasyonları için başlangıç yapıyı oluşturmada kullanılır.

Bir molekülün, moleküler orbitalleri, atomik yükleri ve titreşim modları gibi kalitatif bilgilerini elde etmekte ve ayrıca konformasyon ve süstitüent etkilerinde enerjinin öngörülmesinde kullanılabilir (Frisch and Frisch, 1999).

Kristal yapıların incelenmesinde deneysel X-Ray yapılarına uyumlu geometriler elde edilmesinde ve yapı-aktivite ilişkilerinin incelenmesinde kullanılabilir. (Yenikaya vd., 2005).

2.3.1.3. *Ab initio* moleküler orbital yöntemleri

Ab initio terimi latin kökenli olup "*Başlangıçtan Beri*" anlamındadır. Schrödinger denkleminin yazılarak çözülmesine dayanır. Bu hesaplamalar, deneysel parametre içermeyen doğrudan teorik prensiplerden türetilmiştir (Hinchliffe, 1997).

Ab initio hesaplamaların en yaygın tipi, Hartree Fock hesaplamaları diye adlandırılan merkezi alan yaklaşıklığıdır. Bu yaklaşırmada, Coulomb elektron-elektron itmesi başlangıçta hesaplamalara özellikle alınmaz. Bu itmenin net etkisi daha sonra düzeltme olarak hesaba katılmaktadır. *Ab initio* hesaplamaları varyasyonel bir hesaplama türüdür. Bu nedenle hesaplanan yaklaşık enerji değeri, gerçek enerji değerine eşit veya gerçek enerji değerinden daha büyüktür. HF hesaplamalarında ikinci yaklaştırma, dalga fonksiyonun, tek elektronlu sistemler için hesaplanmış fonksiyonlarla, tanımlanma zorunluluğudur.

En sık kullanılan fonksiyonlar, Slater tipi orbitaller veya Gaussian tipi orbitallerin lineer kombinasyonudur (doğrusal toplamı). Dalga fonksiyonu, atomik orbitallerin lineer kombinasyonlarından (doğrusal toplamı) veya daha sık olarak kullanılan temel

fonksiyonların lineer kombinasyonlarından (doğrusal toplamı) oluşturulmuştur. Bu yaklaşımlar nedeniyle çoğu HF hesaplamaları HF limitinden daha büyük bir enerji değeri verir. *Ab initio* hesaplamalarında kullanılan temel fonksiyonlar STO-3G veya 6-31G** gibi kısaltmalarla gösterilir.

Birçok *ab initio* hesaplamaları, HF hesaplamalarıyla başlar, daha sonra korelasyon olarak adlandırılan elektron-elektron itmesini hesaba katan düzeltmelerle devam eder. Bu korelasyon metodlarının bazıları, Møller-Plesset Pertürbasyon Teori (MPn, n burada düzeltme derecesidir), Genelleştirilmiş Valans Bağ (GVB) metodu, Coupled Cluster Teorisi (CC) dir. Bu metodların hepsi düzeltme hesaplarını içerir.

Yarı deneysel ve *ab initio* yöntemler, hesaplama süresi ve sonucun kesinliği ölçütleri ile birbirlerinden farklıdır. Yarı-deneysel hesaplar göreceli olarak daha ucuzdur ve iyi parametre kümelerinin olduğu sistemler için yeterli yaklaşıklıkla enerji değerini hesaplarlar. *Ab initio* hesaplamalar ise birçok sistem için yüksek kalitede sayısal sonuçlar sağlar (Yenikaya vd., 2005).

Bir moleküler sistemin durumu zamandan bağımsız Schrödinger eşitliği ile verilebilir. Üç boyutlu uzayda, $V(x,y,z)$ potansiyel alanı içinde hareket eden m kütleli bir tanecik için zamandan bağımsız Schrödinger eşitliği şu şekilde yazılabilir.

$$\left\{ \frac{-\hbar^2}{8\pi^2 m} \nabla^2 + V(x,y,z) \right\} \Psi(x,y,z) = E \Psi(x,y,z) \quad (2.3.1)$$

Burada ∇^2 Laplace işlemcisidir ve üç boyutlu uzayda,

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (2.3.2)$$

şeklinde tanımlanır.

Bu eşitlikte Ψ taneciğin dalga fonksiyonu, m taneciğin kütlesi, $\hbar$ Planck sabiti ve V taneciğin hareket ettiği potansiyel alandır. $|\Psi|^2$ tanecikler için olası yoğunluk olarak

tanımlanır. Bu nedenle ψ 'nin normalize olması gerekir. Eğer tüm uzayda integre edilecek olursa, olasılık tanecik sayısını verir.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 d\tau = n \quad (2.3.3)$$

Molekül gibi tanecik topluluğu Schrödinger eşitliğinden pek farklı değildir. Moleküler bir sistem için Ψ , molekül içindeki elektron (F) ve çekirdeğin konumlarının bir fonksiyonudur. Bu semboller, her bir taneciğin konumunu tanımlayan bileşen vektörler setinin kısaltmalarıdır. Hamiltonian, kinetik enerji işlemcisi ve potansiyel enerji işlemcisinin toplamıdır.

$$H = T + V \quad (2.3.4)$$

Kinetik enerji işlemcisi, moleküldeki tüm tanecikler için,

$$T = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2} \sum_k \frac{1}{m_k} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad (2.3.5)$$

şeklinde ifade edilir. Potansiyel enerji hileşeni. yüklü niceliklerin her bir çifti arasındaki Coulomb itmesidir.

$$V = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_j \sum_{k < j} \frac{e_j e_k}{\Delta r_{jk}} \quad (2.3.6)$$

Burada Δ_{ijk} iki tanecik arasındaki uzaklıktır, e_j ve e_k , j ve k taneciklerinin yükleridir. Bir elektron için yük -e, bir çekirdek için yük Z_e dir. (Z atomun, atom numarasıdır.) Moleküldeki çekirdekler J,I ve elektronlar ij indeksleri ile gösterilirse potansiyel enerji aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$V = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[- \sum_i \sum_I \left(\frac{Z_I e^2}{\Delta r_{iI}} \right) + \sum_i \sum_{j < i} \left(\frac{e^2}{\Delta r_{ij}} \right) + \sum_I \sum_{J < I} \left(\frac{Z_I Z_J e^2}{\Delta r_{IJ}} \right) \right] \quad (2.3.7)$$

İlk terim elektron-çekirdek çekimi, ikincisi elektron-elektron itmesi ve üçüncüsü çekirdek-çekirdek itme terimidir.

2.3.2. Gaussian 03W programı

2.3.2.1. Gaussian 03W programı hakkında genel bilgi

Gaussian03W, GaussianXY serisinin sondan ikinci versiyonudur. (XY, programın oluşturulma tarihidir). Programın önceki versiyonları sadece büyük moleküller için kullanılırken, sonraları küçük sistemler üzerinde çalışan araştırmacıların da dikkatini çekmiş ve günümüzde tüm sistemler için yaygın olarak kullanılan bir paket program haline gelmiştir.

Gaussian03W programı içinde pek çok farklı model bulunmaktadır. Modeller, teori düzeyi veya metodu ile temel kümelerinin bir kombinasyonudur. Gaussian programı ile yapılan her hesaplama için model oluşturulurken, seçilen modelin incelenen moleküler sistemi iyi bir şekilde tanımlamasına dikkat edilmelidir. Gaussian03W paket programı moleküler geometri, kuvvet alanları gibi değerleri hesaplama yöntemleri içermektedir. *Ab initio* metodlar dışında, programla deneysel ve yarı-deneysel hesaplamalar da yapılabilmektedir. Grafik açısından oldukça zayıf olan programın bu açığı GaussView ek programı ile kapatılmıştır.

Program kullanılırken, *ab initio* hesap yöntemi ile hesap yapılacaksa, öncelikle bir teori düzeyi belirlemek gerekmektedir (HF veya DFT gibi). Bir sonraki adım ise bir baz kümesi belirlemek olmalıdır (Foresman and Frisch, 1996).

2.3.2.2. Moleküler Geometrinin Programa Tanıtılması

Moleküler yapı hesaplarının çoğu Born-Oppenheimer yaklaşımı altında yapıldığından, öncelikle moleküler geometrinin tam olarak programa tanıtılması gerekir. Geometri tanıtımı Z- matriks yöntemiyle yapılmaktadır. Z-matriks yöntemi aslında geometriyi, bağ uzunlukları ve çeşitli bağ ve düzlem açıları (yani iç koordinatlar) cinsinden tanımlamadır.(Hinchliffe, 1997).

Z-matriks oluşturma tekniğini geometrisi en basit moleküllerden biri olan su molekülü üzerinde tartışalım. Su molekülünün Z-matriks tekniği ile bilgisayara tanıtılması aşağıda gösterildiği gibidir:

O
 H1 O ROH
 H2 O ROH H1 AÇI
 ROH 0,956
 AÇI 104,5

Öncelikle hangi atomla Z-matriks oluşturmaya başlanacağı tamamıyla serbesttir. Birinci satırdaki O, tanımlanan ilk atomun Oksijen olduğunu göstermektedir. Bir sonraki satır, H1'in (Hidrojen atomlarından birincisi) Oksijene ROH bağ uzunluğuyla bağlı olduğunu göstermektedir. Üçüncü satır, H2' nin (Hidrojen atomlarından ikincisi); Oksijen atomuna ROH bağ uzunluğu ile bağlı olduğunu ve H2OH1 açısının da AÇI değerinde olduğunu göstermektedir. Son iki satırda ise ROH ve AÇI'nın değerlerinin, neler olduğu belirtilmektedir.

Eğer çalışılan molekülün 3'ten fazla atomu bulunuyorsa, Z-matriksinin ek satırlara ihtiyacı olacaktır:

E N1 U N2 A N3 D

genel formatında olacak bu satırlarda E; yeni tanımlanacak atomun sembolünü, N1; daha önce tanımlanmış bir atomu, U; ikisi arasındaki bağın uzunluğunu, N2 ve N3; tanımlı başka atomları, A; E, N1 ve N2 arasındaki açıyı, D; EN1N2 ve N1N2N3 düzlemleri arasındaki dihedral açıyı tanımlamaktadır.

2.3.2.3. Temel Setler

Moleküler orbitallerin yaklaşık olarak oluşturulabilmesi için moleküldeki her atoma bir grup temel fonksiyonu karşılık getirilerek temel kümeleri oluşturulur.

Teorik bir hesaplama, bir teorik model ve bir temel set kombinasyonundan oluşur. Kullanılan her bir model ve temel set çifti Schrödinger eşitliğine farklı bir yaklaşımı temsil eder. (Foresman and Frisch, 1996).

Elektronik yapı hesaplamalarında temel setler bir moleküldeki moleküler orbitalleri oluşturmak için gaussian fonksiyonlarının lineer kombinasyonlarını kullanır.

Gaussian programı, içerdikleri fonksiyonların tipi ve sayısına göre sınıflandırılabilen temel setlerin geniş bir yelpazesini sunar. Temel setler, bir molekül içindeki her bir atom için bir grup temel fonksiyonu tanımlar. Bu temel fonksiyonlar, gaussian fonksiyonlarının lineer kombinasyonundan oluşmuşlardır ve sıkıştırılmış (contracted) fonksiyonlar, bileşen gaussian fonksiyonları ise ilkel (primitiv) fonksiyonlar olarak adlandırılır.

2.3.2.4. Minimal temel setler

Her bir atomik orbital için gerekli olan temel fonksiyon tanedir. Minimal temel setler sabit büyüklükte atomik tipi orbitaller kullanır. STO-3G temel seti minimal bir temel settir. Temel fonksiyon başına üç gaussian primitif fonksiyonu kullanır. Onun için adında "3G" bulunur. "STO" ise slater tipi orbital demektir. STO-3G temel seti her bir slater orbitalinin 3 gaussian fonksiyonunun lineer kombinasyonundan oluştuğunu belirtir. Slater tipi orbitaller moleküler orbital hesaplamalarında kullanmak için matematiksel olarak uygun olmadıklarından daha fazla sayıda fonksiyon gerektirse de gaussian tipi fonksiyonlar tercih edilir. Minimal temel setlerin pek çok eksiklikleri vardır. Minimal temel setlerin kullanımı özellikle oksijen ve flor gibi periyodun sonundaki atomları içeren bileşikler için problemler yaratır. Böyle atomlar daha çok elektron taşıdıkları halde periyodun başlarındaki atomlarla aynı sayıda temel fonksiyonları ile tanımlanırlar. Minimal temel setlerin diğer bir dezavantajı da elektron dağılımının küresel olmayan yönlerini tanımlayamamasıdır. Minimal bir temel sette karbon gibi ikinci sıra bir element için 2px, 2py ve 2pz fonksiyonlarının eşdeğer olması zorunludur. Fakat pek çok bileşik için bu doğru değildir. Minimal bir temel settaki fonksiyonlarını sayısının iki katı alan bir temel set double zeta temel set olarak tanımlanır. Basit gaussian fonksiyonlarının genel formu:

$$\theta_{ijk}(r_1 - r_c) = (x_1 - x_c)^i (y_1 - y_c)^j (z_1 - z_c)^k e^{-\alpha(r_1 - r_c)} \quad (2.3.8)$$

şeklindedir. Burada, i, j, k birer pozitif tamsayı ve α pozitif bir katsayıdır. (xc, yc, zc) kullanılan koordinat sisteminin merkezinin koordinatlarıdır ve (x1, y1, z1) ise elektronun kartezyen koordinatlarıdır.

Eğer $i+j+k = 0$ ise kullanılan gaussian fonksiyonu s-tipi, $i+j+k = 1$ ise p-tipi, $i+j+k = 2$ ise d-tipi ve $i+j+k = 3$ ise f-tipi olarak adlandırılır. (Foresman and Frisch, 1996).

2.3.2.5. Split valance temel setler

Çift zeta temel yaklaşımına bir alternatif, iç kabuk orbitallerini tek bir fonksiyon ile valans orbitallerini ise fonksiyon sayısının iki katı ile tanımlamaktır. Bu yaklaşımın temel mantığı, iç orbitallerin bir molekülden diğerine pek az değişmesi ve kimyasal özelliklere etki etmemesidir. Böyle temel setlere split valance double zeta temel setler (3-21G ve 6-31G gibi) denir. Örneğin 3-21G temel seti, iç kabuk orbitallerinin üç ilkel gaussian fonksiyonunun kombinasyonundan oluştuğunu, valans orbitallerinin her biri için iki temel fonksiyonunun ve bu temel fonksiyonlarından birinin 2 diğerinin 1 ilkel gaussian fonksiyonundan oluştuğunu ifade eder. Benzer şekilde triple split valance temel setler (6-311G gibi) de valans orbitallerinin her biri için üç temel fonksiyonun tanımlandığını ifade eder. Böyle temel setler elektron korelasyon metotlarında, elektronlar arasındaki etkileşimlerin tanımlanmasında yararlıdır. Bu temel setlere Hartree-Fock hesaplamalarında genellikle gerek duyulmaz. Bazı büyük temel setler de atomların periyodik tabloda bulundukları yerlere bağlı olarak farklı polarizasyon fonksiyonları kullanır. Örneğin 6-311G (3df, 2df, p) temel seti, periyodik tabloda ikinci ve daha yüksek sıradaki ağır atomlara 3d fonksiyonu ve 1f fonksiyonu, ilk sıradaki ağır

atomlara 1f ve 2d fonksiyonları, hidrojen atomlarına ise 1p fonksiyonu ekler (periyodik tablonun sıralarını numaralarken, kuantüm kimyacılar H ve He atomlarını göz ardı ederler). (Foresman and Frisch, 1996).

2.3.2.6. Polarize temel setler

Polarizasyon fonksiyonları baz kümelerine katılarak molekül orbitalleri, atom orbitallerinin melezleşmesinden elde edilen melez orbitallerden oluşturulabilir. Polarizasyon fonksiyonları, karbon atomları için "d", hidrojen atomları için "p" ve geçiş metalleri için "f" isimlerini alırlar. Örnek olarak 6-31G(d) ve 6-31G(d, p) temel kümelerini gösterebiliriz. Bu temel set ağır atomlara "d" fonksiyonlarını hidrojen atomlarına "p" fonksiyonlarını ekler. Çoklu polarizasyon fonksiyonları içeren temel

setler (High annular momentum temel setler) de vardır. Örneğin 6-31G(2d) temel seti her bir ağır atom başına bir yerine iki "d" fonksiyonu ekler. 6-311++G(3df, 3pd) temel seti valans bölge fonksiyonlarının üç setini, hidrojen ve ağır atomlar üzerine diffuse fonksiyonlarını ve çoklu polarizasyon fonksiyonlarını (ağır atomlara 3d, 1f fonksiyonu ve hidrojen atomlarına 1d, 3p fonksiyonu) ekler.

2.3.2.7. Diffuse fonksiyonlar

6-31+G(d) temel seti, 6-31G(d) temel setinin ağır atomlarına diffuse fonksiyonların eklenmiş halidir. 6-31++G(d) ise hidrojen atomlarına da diffuse fonksiyonların eklendiğini gösterir. Hidrojen atomlarına diffuse fonksiyonların eklenmesi sonuçlarda önemli bir fark oluşturmaz.

Farklı temel fonksiyonların kullanılması ile farklı enerji değerlerinin bulunacağı açıktır. Örneğin bir minimal temel seti kullanılarak E_1 toplam elektronik enerji olsun. Eğer çift zeta temel seti ile SCF (Self Consistent Field) hesaplaması tekrarlanırsa bulunan E_2 enerjisi, E_1 den daha düşük olacaktır. Çift-zeta temel setine polarizasyon fonksiyonları eklenerek SCF (Self Consistent Field) tekrarlanırsa E_2 den daha düşük bir enerji bulunur. Bu enerji elde edilmiş şekilde temel setleri büyütür her defasında toplam elektronik enerji daha iyileştirilebilir. Temel fonksiyonları matematik tamlığa ulaşınca ardışık iki temel set için hesaplanan enerji değerleri birbirinin aynısı olur. Temel setin daha fazla iyileştirilmesi enerjiyi değiştirmez.

Moleküler bağa iştirak etmemiş elektron çiftleri içeren moleküller, anyonlar, uyarılmış seviyedeki sistemler gibi durumlarda diffuse fonksiyonların dahil edilmesi, yörüngelerin uzayda daha geniş bir bölge işgal etmelerini sağlar. Baz kümelerine "diffuse" fonksiyonların dahil edilmesi "+" veya "++" işaretleriyle temsil edilir. "+" işareti hidrojen atomu dışında kalan ağır atomlar için diffuse fonksiyonlarının kümeye dahil edildiğini, "++" işareti ise hem ağır atomlar için hem de hidrojen atomu için diffuse fonksiyonlarının kümeye dahil edildiğini gösterir. Örnek olarak 6-31+G ve 6-31++G temel kümelerini verebiliriz (Atkins and Friedman, 1997).

Atomik yörüngelerin oluşturulmasında hem diffuse hem de polarizasyon fonksiyonlarının yer alması istendiğinde çeşitlilik oldukça artar (6-31+G(d), 6-31++G(d, p) vb gibi).

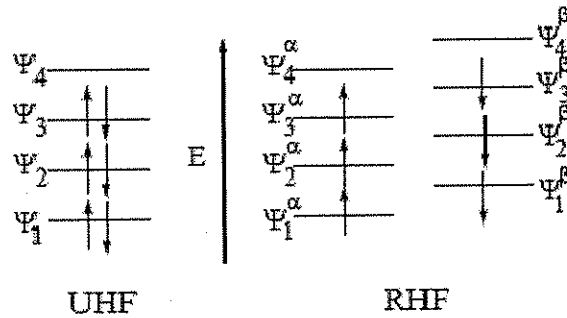
2.3.2.8. Açık ve kapalı kabuk seçimi

Gaussian03W hesaplamalarında teori düzeyi ve baz kümesi belirlendikten sonra, elektron spininin nasıl ele alınacağını gösteren closed/open shell modellerinden birisinin seçilmesi gerekmektedir. Bu iki seçenek sırasıyla, sınırlandırılmamış ve sınırlandırılmış hesaplamalar olarak da bilinirler. "Kapalı kabuk molekülleri" modelinde molekülün elektron sayısının çift olması ve bunların zıt spinli çiftler olarak bulunması koşulu söz konusudur. Elektron yerleşimi bu koşulla sınırlandırılmıştır.

Kapalı kabuk orbitalleri, tek bir sıkıştırılmış gaussian fonksiyonu ile temsil edilirken, açık kabuk orbitalleri iki sıkıştırılmış gaussian fonksiyonu ile temsil edilmektedir. Bu tip baz kümelerine 3-21G ve 6-31G baz kümelerini örnek verebiliriz.

Açık kabuk sistemleri için ise -örneğin, spin yukarıda ve spin aşağıda elektron sayılarının eşit olmadığı moleküllerde- sınırlandırılmamış model kullanılmalıdır. Sınırlandırılmış kapalı kabuk hesaplarında, her elektron çifti tek bir yörüngede yer almaya zorlanırlarken açık kabuk hesapları, spin yukarı ve spin aşağı (α ve β) durumundaki elektronlar için farklı yörüngeler kullanır. Sınırlandırılmamış hesaplar; uyarılmış seviyeler veya tek sayıda elektronu olan moleküller (örneğin iyonlar) için gereklidir.

Gaussian programında açık kabuk hesapları U anahtar sözcüğüyle ve kapalı kabuk hesapları da R anahtar sözcüğüyle belirlenir. Örneğin Hartree Fock teori düzeyi kullanılan bir hesapta UHF (Unrestricted Hartree Fock) veya RHF (Restricted Hartree Fock) anahtar sözcükleri kabuk seçimini belirler (Foresman and Frisch, 1996).



Açık kabuk ve kapalı kabuk modellerinde elektronların orbitallere yerleşimi üstte verilmiştir.

2.3.2.9. Teori düzeyi (yöntem)

Gaussian03W programında pek çok değişik teori düzeyi yer almaktadır. Bunlardan en çok kullanılanları kısaltmaları ile birlikte aşağıdaki gibidir:

Kısaltma	Metod
HF	Hartree-Fock Öz Uyumlu Alan Teorisi
DFT	Becke tipi 3-parametrelili Yoğunluk Fonksiyon Teorisi (Lee-Yang-Parr korelasyon modelini kullanır)
MP2	2.derece Moller-Plesset Pertürbasyon Teorisi
MP4	4.derece Moller-Plesset Pertürbasyon Teorisi
QCISD(T)	2.derece Konfigürasyon Etkileşmesi (tekli, ikili, üçlü)

2.3.2.10. Hartree-Fock teori

Ab initio yöntemlerinin ve yarı deneysel kuantüm mekaniksel yöntemlerin çoğunun başlangıç noktası Hartree-Fock teorisidir. Bazı geçiş yapılarının ve kararlı moleküllerin yapılarını ve titreşim frekanslarını hesaplamada oldukça iyidir.

Hartree-Fock teorisinin dayandığı yaklaşım, moleküldeki bir elektronun, diğer elektronların ve çekirdeklerin etkilerinden doğan enerjinin ortalaması kadar enerjili küresel bir alan içinde hareket ettiğidir. Bu yaklaşım kullanılarak Schrödinger denklemi sadece bu elektron ve ortalama potansiyel enerji için çözülür.

Hartree-Fock teorisinin en önemli problemi, moleküler bir sistem içindeki özellikle karşıt spinli elektronlar arasındaki korelasyonları tanımlamada yetersiz oluşudur. Elektron korelasyonu, elektronların birbiriyle etkileşmesinden gelen enerji katkıları olarak tanımlanır. HF dalga fonksiyonu, elektron korelasyonunu antisimetri nedeniyle kısmen göz önüne alır. SCF (self consistend field) metodunda elektronların, diğer elektronların ortalama bir potansiyeli içinde hareket ettiği kabul edilir ve bir elektronun anlık konumu bir komşu elektronun varlığından etkilenmez. Gerçekte HF enerjisi, en düşük enerji ya da en doğru enerji değildir. Sistemin non-rölativistik enerjisi

(deneysel enerji) ile HF enerjisi arasındaki fark korelasyon enerjisi olarak tanımlanır. Elektron korelasyonun ihmalı bu teoriyi bazı amaçlar için uygunsuz yapar. Örneğin, korelasyonun ihmal edildiği bir hesaplama, H₂ tamamıyla ayrılmış olsa da, H₂ molekülündeki elektronların her iki çekirdek etrafında eşit zaman geçirdiğini öngörür. Denge yapıları için HF geometrileri ve enerjileri genellikle deneysel sonuçlarla uyum içindedir. Dengedeki türlerle ilgilenildiğinde korelasyon etkileri çok önemli değildir. Fakat yine de kantitatif sonuçlar gerektiğinde elektron korelasyon etkilerini hesaba katmak gerekir. Elektron korelasyon metotları post-SCF (varyasyon teorisi) metotları olarak adlandırılır. Çünkü onlar, temel HF modeline korelasyon düzeltmeleri ekler.

Hartree-Fock yaklaşımı, N elektronun ortalama potansiyelinde elektronun enerji seviyeleri hesabıdır. Bu matematiksel olarak, elektronların dalga fonksiyonu, N elektronun tek elektron fonksiyonlarının çarpımı olarak alınmasıdır.

N elektronlu bir sistem için Hamiltonianın genel formu:

$$H = \left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla^2 - \frac{1}{r_{1A}} - \frac{1}{r_{1B}} \dots + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}} + \dots \right) \quad (2.3.9)$$

Burada elektronlar 1,2,3,..., çekirdekler A,B,C,... olarak işaretlenmiştir.

Enerji ifadesini, sistemin toplam elektronik enerjisine katkıda bulunan üç tip etkileşimin genel bir formu şeklinde yazmak daha uygun olacaktır. Bunlardan ilki, çekirdek alanında hareket eden her bir elektronun potansiyel enerjisi vardır. Enerjiye ikinci katkı, elektron çiftleri arasındaki elektrostatik itmelerden gelir. Bu etkileşimler, elektron-elektron arasındaki uzaklığa bağlıdır. Enerjiye üçüncü katkı ise değiş tokuş etkileşimidir.

Bir *ab initio* moleküler orbital hesaplamasına elektron korelasyon etkileri dahil edilebilir. Bunun pek çok yolu vardır. Bunlardan biri Møller-Plesset Pertürbasyon Teorisidir.

2.3.2.11. Møller -Plesset pertürbasyon teori

Møller ve Plesset, 1934 yılında elektron korelasyon probleminin çözümü için alternatif bir yol önermişlerdir. Møller-Plesset hesaplamaları oldukça uzun zaman aldığından kullanımı genellikle daha düşük teori kullanılarak elde edilen bir geometri ile 'single-point' hesaplamalarla sınırlandırılır. Møller-Plesset hesaplamaları, moleküler kuantüm mekaniksel hesaplamalarına elektron korelasyonunu dahil etmenin en popüler yoludur (özellikle de MP2 düzeyi). Bir Møller-Plesset hesaplaması temel set ve teori düzeyi kullanılarak sınıflandırılır (MP2, MP3 gibi). Böylece MP2/6-31G*, 6-31 G* basis seti ile bir ikinci derece Møller-Plesset hesaplamasını belirtir. Bu metot, Rayleigh - Schrödinger pertürbasyon teori üzerine dayanır. Pertürbasyon teoriye göre bir sistemin hamiltonianı H için Schrödinger eşitliğinin çözümü yapılamıyorsa bu hamiltonian, çözümü bilinen bir H_0 hamiltonianı ile bir V pertürbasyon teriminin toplamı olarak yazılarak yaklaşık bir çözüm bulunabilir.

Gerçek problemin hamiltonian'ı

$$H = H_0 + \lambda V \quad (2.3.10)$$

şeklinde bir λ reel parametresine bağlı olarak yazılır (bu λ , parametresi seri açılımı kolaylaştırmak içindir, işlemler sonunda $\lambda=1$ alınır). H hamiltonianının özdeğer ve özfonksiyonları bu λ parametresine bağlı bir seri olarak yazılır.

$$\begin{aligned} \psi &= \psi^{(0)} + \lambda \psi^{(1)} + \lambda^2 \psi^{(2)} + \lambda^3 \psi^{(3)} + \dots \\ E &= E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \lambda^2 E^{(2)} + \lambda^3 E^{(3)} + \dots \end{aligned} \quad (2.3.11)$$

Pertürbe olmuş dalga fonksiyonu ve enerji Schrödinger eşitliğinde yerine konur.

$$(H_0 + \lambda V)(\psi^{(0)} + \lambda \psi^{(1)} + \dots) = (E^{(0)} + \lambda E^{(1)} + \dots)(\psi^{(0)} + \lambda \psi^{(1)} + \dots) \quad (2.3.12)$$

λ 'nın her bir kuvveti için denklemin her iki yanı eşitlenirse λ 'nın 0,1,2 kuvvetlerine göre

eşitliklerin ilk üçü aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\begin{aligned}
(H_0 - E^{(0)})\psi^{(0)} &= 0 \\
(H_0 - E^{(0)})\psi^{(1)} &= (E^{(1)} - V)\psi^{(0)} \\
(H_0 - E^{(0)})\psi^{(2)} &= (E^{(1)} - V)\psi^{(1)} + E^{(2)}\psi^{(0)}
\end{aligned}
\tag{2.3.13}$$

Møller–Plesset pertürbasyon teoriye göre H_0 tek-elektron Fock operatörlerinin toplamı olarak tanımlanır.

$$H_0 = \sum_i F_i \tag{2.3.14}$$

F_i , i inci elektron üzerine etkiyen Fock operatörüdür. Hartree-Fock determinanı ve süstitüye determinantların tümü H_0 ın özfonksiyonudur.

Pay ve payda daima pozitifdir. Çünkü $E^{(0)}$ pertürbe olmayan sistemin en düşük enerji özdeğeridir. Buna ek olarak pay sadece ikili yerdeğıştirmeler için sıfır olmayacaktır. Tek permütasyonlar bu ifadeyi sıfır yapar. Üçlü ve daha yüksek süstitüsyonlar, hamiltonian sadece tek ve iki elektron terimlerini içerdğinden sıfır değerini alır. Böylece $E(2)$ nin değeri yani HF enerjisine ilk pertürbasyon, daima negatif olacaktır. Benzer şekilde üçüncü ve dördüncü derece korelasyon türetilebilir. Üçüncü ve dördüncü (MP3 ve MP4) Møller–Plesset hesaplamaları pek çok ab initio paket programlarında standart seçenekler olarak elde edilebilir. Bununla birlikte Møller–Plesset pertürbasyon teori varyasyonel değildir ve bazen doğru enerjiden daha düşük enerjiler verebilir.

Yakın zamanda, elektronik yapı metodlarının bir üçüncü sınıfı çok yaygın olarak kullanıma girmiştir; Yoğunluk Fonksiyon Teorisi (Density Functional Theory, DFT). Bu metot ab initio metodlarla birçok yönden benzerlik gösterir. DFT hesapları, bir ab initio metot olan Hartree-Fock teorisi ile yaklaşık aynı miktarda hesaplama kaynakları gerektirir. (Foresman and Frisch, 1996).

2.3.2.12. Yoğunluk fonksiyon teorisi (Density Functional Theory)

Son yıllarda, yoğunluk fonksiyonel teori (Density Functional Theory, DFT) üzerine dayanan metotlar oldukça popüler olmuştur. En iyi DFT metotları, HF teoriden çok daha doğru sonuçlar verir. Alışılmış korelasyon yöntemlerinden daha az bilgisayar gücü gerektirir. Bu metod diğer *ab initio* yöntemlere kıyasla daha kısa sürede hesaplama yaptığından çok fazla atoma sahip sistemlerde yaygın olarak tercih edilmektedir (Foresman and Frisch, 1996).

DFT metodu çekicidir, çünkü modellerinde, elektron korelasyonunun bir moleküler sistemdeki elektronların birbirlerinin hareketlerine reaksiyon verme ve birbirlerinin yönünden uzak durma çabalarının olması etkilerini içerir. Hartree-Fock hesapları sadece ortalama olarak bu etkiyi ele alırken her elektron ortalama bir elektron yoğunluğunu görür ve reaksiyon verir. Elektron korelasyonunu da içeren metotlar, zıt spinli elektron çiftlerinin anlık etkileşimlerini hesaplar.

$$E(\rho) = E_{KE(\rho)} + E_V(\rho) + E_J(\rho) + E_{XC(\rho)} \quad (2.3.15)$$

Yoğunluk fonksiyonel teori, atom ve moleküllerin elektronik yapılarını belirlemek için yapılan bir yaklaşımdır. Bu yaklaşım 1964 yılında Hohenberg ve Kohn tarafından ileri sürülen bir teoriye dayanır. Bu teoriye göre bir sistemin temel halinin tüm özellikleri yük yoğunluğunun fonksiyonlarıdır. Böylece Hohenberg- Kohn teoremi toplam elektronik enerjiyi, elektron yoğunluğunun (ρ) bir fonksiyonu olarak yazma imkanı verir. $E_{KE(\rho)}$ kinetik enerji terimi (elektron hareketlerinden doğan), $E_V(\rho)$ çekirdek çiftleri arasında itme ve çekirdek- elektron arasındaki çekmenin potansiyel enerjisini tanımlayan terimler içerir. $E_J(\rho)$ elektron-elektron itme terimidir ve elektron yoğunluğunun karşılıklı Coulomb etkileşimleri olarak tanımlanır. $E_{XC(\rho)}$ ise elektronelektron etkileşimlerinin geriye kalan kısmını içerir, ve değiş tokuş-korelasyon terimidir.

Çekirdek – çekirdek itmesi hariç tüm terimler elektron yoğunluğunun, ρ , bir fonksiyonudur. $EJ(\rho)$ ve $Exc(\rho)$ terimleri tüm elektron-elektron etkileşimlerini içine alır. Enerjiye katkı yapan bu bileşenler yoğunluğa bağlı olarak yazılmalıdır.

$$E_{(p)} = 2 \sum_i \int \psi_i \left(\frac{\nabla^2}{2} \right) \psi_i d\tau + \int V_{\text{çekirdek}} \rho(r) d\tau + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(r) \rho(r')}{|r-r'|} d\tau d\tau' + E_{xc}[\rho(r)] \quad (2.3.16)$$

$Exc(\rho)$ terimi değiş-tokuş ve korelasyon olmak üzere iki bileşene ayrılır.

$$E_{xc(\rho)} = E_{x(\rho)} + E_{c(\rho)} = \int \rho(r) \varepsilon_x[\rho(r)] dr + \rho(r) \varepsilon_c[\rho(r)] dr \quad (2.60)$$

Burada ε_x ve ε_c tanecik başına düşen enerjidir. Potansiyel enerji, enerjinin yoğunluğa göre türevi olarak verilir.

$$V_{xc(r)} = \frac{\partial E_{xc}[\rho]}{\partial \rho(r)} = \varepsilon_{xc}[\rho(r)] + \rho(r) \frac{\partial \varepsilon_{xc}(r)}{\partial \rho} \quad (2.3.17)$$

Daha önce de bahsedildiği gibi paralel spinli elektronlar arasındaki korelasyon, zıt spinli elektronlar arasındakinden farklıdır. Değiş-tokuş enerjisi α ve β spin yoğunluklarından gelen katkıların toplamı olarak verilir.

$$\begin{aligned} E_x[\rho] &= E_x^\alpha[\rho_\alpha] + E_x^\beta[\rho_\beta] \\ E_c[\rho] &= E_c^{\alpha\alpha}[\rho_\alpha] + E_c^{\beta\beta}[\rho_\beta] + E_c^{\alpha\beta}[\rho_\beta, \rho_\alpha] \end{aligned} \quad (2.3.18)$$

Toplam yoğunluk α ve β katkılarının toplamıdır, $\rho = \rho_\alpha + \rho_\beta$. Kapalı kabuk sistemlerde $\rho_\alpha = \rho_\beta$ dir. Değiş - tokuş ve korelasyon enerjilerinin fonksiyonelleri spin yoğunlukları ile ifade edilir. Bununla birlikte sık sık yoğunluk yerine spin polarizasyonu (ζ) fonksiyonu olarak verilir.

$$\zeta = \frac{\rho_\alpha - \rho_\beta}{\rho_\alpha + \rho_\beta}, \quad \frac{4}{3} \pi r_s^3 = \rho^{-1} \quad (2.3.19)$$

Burada r_s bir elektron içeren etkin hacmin yarıçapıdır.

Değiş - tokuş ve korelasyon enerjileri farklı iki yaklaşım ile tanımlanabilir. Bunlardan biri uniform elektron gazı olarak adlandırılan bir modele dayalı yoğunluk yaklaşımıdır. Uniform elektron gazında, elektron yoğunluğu sabittir. Lokal yoğunluk yaklaşımı (Local Density Approximation, LDA) yük yoğunluğunun bir molekül üzerinde çok yavaş değiştiğini varsayar. Öyle ki; molekülün lokalize bir bölümü uniform elektron gazı gibi davranır. Uniform elektron gazı için değiş-tokuş enerjisi aşağıdaki eşitlik ile verilir.

$$E_x^{LDA}[\rho] = -C_x \int \rho^{4/3}(r) dr$$

$$C_x = -\frac{3}{2} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{1/3} \quad (2.3.20)$$

Burada ρ , r nin bir fonksiyonudur, α ve β yoğunluklarının eşit olmadığı durumlar için LDA yerini lokal spin yoğunluk yaklaşımı (Local Spin Density Approximation, LSDA) kullanılır.

$$E_x^{LSDA}[\rho] = -2^{1/2} C_x \int [\rho_\alpha^{4/3} + \rho_\beta^{4/3}] dr \quad (2.3.21)$$

Genellikle LSDA metotları ile HF metodu ile elde edilen sonuçlarla aynı doğrulukta sonuçlar elde edilir. LSDA yaklaşımı üzerine yapılacak iyileştirmeler, bir uniform olmayan elektron gazını hesaba katmayı gerektirir. Bu yönde atılacak ilk adım, değiş-tokuş ve korelasyon enerjilerinin yalnızca elektron yoğunluğuna değil aynı zamanda yoğunluğun türevlerine de bağlı olarak ifade etmektir. Böyle metotlar Gradient Corrected Approximation (GA) olarak adlandırılır. Becke 1988 de LDA değiş-

tokuş fonksiyonellerine bağlı olarak aşağıdaki gradient corrected değiş- tokuş fonksiyonellerini türetmiştir.

$$E_{Becke}^{\chi} = E_{LDA}^{\chi} - \gamma \int \frac{\rho^{4/3} \chi^2}{(1 + 6\gamma \sin^{-1} \chi)} dr \quad (2.3.22)$$

Burada χ boyutsuz gradient değişimidir ve $\chi = \rho^{-4/3} |V\rho|$ dur. γ ise inert gaz atomlarının bilinen değiş-tokuş enerjilerine uyum sağlamak için seçilmiş bir parametredir. Becke onun değerini 0.0042 Hartree olarak tanımlar. Bu şekilde LDA fonksiyonellerinin eksikliklerinin pek çoğu giderilmiş olur.

Korelasyon enerjisi için önerilen, gradient corrected fonksiyonelleri de vardır. Buna örnek olarak Lee, Yang ve Parr (LYP) fonksiyoneli verilebilir.

$$\varepsilon_c^{LYP} = -\alpha \frac{\gamma}{(1 + d\rho^{-1/3})} - ab \frac{\gamma e^{-c\rho^{-1/3}}}{9(1 + d\rho^{-1/3})\rho^{8/3}} \quad (2.67)$$

$$X \left[\frac{18(2^{2/3})C_F(\rho_\alpha^{2/3} + \rho_\beta^{2/3}) - 18\rho t_w}{+ \rho_\alpha(2r_\alpha^\alpha + \nabla^2 \rho_\alpha) + \rho_\beta(2r_\beta^\beta + \nabla^2 \rho_\beta)} \right]$$

$$\gamma = 2 \left[1 - \frac{\rho_\alpha^2 + \rho_\beta^2}{\rho^2} \right] \quad (2.3.23)$$

$$t_w^\alpha = \frac{1}{8} \left(\frac{|\nabla \rho_\alpha|^2}{\rho_\alpha} - \nabla^2 \rho_\alpha \right)$$

Burada a, b, c ve d parametreleri helyum atomunun verilerine uyum sağlamak için seçilmiştir. t_w fonksiyoneli lokal Weizsacker kinetik enerji yoğunluğu olarak bilinir. Tüm spinler aynı yönlü olduğunda ($\rho = \rho_\alpha$, $\rho_\beta = 0^{3/8}$) γ faktörü sıfır olur. Böyle bir durumda LYP fonksiyoneli her paralel spin korelasyonunu öngörmez. Örneğin helyumda LYP korelasyon enerjisi sıfırdır. Becke ve LYP fonksiyonellerinin kombinasyonu BLYP metodunu oluşturur. Bir başka önemli gradient-corrected korelasyon fonksiyoneli de Perdew tarafından (Perdew86 ve Perdew-Wang 91 olarak bilinir)

türetilmiştir. Ayrıca, Hartree - Fock, lokal ve gradient – corrected, değiş-tokuş terimlerinin lineer kombinasyonu olarak tanımlanan hibrit fonksiyonelleri de vardır.

$$E_{hibrit}^{XC} = C_{HF} E_{HF}^X + C_{DFT} E_{DFT}^{XC} \quad (2.3.24)$$

Buradaki C ler sabittir. Bu hibrit fonksiyonellerinin en iyi bilinenlerinden bir tanesi üç-parametre formülasyonudur. (Örneğin; B3LYP, B3PW91) Becke tipi üç parametrelili hibrit fonksiyonelleri şimdiye kadar tanımlanan geleneksel fonksiyonellere göre en üstün olandır ve aşağıdaki gibi ifade edilir.

$$E_{B3LYP}^{XC} = E_{LDA}^X + C_0 (E_{HF}^X - E_{LDA}^X) + C_X \Delta E_{B88}^X + E_{VWN3}^C + C_C (E_{LYP}^C - E_{VWN3}^C) \quad (2.3.25)$$

Becke, B3LYP fonksiyonelindeki bu üç parametre değerlerini, atomizasyon enerjisi, iyonlaşma potansiyeli, proton ilgisi gibi deneysel enerjilere göre ayarlamış ve Co, Cx ve Cc değerlerini sırasıyla 0,2 , 0,72 ve 0,81 olarak belirlemiştir. Farklı fonksiyoneller bilinen fonksiyonellerin değişmesiyle ve bu üç parametrenin değerlerinin ayarlanmasıyla elde edilebilir (Jensen, 1999).

2.3.2.13. Periyodik tablonun üçüncü sıra atomlarından sonraki atomlar için taban kümeler

Periyodik tablonun üçüncü sırasından sonraki atomlar için taban kümeler oldukça farklıdır. Çok büyük çekirdeklerde çekirdeğe yakın elektronlara, yaklaşık olarak etkili çekirdek potansiyeli (ECPs) gibi muamele edilir. Bu muamele, bu atomlar için önemli olan bazı göreceli etkileri içerir. LANL2DZ taban kümesi bunların en iyi bilinenidir. LANL2DZ üçüncü sıra atomlarından sonraki atomlar için çekirdeğe yakın elektronları gösteren etkili çekirdek potansiyelini içeren bir double zeta taban kümesidir (Dimoglo ve Kandemirli, 2005).

2.3.3. Bazı Kuantum Kimyasal Tanımlar

Kuantum kimyasal metodlar ve moleküler modelleme teknikleri makalelerinde belirttiği gibi, reaktiviteyi karakterize eden lokal miktarları ve molekül şeklinin, molekül parçalarının ve süstitüentlerin bağlanma özelliklerinin tanımlanmasını sağlar. Birçok teorik çalışmada, çok iyi tanımlanmış fiziksel parametrelerin kodlanmış olması nedeniyle;

a) Bileşikler çeşitli parçaları ve süstitüentleriyle çok iyi karakterize edilebilir.

b) Çalışılan bileşiklerin kimyasal reaktiviteleri bakımından amaçlanan mekanizma direkt olarak hesaplanabilir.

Sonuç olarak QSAR (Nicel Yapı Etki İlişkileri) modelleri, bileşiklerin biyolojik yada diğer aktivitelerinin tayin edilmesine katılan intermoleküler güçlerin doğasıyla ilgili bilgiler içerecektir.

Kuantum kimyasal olarak türetilen tanımlar, temelde deneysel olarak ölçülen miktarlardan farklıdır. Bu hesaplamalarda istatistiksel hatalar yoktur, hesaplamayı kolaylaştırmak için gerekli olan varsayımlara dayalı hatalar vardır (Karelson, et al., 1996). Çok kullanılan bazı kuantum kimyasal tanımlar aşağıda verilmektedir;

2.3.3.1. Atomik yükler

Klasik kimyasal teoriye göre, elektrostatik (polar) veya orbital (kovalent) tüm kimyasal etkileşimlerdir. Moleküldeki elektriksel yükler kesinlikle elektrostatik etkileşimlerin sürücü gücüdür. Gerçekte, bileşiklerin fizikokimyasal yapıları ve birçok kimyasal reaksiyonda lokal elektron yoğunlukları ve yüklerin önemli olduğu kanıtlanmıştır. Böylece yüke bağlı tanımlar genel anlamda zayıf intermoleküler etkileşimlerin ölçümü olarak ya da kimyasal reaktivite indisleri olarak kullanılır. Birçok kuantum kimyasal tanımlar, bir molekülde kısmi yük dağılımını ya da belirli atomlardaki elektron yoğunluklarından türetilir.

Bir molekülde yük dağılımının hesaplanması için çoğu semi-empirik metod Mullikan popülasyon analizini kullanır. Dahası, semi-empirik metodlar oluşum ısısını, iyonizasyon potansiyelini ve moleküllerin geometrik karakteristiklerini üretmek için

parametrize edilmiştir. Bu nedenle, hesaplanan yükler az güvenilir olabilir. Bu nedenlerden dolayı, farklı semi-empirik metodlarla hesaplanmış yük değerleri bazen birbiriyle çok uyum içerisinde olmaz. Yinede, böyle birçok niceliğin elde edilmesi kolaydır ve yük dağılımının nicel bir analizini verir.

Atomik kısmi yükler, statik kimyasal reaktivite indisleri olarak kullanılır. Tek bir atomda hesaplanan σ ve π elektron yoğunlukları, kimyasal etkileşimlerin mümkün yönelmelerini de karakterize eder ve böylece sıklıkla reaktivite indisleri olarak dikkate alınır. Daha sonra atomdaki toplam elektron yoğunluğundan klasik valans kavramına göre, atoma bağlı valans elektronlarının sayıları çıkartılarak elde edilir. Böyle hesaplanan net atomik yükler, klasik nokta yük elektrostatik modeline göre etkileşimlerin karakterize edilmesi için uygundur. Çeşitli kısmi yüklerin değerleri katı çözücü arasındaki intermoleküler etkileşimleri tanımlamakta kullanılır. Diğer genel yük dayanaklı tanımlar en pozitif ve en negatif net yüklerdir. Atomik yükler ayrıca moleküllerin moleküler polarlıklarının tanımı için kullanılır.(Taşal, 2008)

2.3.3.2. Moleküler orbital enerjileri

Kuantum kimyasal tanımlarda Karelson ve diğerlerinin belirttiği gibi, HOMO ve LUMO enerjileri çok yaygındır. Bu da orbitallerin birçok kimyasal reaksiyonunun yönetilmesinde ve katıların elektronik band aralıklarının saptanmasında baskın rol oynadıklarını gösterir. Ayrıca birçok yük transfer komplekslerinin oluşumundan sorumludur. Kimyasal reaktivitenin, Frontier Moleküler Orbital Teorisine (FMO) göre geçiş durumunun oluşması, reaktif bölgelerin frontier orbitalleri (HOMO ve LUMO) arasındaki etkileşim nedeniyledir. Böylece, diğer orbitallerden farklı olarak frontier moleküler orbitallerin davranışları, kimyasal reaksiyonların doğasını yöneten genel prensiplere dayanır.

HOMO enerjisi direkt olarak iyonizasyon potansiyeliyle bağlantılıdır ve elektrofiller tarafından moleküle yapılan atağın hassaslığını karakterize eder. LUMO enerjisi, elektron affinitesi ile direkt bağlantılıdır ve nükleofiller tarafından moleküle yapılan atağın hassaslığını karakterize eder. HOMO ve LUMO enerjileri radikalik reaksiyonlarda da önemlidir. Yumuşak ve sert nükleofil ve elektrofil kavramı

HOMO/LUMO orbitallerinin relatif enerjileriyle bağlantılıdır. Sert nükleofiller düşük enerjili HOMO, yumuşak nükleofiller yüksek enerjili HOMO, Sert elektrofiller yüksek enerjili LUMO ve yumuşak elektrofiller düşük enerjili LUMO'ya sahiptir.

HOMO ve LUMO aralığı (enerjileri arasındaki fark) kararlılık dizinidir. Yüksek HOMO LUMO aralığı, kimyasal reaksiyonlarda molekülün reaktivlik bakımından yüksek kararlılığını belirtir. HOMO LUMO aralığı aynı zamanda molekülün en düşük uyarılma enerjisinin tahmini olarak kullanılır. Bu kavram yinede uyarılmış halde elektronik reorganizasyonu ihmal eder ve böylece kavramsal olarak doğru olmayan sonuçlara neden olabilir.

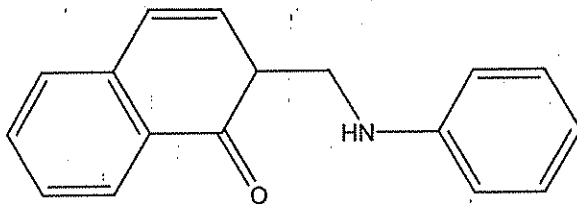
Aktivasyon sertlik kavramı da HOMO-LUMO enerji aralığı temelleriyle tanımlanabilir. Aktivasyon sertlik, molekülün farklı konumları arasındaki reaksiyon oranlarını ayırır ve böylece tahmini yönelme etkileri için ayırt edicidir. Sertliğin nitel tanımı, polarlanabilmeyle yakından ilgilidir, çünkü enerji aralığının düşüşü genellikle molekülün daha kolay polarlanabilmesine neden olur.

Yarı deneysel kuantum kimyasal yöntemi AM1, Hartree-Fock yöntemi 3-21G* temel setleriyle ve Yoğunluk Fonksiyonel Yöntem B3LYP/6-31G(d) temel setleriyle ürik asit molekülünün düzlemsel konformasyonel izomeri ile toplam 35 tautomeri çalışılmıştır. Hesaplanan sonuçlar 35 tautomer içinde trikarbonil tautomerlerin en kararlı, trihidroksi tautomerlerin en kararsız olduğunu göstermiştir. Bağ uzunlukları ve bağ popülasyon analizine göre, ortalama C-N bağ uzunluğu, tautomerler içerisinde hidroksi grupları sayısı arttıkça azalmış ve tüm tautomerler içerisinde ortalama C-C bağ uzunluğu hiçbir olağanüstü değişim göstermemiştir. (Chen, et al., 2002)

Li^+ , Na^+ , K^+ , Be^{2+} , Mg^{2+} ve Ca^{2+} metal katyon komplekslerinin geometrileriyle birlikte farklı olası 2,6 ditiyo pürin anyonları (DTP) incelenmiştir. Kompleksler B3LYP seviyesinde ve 6-311++G(d,p) temel setiyle optimize edilmiştir. Çeşitli olası 2,6-ditiyopürin anyonların farklı nükleofilik yerlerdeki metal katyonlarla etkileşimi kabul edilmiştir. Bu metal katyonları 2,6-ditiyopürin anyonlarıyla koordineli bir şekilde etkileşerek ortaya çıkmıştır. Gaz fazda Li^+ , K^+ , Na^+ katyonları ile N^3 ve S^2 arasında

etkileşim için en çok tercih edilen pozisyon iken bütün iki değerli katyonların Be^{2+} , Mg^{2+} ve Ca^{2+} benzer 2,6-ditiyopürinin N^7 ve S^6 yerleri arasında bağlanmayı tercih etmiştir. Farklı komplekslerin görelî(relative) stabilitesi üzerinde sulu çözücü etkisi Tomasi' nin polarize süreklilik modeli kullanılarak incelenmiştir. Kompleksler için bilgisayarlı olarak Temel set süper pozisyon hatası (BSSE) düzeltilmiş etkileşim enerjisiyle ayarlanmıştır. AIM teorisi, 2,6-ditiyopürin anyonları ile metal katyonları arasındaki koordinasyonda bağın kritik noktalarının (elektron yoğunlukları ve onların Laplacians) özelliklerine analiz uygulanmıştır. Komplekslerin görelî stabilitesi üzerinde önemli bir etkiye sahip olan sulu çözelti 2,6-ditiyopürin anyonlarıyla Mg^{2+} , Ca^{2+} katyonlarının etkileşimiyle ortaya çıkmıştır. 2,6-ditiyopürinin farklı NH ve CS uzanan titreşim modlarına metal katyonların etkisi tartışılmıştır. (Ni, et al., 2009)

2-((fenil imino)metil)naftalin-1-ol' ün katı hal tautomerizmi X-ray ölçümleri ve absorpsiyon spektroskopisi kullanılarak çalışılmıştır. Katı halde keto tautomer baskın çıkmıştır. Oluşan denge içinde sulandırılarak oluşan çözeltideki enolun, katı haldeki keto formuna dönüşümü boya agregat oluşumuyla kuantüm kimyasal hesaplamalar (HF/6-31G** temel seti) kullanılarak açıklanmıştır. (Nedeltcheva, et al., 2009)



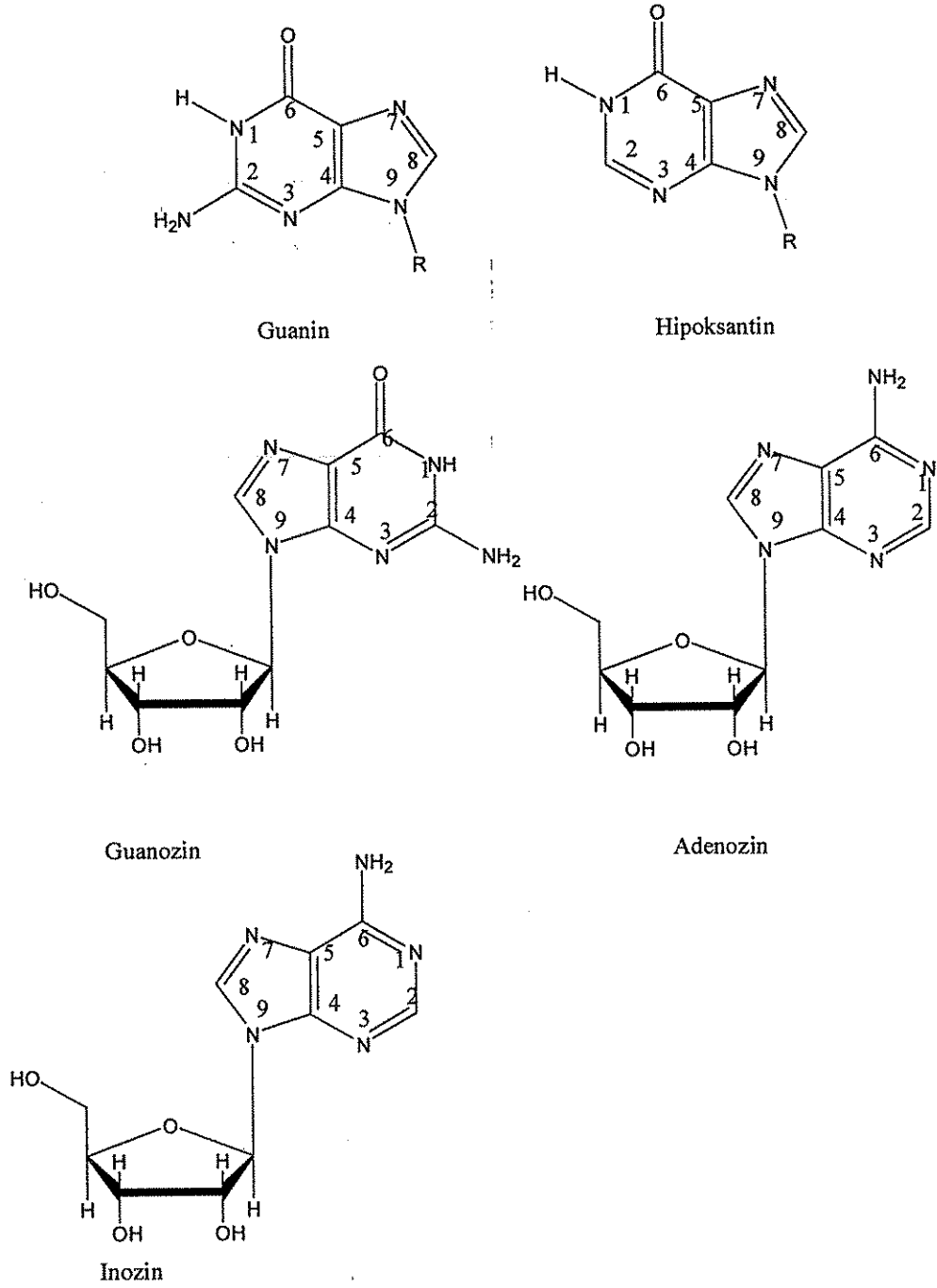
Şekil 2.3.1. 2-((fenilimino)metil)naftalin-1-ol

2.4. Baęlanma yeri

Adenozinin (1,1,7,7,pentametildien) Pd^{2+} metal iyonu ile yapmıř olduęu kompleksler incelenmiřtir. Bazık çözeltisinde N7, nötr çözeltisinde N1, asidik çözeltisinde N3 pozisyonlarından kompleks oluřturmuřtur. (Sigel, 1996).

İnozinin (1,1,7,7,pentametildien) Pd^{2+} metal iyonu ile yapmıř olduęu kompleksler incelenmiřtir. Bazık çözeltide N7, $Ph=5-6$ 'da N7 pozisyonundan N1'e göç olmuřtur. (Sigel, 1996).

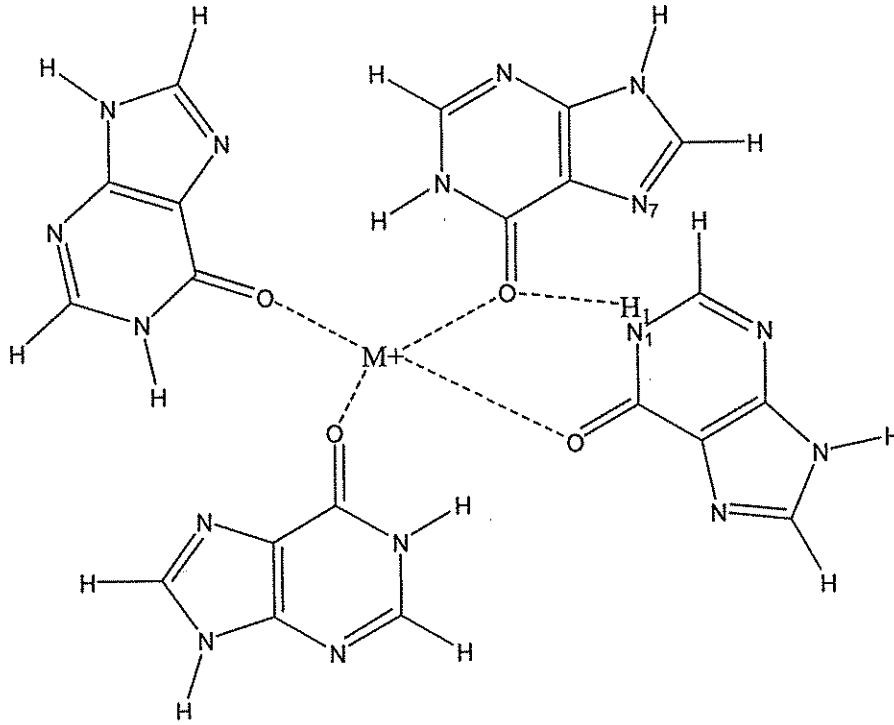
Guanozine CH_3Hg^+ , düşük pK_a 'da N7, $pK_a > 7$ 'de N1 pozisyonundan baęlanır. Nötr adenozine CH_3Hg^+ , N1 ve N7 pozisyonlarından baęlanır. (Sigel, 1996).



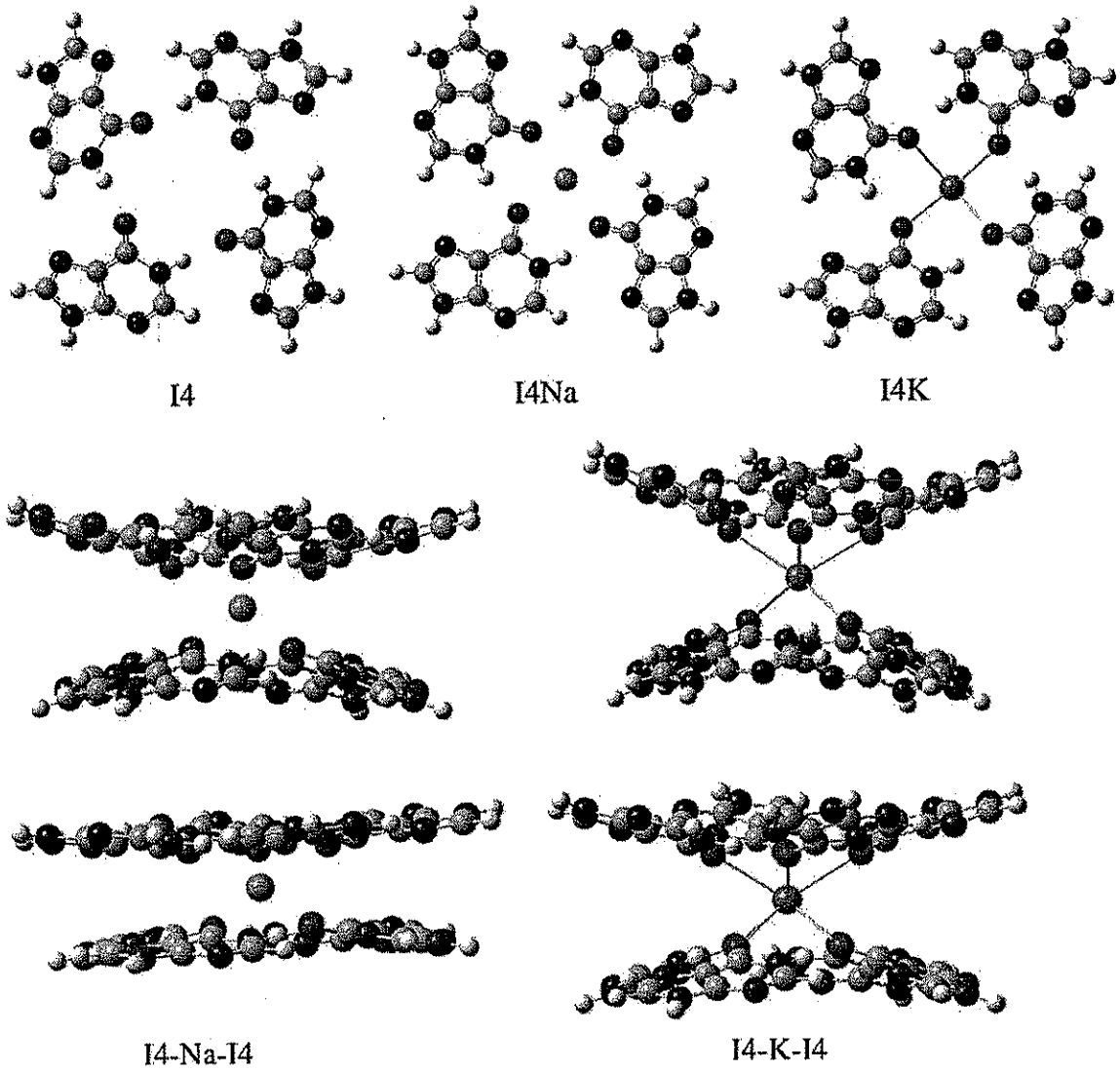
Şekil 2.3.2. Bazı nükleotidler ve bağlanma yerleri

Oktahedral Ru(III), Rh(III) ve Ir(III) 'un adenosin ve ksantosinle kompleksleri araştırılmıştır. Kompleksler element analizi, iletkenlik, IR datalarıyla karakterize edilmiştir. Pt(II) kompleksleri de dahil olmak üzere, N7 pozisyonundan bağlanmışlardır. (Khan, et al., 1978).

İnozini dörütlü ve sekizli alkali metal iyonlarıyla (K^+ ve Na^+) birleřtiren B3LYP yöntemi ve MPW1B95 yöntemiyle incelenmiřtir. Optimize edilmiř yapılar, görel i stabiliteleeri, tetradlar ve oktamerleerin düzeltilmiř baęlanma enerjileeri belirlenmiřtir. Tetradlar ve oktamerleer için gaz fazda $Na^+ > K^+$ stabilitesi varken, iki katyon kompleksleerin kararlılıęı, hidrasyon etkileeri de dahil olmak üzere benzer dönme göstermiřtir. Sonuçlar göstermiřtir ki, B3LYP yöntemi temel istifleme sistemi özellikle 14- Na -14 kompleksi için güvenilir sonuç alamamıřtır. (Meng and Zhao, 2008).



řekil 2.3.3. Katyon-I-tetrad kompleksinin atom sayıları ve yapısı



Şekil 2.3.4. İnozin tetradları ve oktamerlerin optimize edilmiş geometrileri (I4-Na-I4 ve I4-K-I4 yapıları B3LYP yöntemi ile optimize edilmiştir, Diğerleri de MPW1B95 yöntemiyle incelenmiştir)

Tetrad ve oktamerlere B3LYP yönteminden üç farklı temel set 6-31G(d), 6-31G(d,p), 6-311G(d,p) uygulanmıştır. Geometrik optimizasyon elde edilip, göreceli geometrik parametreler ve enerjiler hesaplanmıştır. Bu üç temel setlerin sonuçları birbirine benzer çıkmıştır. (Meng and Zhao, 2008).

3. MATERYAL VE METOD

3.1. CS ChemOffice, Gaussian 03W, Gauss View 3.0

Pürin katabolizmasındaki adenozin, guanozin, guanin, inozin, hipoksantin, ksantin ve ürik asit maddelerinin teorik hesaplanması için Intel (R) Core (TM) 2Duo CPU 4 GB RAM bilgisayar kullanılmıştır.

Bu çalışmada pürin katabolizmasındaki adenozin, guanozin, guanin, inozin, hipoksantin, ksantin ve ürik asit maddelerinin fiziksel özelliklerini hesaplamak için öncelikle her bir molekül CS ChemDraw programında çizilmiştir. Daha sonra Gaussian 03W paket programına verilerek önce MM2'de minimize edilmiş ve her bir molekül için en kararlı geometrik yapı bulunmuştur.

Gaussian 03W programı sayesinde atom ve moleküllerin enerjilerini, yapı parametrelerini, enerjiye bağlı titreşim frekanslarını, kuvvet sabitlerini, dipol momentlerini, termokimyasal özelliklerini, elektron ilgisi ve iyonlaşma enerjilerini hesaplayabiliriz. Bu özellikleri gaz fazında, çözelti içinde ve kristal yapılarında bulabiliriz.

Bu çalışma gaz, kan ($\epsilon=58$) ve sulu fazda ($\epsilon=78$) gerçekleşmiştir. GaussView, Gaussian 03W'e göndereceğimiz inputları hazırlamamıza yardımcı olan ve Gaussian outputlarını grafiksel olarak incelemek için tasarlanmış bir programdır. GaussView, Gaussian kullanıcılarına 3 ana fayda sağlar. Birincisi; molekülü gözümüzde canlandırmamızda yardımcı olur. GaussView, büyük molekülleri dahi hızlı bir şekilde tasarlamamızı sağlar, bu molekülleride basit mouse hareketleriyle; döndürme, çevirme ve yaklaştırma işlemlerini yapabiliriz. İkincisi; GaussView, Gaussian hesaplamalarının birçok tipinin kurulmasını kolaylaştırır. Optimizasyonlar, yapı geçişi hesaplamaları, periyodik sınır hesaplamaları ve daha başka ileri metodların kompleks inputlarını hazırlar. Son olarak; GaussView grafik tekniklerinin birçok çeşidini kullanan Gaussian sonuçlarını gözden geçirmemizi sağlar. Bu sonuçlar aşağıdaki gibi sıralanabilir.

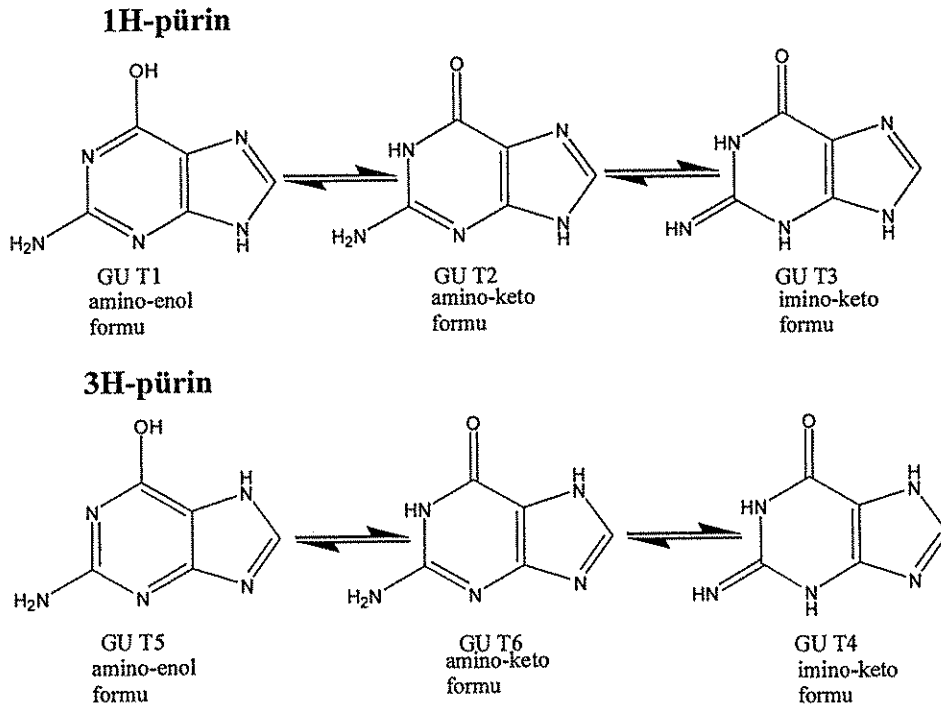
- Moleküller yapının optimize edilmesi.
- Moleküller orbitaller, atomik yükler.

- Elektrostatik potansiyel enerjisi.
- Titreşim frekanslarına karşılık gelen normal modların gösterimi
- IR, Raman, NMR ve diğer Spektrumlar [Eleen Frisch,2003].

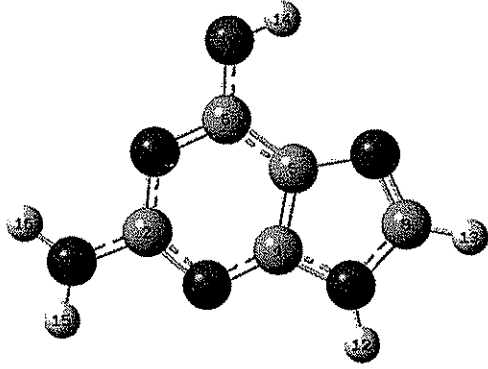
4. TARTIŞMA

4.1. Pürin Katabolizmasında incelenen maddeler

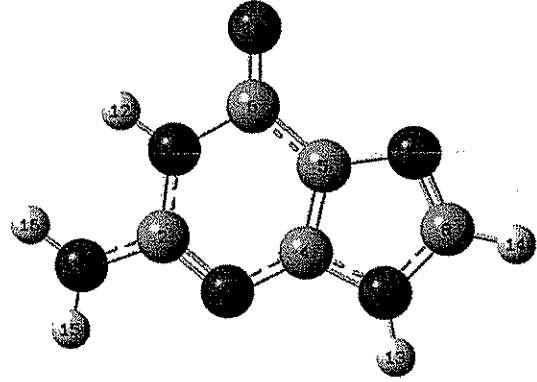
Hesaplamalar sonucunda guanin için elde edilen sonuçlar çizelge 4.1., çizelge 4.3, çizelge 4.4. de ve şekil 4.1.2 de verilmiştir. Buna göre sonuçlar aşağıdaki gibi yorumlanmıştır.



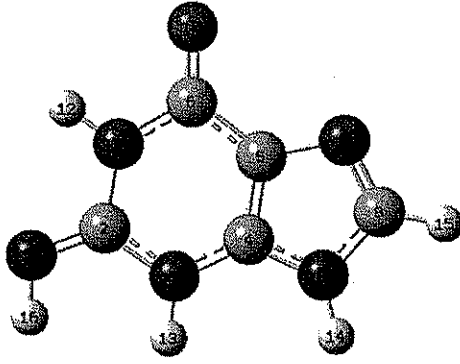
Şekil 4.1.1. Guanin Tautomer Yapıları



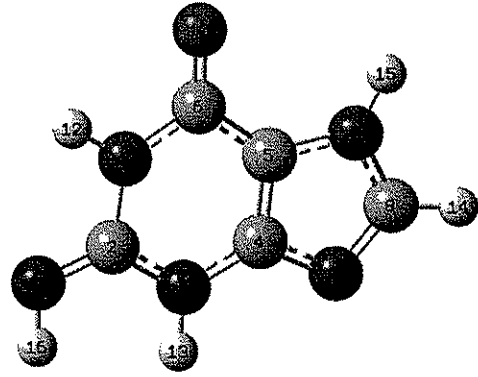
GUT1



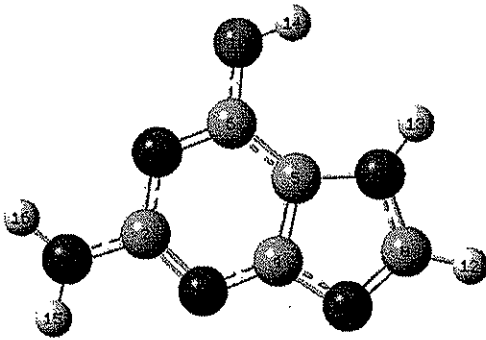
GUT2



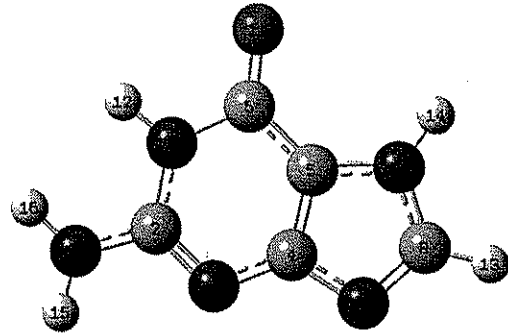
GUT3



GUT4



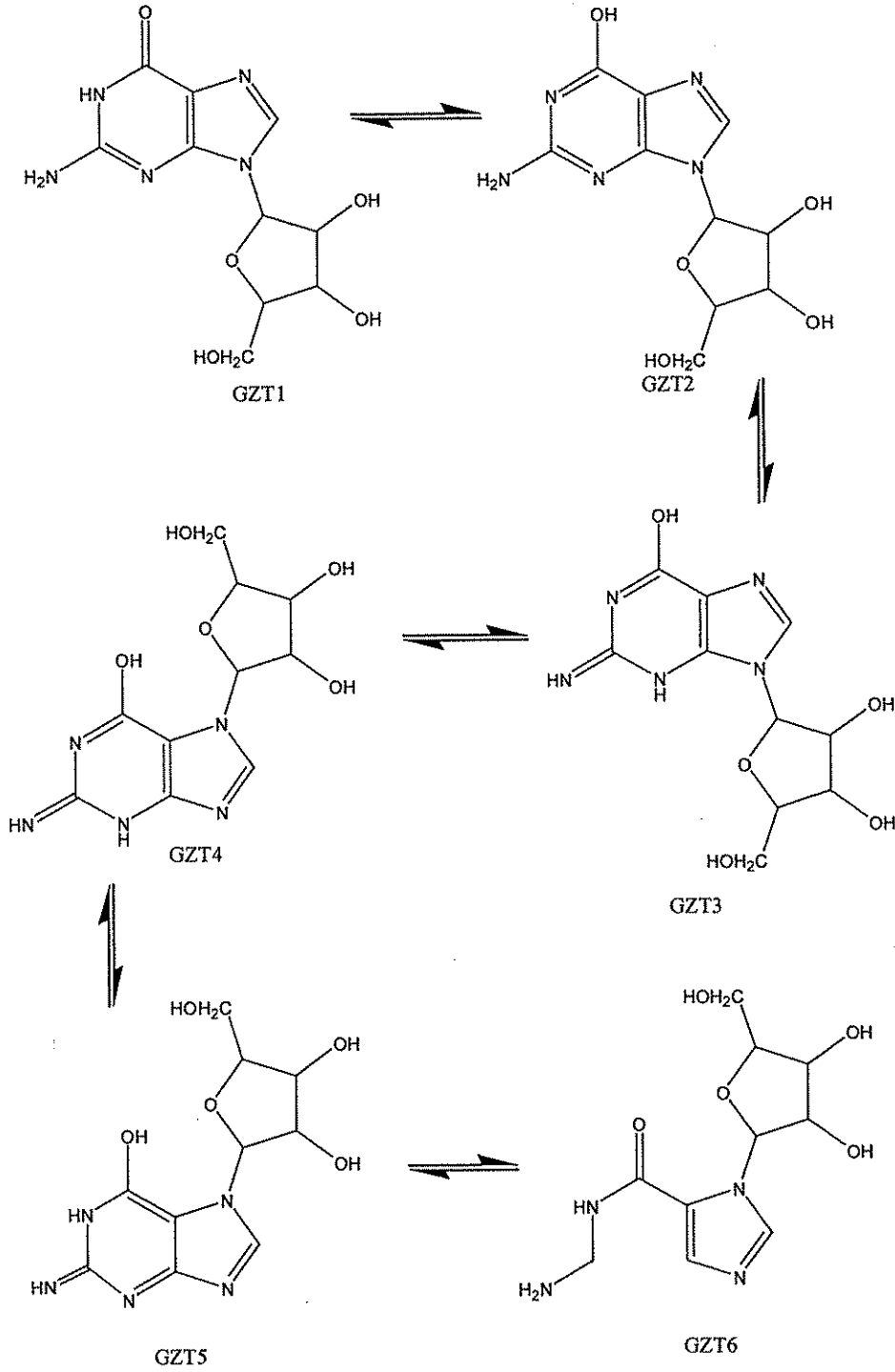
GUT5



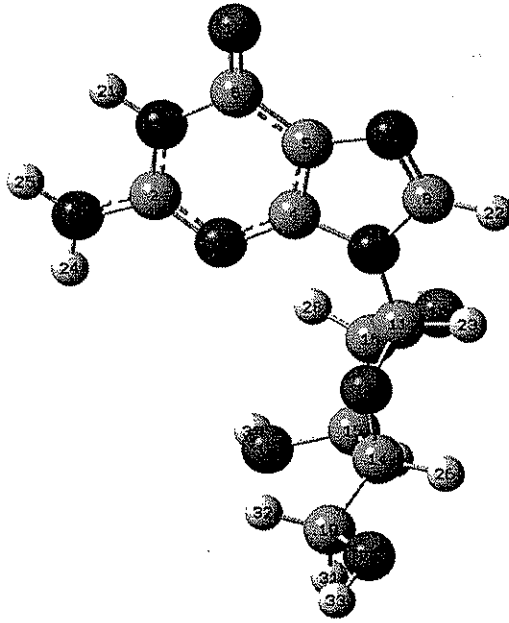
GUT6

Şekil 4.1.2. Gaussian 03W programında kullanılan Guanin tautomer yapılarının numaralandırılmış şekilleri

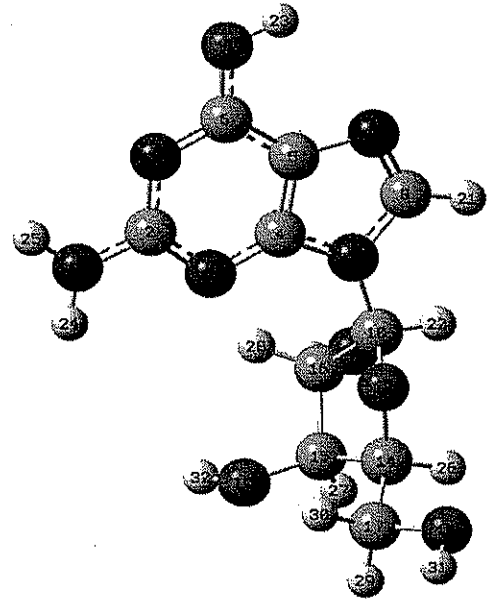
Hesaplamalar sonucunda guanozin için elde edilen sonuçlar çizelge 4.1., çizelge 4.3, çizelge 4.4. de ve şekil 4.1.4 de verilmiştir. Buna göre sonuçlar aşağıdaki gibi yorumlanmıştır.



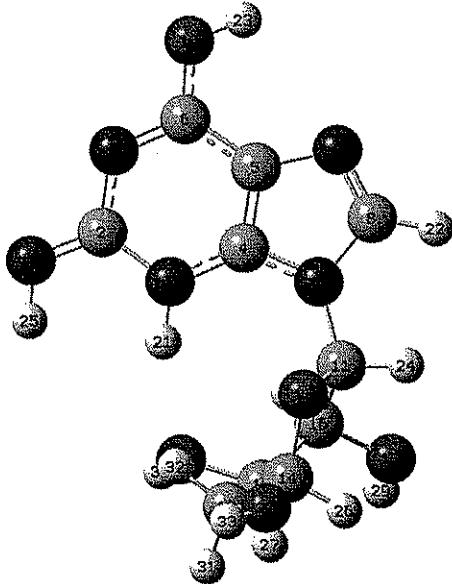
Şekil 4.1.3. Guanozin Tautomer Yapıları



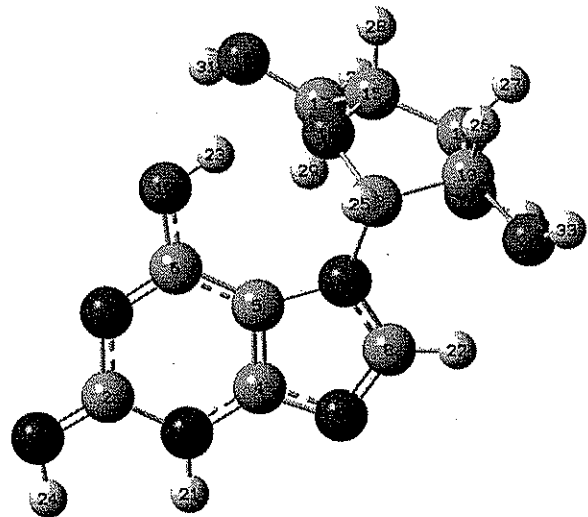
GZT1B



GZT2

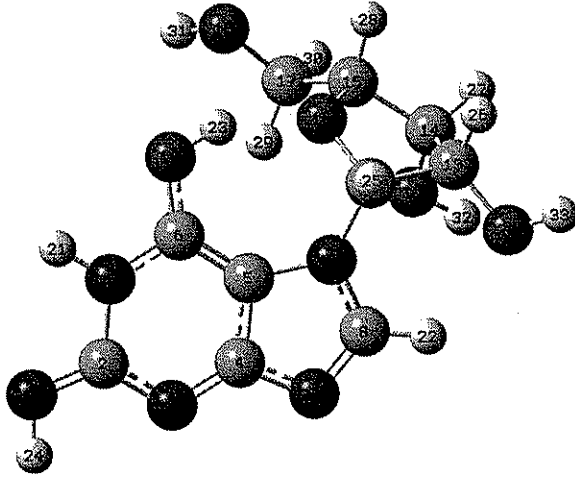


GZT3

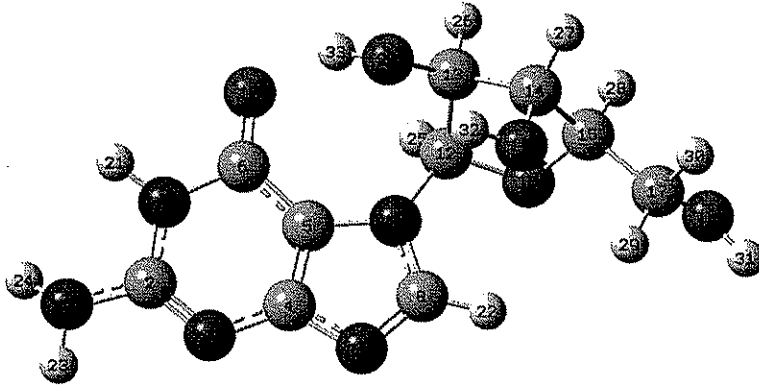


GZT4

Şekil 4.1.4 Gaussian 03W programında kullanılan Guanozinin tautomer yapılarının numaralandırılmış şekilleri



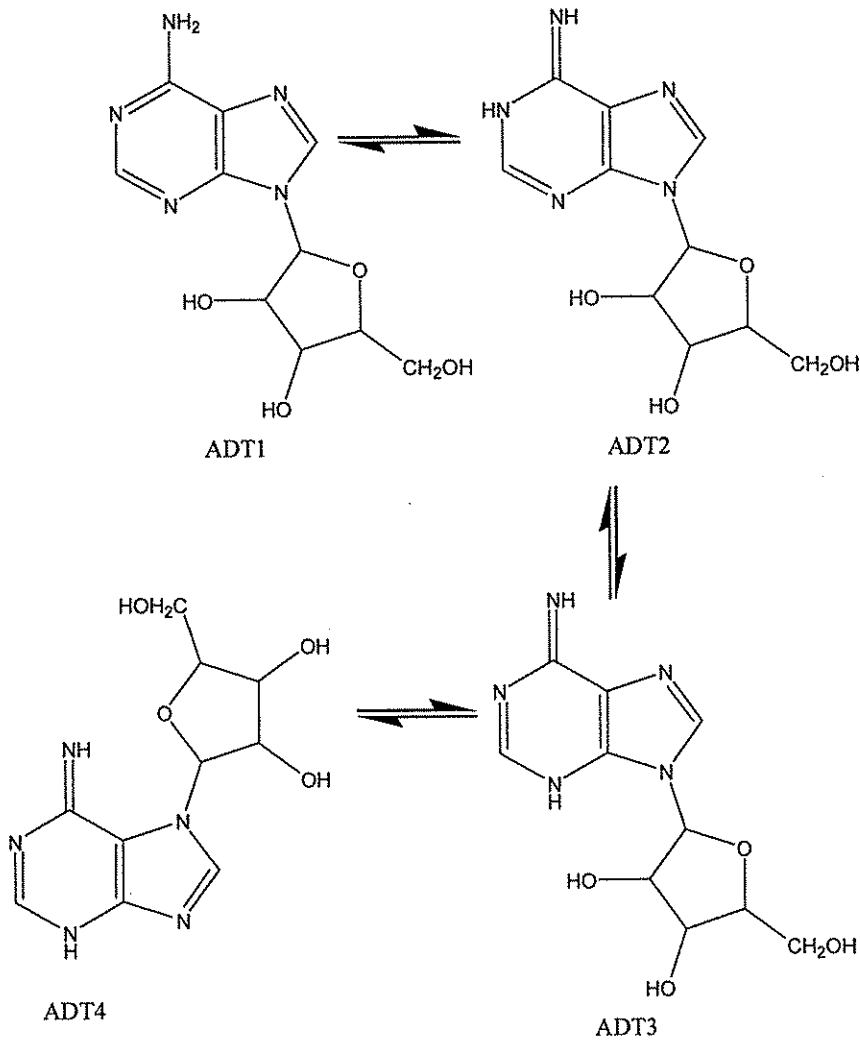
GZT5



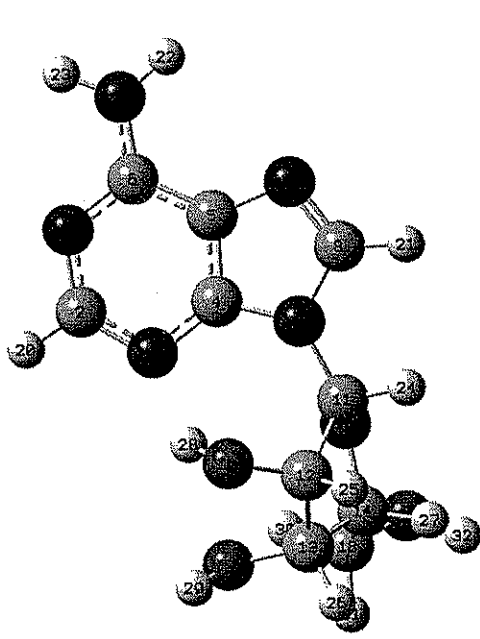
GZT6GAZ

Şekil 4.1.4 Gaussian 03W programında kullanılan Guanozinin tautomer yapılarının numaralandırılmış şekilleri

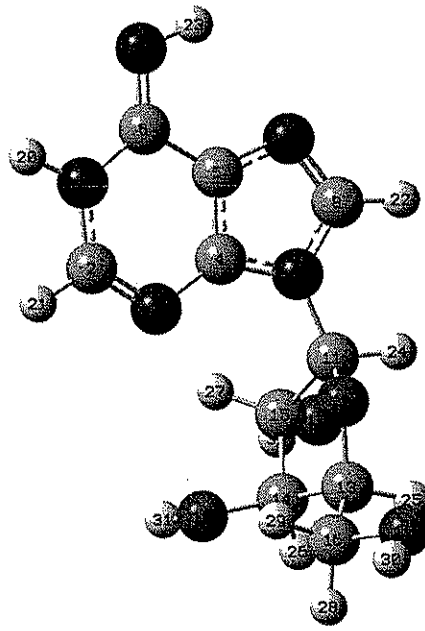
Hesaplamalar sonucunda adenozin için elde edilen sonuçlar çizelge 4.1., çizelge 4.3, çizelge 4.4. de ve şekil 4.1.6 de verilmiştir. Buna göre sonuçlar aşağıdaki gibi yorumlanmıştır



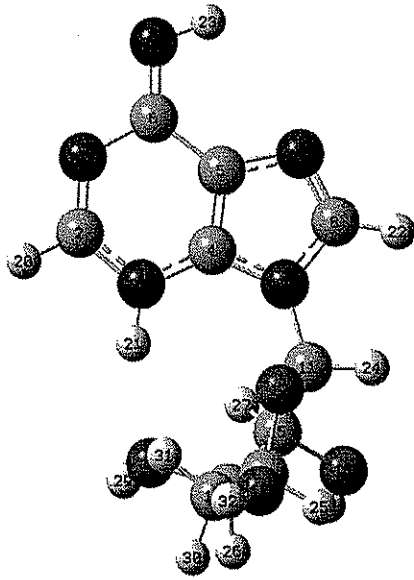
Şekil 4.1.5. Adenozinin Tautomer Yapıları



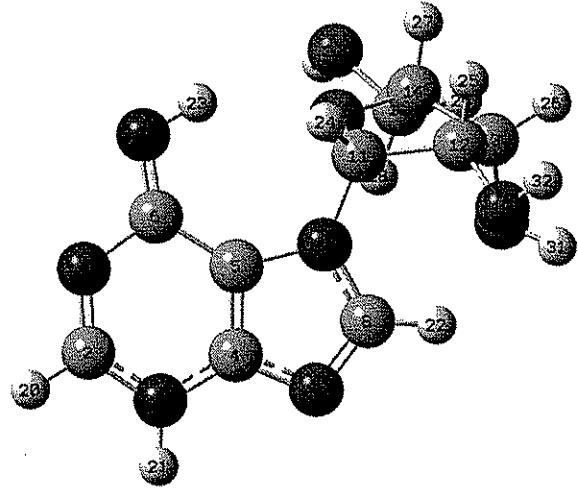
ADT1



ADT2



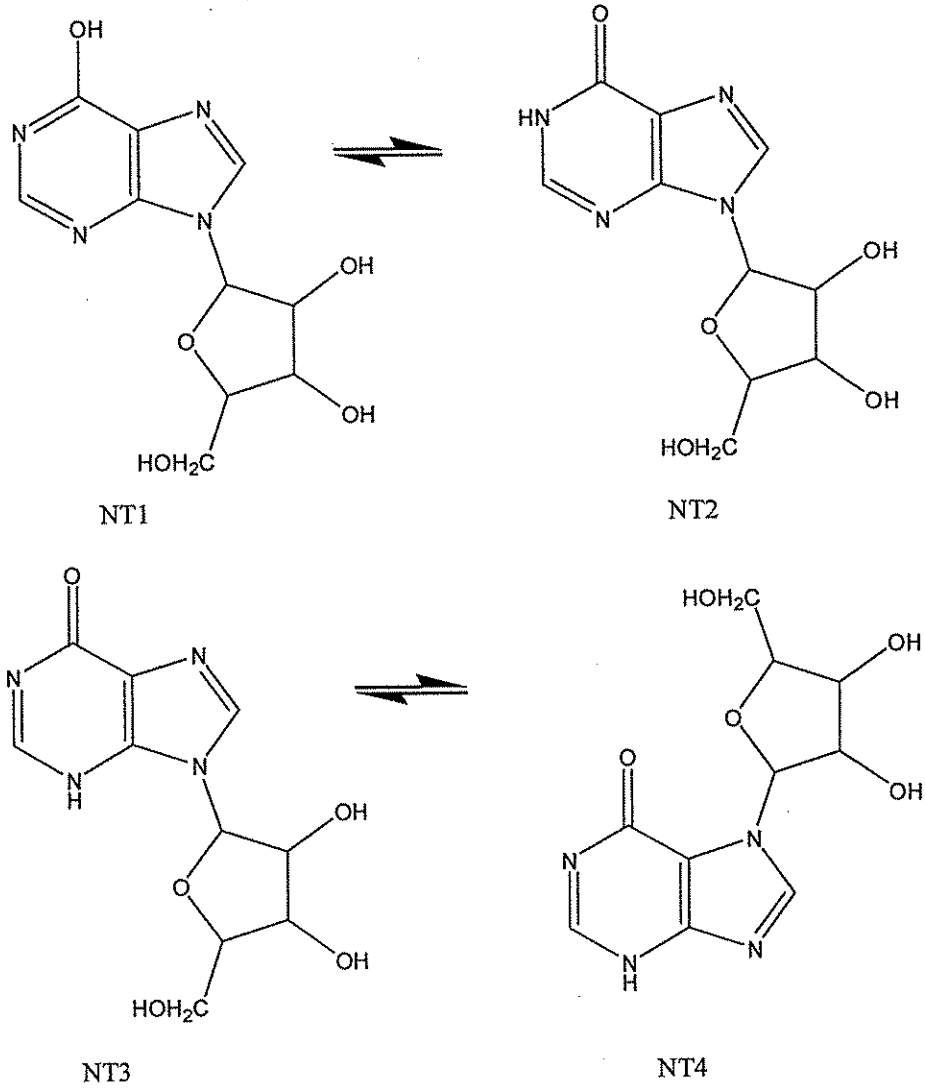
ADT3



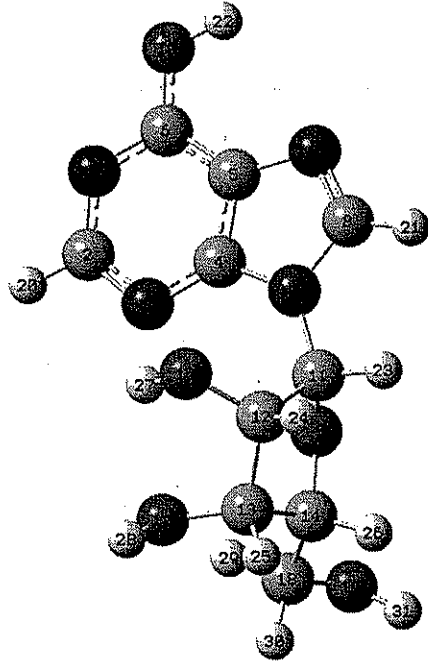
ADT4

Şekil 4.1.6. Gaussian 03W programında kullanılan Adenozinin tautomer yapılarının numaralandırılmış şekilleri

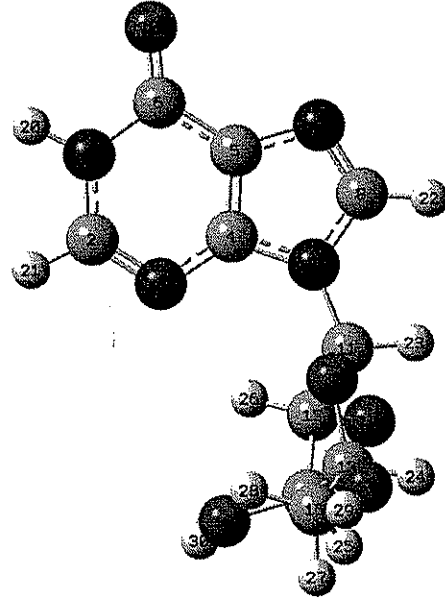
Hesaplamalar sonucunda inozin için elde edilen sonuçlar çizelge 4.1., çizelge 4.3, çizelge 4.4. de ve şekil 4.1.8. de verilmiştir. Buna göre sonuçlar aşağıdaki gibi yorumlanmıştır



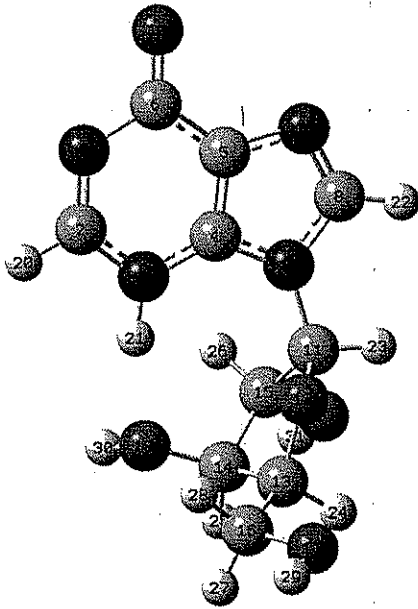
Şekil 4.1.7. İnozinin Tautomer Yapıları



NT1B

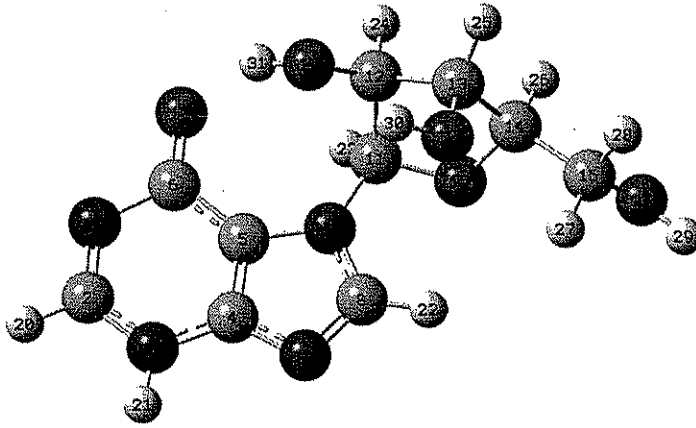


NT2



NT3

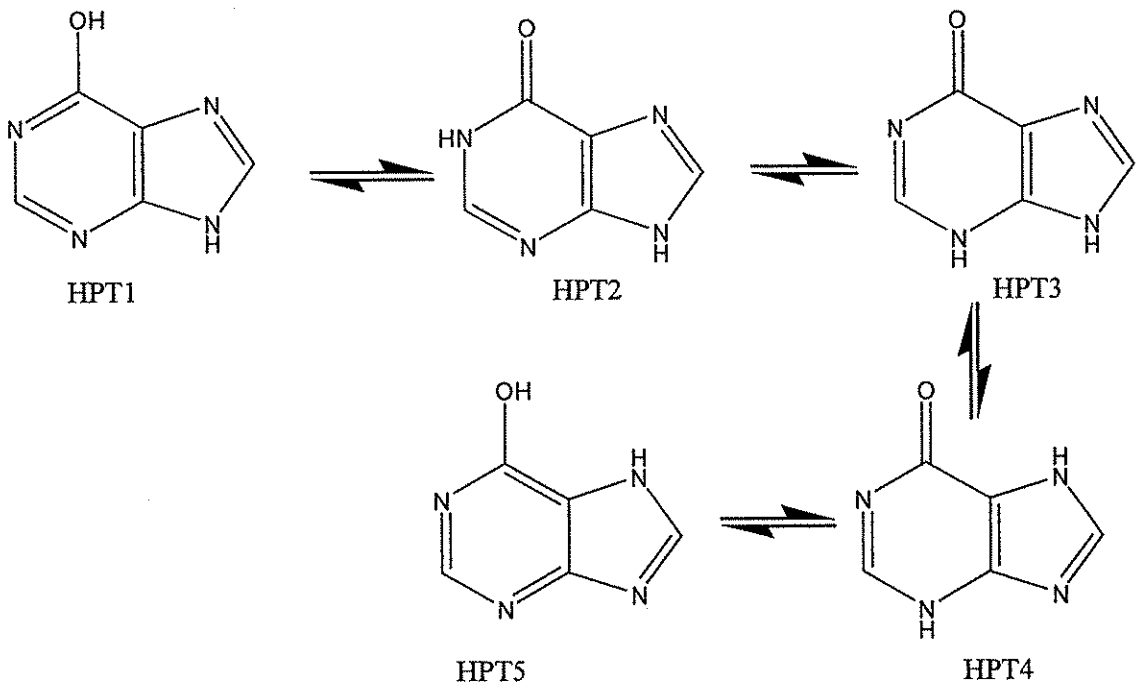
Şekil 4.1.8. Gaussian 03W programında kullanılan İnozinin tautomer yapılarının numaralandırılmış şekilleri



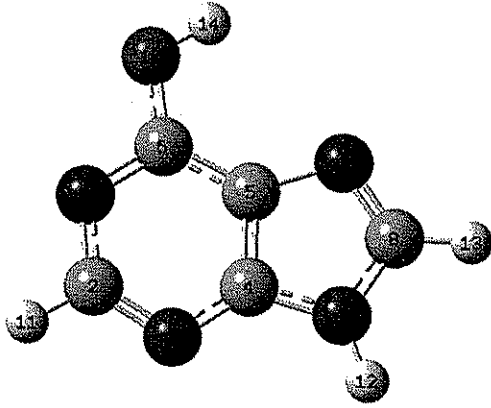
NT4

Şekil 4.1.8. Gaussian 03W programında kullanılan İnozinin tautomer yapılarının numaralandırılmış şekilleri

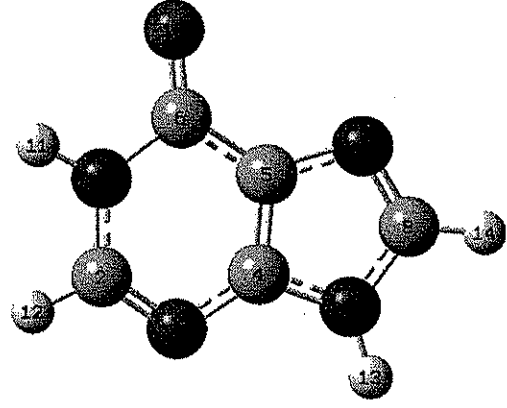
Hesaplamalar sonucunda hipoksantin için elde edilen sonuçlar çizelge 4.1., çizelge 4.3, çizelge 4.4. de ve şekil 4.1.10. de verilmiştir. Buna göre sonuçlar aşağıdaki gibi yorumlanmıştır



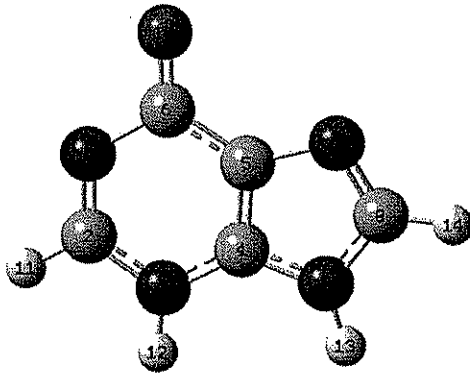
Şekil 4.1.9. Hipoksantin Tautomer Yapıları



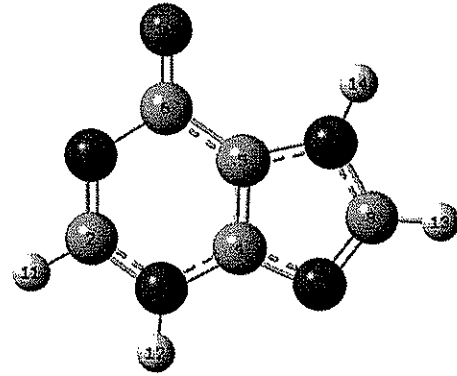
HPT1



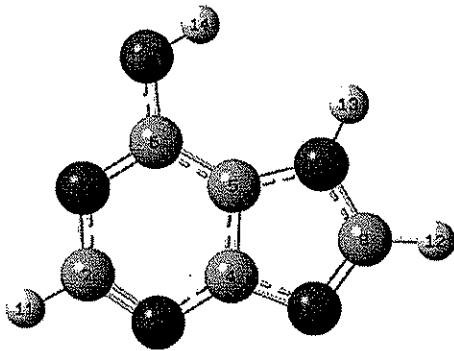
HPT2



HPT3



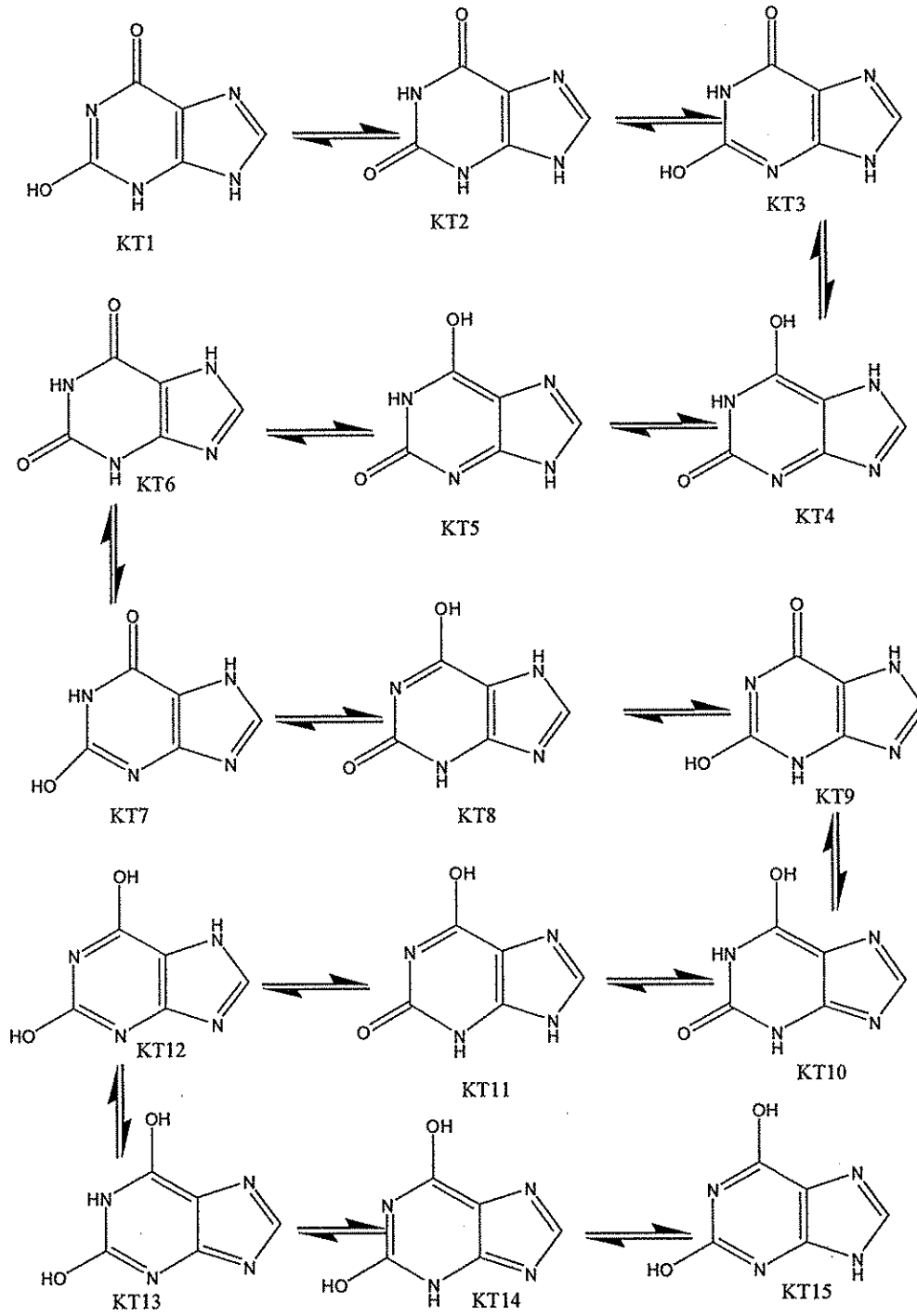
HPT4



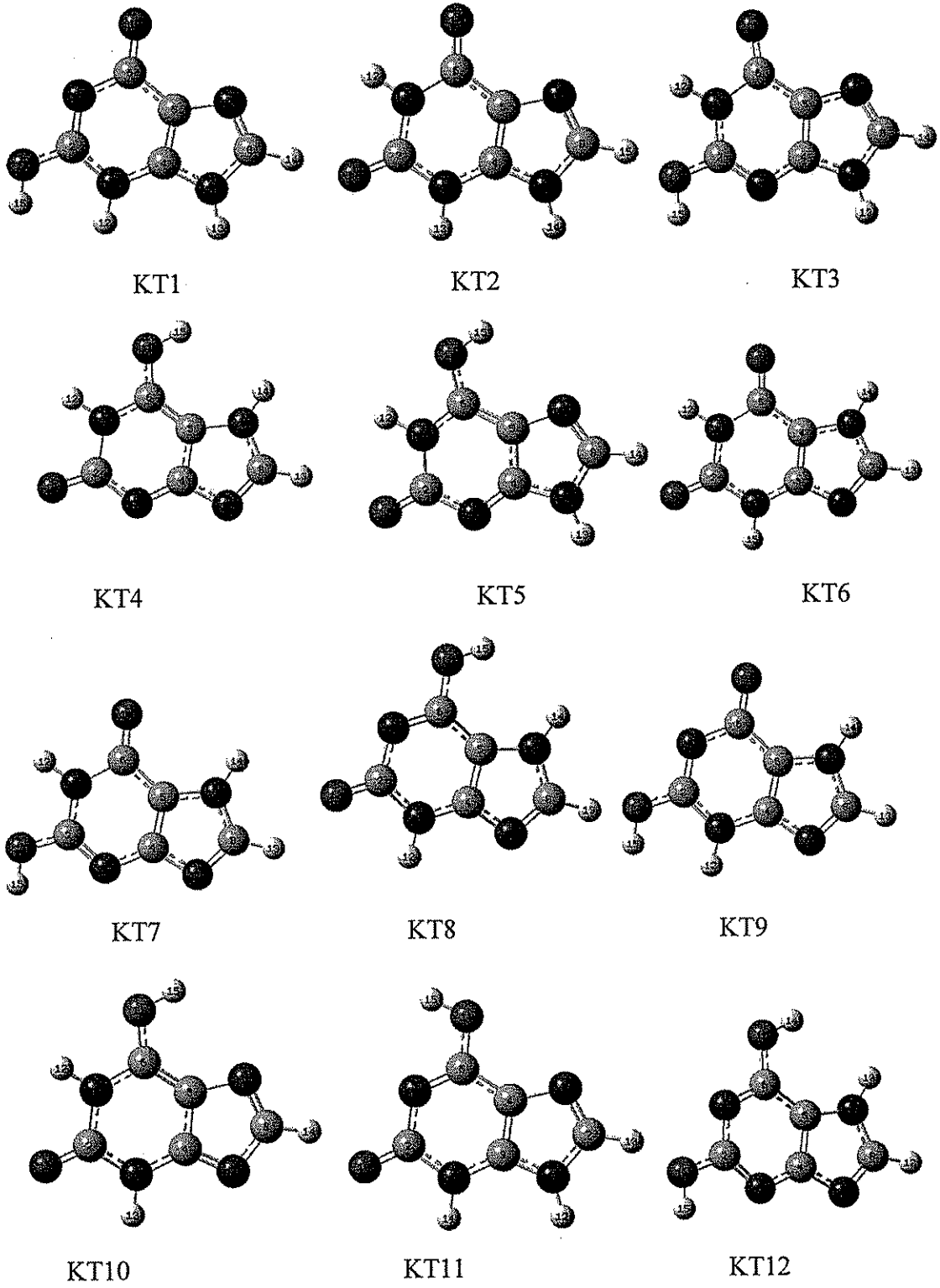
HPT5

Şekil 4.1.10. Gaussian 03W programında kullanılan Hipoksantinin tautomer yapılarının numaralandırılmış şekilleri

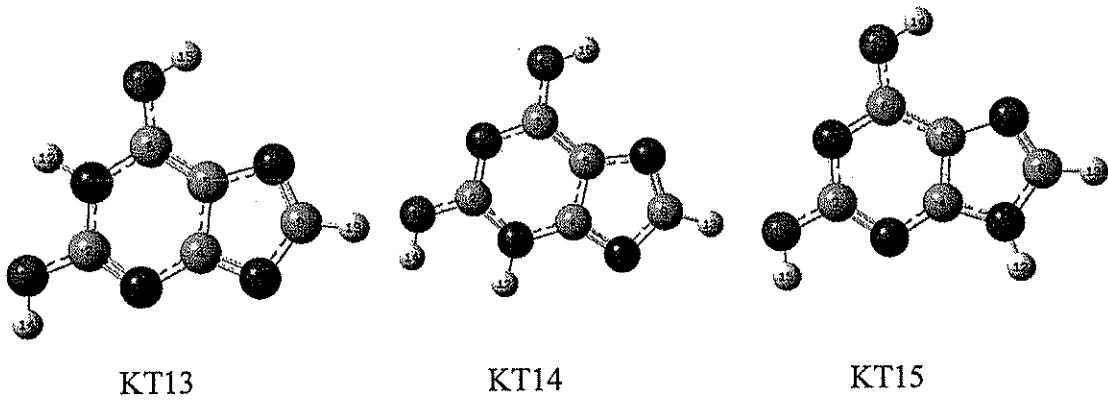
Hesaplamalar sonucunda ksantin için elde edilen sonuçlar çizelge 4.1., çizelge 4.3, çizelge 4.4. de ve şekil 4.1.12. de verilmiştir. Buna göre sonuçlar aşağıdaki gibi yorumlanmıştır.



Şekil 4.1.11. Ksantin Tautomer Yapıları (Szegezdi and Csizmadia, 2007).

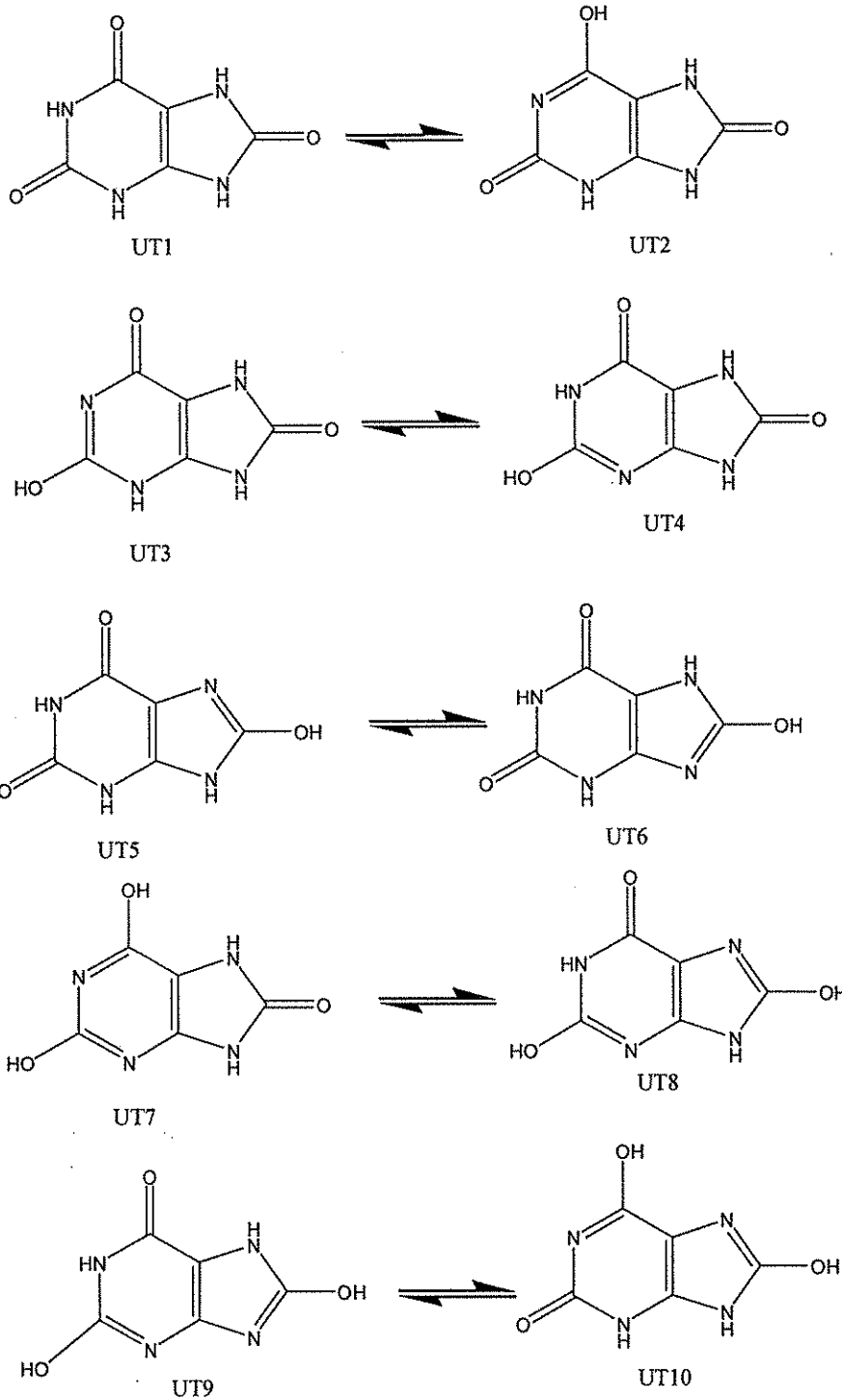


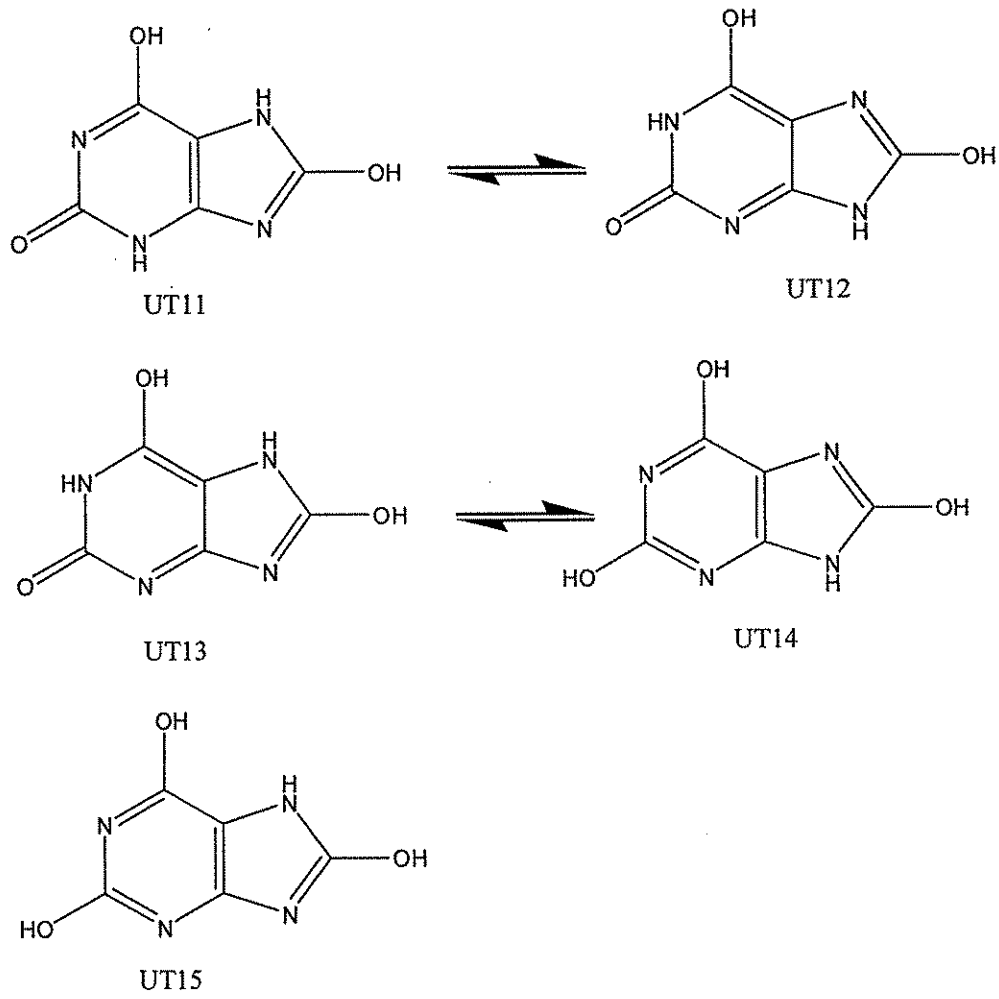
Şekil 4.1.12. Gaussian 03W programında kullanılan Ksantin Tautomer Yapılarının numaralandırılmış şekilleri



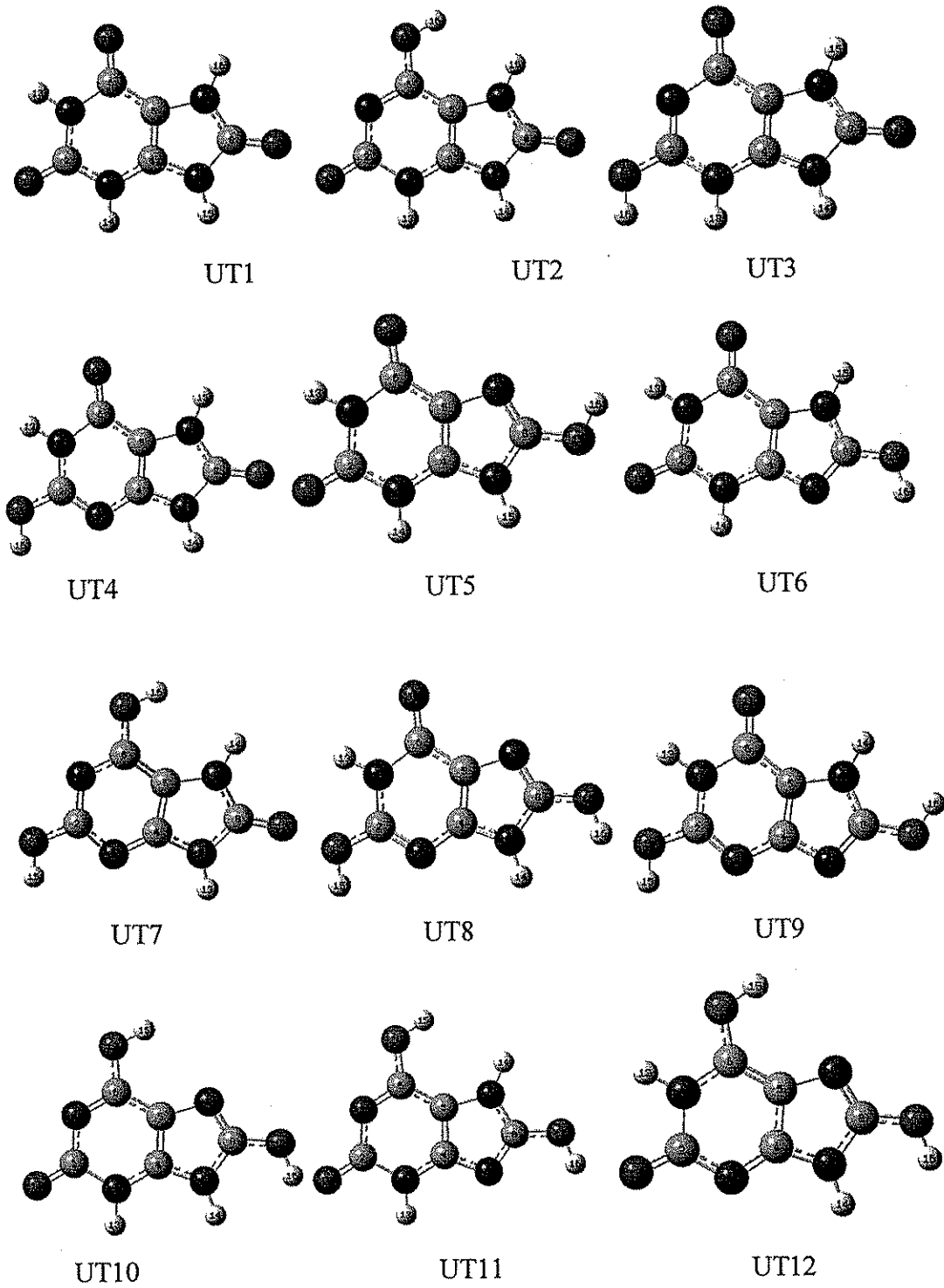
Şekil 4.1.12. Gaussian 03W programında kullanılan Ksantin Tautomer Yapılarının numaralandırılmış şekilleri

Hesaplamalar sonucunda ürik asit için elde edilen sonuçlar çizelge 4.1., çizelge 4.3, çizelge 4.4. de ve şekil 4.1.12. de verilmiştir. Buna göre sonuçlar aşağıdaki gibi yorumlanmıştır

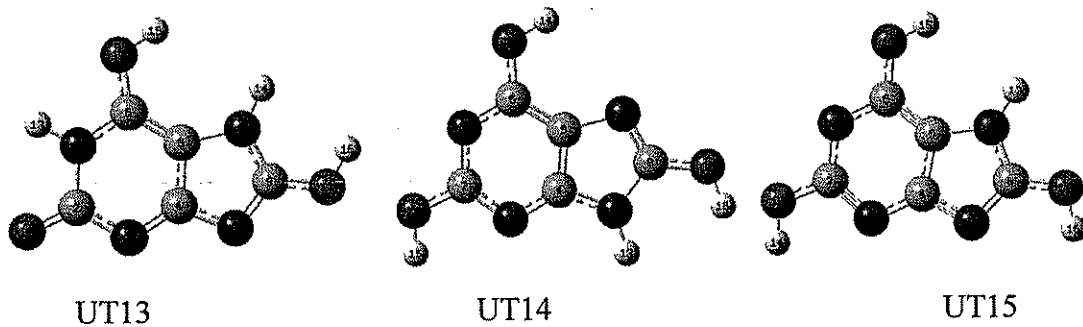




Şekil 4.1.13. Ürik asit Tautomer Yapıları



Şekil 4.1.14. Gaussian 03W programında kullanılan Ürik asitin tautomer yapılarının numaralandırılmış şekilleri



Şekil 4.1.14. Gaussian 03W programında kullanılan Ürik asitin Tautomer Yapılarının numaralandırılmış şekilleri

ΔG değerlerine göre kararlılık sırası

Tautomerlerin kendi içerisinde kararlılık sıralaması yapılacak olursa; HF/6-31G(d,p) yöntemi ve B3LYP/6-31G(d,p) yöntemi kullanıldığında su, gaz ve kan fazlarında guaninin 2. tautomeri (GUT2) en kararlı çıkar.

Guanin;

HF yöntemi

Su faz: GUT2>GUT1>GUT4>GUT3>GUT5

Gaz faz: GUT2>GUT1>GUT4>GUT3>GUT5

Kan faz: GUT2>GUT1>GUT4>GUT3>GUT5

DFT yöntemi

Su faz: GUT2>GUT1>GUT4>GUT3>GUT5

Gaz faz: GUT2>GUT1>GUT4>GUT3>GUT5

Kan faz: GUT2>GUT1>GUT4>GUT3>GUT5

Guanozinin kendi içerisinde kararlılık sıralaması yaptığımızda; HF/6-31G(d,p) yöntemi ve B3LYP/6-31G(d,p) yöntemine göre, su ve kan fazlarında guanozin 1. tautomer (GZT1), gaz fazında ise 6.tautomer (GZT6) en kararlı bulundu.

Guanozin;

HF yöntemi

Su faz: GZT1>GZT6>GZT2>GZT3>GZT4>GZT5

Gaz faz GZT6>GZT1>GZT2>GZT3>GZT5>GZT4

Kan faz: GZT1>GZT6>GZT2>GZT3>GZT4>GZT5

DFT yöntemi

Su faz :GZT1>GZT6>GZT5>GZT4>GZT3>GZT2

Gaz faz :GZT6>GZT1>GZT2>GZT3>GZT4>GZT5

Kan faz : GZT1>GZT6>GZT2>GZT3>GZT4>GZT5

Adenozinin kendi içerisinde kararlılık sıralaması yaptığımızda; HF/6-31G(d,p) yöntemi ve B3LYP/6-31G(d,p) yöntemine göre, su ve kan fazlarında adenozin 1. tautomer (ADT1) en kararlı bulundu.

Adenozin ;

HF yöntemi

Su faz:ADT1>ADT2>ADT3>ADT4

Gaz faz ADT1>ADT2>ADT3>ADT4

Kan faz ADT1>ADT2>ADT3>ADT4

DFT yöntemi

Su faz:ADT1>ADT2>ADT3>ADT4

Gaz faz ADT1>ADT2>ADT3>ADT4

Kan faz ADT1>ADT2>ADT3>ADT4

İnozinin kendi içerisinde kararlılık sıralaması yaptığımızda; HF/6-31G(d,p) yöntemi ve B3LYP/6-31G(d,p) yöntemine göre, su ve kan fazlarında inozin 2. tautomer (NT2) en kararlı bulundu

İnozin;

HF yöntemi

Su faz:NT2>NT4>NT3>NT1

Gaz faz: NT2>NT4>NT1>NT3

Kan faz: NT2>NT4>NT3>NT1

DFT yöntemi

Su faz: NT2>NT4>NT3>NT1

Gaz faz: NT4>NT1>NT3>NT2

Kan faz: NT2>NT4>NT3>NT1

Hipoksantinin kendi içerisinde kararlılık sıralaması yaptığımızda; HF/6-31G(d,p) yöntemi ve B3LYP/6-31G(d,p) yöntemine göre, su, gaz ve kan fazlarında hipoksantinin 2. tautomer (HPT2) en kararlı bulundu

Hipoksantin;

HF yöntemi

Su faz: HPT2>HPT3>HPT1>HPT4>HPT5

Gaz faz: :HPT2>HPT1>HPT4>HPT5>HPT3

Kan faz: :HPT2>HPT1>HPT4>HPT5>HPT3

DFT yöntemi

Su faz: HPT2>HPT3>HPT4>HPT1>HPT5

Gaz faz: HPT2>HPT1>HPT4>HPT5>HPT3

Kan faz: HPT2>HPT4>HPT1>HPT3>HPT5

Ksantinin kendi içerisinde kararlılık sıralaması yaptığımızda; HF/6-31G(d,p) yöntemi ve B3LYP/6-31G(d,p) yöntemine göre, su, gaz ve kan fazlarında ksantinin 6. tautomer (KT6) en kararlı bulundu

Ksantin;

HF yöntemi

Su faz: KT6>KT2>KT3>KT7>KT11>KT5>KT8>KT9>KT15>KT10>

KT1>KT4>KT12>KT14>KT13

Gaz faz: :KT6>KT7>KT3>KT15>KT10>KT5>KT11>KT12>KT2>KT8=>KT9>KT13>KT14>KT4>KT1

Kan faz: :KT6>KT2>KT3>KT7>KT11>KT5>KT8>KT9>KT15>KT10>

KT1>KT4>KT12>KT14>KT13

DFT yöntemi

Su faz: :KT6>KT2>KT3>KT7>KT11>KT5>KT8>KT9>KT15>KT10>

KT1>KT4>KT12>KT14>KT13

Gaz faz: :KT6>KT2>KT3>KT7>KT11>KT5>KT8>KT9>KT15>KT10>KT1>KT4>KT12>KT14>KT13

Kan faz: :KT6>KT2>KT3>KT7>KT11>KT5>KT8>KT9>KT15>KT10>

KT1>KT4>KT12>KT14>KT13

Ürik asitin kendi içerisinde kararlılık sıralamasını yaptığımızda; HF/6-31G(d,p) yöntemi ve B3LYP/6-31G(d,p) yöntemine göre, su, gaz ve kan fazlarında ürik asitin 1. tautomer (UT1) en kararlı bulundu

Ürik asit;

HF yöntemi

Su faz: UT1>UT5>UT6>UT2>UT7>UT9>UT8>UT12>UT10>UT15>

UT14>UT13>UT4>UT3>UT11

Gaz faz: UT1>UT5>UT6>UT2>UT7>UT9>UT8>UT12>UT10>UT15>

UT14>UT13>UT4>UT3>UT11

Kan faz: UT1>UT5>UT6>UT2>UT7>UT9>UT8>UT12>UT10>UT15>

UT14>UT13>UT4>UT3>UT11

DFT yöntemi

Su faz: UT1>UT5>UT6>UT2>UT7>UT9>UT8>UT12>UT10>UT15>

UT14>UT13>UT4>UT3>UT11

Gaz faz: UT1>UT5>UT6>UT2>UT7>UT9>UT8>UT12>UT10>UT15>

UT14>UT13>UT4>UT3>UT11

Kan faz: UT1>UT5>UT6>UT2>UT7>UT9>UT8>UT12>UT10>UT15>

UT14>UT13>UT4>UT3>UT11

Çizelge 4.1. Pürin katabolizmasında incelenen maddeler için HF ve DFT ile hesaplanmış ΔG (serbest enerji) , E+ZPE(Sıfır nokta düzeltme enerjisi) ve E(Toplam enerji) değerleri

	HF			B3LYP		
	E (Kcal/mol)	e+ZPE (Kcal/mol)	ΔG (Kcal/mol)	E (Kcal/mol)	e+ZPE (Kcal/mol)	ΔG (Kcal/mol)
GUT1	-338519,62	-338442,90	-338463,19	-340502,74	-340432,07	-340452,62
GUT1GAZ	-340463,39	-340390,35	-340410,87	-340463,39	-340391,68	-340412,38
GUT1KAN	-338519,56	-338442,87	-338463,14	-340502,74	-340432,02	-340452,60
GUT2	-338528,66	-338451,72	-338471,99	-340511,52	-340440,62	-340461,20
GUT2GAZ	-338486,42	-338407,36	-338427,69	-340465,09	-340391,67	-340412,38
GUT2KAN	-338528,66	-338451,72	-338471,99	-340511,65	-340440,30	-340461,01
GUT3	-338517,61	-338440,49	-338461,01	-340501,04	-340430,32	-340452,04
GUT3GAZ	-338470,23	-338391,11	-338412,13	-340449,21	-340376,36	-340397,69
GUT3KAN	-338517,61	-338440,49	-338461,07	-340501,04	-340430,07	-340450,84
GUT4	-338519,18	-338441,93	-338462,52	-340503,12	-340432,02	-340452,79
GUT4GAZ	-338479,90	-338400,14	-338420,85	-340459,00	-340385,52	-340406,48
GUT4KAN	-338519,18	-338441,93	-338462,52	-340503,12	-340432,02	-340452,79
GUT5	-338515,98	-338439,42	-338459,82	-340499,98	-340429,45	-340450,09
GUT5GAZ	-338473,18	-338395,06	-338415,89	-340452,60	-340380,37	-340401,27
GUT5KAN	-338515,98	-338439,42	-338459,82	-340499,98	-340429,45	-340450,09
GUT6	-338527,12	-338450,27	-338470,62	-340510,76	-340439,85	-340460,48
GUT6GAZ	-338485,35	-338406,35	-338426,72	-340464,33	-340391,51	-340412,15
GUT6KAN	-338527,12	-338450,27	-338470,62	-340510,76	-340439,85	-340460,48
	HF			B3LYP		
	E (Kcal/mol)	e+ZPE (Kcal/mol)	ΔG (Kcal/mol)	E (Kcal/mol)	e+ZPE (Kcal/mol)	ΔG (Kcal/mol)
GZT1	-648192,65	-648019,31	-648065,29	-651922,21	-651766,27	-651796,21
GZT1GAZ	-648124,52	-647949,88	-647977,87	-651849,10	-651688,40	-651717,20
GZT1KAN	-648188,65	-648017,31	-648061,27	-648181,69	-651765,83	-651795,83
GZT2	-648178,99	-648009,39	-648037,86	-648172,27	-647983,18	-648008,08
GZT2GAZ	-648119,88	-647944,72	-647972,75	-651841,83	-651680,91	-651709,77
GZT2KAN	-648179,11	-648009,50	-648038,19	-651911,92	-651754,43	-651783,15
GZT3	-648089,13	-647989,80	-648017,85	-651882,86	-651727,08	-651754,58
GZT3GAZ	-648089,13	-647915,08	-647943,42	-651815,91	-651655,98	-651685,00
GZT3KAN	-648160,48	-647989,85	-648017,93	-651898,18	-651741,55	-651770,20
GZT4	-648157,02	-647986,31	-648014,08	-651895,54	-651738,89	-651766,07
GZT4GAZ	-648088,00	-647913,41	-647941,52	-647460,49	-651657,81	-651685,77
GZT4KAN	-648157,28	-647986,82	-648013,89	-651895,60	-651738,95	-651767,39
GZT5	-648154,83	-647984,35	-648012,15	-651893,03	-651736,54	-651765,86

Çizelge 4.1. devamı

GZT5GAZ	-648089,50	-647914,67	-647942,34	-651817,29	-651656,50	-651684,79
GZT5KAN	-648154,89	-647984,43	-648012,26	-651893,16	-651736,33	-651764,89
GZT6	-648186,52	-648016,39	-648043,52	-651921,46	-651765,32	-651793,96
GZT6GAZ	-648128,10	-647952,87	-647980,35	-651853,43	-651691,96	-651720,09
GZT6KAN	-648186,20	-648016,49	-648043,49	-651921,46	-651765,20	-651793,34
		HF			B3LYP	
	E (Kcal/mol)	e+ZPE (Kcal/mol)	ΔG (Kcal/mol)	E (Kcal/mol)	e+ZPE (Kcal/mol)	ΔG (Kcal/mol)
ADT1	-601158,28	-600993,81	-601019,22	-604675,79	-604521,42	-604545,90
ADT1GAZ	-601104,94	-600937,02	-600962,81	-604613,92	-604457,60	-604482,77
ADT1KAN	-601160,86	-600995,51	-601020,73	-604675,48	-604521,11	-604545,58
ADT2	-601158,28	-600993,75	-601019,16	-604672,34	-604518,47	-604545,52
ADT2GAZ	-601092,52	-600924,60	-600950,20	-604599,48	-604443,23	-604469,03
ADT2KAN	-601157,84	-600993,31	-601018,79	-604671,96	-604518,10	-604545,08
ADT3	-601152,51	-600987,66	-601013,33	-604683,13	-604528,57	-604556,36
ADT3GAZ	-601083,11	-600915,00	-600941,16	-604591,70	-604435,58	-604461,75
ADT3KAN	-601152,07	-600987,22	-601012,89	-604667,19	-604513,01	-604540,18
ADT4	-601143,66	-600978,00	-601003,35	-604661,17	-604506,42	-604533,16
ADT4GAZ	-601076,46	-600907,78	-600933,13	-604588,44	-604431,63	-604457,48
ADT4KAN	-601143,22	-600977,56	-601002,85	-604681,25	-604526,86	-604555,39
		HF			B3LYP	
	E (Kcal/mol)	e+ZPE (Kcal/mol)	ΔG (Kcal/mol)	E (Kcal/mol)	e+ZPE (Kcal/mol)	ΔG (Kcal/mol)
NT1	-613624,58	-613464,21	-613490,40	-617157,78	-617010,74	-617038,10
NT1GAZ	-613571,81	-613407,98	-613435,28	-617093,59	-616943,22	-616971,39
NT1KAN	-613624,65	-613464,26	-613491,50	-617157,28	-617010,28	-617038,46
NT2	-613636,82	-613477,00	-613504,83	-617169,58	-617022,97	-617050,62
NT2GAZ	-613581,47	-613417,55	-613444,49	-617103,81	-613417,55	-613444,49
NT2KAN	-613636,44	-613476,36	-613503,13	-617169,45	-617022,82	-617051,46
NT3	-613629,04	-613468,75	-613495,87	-617163,36	-617016,22	-617043,81
NT3GAZ	-613558,95	-613396,39	-613423,91	-617083,04	-616933,53	-616933,53
NT3KAN	-613629,10	-613468,89	-613496,05	-617163,36	-617016,23	-617043,89
NT4	-613631,93	-613472,18	-613498,82	-617164,74	-617018,16	-617045,12
NT4GAZ	-613577,46	-613413,58	-613440,20	-617102,93	-616952,07	-616979,25
NT4KAN	-613631,55	-613470,45	-613496,74	-617165,00	-617018,49	-617045,42
		HF			B3LYP	
	E (Kcal/mol)	e+ZPE (Kcal/mol)	ΔG (Kcal/mol)	E (Kcal/mol)	e+ZPE (Kcal/mol)	ΔG (Kcal/mol)
HPT1	-303968,23	-303901,71	-303921,17	-305749,23	-305688,05	-305707,75
HPT1GAZ	-303938,30	-303869,90	-303889,35	-305715,28	-305652,28	-305671,92

Çizelge 4.1. devamı

HPT1KAN	-303968,23	-303901,71	-303921,17	-305749,23	-305688,05	-305707,75
HPT2	-303977,45	-303910,43	-303929,95	-305758,89	-305697,21	-305716,91
HPT2GAZ	-303941,43	-303872,97	-303892,43	-305720,05	-305656,98	-305676,75
HPT2KAN	-303977,45	-303910,49	-303929,96	-305758,89	-305697,24	-305716,91
HPT3	-303968,73	-303902,65	-303921,92	-305750,42	-305689,17	-305708,94
HPT3GAZ	-303908,68	-303842,10	-303861,43	-305694,38	-305632,20	-305652,09
HPT3KAN	-303948,65	-303883,41	-303903,06	-305746,78	-305685,72	-305705,55
HPT4	-303963,33	-303898,51	-303917,84	-305749,54	-305688,55	-305708,44
HPT4GAZ	-303921,10	-303854,40	-303873,73	-305706,49	-305644,06	-305663,82
HPT4KAN	-303963,08	-303898,20	-303917,53	-305749,35	-305688,30	-305708,19
HPT5	-303957,18	-303892,43	-303911,75	-305743,52	-305682,90	-305702,42
HPT5GAZ	-303916,90	-303850,57	-303869,83	-305701,22	-305639,29	-305655,85
HPT5KAN	-303956,93	-303892,11	-303911,44	-305743,20	-305682,65	-305702,16
		HF			B3LYP	
	E (Kcal/mol)	e+ZPE (Kcal/mol)	ΔG (Kcal/mol)	E (Kcal/mol)	e+ZPE (Kcal/mol)	ΔG (Kcal/mol)
KT1	-350959,75	-350890,84	-350911,28	-352966,09	-352903,05	-352923,71
KT1GAZ	-350899,70	-350829,07	-350849,69	-352902,02	-352837,33	-352858,25
KT1KAN	-350959,75	-350890,93	-350910,85	-352966,09	-352903,06	-352923,73
KT2	-350978,77	-350909,44	-350929,83	-352984,04	-352920,25	-352940,88
KT2GAZ	-350934,34	-350862,94	-350862,94	-352934,53	-352868,93	-352889,77
KT2KAN	-350978,77	-350909,44	-350929,83	-352984,04	-352920,25	-352940,88
KT3	-350970,74	-350901,45	-350921,69	-352976,63	-352913,09	-352933,59
KT3GAZ	-350930,26	-350858,49	-350878,75	-352930,89	-352865,06	-352885,60
KT3KAN	-350970,74	-350901,45	-350921,69	-352976,63	-352913,09	-352933,59
KT4	-350959,06	-350890,40	-350910,80	-352966,53	-352903,50	-352924,16
KT4GAZ	-350903,22	-350833,08	-350853,50	-352907,55	-352843,22	-352863,92
KT4KAN	-350959,06	-350890,40	-350910,81	-352966,53	-352903,47	-352924,11
KT5	-350963,96	-350894,93	-350915,26	-352970,55	-352907,23	-352927,81
KT5GAZ	-350920,79	-350849,38	-350869,71	-352923,23	-352857,60	-352878,24
KT5KAN	-350963,96	-350894,93	-350915,26	-352970,55	-352907,23	-352927,81
KT6	-350980,59	-350911,06	-350931,52	-352986,30	-352922,35	-352943,00
KT6GAZ	-350942,94	-350871,15	-350891,54	-352943,38	-352877,30	-352898,01
KT6KAN	-350980,59	-350911,06	-350931,52	-352986,30	-352922,35	-352943,00
KT7	-350969,86	-350900,52	-350920,85	-352976,38	-352912,88	-352933,40
KT7GAZ	-350930,57	-350858,73	-350878,99	-352931,89	-352865,94	-352886,52
KT7KAN	-350969,86	-350900,52	-350920,85	-352976,38	-352912,82	-352933,40
KT8	-350963,33	-350894,24	-350914,70	-352970,55	-352907,17	-352927,81
KT8GAZ	-350912,57	-350841,72	-350862,49	-352916,27	-352851,26	-352872,28

Çizelge 4.1. devamı

KT8KAN	-350963,33	-350894,30	-350914,70	-352971,80	-192688,18	-192707,76
KT9	-350963,08	-350894,05	-350914,45	-352969,92	-352906,60	-352927,25
KT9GAZ	-350912,94	-350842,16	-350862,49	-352915,39	-352850,32	-352871,46
KT9KAN	-350963,08	-350894,05	-350914,45	-352969,92	-352906,60	-352927,31
KT10	-350961,89	-350892,86	-350913,19	-352968,35	-352904,91	-352925,49
KT10GAZ	-350923,61	-350851,95	-350872,28	-352924,55	-352858,60	-352879,24
KT10KAN	-350961,89	-350892,86	-350913,19	-352968,35	-352904,91	-352925,49
KT11	-350965,90	-350896,81	-350917,15	-352972,24	-352908,93	-352929,51
KT11GAZ	-350920,03	-350848,62	-350869,08	-352921,79	-352856,35	-352877,06
KT11KAN	-350965,90	-350896,81	-350917,15	-352972,24	-352908,93	-352929,51
KT12	-350959,25	-350890,23	-350910,49	-352966,15	-352902,90	-352923,42
KT12GAZ	-350913,88	-350842,97	-350863,56	-352916,08	-352850,88	-352871,59
KT12KAN	-350959,25	-350890,23	-350910,56	-352966,15	-352902,90	-352923,42
KT13	-350951,28	-350882,44	-350902,71	-352958,37	-352895,43	-352915,89
KT13GAZ	-350908,86	-350837,33	-350857,60	-352910,81	-352845,11	-352865,63
KT13KAN	-350951,28	-350882,44	-350902,71	-352958,37	-352895,43	-352915,89
KT14	-350951,41	-350882,51	-350902,78	-352958,88	-352895,69	-352916,27
KT14GAZ	-350905,66	-350834,38	-350854,83	-352908,55	-352843,16	-352863,87
KT14KAN	-350951,41	-350882,51	-350902,84	-352958,88	-352895,69	-352916,20
KT15	-350962,26	-350893,05	-350913,32	-352968,35	-352904,91	-352925,37
KT15GAZ	-350925,37	-350853,58	-350873,72	-352925,87	-352859,92	-352880,37
KT15KAN	-350962,26	-350893,05	-350913,32	-352968,35	-352904,91	-352925,37
		HF			B3LYP	
	E	e+ZPE	ΔG	E	e+ZPE	ΔG
	(Kcal/mol)	(Kcal/mol)	(Kcal/mol)	(Kcal/mol)	(Kcal/mol)	(Kcal/mol)
UT1	-397977,13	-397905,60	-397927,06	-400208,37	-400142,48	-400164,07
UT1GAZ	-397929,38	-397855,02	-397876,54	-400154,15	-400085,69	-400107,53
UT1KAN	-397977,13	-397905,60	-397927,12	-400208,37	-400142,48	-400164,07
UT2	-397961,38	-397890,47	-397911,50	-400130,94	-400128,67	-400150,37
UT2GAZ	-397903,46	-397829,98	-397851,25	-400130,94	-400063,54	-400085,13
UT2KAN	-395708,62	-395636,96	-395657,92	-397944,38	-400127,77	-400149,12
UT3	-395705,11	-395633,63	-395654,66	-397940,99	-397875,66	-397897,06
UT3GAZ	-397897,31	-397823,64	-397217,78	-400124,16	-400056,58	-400078,54
UT3KAN	-395705,11	-395633,70	-395654,72	-397940,99	-397875,66	-397897,06
UT4	-395717,47	-395645,49	-395666,39	-397953,60	-397887,71	-397908,92
UT4GAZ	-397925,74	-397851,00	-397872,28	-400150,89	-400082,18	-400103,70
UT4KAN	-397970,29	-397898,82	-397920,03	-400201,97	-400136,27	-400157,73
UT5	-397966,40	-397894,80	-397916,08	-400197,01	-400131,44	-400153,02
UT5GAZ	-397916,89	-397842,28	-397863,68	-400140,29	-400071,95	-400093,66

Çizelge 4.1. devamı

UT5KAN	-397956,55	-397885,64	-397906,79	-400188,23	-400122,72	-400143,86
UT6	-397961,57	-397890,79	-397911,87	-400192,81	-400127,30	-400149,13
UT6GAZ	-397916,14	-397841,78	-397862,61	-400142,11	-400073,08	-400094,29
UT6KAN	-397961,32	-397890,47	-397911,62	-400192,56	-400126,98	-400148,88
UT7	-397947,33	-397877,99	-397898,69	-400185,91	-400121,59	-400142,73
UT7GAZ	-397896,31	-398451,15	-397844,16	-400130,06	-400062,41	-400083,75
UT7KAN	-397947,01	-397877,61	-397898,32	-400185,59	-400121,27	-400142,42
UT8	-397943,37	-397872,84	-397893,86	-400178,00	-400112,99	-400134,01
UT8GAZ	-397887,96	-397814,04	-397834,81	-400118,51	-400050,30	-400071,39
UT8KAN	-397942,93	-397872,46	-397893,42	-400180,26	-400112,61	-400133,63
UT9	-397945,88	-397875,60	-397896,56	-400180,26	-400115,37	-400136,46
UT9GAZ	-397893,55	-397819,69	-397840,40	-400122,90	-400054,69	-400077,03
UT9KAN	-395688,60	-395618,76	-395639,53	-397921,79	-397856,21	-397877,36
UT10	-397937,47	-397867,32	-397888,65	-400172,85	-400107,97	-400128,99
UT10GAZ	-397877,61	-397803,94	-397824,84	-400109,73	-400041,86	-400063,15
UT10KAN	-397937,04	-397866,88	-397888,15	-400172,48	-400107,61	-400128,63
UT11	-395683,02	-395613,05	-395633,82	-400177,06	-400112,12	-400133,09
UT11GAZ	-397884,14	-397810,47	-397831,24	-400115,81	-400047,70	-400068,77
UT11KAN	-397953,92	-397882,76	-397904,15	-400176,68	-400111,73	-400132,70
UT12	-397938,35	-397868,32	-397889,22	-400173,92	-400109,20	-400131,35
UT12GAZ	-397882,88	-397809,27	-397829,92	-397882,88	-400046,48	-400068,59
UT12KAN	-397938,04	-397867,88	-397888,84	-400173,61	-400108,84	-400130,97
UT13	-397931,76	-397862,68	-397883,57	-400167,39	-400103,12	-400124,58
UT13GAZ	-397866,94	-397794,21	-397814,98	-400099,25	-400032,46	-400053,58
UT13KAN	-397931,26	-397862,17	-397883,07	-400166,95	-400102,66	-400124,11
UT14	-397934,46	-397864,81	-397885,52	-400172,92	-400109,03	-400130,07
UT14GAZ	-397884,45	-397811,35	-397831,86	-400117,76	-400050,15	-400071,52
UT14KAN	-397934,09	-397864,43	-397885,14	-400172,60	-400108,70	-400129,74
UT15	-397935,65	-397866,26	-397886,98	-400173,92	-400110,10	-400131,11
UT15GAZ	-397883,95	-397811,15	-397831,67	-400116,94	-400049,48	-400070,82
UT15KAN	-397935,28	-397865,87	-397886,58	-400173,54	-400109,75	-400130,76

Çizelge 4.2. Pürin katabolizmasındaki bazı maddelerin Se bağlanmış yapılarının E (Toplam enerji), E+ZPE(Sıfır nokta düzeltme enerjisi), ΔG (Serbest enerji) değerleri

	HF			B3LYP		
	E (Kcal/mol)	e+ZPE (Kcal/mol)	ΔG (Kcal/mol)	E (Kcal/mol)	e+ZPE (Kcal/mol)	ΔG (Kcal/mol)
GUT2	-1842998,0	-1842919,7	-1842941,7	-1846141,6	-1846041,3	-1846064,4
GUT2GAZ	-1842601,4	-1842529,6	-1842552,8	-1845696,6	-1845617,4	-1845640,5
GUT2KAN	-1842997,7	-1842919,4	-1842941,4	-1846141,3	-1846041,0	-1846064,1
GZT1	-2152691,0	-2152518,5	-2152548,0	-2157553,2	-2157394,9	-2157425,5
GZT1GAZ	-2152239,2	-2152072,2	-2152102,6	-2157049,2	-2156897,0	-2156924,5
GZT1KAN	-2152691,0	-2152518,5	-2152548,0	-2157553,1	-2157394,8	-2157426,8
ADT1	-2105325,2	-2105163,4	-2105193,1	-2109948,0	-2109798,9	-2109829,3
ADT1GAZ	-2105252,8	-2105088,2	-2105118,3	-2109864,6	-2109713,2	-2109744,5
ADT1KAN	-2105325,8	-2105163,5	-2105192,9	-2109947,3	-2109798,5	-2109829,8
NT2	-2118134,2	-2117973,1	-2118002,8	-2122792,0	-2122644,3	-2122674,9
NT2GAZ	-2117694,3	-2117538,3	-2117567,8	-2122614,9	-2122464,3	-2122491,3
NT2KAN	-2118077,2	-2117919,3	-2117945,8	-2122740,5	-2122592,8	-2122618,0
HPT2	-1808478,3	-1808409,3	-1808430,7	-1811387,0	-1811323,3	-1811344,9
HPT2GAZ	-1808056,9	-1811344,9	-1808017,9	-1810949,6	-1810893,6	-1810915,9
HPT2KAN	-1808478,3	-1808409,3	-1808430,7	-1811387,0	-1811323,3	-1811344,9
KT6	-1855107,8	-1855045,1	-1855067,2	-1858613,0	-1858546,9	-1858569,4
KT6GAZ	-1855057,8	-1854993,3	-1855016,1	-1858170,6	-1858111,5	-1858134,6
KT6KAN	-1855115,1	-1855405,2	-1855427,0	-1858612,7	-1855051,7	-1855074,0
UT1	-1905831,7	-1902372,2	-1902395,4	-1905831,7	-1905763,9	-1905786,8
UT1GAZ	-1902028,1	-1901961,3	-1901984,4	-1905361,6	-1905301,0	-1905324,2
UT1KAN	-1902103,4	-1902038,4	-1902061,3	-1905814,8	-1905742,6	-1905765,5

Çizelge 4.3. Pürin katabolizmasında incelenen bazı maddelerin gaz, su ve kan fazlarında hesaplanan E (Toplam enerji), HOMO, LUMO, nükleofilite (η), dipol moment $\mu(D)$ değerleri

GUANİN

	GAZ FAZ					GAZ FAZ				
	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$
1	-338485,83	-0,2973	0,1404	0,4377	3,6533	-340463,41	-0,2048	-0,0131	0,1917	3,3702
2	-338486,43	-0,2937	0,1586	0,4522	7,0600	-340465,12	-0,2081	-0,0059	0,2022	6,4945
3	-338470,25	-0,3151	0,1509	0,4659	9,2546	-340449,19	-0,2173	-0,0106	0,2067	8,6255
4	-338479,90	-0,3163	0,1189	0,4352	4,4523	-340458,99	-0,2162	-0,0331	0,1831	3,8164
5	-338473,20	-0,3014	0,1204	0,4218	5,0668	-340452,58	-0,2051	-0,0256	0,1795	4,3556
6	-338485,34	-0,3003	0,1305	0,4308	2,1499	-340464,34	-0,2061	-0,0189	0,1871	2,3547

	SULU FAZ					SULU FAZ				
	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$
1	-338519,62	-0,3065	0,0660	0,3724	5,1685	-340502,75	-0,2194	-0,0338	0,1856	5,0433
2	-338528,67	-0,3046	0,0643	0,3689	10,4802	-340511,57	-0,2187	-0,0256	0,1931	10,6604
3	-338517,60	-0,3108	0,0635	0,3743	14,0606	-340501,06	-0,2207	-0,0318	0,1889	13,9565
4	-338519,16	-0,3147	0,0644	0,3792	6,3621	-340503,13	-0,2218	-0,0444	0,1774	5,8714
5	-338515,96	-0,3113	0,0658	0,3772	8,3695	-340499,99	-0,2208	-0,0423	0,1786	7,7902
6	-338527,15	-0,3101	0,0644	0,3746	3,3048	-340510,77	-0,2213	-0,0383	0,1831	3,6507

	KAN FAZ					KAN FAZ				
	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$
1	-338519,41	-0,3064	0,0660	0,3724	5,1547	-340502,56	-0,2194	-0,0338	0,1856	5,0289
2	-338528,39	-0,3045	0,0643	0,3688	10,4509	-340511,39	-0,2204	-0,0261	0,1943	10,4123
3	-338517,25	-0,3109	0,0634	0,3743	14,0159	-340500,73	-0,2208	-0,0317	0,1891	13,9092
4	-338518,92	-0,3148	0,0644	0,3792	6,3484	-340502,90	-0,2219	-0,0444	0,1774	5,8571
5	-338515,65	-0,3113	0,0658	0,3771	8,3363	-340499,69	-0,2208	-0,0423	0,1785	7,7554
6	-338526,84	-0,3101	0,0644	0,3745	3,2904	-340510,52	-0,2213	-0,0383	0,1831	3,6344

Çizelge 4.3. devamı

GUANOZİN

	GAZ FAZ		HF			GAZ FAZ		B3LYP		
	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$
1	-648124,33	-0,3044	0,1404	0,4448	7,8259	-651849,12	-0,2173	-0,0185	0,1989	7,1888
2	-648119,85	-0,3068	0,1313	0,4381	5,1449	-651794,64	-0,2106	-0,0176	0,1926	5,6262
3	-648088,56	-0,2835	0,1432	0,4268	11,2700	-651815,34	-0,1897	-0,0125	0,1773	10,4889
4	-648088,03	-0,2808	0,1205	0,4013	12,6707	-651818,92	-0,1921	-0,0351	0,1570	12,1065
5	-648089,48	-0,2688	0,1112	0,3800	11,9566	-651817,23	-0,1741	-0,0349	0,1392	10,9844
6	-648128,10	-0,3081	0,1186	0,4266	3,1818	-651853,44	-0,2183	-0,0333	0,1849	3,3349

	SULU FAZ		HF			SULU FAZ		B3LYP		
	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$
1	-648188,62	-0,3108	0,0639	0,3747	12,1174	-651922,22	-0,2201	-0,0275	0,1926	15,6006
2	-648178,97	-0,3069	0,0654	0,3723	8,3685	-651912,00	-0,2269	-0,0398	0,1871	7,8370
3	-648160,46	-0,3030	0,0656	0,3686	15,7688	-651898,15	-0,2145	-0,0422	0,1699	15,5223
4	-648157,02	-0,3029	0,0631	0,3660	19,3197	-651895,51	-0,2121	-0,0501	0,1620	18,9671
5	-648154,80	-0,2947	0,0632	0,3579	20,3993	-651893,03	-0,2035	-0,0570	0,1465	19,6242
6	-648186,50	-0,3087	0,0630	0,3717	5,1142	-651921,47	-0,2193	-0,0410	0,1783	6,0823

	KAN FAZ		HF			KAN FAZ		B3LYP		
	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$
1	-648188,65	-0,3108	0,0639	0,3747	12,1174	-651921,81	-0,2217	-0,0280	0,1937	15,1743
2	-648155,08	-0,3071	0,0654	0,3725	8,3921	-651911,59	-0,2268	-0,0397	0,1871	7,7720
3	-648159,47	-0,3030	0,0656	0,3686	15,6927	-651897,55	-0,2144	-0,0421	0,1723	15,4680
4	-648156,81	-0,3027	0,0630	0,3656	19,3563	-651895,16	-0,2118	-0,0499	0,1619	18,8180
5	-648154,47	-0,2947	0,0631	0,3577	20,1356	-651893,16	-0,2034	-0,0568	0,1465	18,5834
6	-648185,80	-0,3079	0,0632	0,3711	6,2184	-651921,48	-0,2192	-0,0411	0,1707	6,0793

ADENOZİN

	GAZ FAZ		HF			GAZ FAZ		B3LYP		
	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$
1	-601135,02	-0,3140	0,1287	0,4427	3,5140	-604639,25	-0,2312	-0,0324	0,1988	3,0206
2	-601124,83	-0,2989	0,1203	0,4192	4,5352	-604627,38	-0,2140	-0,0376	0,1764	3,8396
3	-601104,18	-0,2803	0,1539	0,4342	12,9005	-604606,45	-0,1898	-0,0069	0,1829	12,4748
4	-601111,41	-0,3028	0,1221	0,4249	1,6981	-604613,58	-0,2128	-0,0308	0,1820	3,5006

Çizelge 4.3. devamı

	SULU FAZ		HF			SULU FAZ		B3LYP		
	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$
1	-601185,27	-0,3176	0,0668	0,3844	7,9591	-604693,74	-0,2354	-0,0407	0,1947	6,1516
2	-601178,49	-0,3029	0,0663	0,3692	10,8560	-604689,58	-0,2204	-0,0381	0,1823	10,5571
3	-601170,93	-0,3048	0,0667	0,3715	19,7179	-604683,13	-0,2193	-0,0380	0,1814	19,8464
4	-601169,41	-0,3054	0,0647	0,3701	4,9379	-604681,25	-0,2195	-0,0383	0,1812	5,0852

	KAN FAZ		HF			KAN FAZ		B3LYP		
	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$
1	-601185,04	-0,3179	0,0669	0,3847	7,7418	-604696,00	-0,2356	-0,0408	0,1947	6,0636
2	-601178,49	-0,3029	0,0663	0,3692	10,8560	-604689,09	-0,2203	-0,0381	0,1822	10,4443
3	-601170,47	-0,3047	0,0667	0,3714	19,6623	-604682,72	-0,2192	-0,0379	0,1813	19,7997
4	-601169,41	-0,3054	0,0647	0,3701	4,9383	-604681,25	-0,2195	-0,0383	0,1812	5,1053

İNOZİN

	GAZ FAZ		HF			GAZ FAZ		B3LYP		
	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$
1	-613571,79	-0,3369	0,1144	0,4513	6,4019	-617093,59	-0,2429	-0,0343	0,2087	6,1435
2	-613581,47	-0,3259	0,1063	0,4322	4,4978	-617103,78	-0,2353	-0,0450	0,1903	5,5615
3	-613558,96	-0,3053	0,1430	0,4483	14,4796	-617083,04	-0,2124	-0,0160	0,1965	13,8084
4	-613577,48	-0,3259	0,1131	0,4390	3,7052	-617102,95	-0,2372	-0,0453	0,1919	3,6902

	SULU FAZ		HF			SULU FAZ		B3LYP		
	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$
1	-613624,60	-0,3376	0,0672	0,4048	11,5123	-617157,77	-0,2544	-0,0480	0,2063	11,3494
2	-613636,85	-0,3262	0,0666	0,3927	13,5336	-617169,56	-0,2432	-0,0447	0,1985	13,1441
3	-613629,02	-0,3302	0,0671	0,3973	22,1509	-617163,34	-0,2434	-0,0492	0,1942	22,2383
4	-613631,93	-0,3291	0,0653	0,3943	6,9137	-617164,75	-0,2420	-0,0506	0,1914	9,3863

	KAN FAZ		HF			KAN FAZ		B3LYP		
	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$
1	-613624,27	-0,3371	0,0672	0,4043	11,6188	-617157,79	-0,2544	-0,0480	0,2063	11,3494
2	-613636,43	-0,3263	0,0666	0,3929	13,4540	-617168,76	-0,2429	-0,0444	0,1985	13,1113
3	-613628,63	-0,3301	0,0670	0,3971	22,1267	-617162,88	-0,2432	-0,0491	0,1941	22,1956
4	-613631,17	-0,3296	-0,3296	0,0000	6,9298	-617164,59	-0,2418	-0,0503	0,1914	9,4047

Çizelge 4.3. devamı

HİPOKSANTİN

	GAZ FAZ					GAZ FAZ				
	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$
1	-303938,72	-0,3332	0,1203	0,4535	4,8188	-305715,29	-0,2439	-0,0339	0,2100	4,5584
2	-303941,46	-0,3159	0,1221	0,4380	5,6049	-305720,02	-0,2272	-0,0322	0,1950	5,0472
3	-303920,48	-0,3183	0,1319	0,4502	11,3005	-305699,48	-0,2257	-0,0283	0,1974	10,6161
4	-303933,32	-0,3245	0,1207	0,4452	5,1162	-305712,58	-0,2304	-0,0343	0,1961	4,6798
5	-303926,62	-0,3437	0,1102	0,4539	6,8894	-305705,05	-0,2510	-0,0390	0,2120	6,5954

	SULU FAZ					SULU FAZ				
	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$
1	-303968,24	-0,3364	0,0687	0,4052	6,7181	-305749,25	-0,2531	-0,0464	0,2067	6,7473
2	-303977,45	-0,3247	0,0679	0,3926	8,6331	-305758,87	-0,2413	-0,0404	0,2009	8,3059
3	-303968,74	-0,3274	0,0669	0,4014	18,1007	-305750,44	-0,2414	-0,0477	0,1937	17,9008
4	-303971,91	-0,3333	0,0681	0,4014	8,2928	-305754,14	-0,2451	-0,0500	0,1951	8,1024
5	-303965,31	-0,3444	0,0680	0,4124	10,5155	-305747,06	-0,2579	-0,0499	0,2080	10,5369

	KAN FAZ					KAN FAZ				
	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$
1	-303968,05	-0,3364	0,0687	0,4052	6,7022	-305749,08	-0,2531	-0,0464	0,2067	6,7294
2	-303977,21	-0,3247	0,0679	0,3925	8,6067	-305758,65	-0,2413	-0,0404	0,2009	8,2783
3	-303968,36	-0,3274	0,0666	0,4013	18,0367	-305750,08	-0,2414	-0,0476	0,1937	17,8332
4	-303971,66	-0,3333	0,0680	0,4013	8,2653	-305753,91	-0,2451	-0,0500	0,1951	8,0754
5	-303965,02	-0,3445	0,0679	0,4124	10,4801	-305746,78	-0,2580	-0,0499	0,2081	10,4977

Çizelge 4.3. devamı

KSANTİN

	GAZ FAZ		HF			GAZ FAZ		B3LYP		
	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$
1	-350899,70	-0,3281	0,1378	0,4659	11,9577	-352902,00	-0,2309	-0,0232	0,2078	11,3023
2	-350934,33	-0,3289	0,1417	0,4706	7,6536	-352934,51	-0,2318	-0,0192	0,2127	7,1502
3	-350930,28	-0,3112	0,1468	0,4579	6,7419	-352930,90	-0,2202	-0,0117	0,2085	6,3031
4	-350903,23	-0,3105	0,0879	0,3984	11,7292	-352907,53	-0,2121	-0,0559	0,1562	10,7783
5	-350920,79	-0,3077	0,1057	0,4134	6,3041	-352923,21	-0,2126	-0,0440	0,1687	5,4739
6	-350942,96	-0,3335	0,1105	0,4440	4,7527	-352943,38	-0,2312	-0,0408	0,1934	4,1357
7	-350930,58	-0,3192	0,1207	0,4399	0,5561	-352931,91	-0,2250	-0,0299	0,1951	0,5493
8	-350912,56	-0,3238	0,0965	0,4203	10,1897	-352916,30	-0,2254	-0,0509	0,1745	9,0716
9	-350912,95	-0,3282	0,1254	0,4537	6,6228	-352915,39	-0,2310	-0,0292	0,2018	5,9246
10	-350923,64	-0,3264	0,0905	0,4169	2,6512	-352924,58	-0,2292	-0,0565	0,1727	2,6093
11	-350920,02	-0,3195	0,1234	0,4428	6,6682	-352921,77	-0,2240	-0,0326	0,1915	6,0937
12	-350913,91	-0,3305	0,1077	0,4382	6,8667	-352916,08	-0,2337	-0,0390	0,1947	6,1986
13	-350908,89	-0,3214	0,1029	0,4243	5,4023	-352910,78	-0,2261	-0,0438	0,1823	5,3122
14	-350905,66	-0,3194	0,0985	0,4179	4,3616	-352908,58	-0,2306	-0,0495	0,1811	4,1396
15	-350925,36	-0,3230	0,1268	0,4498	5,9818	-352925,89	-0,2302	-0,0275	0,2027	5,4950

	SULU FAZ		HF			SULU FAZ		B3LYP		
	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$
1	-350959,78	-0,3269	0,0640	0,3910	20,2421	-352966,10	-0,2388	-0,0355	0,2033	20,0388
2	-350978,79	-0,3256	0,0649	0,1994	11,6653	-352984,01	-0,2370	-0,0376	0,1994	11,5913
3	-350970,78	-0,3183	0,0656	0,3839	10,3994	-352976,63	-0,2329	-0,0306	0,2023	10,3332
4	-350959,03	-0,3229	0,0645	0,3873	18,6428	-352966,55	-0,2298	-0,0629	0,1670	18,0905
5	-350963,95	-0,3174	0,0656	0,3830	9,6704	-352970,57	-0,2284	-0,0534	0,1750	9,1818
6	-350980,58	-0,2401	0,0655	0,3967	6,6427	-352986,28	-0,2401	-0,0495	0,1906	6,2732
7	-350969,86	-0,3247	0,0658	0,3905	0,5434	-352976,41	-0,2365	-0,0434	0,1931	0,5612
8	-350963,31	-0,3292	0,0660	0,3953	15,5405	-352970,53	-0,2382	-0,0579	0,1804	14,8508
9	-350963,10	-0,3323	0,0655	0,3978	10,4145	-352969,92	-0,2424	-0,0434	0,1989	10,1177
10	-350961,89	-0,3256	0,0647	0,3902	4,4885	-352968,34	-0,2367	-0,0614	0,1752	4,5166
11	-350965,89	-0,3231	0,0655	0,3886	10,0887	-352972,27	-0,2351	-0,0473	0,1878	9,8348
12	-350959,23	-0,3332	0,0667	0,3999	10,1484	-352966,16	-0,2436	-0,0490	0,1946	9,8054
13	-350951,25	-0,3252	0,0647	0,3899	9,1134	-352958,40	-0,2378	-0,0534	0,1844	9,0347
14	-350951,43	-0,3251	0,0650	0,3901	6,4659	-352958,85	-0,2411	-0,0554	0,1857	6,4062
15	-350962,28	-0,3262	0,0669	0,3931	8,2711	-352968,35	-0,2401	-0,0412	0,1990	8,1401

Çizelge 4.3. devamı

	KAN FAZ		HF			KAN FAZ		B3LYP		
	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$
1	-350959,27	-0,3269	0,0637	0,3907	20,1684	-352965,61	-0,2388	-0,0355	0,2033	19,9565
2	-350978,49	-0,3257	0,0648	0,3905	11,6285	-352983,71	-0,2370	-0,0376	0,1995	11,5538
3	-350970,51	-0,3182	0,0656	0,3838	10,3649	-352976,38	-0,2329	-0,0306	0,2024	10,2962
4	-350958,60	-0,3228	0,0643	0,3871	18,5811	-352966,14	-0,2298	-0,0629	0,1668	18,0249
5	-350963,67	-0,3175	0,0655	0,3830	9,6443	-352970,31	-0,2284	-0,0535	0,1749	9,1524
6	-350980,36	-0,3312	0,0655	0,3968	6,6301	-352986,07	-0,2402	-0,0495	0,1906	6,2586
7	-350969,62	-0,3248	0,0658	0,3905	0,5399	-352976,18	-0,2365	-0,0434	0,1931	0,5573
8	-350962,93	-0,3293	0,0660	0,3952	15,4944	-352931,04	-0,2400	-0,0706	0,1694	10,4033
9	-350962,73	-0,3323	0,0654	0,3977	10,3785	-352969,57	-0,2424	-0,0435	0,1990	10,0870
10	-350961,66	-0,3256	0,0646	0,3902	4,4714	-352968,12	-0,2367	-0,0615	0,1752	4,4985
11	-350965,57	-0,3231	0,0654	0,3885	10,0597	-352971,96	-0,2351	-0,0473	0,1878	9,8038
12	-350958,89	-0,3332	0,0667	0,3999	10,1181	-352965,83	-0,2437	-0,0490	0,1946	9,7721
13	-350950,98	-0,3253	0,0646	0,3898	9,0808	-352958,14	-0,2378	-0,0535	0,1843	9,0004
14	-350951,11	-0,3251	0,0649	0,3900	6,4529	-352958,54	-0,2411	-0,0555	0,1856	6,3938
15	-350962,03	-0,3262	0,0669	0,3931	8,2323	-352968,12	-0,2402	-0,0412	0,1990	8,1177

ÜRİK ASİT

	GAZ FAZ		HF			GAZ FAZ		B3LYP		
	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$
1	-397929,36	-0,3211	0,1183	0,4394	3,2015	-400154,17	-0,2173	-0,0338	0,1836	3,0359
2	-397903,45	-0,3185	0,1059	0,4243	4,9627	-400130,93	-0,2172	-0,0426	0,1747	4,7780
3	-397897,28	-0,3179	0,1229	0,4408	8,4112	-400124,17	-0,2148	-0,0364	0,1842	7,9164
4	-397925,72	-0,3067	0,1226	0,4293	5,7376	-400150,87	-0,2083	-0,0278	0,1805	4,8628
5	-397916,87	-0,3180	0,1396	0,4576	6,5721	-400140,29	-0,2174	-0,0171	0,2004	6,3046
6	-397927,36	-0,3248	0,1257	0,4504	4,9675	-400149,99	-0,2229	-0,0278	0,1951	4,4934
7	-397915,59	-0,3247	0,1223	0,4470	1,1926	-400140,01	-0,2235	-0,0266	0,1970	1,3614
8	-397913,43	-0,3011	0,1441	0,4452	5,3508	-400137,40	-0,2070	-0,0110	0,1960	4,9696
9	-397908,05	-0,3134	0,1304	0,4438	1,7625	-400132,38	-0,2160	-0,0207	0,1954	1,8492
10	-397898,69	-0,3124	0,1247	0,4371	9,3656	-400124,51	-0,2136	-0,0279	0,1858	8,7631
11	-397898,25	-0,3167	0,1127	0,4295	9,9389	-400123,92	-0,2164	-0,0371	0,1794	9,1341
12	-397898,35	-0,3029	0,1141	0,4169	5,4928	-400124,07	-0,2057	-0,0350	0,1707	5,1797
13	-397893,66	-0,3195	0,1051	0,4246	9,7668	-400118,49	-0,2135	-0,0430	0,1705	9,2563
14	-397909,23	-0,3138	0,1367	0,4505	5,6005	-400132,68	-0,2184	-0,0159	0,2025	5,3747
15	-397901,12	-0,3265	0,1251	0,4515	6,2377	-400125,04	-0,2270	-0,0241	0,2029	5,8384

Çizelge 4.3. devamı

	SULU FAZ		HF			SULU FAZ		B3LYP		
	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$
1	-397977,14	-0,3155	0,0626	0,3781	5,1583	-400208,34	-0,2212	0,0626	0,3781	5,1590
2	-397961,36	-0,3155	0,0626	0,3781	7,7905	-400193,97	-0,2224	-0,0478	0,1747	8,0012
3	-395705,11	-0,3036	0,1370	0,4406	13,5744	-397941,02	-0,1964	-0,1964	0,0000	12,7397
4	-395717,45	-0,2991	0,1294	0,4285	7,8321	-397953,54	-0,1950	-0,0123	0,1827	6,7510
5	-397966,42	-0,3141	0,0627	0,3768	10,2912	-400197,00	-0,2226	-0,0331	0,1895	10,4347
6	-397970,38	-0,3212	0,0633	0,3845	7,2169	-400200,65	-0,2280	-0,0391	0,1889	7,3526
7	-397962,26	-0,3209	0,0639	0,3848	1,5060	-400193,63	-0,2280	-0,0353	0,1927	1,8822
8	-397956,96	-0,3075	0,0635	0,3710	12,9054	-400188,45	-0,2197	-0,0269	0,1928	12,7609
9	-397958,32	-0,3174	0,0637	0,3811	2,3491	-400189,48	-0,2267	-0,0337	0,1930	2,5237
10	-397949,83	-0,3130	0,0624	0,3754	15,2517	-400182,07	-0,2227	-0,0429	0,1798	15,3853
11	-395693,37	-0,3130	0,1121	0,4251	14,0212	-400185,59	-0,2279	-0,0470	0,1809	15,0404
12	-397951,72	-0,3097	0,0632	0,3729	8,5487	-400183,62	-0,2191	-0,0456	0,1735	8,6640
13	-397949,97	-0,3227	0,0620	0,3846	20,5476	-400181,31	-0,2265	0,0507	0,2772	20,2448
14	-397949,58	-0,3154	0,0640	0,3794	9,9912	-400181,04	-0,2270	-0,0315	0,1955	10,2099
15	-397950,65	-0,3266	0,0640	0,3906	9,1988	-400181,78	-0,2349	-0,0363	0,1986	9,2009

	KAN FAZ		HF			KAN FAZ		B3LYP		
	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$	E(Kcal/mol)	HOMO	LUMO	η	$\mu(D)$
1	-397976,84	-0,3157	0,0625	0,3781	5,1393	-400208,06	-0,2213	-0,0402	0,1811	5,1390
2	-395708,21	-0,3027	0,1157	0,4184	7,4205	-397944,39	-0,1977	-0,0238	0,1739	7,2991
3	-395704,67	-0,3036	0,1370	0,4406	13,5318	-397940,63	-0,1965	-0,0077	0,1888	12,6940
4	-397970,05	-0,3109	0,0634	0,3744	8,6148	-400201,68	-0,2194	-0,0350	0,1844	7,9623
5	-397966,08	-0,3142	0,0626	0,3767	10,2571	-400196,68	-0,2227	-0,0331	0,1896	10,3974
6	-397970,13	-0,3213	0,0632	0,3845	7,1976	-400200,41	-0,2281	-0,0392	0,1889	7,3363
7	-397961,94	-0,3210	0,0639	0,3848	1,4994	-400193,31	-0,2281	-0,0354	0,1928	1,8735
8	-397956,58	-0,3075	0,0634	0,3709	12,8608	-400188,08	-0,2197	-0,0268	0,1928	12,7150
9	-395698,00	-0,3119	0,1282	0,4402	2,9519	-397933,35	-0,2073	-0,0128	0,1945	3,1508
10	-397949,38	-0,3131	0,0622	0,3753	15,2053	-400181,63	-0,2228	-0,0429	0,1799	15,3300
11	-397906,40	-0,3234	0,0285	0,3519	11,2787	-400185,20	-0,2280	-0,0470	0,1809	14,9894
12	-397951,37	-0,3097	0,0631	0,3728	8,5279	-400183,27	-0,2192	-0,0457	0,1735	8,6359
13	-397949,43	-0,3227	0,0617	0,3844	20,4792	-400180,78	-0,2265	-0,0508	0,1757	20,1665
14	-397951,42	-0,3160	0,0643	0,3803	7,8731	-400182,61	-0,2274	-0,0311	0,1963	8,0692
15	-397950,30	-0,3267	0,0640	0,3906	9,1697	-400181,43	-0,2349	-0,0363	0,1986	9,1699

Çizelge 4.4. Pürin katabolizmasında incelenen bazı maddelerin gaz, su ve kan fazlarında hesaplanan mulliken yükleri

GUANİN TAUTOMER YAPILARI

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
GUT1						
1 N	-0,6871	-0,6881	-0,6915	-0,5804	-0,5814	-0,5484
2 C	0,6963	0,6964	0,8279	0,5573	0,5573	0,6410
3 N	-0,6572	-0,6579	-0,7075	-0,5550	-0,5557	-0,5788
4 C	0,4068	0,4072	0,6987	0,2449	0,2451	0,5466
5 C	0,0083	0,0088	-0,0237	0,2590	0,2595	0,1407
6 C	0,5239	0,5241	0,7339	0,2805	0,2810	0,5101
7 N	-0,6121	-0,6121	-0,7618	-0,4619	-0,4620	-0,5961
8 C	0,3419	0,3420	0,3561	0,2152	0,2152	0,2829
9 N	-0,5361	-0,5370	-0,5726	-0,5320	-0,5328	-0,5286
10 O	-0,6241	-0,6248	-0,6155	-0,5441	-0,5449	-0,5177
11 N	-0,7738	-0,7743	-0,7711	-0,6511	-0,6517	-0,6435
12 H	0,4403	0,4410	0,3296	0,3959	0,3967	0,2715
13 H	0,2339	0,2344	0,1774	0,1991	0,1996	0,1216
14 H	0,4656	0,4662	0,3753	0,4504	0,4512	0,3393
15 H	0,3859	0,3862	0,3196	0,3602	0,3606	0,2770
16 H	0,3872	0,3875	0,3251	0,3619	0,3622	0,2821
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
GUT2						
1 N	-0,7313	-0,7314	-0,8443	-0,5302	-0,5438	-0,6097
2 C	0,7617	0,7616	0,9608	0,5335	0,6009	0,6984
3 N	-0,6958	-0,6965	-0,7218	-0,5744	-0,5895	-0,5804
4 C	0,3792	0,3804	0,6401	0,1855	0,1814	0,5003
5 C	-0,0354	-0,0354	-0,0273	0,2279	0,2110	0,1391
6 C	0,7228	0,7230	0,8205	0,4619	0,4661	0,5633
7 N	-0,5899	-0,5900	-0,7407	-0,4397	-0,4403	-0,5791
8 C	0,3491	0,3489	0,3327	0,2457	0,2446	0,2723
9 N	-0,5286	-0,5301	-0,5168	-0,5169	-0,5194	-0,4795
10 O	-0,7760	-0,7774	-0,5942	-0,6993	-0,7012	-0,5022
11 N	-0,7737	-0,7741	-0,7926	-0,6158	-0,6523	-0,6435
12 H	0,4460	0,4468	0,3274	0,4000	0,4004	0,2725
13 H	0,4399	0,4407	0,3273	0,3964	0,3966	0,2710
14 H	0,2299	0,2303	0,1713	0,1969	0,1968	0,1193

Çizelge 4.4.devamı

15 H	0,4020	0,4024	0,3384	0,3669	0,3753	0,2877
16 H	0,4001	0,4006	0,3189	0,3613	0,3732	0,2702
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
GUT3						
1 N	-0,7610	-0,7611	-0,8371	-0,5635	-0,5636	-0,6129
2 C	0,7555	0,7562	0,9075	0,5816	0,5820	0,6794
3 N	-0,7480	-0,7480	-0,8868	-0,5437	-0,5436	-0,6818
4 C	0,3940	0,3948	0,7498	0,1823	0,1838	0,5917
5 C	0,0935	0,0937	-0,0350	0,3184	0,3181	0,1246
6 C	0,6833	0,6833	0,8592	0,4342	0,4338	0,6016
7 N	-0,5876	-0,5875	-0,7477	-0,4453	-0,4452	-0,5866
8 C	0,3362	0,3362	0,3293	0,2289	0,2288	0,2688
9 N	-0,5141	-0,5159	-0,5013	-0,5053	-0,5070	-0,4682
10 O	-0,7463	-0,7478	-0,5736	-0,6734	-0,6749	-0,4878
11 N	-0,8079	-0,8097	-0,6883	-0,7402	-0,7418	-0,5931
12 H	0,4433	0,4437	0,3485	0,3982	0,3987	0,2914
13 H	0,4481	0,4491	0,3225	0,4007	0,4017	0,2648
14 H	0,4502	0,4511	0,3263	0,4060	0,4069	0,2689
15 H	0,2357	0,2361	0,1812	0,2014	0,2019	0,1267
16 H	0,3248	0,3256	0,2454	0,3194	0,3202	0,2122
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
GUT4						
1 N	-0,7634	-0,7635	-0,8315	-0,5695	-0,5697	-0,6098
2 C	0,7480	0,7485	0,9038	0,5783	0,5788	0,6770
3 N	-0,7524	-0,7524	-0,8796	-0,5416	-0,5417	-0,6763
4 C	0,2260	0,2264	0,6130	-0,0337	-0,0333	0,4747
5 C	0,2674	0,2676	0,0673	0,5228	0,5230	0,2174
6 C	0,7024	0,7023	0,8767	0,4799	0,4798	0,6149
7 N	-0,5597	-0,5605	-0,5984	-0,4788	-0,4796	-0,5022
8 C	0,3661	0,3660	0,3742	0,2240	0,2239	0,2899
9 N	-0,5798	-0,5799	-0,6934	0,4911	-0,4913	-0,5759
10 O	-0,7472	-0,7482	-0,6078	-0,6747	-0,6756	-0,5195
11 N	-0,8161	-0,8178	-0,6922	-0,7467	-0,7484	-0,5968
12 H	0,4452	0,4457	0,3490	0,4006	0,4010	0,2921
13 H	0,4411	0,4418	0,3327	0,3935	0,3944	0,2751
14 H	0,2446	0,2450	0,1903	0,2072	0,2077	0,1331

Çizelge 4.4. devamı

15 H	0,4549	0,4555	0,3461	0,4123	0,4131	0,2896
16 H	0,3227	0,3233	0,2495	0,3174	0,3181	0,2165
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
GUT5						
1 N	-0,6830	-0,6841	-0,6790	-0,5777	-0,5788	-0,5371
2 C	0,6761	0,6760	0,8160	0,5427	0,5424	0,6310
3 N	-0,6613	-0,6626	-0,6809	-0,5498	-0,5511	-0,5560
4 C	0,2161	0,2175	0,5468	0,0005	0,0018	0,4158
5 C	0,1620	0,1624	0,1109	0,4360	0,4363	0,2601
6 C	0,5703	0,5709	0,7357	0,3578	0,3584	0,5084
7 N	-0,5842	-0,5859	-0,5762	-0,4950	-0,4966	-0,4805
8 C	0,3822	0,3819	0,3841	0,2214	0,2211	0,2905
9 N	-0,6054	-0,6052	-0,7583	-0,5216	-0,5214	-0,6257
10 O	-0,6191	-0,6198	-0,6161	-0,5400	-0,5408	-0,5156
11 N	-0,7758	-0,7764	-0,7720	-0,6509	-0,6514	-0,6424
12 H	0,2408	0,2414	0,1822	0,2034	0,2039	0,1249
13 H	0,4503	0,4513	0,3165	0,4073	0,4084	0,2589
14 H	0,4619	0,4629	0,3477	0,4479	0,4490	0,3101
15 H	0,3840	0,3843	0,3218	0,3583	0,3586	0,2795
16 H	0,3849	0,3852	0,3207	0,3596	0,3600	0,2779
	HF			B3LYP		
GUT6	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
1N	-0,7360	-0,7361	-0,8405	-0,5512	-0,5513	-0,6193
2C	0,7484	0,7482	0,9401	0,5956	0,5952	0,7305
3N	-0,6995	-0,7008	-0,6943	-0,5809	-0,5822	-0,5700
4C	0,1981	0,1996	0,5106	-0,0505	-0,0490	0,3917
5C	0,1517	0,1519	0,0848	0,4284	0,4286	0,2384
6C	0,7394	0,7397	0,8345	0,5063	0,5065	0,5704
7N	-0,5711	-0,5726	-0,5811	-0,4857	-0,4872	-0,4891
8C	0,3772	0,3769	0,3683	0,2355	0,2351	0,2833
9N	-0,5875	-0,5876	-0,7032	-0,4974	-0,4975	-0,5813
10N	-0,7758	-0,7763	-0,7923	-0,6519	-0,6524	-0,6602
11O	-0,7775	-0,7783	-0,6265	-0,7012	-0,7019	-0,5358
12H	0,4473	0,4482	0,3280	0,4022	0,4031	0,2685
13H	0,2377	0,2382	0,1792	0,2020	0,2025	0,1230
14H	0,4498	0,4505	0,3382	0,4065	0,4073	0,2813
15H	0,4000	0,4003	0,3400	0,3722	0,3725	0,2967
16H	0,3977	0,3983	0,3141	0,3700	0,3707	0,2717

Çizelge 4.4. devamı

GUANOZİNİN TAUTOMER YAPILARI

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
GZT1						
1 N	-0,7076	-0,7076	-0,8430	-0,5403	-0,5532	-0,6194
2 C	0,7579	0,7579	0,9715	0,5831	0,6495	0,7404
3 N	-0,6766	-0,6766	-0,8163	-0,4851	-0,4992	-0,6584
4 C	0,7075	0,7075	0,7313	0,2071	0,1934	0,5631
5 C	-0,4277	-0,4277	-0,0390	-0,2010	-0,1990	0,1221
6 C	0,5919	0,5919	0,8293	0,5078	0,5074	0,5747
7 N	-0,2743	-0,2743	-0,7871	-0,0748	-0,0726	-0,5312
8 C	0,4045	0,4045	0,3624	0,3461	0,3435	0,2786
9 N	-0,4231	-0,4231	-0,5344	-0,4410	-0,4431	-0,4949
10 O	-0,7624	-0,7624	-0,5845	-0,6947	-0,6961	-0,4945
11 C	-0,0261	-0,0261	0,4778	-0,2431	-0,2627	0,3277
12 N	-0,7259	-0,7259	-0,7703	-0,6137	-0,6480	-0,6457
13 O	-0,5262	-0,5262	-0,6553	-0,3184	-0,3203	-0,5046
14 C	0,1007	0,1007	0,1673	0,1483	0,1546	0,1594
15 C	0,1916	0,1916	0,2048	-0,0727	-0,0822	0,1568
16 C	0,0448	0,0448	0,1086	0,0668	0,0923	0,0841
17 O	-0,6998	-0,6998	-0,6587	-0,6017	-0,6057	-0,5515
18 O	-0,7150	-0,7150	-0,7041	-0,6157	-0,6154	-0,5992
19 C	0,1665	0,1665	0,1353	0,0651	0,0597	0,0657
20 O	-0,7389	-0,7389	-0,6451	-0,6479	-0,6505	-0,5387
21 H	0,4536	0,4536	0,3332	0,4059	0,4065	0,2759
22 H	0,2308	0,2308	0,1783	0,2006	0,2008	0,1278
23 H	0,1733	0,1733	0,1618	0,1691	0,1692	0,1239
24 H	0,3832	0,3832	0,3364	0,3653	0,3717	0,2990
25 H	0,3907	0,3907	0,3150	0,3649	0,3765	0,2769
26 H	0,1585	0,1585	0,1414	0,1668	0,1672	0,1065
27 H	0,1703	0,1703	0,1317	0,1709	0,1710	0,0897
28 H	0,1726	0,1726	0,1548	0,1861	0,1848	0,1119
29 H	0,4460	0,4460	0,3458	0,4332	0,4340	0,3146
30 H	0,4585	0,4585	0,3984	0,4308	0,4317	0,3518
31 H	0,1321	0,1321	0,1002	0,1503	0,1506	0,0845
32 H	0,1293	0,1293	0,1129	0,1516	0,1520	0,0946
33 H	0,4393	0,4393	0,3391	0,4300	0,4314	0,3078

Çizelge 4.4. devamı

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
GZT2						
1 N	-0,6847	-0,6860	-0,6858	-0,5602	-0,5600	-0,5425
2 C	0,7051	0,7076	0,8264	0,5472	0,5444	0,6288
3 N	-0,5685	-0,5696	-0,7817	-0,4924	-0,4937	-0,6261
4 C	0,5207	0,5211	0,7935	0,5151	0,5174	0,6143
5 C	-0,3743	-0,3749	-0,0265	-0,4238	-0,4255	0,1311
6 C	0,5274	0,5233	0,7425	0,3457	0,3435	0,5186
7 N	-0,2316	-0,2335	-0,8080	-0,0571	-0,0581	-0,5437
8 C	0,4379	0,4379	0,3881	0,3866	0,3865	0,2988
9 N	-0,4535	-0,4515	-0,5874	-0,4287	-0,4285	-0,5443
10 O	-0,0490	-0,0250	-0,6118	-0,1334	-0,1269	0,3100
11 C	-0,6267	-0,6262	-0,7539	-0,2072	-0,2052	0,1433
12 N	-0,7710	-0,7765	0,4621	0,0884	0,0842	0,1172
13 O	-0,5018	-0,5023	0,1793	0,2015	0,2045	0,1565
14 C	0,1341	0,1242	0,1771	-0,3571	-0,3596	-0,4883
15 C	0,0903	0,1113	0,1594	-0,5352	-0,5359	-0,5156
16 C	0,0686	0,0580	-0,6348	-0,6149	-0,6153	-0,6339
17 O	0,2270	0,2129	-0,6545	-0,0768	-0,0784	0,0563
18 O	-0,7335	-0,7340	-0,6870	-0,6110	-0,6116	-0,5273
19 C	-0,7203	-0,7211	0,1352	-0,6205	-0,6218	-0,5310
20 O	-0,7044	-0,7064	-0,6405	-0,5714	-0,5710	-0,5560
21 H	0,2309	0,2313	0,1784	0,2040	0,2046	0,1239
22 H	0,1636	0,1637	0,3778	0,1700	0,1704	0,0907
23 H	0,4682	0,4685	0,3160	0,1787	0,1793	0,1022
24 H	0,3819	0,3834	0,3222	0,1646	0,1653	0,0885
25 H	0,3882	0,3898	0,1215	0,1633	0,1641	0,0644
26 H	0,1574	0,1577	0,1378	0,4546	0,4553	0,3415
27 H	0,1607	0,1599	0,1189	0,3509	0,3522	0,2777
28 H	0,1709	0,1688	0,0950	0,3592	0,3590	0,2805
29 H	0,1314	0,1311	0,3515	0,1571	0,1567	0,1353
30 H	0,1319	0,1325	0,3933	0,1509	0,1508	0,0653
31 H	0,4369	0,4371	0,1629	0,4148	0,4155	0,3017
32 H	0,4418	0,4427	0,1018	0,4340	0,4349	0,3135
33 H	0,4438	0,4441	0,3305	0,4027	0,4027	0,3482

Çizelge 4.4. devamı

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
GZT3						
1 N	-0,6829	-0,6851	-0,6505	-0,5662	-0,5680	-0,5138
2 C	0,6408	0,6423	0,8012	0,4847	0,4866	0,5936
3 N	-0,6671	-0,6652	-0,8935	-0,4516	-0,4514	-0,6858
4 C	0,7179	0,7238	0,8357	0,6527	0,6513	0,6341
5 C	-0,3240	-0,3306	-0,0569	-0,3412	-0,3393	0,1102
6 C	0,5307	0,5313	0,7595	0,3807	0,3812	0,5361
7 N	-0,2865	-0,2864	-0,8000	-0,0905	-0,0898	-0,5435
8 C	0,3674	0,3651	0,3577	0,2765	0,2756	0,2695
9 N	-0,4114	-0,4112	-0,5766	-0,4208	-0,4215	-0,5375
10 O	-0,5964	-0,5973	-0,6107	-0,5088	-0,5098	-0,5113
11 C	-0,0516	-0,0569	0,4799	-0,4789	-0,4802	0,3291
12 N	-0,7990	-0,8011	-0,6639	-0,7273	-0,7295	-0,5762
13 O	-0,5222	-0,5217	-0,6529	-0,3443	-0,3453	-0,5006
14 C	0,1246	0,1288	0,1773	0,2417	0,2421	0,1645
15 C	0,2070	0,2011	0,1682	-0,0266	-0,0262	0,1283
16 C	0,0226	0,0305	0,1179	0,1424	0,1429	0,0901
17 O	-0,6944	-0,6949	-0,6507	-0,5834	-0,5845	-0,5410
18 O	-0,7585	-0,7601	-0,6657	-0,6522	-0,6526	-0,5432
19 C	0,1570	0,1562	0,1327	-0,0571	-0,0571	0,0607
20 O	-0,7334	-0,7338	-0,6434	-0,6435	-0,6447	-0,5359
21 H	0,4355	0,4360	0,3610	0,3737	0,3740	0,2863
22 H	0,2380	0,2385	0,1820	0,2084	0,2090	0,1276
23 H	0,4697	0,4704	0,3734	0,4529	0,4537	0,3370
24 H	0,1818	0,1824	0,1709	0,1853	0,1855	0,1329
25 H	0,2953	0,2958	0,2227	0,2906	0,2914	0,1904
26 H	0,1670	0,1668	0,1567	0,1803	0,1805	0,1243
27 H	0,1780	0,1784	0,1386	0,1889	0,1894	0,1025
28 H	0,1745	0,1751	0,1487	0,1952	0,1958	0,1100
29 H	0,4480	0,4485	0,3486	0,4379	0,4387	0,3179
30 H	0,4652	0,4665	0,3547	0,4610	0,4619	0,3256
31 H	0,1337	0,1340	0,1022	0,1531	0,1535	0,0877
32 H	0,1331	0,1327	0,1288	0,1544	0,1544	0,1147
33 H	0,4396	0,4399	0,3458	0,4316	0,4324	0,3155

Çizelge 4.4. devamı

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
GZT4						
1 N	-0,6897	-0,6889	-0,6442	-0,5721	-0,5730	-0,4988
2 C	0,6375	0,6379	0,8017	0,4475	0,4457	0,5964
3 N	-0,7134	-0,7130	-0,8601	-0,5022	-0,5029	-0,6535
4 C	-0,1529	-0,1288	0,6207	-0,5720	-0,5646	0,4728
5 C	0,6070	0,6005	0,1001	0,7437	0,7222	0,2373
6 C	0,5532	0,5425	0,7594	0,4171	0,4238	0,5202
7 N	-0,4486	-0,4497	-0,6181	-0,3906	-0,3901	-0,5146
8 C	0,2786	0,2750	0,4125	0,2426	0,2511	0,2944
9 N	-0,3686	-0,3896	-0,7728	-0,0722	-0,0709	-0,5531
10 O	-0,6047	-0,6035	-0,6413	-0,4988	-0,4990	-0,5518
11 C	-0,8399	-0,8416	-0,6634	-0,7538	-0,7553	-0,5697
12 N	0,2397	0,2591	0,4250	-0,0425	-0,0398	0,2869
13 O	-0,0793	-0,0941	0,1788	-0,1579	-0,1466	0,1292
14 C	0,3599	0,3611	0,1462	0,2525	0,2505	0,1237
15 C	0,0159	0,0274	0,1901	0,0401	0,0260	0,1552
16 C	-0,5599	-0,5543	-0,7052	-0,4168	-0,4144	-0,5558
17 O	0,0926	0,0844	0,1253	-0,1039	-0,0962	0,0474
18 O	-0,7143	-0,7159	-0,6489	-0,6148	-0,6158	-0,5528
19 C	-0,7318	-0,7307	-0,6493	-0,6153	-0,6223	-0,5371
20 O	-0,7226	-0,7247	-0,6645	-0,6122	-0,6165	-0,5455
21 H	0,4396	0,4409	0,3215	0,3910	0,3920	0,2652
22 H	0,2495	0,2488	0,2037	0,2135	0,2130	0,1356
23 H	0,4981	0,4970	0,4065	0,4626	0,4617	0,3544
24 H	0,3029	0,3036	0,2226	0,2991	0,3000	0,1946
25 H	0,2048	0,2062	0,1692	0,2147	0,2156	0,1350
26 H	0,1908	0,1924	0,1519	0,2049	0,2051	0,1195
27 H	0,1711	0,1705	0,1440	0,1812	0,1821	0,1073
28 H	0,1809	0,1813	0,1638	0,1894	0,1897	0,1278
29 H	0,1192	0,1177	0,1367	0,1572	0,1563	0,1239
30 H	0,1364	0,1373	0,1152	0,1548	0,1550	0,1188
31 H	0,4379	0,4390	0,3526	0,4283	0,4289	0,3282
32 H	0,4483	0,4488	0,3604	0,4353	0,4374	0,3276
33 H	0,4614	0,4630	0,3597	0,4493	0,4512	0,3305

Çizelge 4.4. devamı

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
GZT5						
1 N	-0,6925	-0,6941	-0,7731	-0,5101	-0,5121	-0,5703
2 C	0,5815	0,5822	0,7971	0,4003	0,3981	0,5948
3 N	-0,7325	-0,7346	-0,6984	-0,6039	-0,6055	-0,5654
4 C	-0,0229	-0,0353	0,5645	-0,5175	-0,5106	0,4106
5 C	0,4100	0,4066	0,0815	0,6435	0,6443	0,2192
6 C	0,6670	0,6857	0,7952	0,4781	0,4703	0,5583
7 N	-0,4676	-0,4699	-0,5882	-0,3812	-0,3772	-0,4852
8 C	0,3128	0,3088	0,4239	0,2979	0,2952	0,2976
9 N	-0,3273	-0,3093	-0,7591	-0,0539	-0,0487	-0,5466
10 O	-0,6394	-0,6433	-0,6548	-0,5220	-0,5225	-0,5504
11 C	-0,8769	-0,8791	-0,7306	-0,7877	-0,7861	-0,6407
12 N	0,2157	0,1934	0,4054	-0,0483	-0,0330	0,2713
13 O	-0,0152	0,0013	0,1873	-0,1272	-0,1403	0,1361
14 C	0,3493	0,3500	0,1529	0,2413	0,2435	0,1254
15 C	0,0283	0,0253	0,1912	0,0530	0,0568	0,1634
16 C	-0,5644	-0,5717	-0,7148	-0,4235	-0,4220	-0,5468
17 O	0,0856	0,0887	0,1150	-0,1133	-0,1114	0,0490
18 O	-0,7193	-0,7206	-0,6565	-0,6178	-0,6192	-0,5448
19 C	-0,7360	-0,7386	-0,6501	-0,6191	-0,6185	-0,5410
20 O	-0,7427	-0,7413	-0,6661	-0,6187	-0,6381	-0,5478
21 H	0,4557	0,4561	0,3456	0,4101	0,4105	0,2872
22 H	0,2482	0,2503	0,2013	0,2124	0,2132	0,1300
23 H	0,5097	0,5146	0,4276	0,4750	0,4753	0,3729
24 H	0,3127	0,3128	0,2625	0,3068	0,3072	0,2277
25 H	0,2031	0,2030	0,1574	0,2144	0,2151	0,1258
26 H	0,1899	0,1897	0,1476	0,2022	0,2050	0,1169
27 H	0,1719	0,1741	0,1408	0,1839	0,1801	0,1065
28 H	0,1809	0,1809	0,1601	0,1902	0,1898	0,1270
29 H	0,1206	0,1213	0,1453	0,1579	0,1576	0,1301
30 H	0,1373	0,1373	0,1170	0,1563	0,1562	0,1057
31 H	0,4389	0,4396	0,3505	0,4296	0,4302	0,3217
32 H	0,4482	0,4475	0,3618	0,4377	0,4358	0,3301
33 H	0,4688	0,4683	0,3596	0,4534	0,4606	0,3309

Çizelge 4.4. devamı

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
GZT6						
1 N	-0,7192	-0,7193	-0,8214	-0,7184	-0,5308	-0,6021
2 C	0,7373	0,7373	0,8840	0,7327	0,5783	0,6760
3 N	-0,6878	-0,6879	-0,6740	-0,6867	-0,5702	-0,5475
4 C	-0,1008	-0,1008	0,5141	-0,1756	-0,5230	0,3885
5 C	0,2498	0,2498	0,1232	0,2994	0,5932	0,2519
6 C	0,9049	0,9050	0,8556	0,9789	0,7162	0,6018
7 N	-0,4783	-0,4784	-0,6057	-0,4763	-0,4133	-0,5048
8 C	0,1995	0,1996	0,4202	0,1916	0,1747	0,3045
9 N	-0,1792	-0,1793	-0,7514	-0,1598	-0,0008	-0,5397
10 O	-0,7700	-0,7701	-0,6954	-0,7710	-0,6896	-0,5941
11 C	-0,7766	-0,7767	-0,7557	-0,7756	-0,6530	-0,6418
12 N	-0,0503	-0,0504	0,4673	-0,1575	-0,5455	0,3087
13 O	0,0816	0,0817	0,1891	0,1301	0,2223	0,1465
14 C	0,2591	0,2591	0,1554	0,2931	0,0371	0,1310
15 C	0,1850	0,1850	0,1990	0,1818	0,2491	0,1731
16 C	-0,5588	-0,5589	-0,6828	-0,5551	-0,3694	-0,5196
17 O	0,1503	0,1503	0,1293	0,1573	-0,0151	0,0592
18 O	-0,7298	-0,7299	-0,6452	-0,7315	-0,6445	-0,5391
19 C	-0,7251	-0,7251	-0,6641	-0,7350	-0,6278	-0,5586
20 O	-0,7462	-0,7463	-0,6983	-0,7746	-0,6623	-0,5923
21 H	0,4523	0,4524	0,3361	0,4519	0,4065	0,2800
22 H	0,2289	0,2289	0,1981	0,2281	0,2028	0,1425
23 H	0,3996	0,3996	0,3303	0,3991	0,3729	0,2928
24 H	0,3988	0,3989	0,3021	0,3977	0,3721	0,2683
25 H	0,1680	0,1680	0,1626	0,1694	0,1675	0,1259
26 H	0,1771	0,1771	0,1296	0,1793	0,1949	0,0958
27 H	0,1648	0,1649	0,1337	0,1623	0,1713	0,0942
28 H	0,1574	0,1575	0,1394	0,1574	0,1709	0,1083
29 H	0,1335	0,1335	0,1207	0,1344	0,1537	0,1089
30 H	0,1281	0,1281	0,1037	0,1285	0,1489	0,0898
31 H	0,4371	0,4371	0,3411	0,4367	0,4291	0,3104
32 H	0,4506	0,4506	0,3693	0,4458	0,4308	0,3310
33 H	0,4582	0,4583	0,3898	0,4612	0,4530	0,3498

Çizelge 4.4. devamı

ADENOZİNİN TAUTOMER YAPILARI

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
ADT1						
1 N	-0,5785	-0,5798	-0,6669	-0,4699	-0,4709	-0,5239
2 C	0,3065	0,3056	0,3628	0,2701	0,2691	0,2461
3 N	-0,5181	-0,5142	-0,7181	-0,3940	-0,3963	-0,5922
4 C	0,2593	0,2624	0,7498	0,1388	0,1359	0,5926
5 C	-0,1659	-0,1810	0,0634	-0,0950	-0,0931	0,1963
6 C	0,2917	0,2904	0,6563	0,1724	0,1725	0,5002
7 N	-0,1553	-0,1529	-0,7934	-0,0431	-0,0430	-0,5299
8 C	0,5246	0,5267	0,3892	0,4313	0,4308	0,2941
9 N	-0,4264	-0,4256	-0,5863	-0,4199	-0,4202	-0,5359
10 N	-0,7559	-0,7571	-0,7668	-0,6390	-0,6396	-0,6382
11 C	0,0645	0,0677	0,4597	-0,1649	-0,1546	0,3033
12 C	-0,1263	-0,1156	0,1805	-0,1832	-0,1814	0,1269
13 C	0,2613	0,2534	0,1788	0,1075	0,1026	0,1476
14 C	0,1983	0,2012	0,1597	0,1891	0,1880	0,1388
15 O	-0,5279	-0,5272	-0,6340	-0,3589	-0,3624	-0,5006
16 O	-0,6680	-0,6647	-0,6899	-0,5694	-0,5649	-0,5962
17 O	-0,7680	-0,7733	-0,6524	-0,6306	-0,6360	-0,5561
18 C	0,0535	0,0536	0,1336	-0,0787	-0,0785	0,0634
19 O	-0,7097	-0,7119	-0,6412	-0,6103	-0,6111	-0,5367
20 H	0,1856	0,1854	0,1629	0,1631	0,1631	0,1146
21 H	0,2315	0,2319	0,1775	0,2046	0,2051	0,1282
22 H	0,3881	0,3882	0,3352	0,3631	0,3634	0,2945
23 H	0,3992	0,3995	0,3268	0,3778	0,3781	0,2863
24 H	0,1579	0,1584	0,1200	0,1702	0,1703	0,0956
25 H	0,1697	0,1698	0,1364	0,1790	0,1794	0,1056
26 H	0,1626	0,1645	0,1172	0,1652	0,1667	0,0961
27 H	0,1520	0,1525	0,0934	0,1636	0,1646	0,0822
28 H	0,4373	0,4361	0,3955	0,4022	0,4011	0,3642
29 H	0,4528	0,4531	0,3524	0,4359	0,4379	0,3236
30 H	0,1425	0,1418	0,1660	0,1572	0,1567	0,1094
31 H	0,1320	0,1316	0,1017	0,1507	0,1506	0,0998
32 H	0,4284	0,4291	0,3299	0,4148	0,4157	0,2995

Çizelge 4.4. devamı

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
ADT2						
1 N	-0,5899	-0,6352	-0,7581	-0,4163	-0,4174	-0,5498
2 C	0,4368	0,4221	0,4623	0,3531	0,3532	0,3257
3 N	-0,4687	-0,4017	-0,7304	-0,3703	-0,3708	-0,5870
4 C	0,0908	0,0479	0,6898	-0,2252	-0,2248	0,5397
5 C	0,1944	0,1424	0,0210	0,3784	0,3727	0,1549
6 C	0,1069	0,1483	0,6608	0,0584	0,0630	0,4918
7 N	-0,2256	-0,2554	-0,7682	-0,0475	-0,0452	-0,5156
8 C	0,4602	0,4197	0,3693	0,3585	0,3573	0,2818
9 N	-0,4613	-0,4564	-0,5758	-0,4675	-0,4703	-0,5282
10 N	-0,7968	-0,8034	-0,6849	-0,7614	-0,7627	-0,6143
11 C	-0,0603	0,0208	0,4776	-0,2992	-0,2934	0,3281
12 C	-0,5003	-0,5060	-0,6548	-0,3233	-0,3232	-0,5045
13 C	0,0919	0,0524	0,1648	0,1498	0,1323	0,1560
14 C	0,1369	0,2139	0,2071	-0,0374	-0,0257	0,1580
15 O	0,0418	0,0061	0,1106	0,0769	0,0633	0,0871
16 O	-0,7011	0,1692	-0,6594	-0,6037	-0,6046	0,0645
17 O	-0,7269	-0,7292	-0,6936	-0,6195	-0,6232	-0,5398
18 C	0,2365	-0,7207	0,1340	0,0337	0,0481	-0,5844
19 O	-0,7332	-0,6925	-0,6460	-0,6479	-0,6493	-0,5522
20 H	0,4499	0,4699	0,3399	0,4088	0,4097	0,2859
21 H	0,2274	0,2389	0,1866	0,1961	0,1967	0,1366
22 H	0,2299	0,2547	0,1810	0,2031	0,2036	0,1308
23 H	0,3171	0,3244	0,2807	0,3120	0,3125	0,2474
24 H	0,1642	0,1848	0,1608	0,1706	0,1707	0,1230
25 H	0,1582	0,1669	0,1405	0,1681	0,1682	0,1063
26 H	0,1620	0,1712	0,1323	0,1701	0,1712	0,0910
27 H	0,1713	0,1702	0,1535	0,1830	0,1866	0,1107
28 H	0,4441	0,1366	0,3461	0,4337	0,4347	0,0871
29 H	0,4425	0,1400	0,3948	0,4318	0,4329	0,0983
30 H	0,1317	0,4284	0,1023	0,1501	0,1506	0,3082
31 H	0,1321	0,4337	0,1154	0,1532	0,1526	0,3473
32 H	0,4367	0,4372	0,3394	0,4296	0,4305	0,3151

Çizelge 4.4. devamı

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
ADT3						
1 N	-0,5311	-0,5327	-0,5836	-0,4217	-0,4233	-0,4527
2 C	0,4417	0,4417	0,3970	0,3394	0,3395	0,2702
3 N	-0,5543	-0,5537	-0,8247	-0,3587	-0,3577	-0,6264
4 C	0,3771	0,3763	0,7411	0,2821	0,2817	0,5643
5 C	0,0784	0,0796	0,0313	0,0909	0,0909	0,1676
6 C	0,0011	0,0026	0,5600	-0,0638	-0,0621	0,4078
7 N	-0,2910	-0,2910	-0,7843	-0,0879	-0,0883	-0,5281
8 C	0,3916	0,3916	0,3546	0,3059	0,3058	0,2673
9 N	-0,4355	-0,4369	-0,5659	-0,4389	-0,4398	-0,5208
10 N	-0,7505	-0,7527	-0,6329	-0,7098	-0,7118	-0,5708
11 C	-0,0477	-0,0474	0,4804	-0,4807	-0,4796	0,3278
12 C	-0,5237	-0,5243	-0,6547	-0,3458	-0,3468	-0,5021
13 C	0,1131	0,1128	0,1776	0,2162	0,2160	0,1656
14 C	0,2178	0,2193	0,1681	0,0020	0,0033	0,1271
15 O	0,0096	0,0089	0,1182	0,1241	0,1222	0,0906
16 O	-0,6930	-0,6937	-0,6502	-0,5803	-0,5813	-0,5400
17 O	-0,7628	-0,7632	-0,6673	-0,6579	-0,6583	-0,5444
18 C	0,1584	0,1573	0,1343	-0,0559	-0,0559	0,0616
19 O	-0,7337	-0,7347	-0,6420	-0,6436	-0,6448	-0,5346
20 H	0,2228	0,2234	0,1617	0,1917	0,1923	0,1085
21 H	0,4549	0,4555	0,3621	0,3951	0,3953	0,2893
22 H	0,2341	0,2346	0,1753	0,2059	0,2065	0,1230
23 H	0,3046	0,3050	0,2625	0,2985	0,2990	0,2268
24 H	0,1814	0,1817	0,1709	0,1859	0,1863	0,1339
25 H	0,1664	0,1664	0,1568	0,1808	0,1809	0,1249
26 H	0,1779	0,1782	0,1374	0,1902	0,1908	0,1020
27 H	0,1735	0,1740	0,1473	0,1958	0,1965	0,1087
28 H	0,4473	0,4480	0,3478	0,4376	0,4384	0,3174
29 H	0,4657	0,4663	0,3520	0,4627	0,4635	0,3234
30 H	0,1333	0,1335	0,1009	0,1532	0,1536	0,0867
31 H	0,1324	0,1331	0,1230	0,1546	0,1546	0,1099
32 H	0,4394	0,4401	0,3449	0,4317	0,4326	0,3149

Çizelge 4.4. devamı

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
ADT4						
1 N	-0,5252	-0,5252	-0,5939	-0,4153	-0,4154	-0,4559
2 C	0,3544	0,3544	0,4166	0,2227	0,2219	0,2860
3 N	-0,6253	-0,6253	-0,7872	-0,4255	-0,4255	-0,5908
4 C	-0,1506	-0,1506	0,5637	-0,4467	-0,4423	0,4362
5 C	0,5330	0,5330	0,1922	0,7210	0,7123	0,2954
6 C	0,2021	0,2021	0,5748	0,0451	0,0525	0,4133
7 N	-0,4567	-0,4567	-0,6147	-0,4050	-0,4053	-0,5172
8 C	0,2996	0,2996	0,4168	0,3051	0,3055	0,3055
9 N	-0,3174	-0,3174	-0,7612	-0,0939	-0,0958	-0,5456
10 N	-0,7130	-0,7130	-0,6683	-0,6552	-0,6552	-0,6041
11 C	0,2270	0,2270	0,4707	-0,1972	-0,2000	0,3039
12 C	-0,1397	-0,1398	0,1714	0,0470	0,0507	0,1362
13 C	0,3016	0,3016	0,1650	0,0515	0,0467	0,1315
14 C	0,3047	0,3047	0,1687	0,3501	0,3527	0,1705
15 O	-0,5929	-0,5929	-0,7107	-0,4330	-0,4323	-0,5239
16 O	0,0184	0,0184	0,1316	-0,2013	-0,2020	0,0592
17 O	-0,6902	-0,6902	-0,6494	-0,5971	-0,5974	-0,5379
18 C	-0,7483	-0,7483	-0,6584	-0,6352	-0,6347	-0,5553
19 O	-0,7313	-0,7313	-0,6763	-0,6194	-0,6201	-0,5685
20 H	0,2254	0,2254	0,1768	0,1953	0,1953	0,1258
21 H	0,4560	0,4560	0,3365	0,4103	0,4103	0,2809
22 H	0,2185	0,2185	0,1977	0,1978	0,1984	0,1445
23 H	0,2735	0,2735	0,2272	0,2632	0,2634	0,2032
24 H	0,1575	0,1575	0,1517	0,1594	0,1599	0,1213
25 H	0,1858	0,1858	0,1366	0,1969	0,1969	0,1034
26 H	0,1643	0,1643	0,1406	0,1735	0,1733	0,0996
27 H	0,1634	0,1634	0,1383	0,1743	0,1741	0,1109
28 H	0,1326	0,1326	0,1284	0,1555	0,1560	0,1101
29 H	0,1434	0,1434	0,1296	0,1589	0,1589	0,0915
30 H	0,4276	0,4276	0,3477	0,4179	0,4179	0,3117
31 H	0,4479	0,4479	0,3705	0,4357	0,4354	0,3338
32 H	0,4540	0,4540	0,3662	0,4438	0,4438	0,3242

Çizelge 4.4. devamı

İNOZİNİN TAUTOMER YAPILARI

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
NT1						
1 N	-0,5568	-0,5587	-0,6140	-0,4429	-0,4496	-0,4753
2 C	0,2641	0,2664	0,3531	0,1967	0,2070	0,2310
3 N	-0,4870	-0,4886	-0,6976	-0,4095	-0,3992	-0,5453
4 C	0,4438	0,4432	0,7626	0,3269	0,3049	0,5924
5 C	-0,3066	-0,3051	0,0127	-0,1695	-0,1646	0,1579
6 C	0,4236	0,4272	0,7263	0,2032	0,2197	0,5128
7 N	-0,1374	-0,1375	-0,7939	0,0412	0,0291	-0,5296
8 C	0,5013	0,5027	0,3997	0,4181	0,4189	0,3094
9 N	-0,4311	-0,4330	-0,5941	-0,4198	-0,4224	-0,5445
10 O	-0,6310	-0,6311	-0,6091	-0,5337	-0,5332	-0,5082
11 C	0,0631	0,0550	0,4587	-0,1781	-0,1674	0,3096
12 C	-0,1024	-0,1108	0,1795	-0,1641	-0,1225	0,1423
13 C	0,2502	0,2610	0,1753	0,1491	0,0837	0,1125
14 C	0,1886	0,1785	0,1590	0,2392	0,1780	0,1570
15 O	-0,5257	-0,5225	-0,6341	-0,3829	-0,3718	-0,4892
16 O	-0,6643	-0,6664	0,1331	-0,5268	-0,5295	-0,5568
17 O	-0,7796	-0,7779	-0,6402	-0,7167	-0,6873	-0,5268
18 C	0,0598	0,0628	-0,6500	-0,1212	-0,0751	0,0570
19 O	-0,7113	-0,7110	-0,6845	-0,6162	-0,6116	-0,5270
20 H	0,1931	0,1940	0,1718	0,1643	0,1665	0,1157
21 H	0,2369	0,2377	0,1845	0,2084	0,2099	0,1313
22 H	0,4671	0,4681	0,3779	0,4509	0,4524	0,3425
23 H	0,1599	0,1617	0,1391	0,1656	0,1692	0,0937
24 H	0,1706	0,1716	0,1204	0,1814	0,1787	0,1044
25 H	0,1667	0,1661	0,0966	0,1793	0,1771	0,0917
26 H	0,1533	0,1543	0,1664	0,1615	0,1656	0,0666
27 H	0,4345	0,4346	0,1027	0,4081	0,4040	0,3499
28 H	0,4547	0,4558	0,3308	0,4617	0,4484	0,3168
29 H	0,1426	0,1421	0,3519	0,1612	0,1567	0,1380
30 H	0,1307	0,1316	0,3922	0,1488	0,1488	0,0677
31 H	0,4279	0,4286	0,1224	0,4157	0,4154	0,3017

Çizelge 4.4. devamı

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
NT2						
1 N	-0,6378	-0,6383	-0,7766	-0,4518	-0,4527	-0,5588
2 C	0,3851	0,3854	0,4555	0,3019	0,3026	0,3212
3 N	-0,4502	-0,4476	-0,7175	-0,3538	-0,3550	-0,5777
4 C	0,2174	0,2203	0,6947	-0,0595	-0,0562	0,5444
5 C	-0,0327	-0,0361	-0,0126	0,1039	0,0990	0,1361
6 C	0,5032	0,5060	0,8260	0,3667	0,3703	0,5774
7 N	-0,2214	-0,2251	-0,7718	-0,0327	-0,0345	-0,5163
8 C	0,4492	0,4449	0,3661	0,3601	0,3593	0,2842
9 N	-0,4363	-0,4384	-0,5360	-0,4319	-0,4346	-0,4934
10 O	-0,7719	-0,7734	-0,5761	-0,6865	-0,6872	-0,4874
11 C	-0,0208	-0,0101	0,4818	-0,2638	-0,2581	0,3289
12 C	-0,5023	-0,5017	-0,6810	-0,3216	-0,3206	-0,5045
13 C	0,0937	0,0915	0,1369	0,1438	0,1234	0,1548
14 C	0,1268	0,1371	0,2107	-0,0453	-0,0296	0,1575
15 O	0,0462	0,0407	0,1108	0,0783	0,0599	0,0873
16 O	0,2323	0,2264	0,1429	0,0348	0,0527	0,0649
17 O	-0,7330	-0,7349	-0,6521	-0,6476	-0,6487	-0,5392
18 C	-0,7258	-0,7271	-0,6882	-0,6198	-0,6239	-0,5829
19 O	-0,7010	-0,7019	-0,6582	-0,6032	-0,6032	-0,5512
20 H	0,4614	0,4622	0,3423	0,4200	0,4210	0,2875
21 H	0,2359	0,2360	0,1939	0,2032	0,2040	0,1403
22 H	0,2338	0,2342	0,1839	0,2074	0,2080	0,1341
23 H	0,1668	0,1671	0,1649	0,1724	0,1727	0,1250
24 H	0,1596	0,1591	0,1386	0,1691	0,1691	0,1079
25 H	0,1627	0,1629	0,1370	0,1717	0,1728	0,0929
26 H	0,1706	0,1702	0,1547	0,1848	0,1866	0,1106
27 H	0,1318	0,1319	0,1261	0,1504	0,1510	0,0877
28 H	0,1323	0,1322	0,1144	0,1532	0,1525	0,0973
29 H	0,4373	0,4378	0,3479	0,4297	0,4307	0,3087
30 H	0,4428	0,4432	0,3924	0,4319	0,4331	0,3462
31 H	0,4445	0,4451	0,3480	0,4343	0,4352	0,3158

Çizelge 4.4. devamı

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
NT3						
1 N	-0,5934	-0,5949	-0,6302	-0,4643	-0,4655	-0,4741
2 C	0,3832	0,3833	0,4059	0,2803	0,2806	0,2728
3 N	-0,5409	-0,5389	-0,8124	-0,3416	-0,3407	-0,6141
4 C	0,4830	0,4898	0,7500	0,4298	0,4282	0,5676
5 C	-0,1500	-0,1566	-0,0205	-0,2173	-0,2158	0,1332
6 C	0,4633	0,4650	0,7639	0,3148	0,3151	0,5259
7 N	-0,2808	-0,2808	-0,7869	-0,0733	-0,0741	-0,5281
8 C	0,3772	0,3769	0,3513	0,3141	0,3145	0,2685
9 N	-0,4178	-0,4193	-0,5247	-0,4060	-0,4073	-0,4844
10 O	-0,7413	-0,7433	-0,5611	-0,6548	-0,6567	-0,4799
11 C	-0,0384	-0,0388	0,4811	-0,4687	-0,4658	0,3272
12 C	-0,5248	-0,5235	-0,6564	-0,3470	-0,3477	-0,5028
13 C	0,1134	0,1120	0,1775	0,2208	0,2199	0,1651
14 C	0,2055	0,2112	0,1664	-0,0081	-0,0058	0,1257
15 O	0,0245	0,0200	0,1185	0,1384	0,1354	0,0912
16 O	0,1620	0,1623	0,1353	-0,0542	-0,0543	0,0624
17 O	-0,7327	-0,7339	-0,6411	-0,6432	-0,6443	-0,5339
18 C	-0,7648	-0,7660	-0,6700	-0,6592	-0,6596	-0,5458
19 O	-0,6919	-0,6934	-0,6492	-0,5795	-0,5806	-0,5390
20 H	0,2334	0,2340	0,1684	0,2007	0,2013	0,1134
21 H	0,4641	0,4640	0,3690	0,4017	0,4019	0,2944
22 H	0,2374	0,2380	0,1769	0,2102	0,2108	0,1254
23 H	0,1836	0,1837	0,1737	0,1886	0,1889	0,1361
24 H	0,1678	0,1678	0,1592	0,1826	0,1826	0,1266
25 H	0,1804	0,1800	0,1392	0,1927	0,1931	0,1037
26 H	0,1753	0,1766	0,1465	0,1977	0,1982	0,1084
27 H	0,1335	0,1339	0,1012	0,1540	0,1542	0,0871
28 H	0,1330	0,1325	0,1209	0,1544	0,1547	0,1087
29 H	0,4396	0,4403	0,3453	0,4322	0,4329	0,3154
30 H	0,4682	0,4689	0,3532	0,4655	0,4663	0,3245
31 H	0,4479	0,4485	0,3485	0,4383	0,4392	0,3181

Çizelge 4.4. devamı

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
NT4						
1 N	-0,5967	-0,5988	-0,6378	-0,4640	-0,4655	-0,4772
2 C	0,3027	0,3018	0,4241	0,1917	0,1918	0,2907
3 N	-0,6084	-0,6089	-0,7778	-0,4085	-0,4096	-0,5833
4 C	-0,1349	-0,1496	0,5824	-0,5418	-0,5509	0,4505
5 C	0,2768	0,2641	0,1315	0,7806	0,7765	0,2531
6 C	0,7465	0,7575	0,8110	0,5404	0,5465	0,5744
7 N	-0,4533	-0,4552	-0,6216	-0,3845	-0,3836	-0,5175
8 C	0,2825	0,2979	0,4228	0,1700	0,1711	0,3114
9 N	-0,2627	-0,2581	-0,7500	0,0012	-0,0005	-0,5399
10 O	-0,7469	-0,7491	-0,6693	-0,6566	-0,6566	-0,5699
11 C	0,1980	0,1957	0,4683	-0,5263	-0,5206	0,3083
12 C	-0,0608	-0,0588	0,1911	0,1613	0,1651	0,1495
13 C	0,3068	0,2960	0,1536	0,0661	0,0685	0,1292
14 C	0,1976	0,2105	0,1978	0,2345	0,2271	0,1718
15 O	-0,5725	-0,5697	-0,6842	-0,3814	-0,3791	-0,5208
16 O	0,1270	0,1309	0,1294	-0,0113	-0,0141	0,0593
17 O	-0,7339	-0,7362	-0,6443	-0,6435	-0,6442	-0,5383
18 C	-0,7396	-0,7452	-0,6664	-0,6362	-0,6335	-0,5612
19 O	-0,7313	-0,7293	-0,6995	-0,6486	-0,6491	-0,5942
20 H	0,2356	0,2359	0,1842	0,2034	0,2039	0,1339
21 H	0,4626	0,4636	0,3416	0,4176	0,4182	0,2870
22 H	0,2246	0,2281	0,2047	0,2083	0,2100	0,1499
23 H	0,1754	0,1708	0,1716	0,1749	0,1744	0,1342
24 H	0,1803	0,1814	0,1334	0,1949	0,1962	0,0988
25 H	0,1624	0,1614	0,1354	0,1718	0,1724	0,0963
26 H	0,1606	0,1613	0,1414	0,1716	0,1716	0,1107
27 H	0,1307	0,1318	0,1179	0,1541	0,1540	0,1057
28 H	0,1305	0,1302	0,1043	0,1488	0,1495	0,0910
29 H	0,4387	0,4395	0,3409	0,4278	0,4285	0,3104
30 H	0,4456	0,4476	0,3691	0,4353	0,4329	0,3307
31 H	0,4560	0,4529	0,3936	0,4482	0,4492	0,3552

Çizelge 4.4. devamı

HİPOKSANTİNİN TAUTOMER YAPILARI

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
HPT1						
1 N	-0,5568	-0,5579	-0,6132	-0,4476	-0,4487	-0,4714
2 C	0,2416	0,2417	0,3360	0,1585	0,1586	0,2238
3 N	-0,5229	-0,5235	-0,6184	-0,4272	-0,4278	-0,4949
4 C	0,3484	0,3485	0,6629	0,1677	0,1677	0,5219
5 C	0,1343	0,1350	0,0216	0,4267	0,4273	0,1727
6 C	0,4270	0,4271	0,7175	0,1576	0,1579	0,5039
7 N	-0,6028	-0,6029	-0,7475	-0,4368	-0,4369	-0,5791
8 C	0,3470	0,3470	0,3679	0,2339	0,2339	0,2935
9 N	-0,5315	-0,5323	-0,5790	-0,5184	-0,5191	-0,5269
10 O	-0,6342	-0,6349	-0,6117	-0,5423	-0,5431	-0,5085
11 H	0,1977	0,1980	0,1673	0,1672	0,1675	0,1129
12 H	0,4458	0,4466	0,3357	0,4031	0,4039	0,2798
13 H	0,2407	0,2412	0,1852	0,2069	0,2073	0,1313
14 H	0,4654	0,4661	0,3757	0,4505	0,4512	0,3408
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
HPT2						
1 N	-0,6412	-0,6412	-0,7714	-0,4517	-0,4518	-0,5513
2 C	0,3220	0,3219	0,4267	0,2220	0,2219	0,2996
3 N	-0,5408	-0,5414	-0,6254	-0,4492	-0,4497	-0,5087
4 C	0,2769	0,2779	0,6029	0,0856	0,0865	0,4805
5 C	0,0915	0,0918	0,0034	0,3512	0,3516	0,1528
6 C	0,6396	0,6397	0,8182	0,3718	0,3717	0,5673
7 N	-0,5830	-0,5832	-0,7236	-0,4198	-0,4199	-0,5626
8 C	0,3433	0,3431	0,3404	0,2537	0,2534	0,2789
9 N	-0,5191	-0,5206	-0,5201	-0,5005	-0,5020	-0,4775
10 O	-0,7681	-0,7694	-0,5855	-0,6895	-0,6908	-0,4948
11 H	0,4564	0,4571	0,3377	0,4142	0,4150	0,2827
12 H	0,2401	0,2407	0,1844	0,2050	0,2055	0,1287
13 H	0,4461	0,4468	0,3335	0,4035	0,4044	0,2777
14 H	0,2361	0,2366	0,1785	0,2036	0,2040	0,1265

Çizelge 4.4. devamı

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
HPT3						
1 N	-0,6042	-0,6062	-0,6215	-0,4764	-0,4779	-0,4662
2 C	0,3455	0,3447	0,4108	0,2339	0,2338	0,2822
3 N	-0,5948	-0,5937	-0,8011	-0,4084	-0,4081	-0,6046
4 C	0,3410	0,3394	0,7129	0,1312	0,1320	0,5694
5 C	0,1437	0,1472	-0,0054	0,3727	0,3729	0,1487
6 C	0,5040	0,5055	0,7649	0,2752	0,2760	0,5275
7 N	-0,5954	-0,5939	-0,7473	-0,4405	-0,4403	-0,5852
8 C	0,3351	0,3343	0,3337	0,2400	0,2398	0,2728
9 N	-0,5181	-0,5207	-0,5047	-0,4982	-0,4999	-0,4649
10 O	-0,7505	-0,7530	-0,5501	-0,6693	-0,6713	-0,4691
11 H	0,2376	0,2382	0,1763	0,2041	0,2047	0,1233
12 H	0,4645	0,4653	0,3271	0,4195	0,4206	0,2699
13 H	0,4526	0,4535	0,3245	0,4099	0,4110	0,2682
14 H	0,2388	0,2391	0,1799	0,2059	0,2064	0,1277
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
HPT4						
1 N	-0,6150	-0,6164	-0,6413	-0,4849	-0,4863	-0,4808
2 C	0,3410	0,3408	0,4215	0,2320	0,2319	0,2880
3 N	-0,5908	-0,5907	-0,7853	-0,3986	-0,3986	-0,5929
4 C	0,1812	0,1818	0,5796	-0,0633	-0,0626	0,4595
5 C	0,2916	0,2916	0,0910	0,5340	0,5341	0,2297
6 C	0,5491	0,5498	0,7961	0,3460	0,3466	0,5554
7 N	-0,5597	-0,5605	-0,5936	-0,4715	-0,4721	-0,4983
8 C	0,3489	0,3489	0,3694	0,2284	0,2284	0,2890
9 N	-0,5811	-0,5813	-0,6939	-0,4861	-0,4863	-0,5718
10 O	-0,7602	-0,7616	-0,5964	-0,6767	-0,6780	-0,5107
11 H	0,2361	0,2367	0,1797	0,2032	0,2038	0,1273
12 H	0,4585	0,4593	0,3381	0,4140	0,4149	0,2818
13 H	0,2455	0,2459	0,1881	0,2096	0,2101	0,1330
14 H	0,4548	0,4554	0,3466	0,4135	0,4142	0,2906

Çizelge 4.4. devamı

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
HPT5						
1 N	-0,5529	-0,5541	-0,5998	-0,4453	-0,4464	-0,4615
2 C	0,2348	0,2348	0,3218	0,1612	0,1612	0,2164
3 N	-0,5227	-0,5240	-0,5878	-0,4200	-0,4213	-0,4720
4 C	0,1677	0,1689	0,5177	-0,0529	-0,0519	0,4006
5 C	0,2847	0,2851	0,1558	0,5932	0,5937	0,2909
6 C	0,4665	0,4669	0,7188	0,2202	0,2207	0,5031
7 N	-0,5654	-0,5671	-0,5578	-0,4649	-0,4665	-0,4618
8 C	0,3613	0,3612	0,3808	0,2251	0,2249	0,2934
9 N	-0,5991	-0,5988	-0,7601	-0,5132	-0,5129	-0,6255
10 O	-0,6306	-0,6314	-0,6130	-0,5387	-0,5395	-0,5072
11 H	0,1941	0,1944	0,1666	0,1652	0,1655	0,1140
12 H	0,2453	0,2458	0,1877	0,2092	0,2097	0,1327
13 H	0,4549	0,4560	0,3208	0,4137	0,4148	0,2647
14 H	0,4611	0,4621	0,3482	0,4470	0,4481	0,3119

KSANTİNİN TAUTOMER YAPILARI

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
KT1						
1 N	-0,7517	-0,7535	-0,6407	-0,6176	-0,6194	-0,4871
2 C	0,9190	0,9195	0,9066	0,6934	0,6936	0,6769
3 N	-0,6820	-0,6815	-0,8377	-0,4820	-0,4816	-0,6565
4 C	0,3646	0,3651	0,6698	0,1770	0,1779	0,5401
5 C	0,0801	0,0808	0,0099	0,2784	0,2786	0,1553
6 C	0,5908	0,5916	0,7689	0,3771	0,3781	0,5290
7 N	-0,6007	-0,6004	-0,7442	-0,4569	0,4566	-0,5861
8 C	0,3390	0,3388	0,3337	0,2316	0,2313	0,2716
9 N	-0,5206	-0,5225	-0,5071	-0,5031	-0,5050	-0,4664
10 O	-0,7563	-0,7584	-0,5402	-0,6724	-0,6746	-0,4627
11 O	-0,6149	-0,6158	-0,6074	-0,5201	-0,5210	-0,5028
12 H	0,4629	0,4642	0,3240	0,4157	0,4171	0,2727
13 H	0,4517	0,4527	0,3257	0,4082	0,4093	0,2682
14 H	0,2369	0,2374	0,1810	0,2036	0,2041	0,1273
15 H	0,4809	0,4820	0,3575	0,4669	0,4682	0,3204

Çizelge 4.4. devamı

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
KT2						
1 N	-0,8135	-0,8136	-0,8553	-0,6055	-0,6056	-0,6217
2 C	1,0093	1,0096	1,0265	0,7459	0,7463	0,7446
3 N	-0,7723	-0,7722	-0,8726	-0,5719	-0,5718	-0,6674
4 C	0,4336	0,4341	0,7529	0,2304	0,2308	0,5986
5 C	0,1081	0,1086	-0,0316	0,3392	0,3402	0,1289
6 C	0,6462	0,6462	0,8539	0,3985	0,3980	0,5963
7 N	-0,5834	-0,5834	-0,7433	-0,4347	-0,4346	-0,5829
8 C	0,3457	0,3456	0,3325	0,2461	0,2458	0,2725
9 N	-0,5073	-0,5091	-0,5012	-0,4961	-0,4977	-0,4670
10 O	-0,7296	-0,7310	-0,5636	-0,6571	-0,6584	-0,4793
11 O	-0,7423	-0,7432	-0,6017	-0,6333	-0,6343	-0,5005
12 H	0,4534	0,4539	0,3496	0,4093	0,4098	0,2934
13 H	0,4604	0,4612	0,3389	0,4145	0,4154	0,2802
14 H	0,4532	0,4541	0,3303	0,4094	0,4104	0,2732
15 H	0,2386	0,2391	0,1845	0,2050	0,2055	0,1302
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
KT3						
1 N	-0,7756	-0,7757	-0,8153	-0,5761	-0,5761	-0,5939
2 C	0,8880	0,8881	0,9719	0,6614	0,6614	0,7312
3 N	-0,6546	-0,6548	-0,7187	-0,5446	-0,5448	-0,5866
4 C	0,3639	0,3647	0,6291	0,1839	0,1851	0,4986
5 C	0,0028	0,0035	-0,0179	0,2551	0,2554	0,1402
6 C	0,6921	0,6919	0,8252	0,4340	0,4339	0,5690
7 N	-0,5941	-0,5942	-0,7343	-0,4399	-0,4399	-0,5756
8 C	0,3578	0,3576	0,3356	0,2571	0,2568	0,2744
9 N	-0,5203	-0,5220	-0,5154	-0,5059	-0,5075	-0,4767
10 O	-0,6293	-0,6297	-0,6190	-0,5341	-0,5346	-0,5209
11 O	-0,7582	-0,7596	-0,5790	-0,6815	-0,6829	-0,4913
12 H	0,4593	0,4598	0,3503	0,4130	0,4137	0,2922
13 H	0,4437	0,4445	0,3306	0,4002	0,4011	0,2738
14 H	0,2334	0,2339	0,1766	0,2006	0,2011	0,1236
15 H	0,4913	0,4919	0,3803	0,4766	0,4774	0,3421

Çizelge 4.4. devamı

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
KT4						
1 N	-0,7756	-0,7662	-0,8034	-0,5760	-0,7662	-0,5921
2 C	0,8880	0,8865	0,9407	0,6560	0,6566	0,6799
3 N	-0,6546	-0,7597	-0,6866	-0,6139	-0,6155	-0,5467
4 C	0,3639	0,3289	0,5745	0,0585	0,0589	0,4259
5 C	0,0028	0,2087	0,1205	0,5544	0,5552	0,2692
6 C	0,6921	0,6260	0,7915	0,3506	0,3509	0,5623
7 N	-0,5941	-0,5641	-0,5658	-0,4583	-0,4602	-0,4598
8 C	0,3578	0,4071	0,4104	0,2505	0,2501	0,3063
9 N	-0,5203	-0,5883	-0,7729	-0,5074	-0,5070	-0,6322
10 O	-0,6293	-0,8095	-0,6141	-0,6875	-0,6890	-0,5119
11 O	-0,7582	-0,6265	-0,6234	-0,5429	-0,5433	-0,5206
12 H	0,4593	0,4600	0,3493	0,4147	0,4153	0,2922
13 H	0,4437	0,2503	0,1924	0,2112	0,2117	0,1343
14 H	0,2334	0,4580	0,3194	0,4143	0,4155	0,2618
15 H	0,4913	0,4887	0,3673	0,4756	0,4767	0,3312
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
KT5						
1 N	-0,7655	-0,7654	-0,8142	-0,5725	-0,5725	-0,6043
2 C	0,8986	0,8992	0,9462	0,6602	0,6608	0,6856
3 N	-0,7502	-0,7513	-0,7178	-0,6165	-0,6175	-0,5712
4 C	0,5006	0,5001	0,7270	0,2938	0,2934	0,5534
5 C	0,0614	0,0624	-0,0321	0,3712	0,3720	0,1413
6 C	0,5879	0,5879	0,8108	0,2884	0,2883	0,5800
7 N	-0,5914	-0,5914	-0,7613	-0,4292	-0,4294	-0,5836
8 C	0,3667	0,3666	0,3764	0,2497	0,2497	0,2971
9 N	-0,5119	-0,5126	-0,5703	-0,5119	-0,5125	-0,5284
10 O	-0,6279	-0,6284	-0,6178	-0,5452	-0,5456	-0,5184
11 O	-0,8036	-0,8050	-0,6142	-0,6857	-0,6871	-0,5119
12 H	0,4590	0,4597	0,3502	0,4138	0,4145	0,2923
13 H	0,4449	0,4456	0,3380	0,4005	0,4012	0,2805
14 H	0,2409	0,2413	0,1869	0,2058	0,2062	0,1302
15 H	0,4905	0,4912	0,3922	0,4774	0,4782	0,3573

Çizelge 4.4. devamı

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
KT6						
1 N	-0,8167	-0,8168	-0,8534	-0,6122	-0,6122	-0,6209
2 C	1,0002	1,0005	1,0243	0,7426	0,7429	0,7426
3 N	0,2617	0,2620	0,6159	0,0110	0,0112	0,4804
4 C	0,2741	0,2744	0,0712	0,5365	0,5370	0,2218
5 C	0,6755	0,6755	0,8708	0,4532	0,4530	0,6087
6 C	-0,5526	-0,5537	-0,5910	-0,4670	-0,4680	-0,4951
7 N	0,3707	0,3706	0,3764	0,2368	0,2367	0,2928
8 C	-0,5746	-0,5748	-0,6932	-0,4861	-0,4862	-0,5751
9 N	-0,7472	-0,7482	-0,6015	-0,6369	-0,6379	-0,4995
10 O	-0,7315	-0,7323	-0,5978	-0,6587	-0,6595	-0,5112
11 O	-0,7729	-0,7729	-0,8610	-0,5647	-0,5646	-0,6568
12 H	0,4551	0,4556	0,3497	0,4114	0,4119	0,2937
13 H	0,2472	0,2476	0,1935	0,2104	0,2109	0,1366
14 H	0,4573	0,4580	0,3476	0,4153	0,4161	0,2914
15 H	0,4536	0,4542	0,3483	0,4080	0,4087	0,2904
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
KT7						
1 N	-0,7803	-0,7804	-0,8135	-0,5835	-0,5836	-0,5928
2 C	0,8708	0,8707	0,9538	0,6529	0,6527	0,7187
3 N	-0,6593	-0,6601	-0,6901	-0,5415	-0,5423	-0,5633
4 C	0,1918	0,1932	0,5028	-0,0343	-0,0330	0,3893
5 C	0,1738	0,1740	0,0916	0,4607	0,4610	0,2402
6 C	0,7181	0,7182	0,8407	0,4770	0,4770	0,5790
7 N	-0,5720	-0,5734	-0,5752	-0,4803	-0,4816	-0,4835
8 C	0,3824	0,3820	0,3678	0,2480	0,2476	0,2857
9 N	-0,5796	-0,5798	-0,7009	-0,4889	-0,4891	-0,5792
10 O	-0,7601	-0,7610	-0,6118	-0,6830	-0,6838	-0,5214
11 O	-0,6287	-0,6291	-0,6235	-0,5322	-0,5327	-0,5239
12 H	0,4605	0,4611	0,3507	0,4149	0,4155	0,2930
13 H	0,2407	0,2411	0,1841	0,2050	0,2055	0,1287
14 H	0,4527	0,4534	0,3416	0,4106	0,4114	0,2854
15 H	0,4892	0,4898	0,3818	0,4746	0,4753	0,3439

Çizelge 4.4. devamı

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
KT8						
1 N	-0,7566	-0,7582	-0,6803	-0,4836	-0,6226	-0,5216
2 C	0,9119	0,9126	0,9468	0,5942	0,6719	0,6819
3 N	-0,7248	-0,7247	-0,8490	-0,5145	-0,5208	-0,6443
4 C	0,2711	0,2715	0,6505	0,0214	0,0492	0,5044
5 C	0,2733	0,2736	0,0782	0,5140	0,5485	0,2400
6 C	0,5565	0,5568	0,7727	0,2931	0,3295	0,5359
7 N	-0,5586	-0,5598	-0,5861	-0,3587	-0,4739	-0,4884
8 C	0,3749	0,3749	0,3853	0,2130	0,2227	0,2967
9 N	-0,5861	-0,5859	-0,7369	-0,5073	-0,5073	-0,6144
10 O	-0,7875	-0,7890	-0,5980	-0,5104	-0,6682	-0,4972
11 O	-0,5992	-0,6001	-0,5966	-0,4061	-0,5173	-0,4952
12 H	0,4467	0,4473	0,3414	0,3318	0,4016	0,2827
13 H	0,2510	0,2514	0,1960	0,1589	0,2137	0,1382
14 H	0,4590	0,4600	0,3265	0,3106	0,4180	0,2699
15 H	0,4683	0,4693	0,3491	0,3434	0,4550	0,3114
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
KT9						
1 N	-0,7575	-0,7592	-0,6766	-0,6236	-0,6252	-0,5121
2 C	0,9030	0,9032	0,9544	0,6788	0,6792	0,7070
3 N	-0,6797	-0,6795	-0,8642	-0,4716	-0,4715	-0,6621
4 C	0,2071	0,2079	0,5740	-0,0182	-0,0178	0,4523
5 C	0,2249	0,2247	0,0946	0,4433	0,4430	0,2320
6 C	0,6373	0,6381	0,8084	0,4501	0,4512	0,5622
7 N	-0,5694	-0,5701	-0,5962	-0,4906	-0,4913	-0,5041
8 C	0,3609	0,3609	0,3674	0,2251	0,2251	0,2873
9 N	-0,5841	-0,5843	-0,6951	-0,4915	-0,4917	-0,5746
10 O	-0,7634	-0,7649	-0,5957	-0,6790	-0,6804	-0,5112
11 O	-0,6140	-0,6149	-0,5922	-0,5185	-0,5195	-0,4919
12 H	0,4566	0,4576	0,3317	0,4096	0,4107	0,2742
13 H	0,2443	0,2448	0,1882	0,2080	0,2084	0,1320
14 H	0,4537	0,4543	0,3470	0,4114	0,4121	0,2901
15 H	0,4802	0,4813	0,3541	0,4666	0,4676	0,3188

Çizelge 4.4. devamı

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
KT10						
1 N	-0,7972	-0,7972	-0,8315	-0,5946	-0,5946	-0,6175
2 C	1,0033	1,0036	1,0267	0,7459	0,7461	0,7448
3 N	-0,7489	-0,7489	-0,8572	-0,5463	-0,5464	-0,6476
4 C	0,3548	0,3551	0,6989	0,1672	0,1673	0,5328
5 C	0,2251	0,2256	0,0209	0,5295	0,5299	0,1875
6 C	0,5529	0,5526	0,7865	0,2566	0,2565	0,5577
7 N	-0,6088	-0,6099	-0,6243	-0,5180	-0,5191	-0,5138
8 C	0,3009	0,3011	0,3046	0,1765	0,1767	0,2342
9 N	-0,5570	-0,5578	-0,5903	-0,5514	-0,5522	-0,5394
10 O	-0,7286	-0,7296	-0,5933	-0,6202	-0,6212	-0,4932
11 O	-0,6174	-0,6177	-0,6144	-0,5322	-0,5326	-0,5136
12 H	0,4714	0,4720	0,3606	0,4272	0,4279	0,3051
13 H	0,4577	0,4582	0,3532	0,4123	0,4129	0,2959
14 H	0,1980	0,1983	0,1609	0,1664	0,1666	0,1033
15 H	0,4938	0,4944	0,3984	0,4813	0,4820	0,3636
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
KT11						
1 N	-0,7353	-0,7361	-0,7455	-0,5998	-0,6005	-0,5783
2 C	0,9051	0,9059	0,9535	0,6602	0,6610	0,6872
3 N	0,4432	0,4435	0,7946	0,2975	0,2979	0,6308
4 C	-0,0541	-0,0533	0,0166	0,1799	0,1812	0,1747
5 C	0,7015	0,7009	0,7509	0,3985	0,3975	0,5322
6 C	-0,5968	-0,5968	-0,7538	-0,4499	-0,4498	-0,5917
7 N	0,3390	0,3390	0,3334	0,2457	0,2456	0,2727
8 C	-0,5057	-0,5073	-0,5103	-0,4941	-0,4958	-0,4774
9 N	-0,7278	-0,7275	-0,8631	-0,5334	-0,5331	-0,6579
10 O	-0,7846	-0,7859	-0,6034	-0,6676	-0,6688	-0,5032
11 O	-0,6098	-0,6106	-0,5944	-0,5213	-0,5224	-0,4977
12 H	0,4533	0,4542	0,3314	0,4095	0,4105	0,2743
13 H	0,2407	0,2412	0,1851	0,2068	0,2072	0,1304
14 H	0,4528	0,4537	0,3315	0,4066	0,4075	0,2712
15 H	0,4785	0,4791	0,3733	0,4612	0,4618	0,3326

Çizelge 4.4. devamı

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
KT12						
1 N	-0,7174	-0,7188	-0,6335	-0,6020	-0,6033	-0,4924
2 C	0,7873	0,7875	0,8511	0,5926	0,5928	0,6329
3 N	-0,6368	-0,6376	-0,6895	-0,5166	-0,5174	-0,5589
4 C	0,2177	0,2189	0,5427	0,0118	0,0128	0,4162
5 C	0,1667	0,1671	0,1273	0,4599	0,4603	0,2736
6 C	0,5920	0,5924	0,7328	0,3660	0,3664	0,5083
7 N	-0,5822	-0,5838	-0,5699	-0,4893	-0,4908	-0,4741
8 C	0,3870	0,3867	0,3850	0,2323	0,2321	0,2939
9 N	-0,5966	-0,5964	-0,7569	-0,5128	-0,5126	-0,6251
10 O	-0,6194	-0,6202	-0,6070	-0,5353	-0,5362	-0,5055
11 O	-0,6325	-0,6333	-0,6064	-0,5354	-0,5362	-0,5065
12 H	0,2445	0,2450	0,1880	0,2078	0,2083	0,1314
13 H	0,4535	0,4545	0,3207	0,4114	0,4125	0,2639
14 H	0,4667	0,4677	0,3499	0,4538	0,4549	0,3129
15 H	0,4695	0,4701	0,3656	0,4556	0,4563	0,3293
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
KT13						
1 N	-0,7569	-0,7569	-0,7867	-0,5679	-0,5679	-0,5868
2 C	0,8818	0,8817	0,9448	0,6624	0,6623	0,7086
3 N	-0,6202	-0,6211	-0,6691	-0,5090	-0,5099	-0,5377
4 C	0,2904	0,2919	0,5853	0,1163	0,1177	0,4444
5 C	0,1507	0,1509	0,0617	0,4598	0,4599	0,2157
6 C	0,5567	0,5567	0,7371	0,2729	0,2730	0,5200
7 N	-0,6381	-0,6397	-0,6145	-0,5349	-0,5364	-0,5053
8 C	0,3169	0,3169	0,3036	0,1901	0,1901	0,2305
9 N	-0,5785	-0,5792	-0,6080	-0,5651	-0,5658	-0,5499
10 O	-0,6225	-0,6230	-0,6245	-0,5266	-0,5270	-0,5270
11 O	-0,6330	-0,6332	-0,6275	-0,5474	-0,5477	-0,5254
12 H	0,4769	0,4776	0,3615	0,4306	0,4314	0,3051
13 H	0,1914	0,1917	0,1536	0,1608	0,1611	0,0969
14 H	0,4930	0,4936	0,3861	0,4786	0,4793	0,3488
15 H	0,4913	0,4919	0,3966	0,4792	0,4798	0,3620

Çizelge 4.4. devamı

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
KT14						
1 N	-0,7227	-0,7239	-0,6471	-0,6038	-0,6049	-0,5036
2 C	0,9214	0,9216	0,9687	0,6953	0,6954	0,7163
3 N	-0,6396	-0,6397	-0,8387	-0,4411	-0,4412	-0,6345
4 C	0,2843	0,2849	0,6422	0,1203	0,1209	0,4919
5 C	0,1871	0,1875	0,0432	0,4612	0,4616	0,2050
6 C	0,4936	0,4938	0,7075	0,2386	0,2386	0,4878
7 N	-0,6334	-0,6342	-0,6324	-0,5443	-0,5453	-0,5230
8 C	0,2850	0,2853	0,2926	0,1567	0,1571	0,2274
9 N	-0,5796	-0,5805	-0,5970	-0,5648	-0,5655	-0,5416
10 O	-0,6073	-0,6082	-0,5854	-0,5103	-0,5112	-0,4848
11 O	-0,6069	-0,6076	-0,5947	-0,5207	-0,5215	-0,4964
12 H	0,4630	0,4639	0,3399	0,4157	0,4167	0,2808
13 H	0,1927	0,1931	0,1530	0,1627	0,1631	0,0980
14 H	0,4869	0,4878	0,3621	0,4734	0,4744	0,3271
15 H	0,4755	0,4761	0,3858	0,4610	0,4617	0,3495
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
KT15						
1 N	-0,7197	-0,7208	-0,6452	-0,6027	-0,6040	-0,5024
2 C	0,8072	0,8071	0,8627	0,6052	0,6056	0,6405
3 N	-0,6324	-0,6324	-0,7178	-0,5200	-0,5203	-0,5828
4 C	0,3924	0,3953	0,6932	0,2318	0,2321	0,5456
5 C	0,0367	0,0352	-0,0065	0,3077	0,30812	0,1541
6 C	0,5367	0,5372	0,7304	0,2862	0,2865	0,5092
7 N	-0,6127	-0,6131	-0,7559	-0,4577	-0,4578	-0,5907
8 C	0,3514	0,3514	0,3603	0,2281	0,2281	0,2880
9 N	-0,5266	-0,5277	-0,5712	-0,5199	-0,5207	-0,5251
10 O	-0,6229	-0,6237	-0,6058	-0,5385	-0,5393	-0,5069
11 O	-0,6335	-0,6343	-0,6023	-0,5380	-0,5389	-0,5038
12 H	0,4443	0,4450	0,3335	0,4006	0,4015	0,2765
13 H	0,2379	0,2385	0,1836	0,2040	0,2045	0,1286
14 H	0,4701	0,4706	0,3772	0,4559	0,4567	0,3417
15 H	0,4710	0,4716	0,3638	0,4570	0,4578	0,3272

Çizelge 4.4. devamı

ÜRİK ASİT TAUTOMER YAPILARI

	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
UT1						
1 N	-0,8201	-0,8202	-0,8552	-0,6138	-0,6139	-0,6227
2 C	1,0026	1,0029	1,0295	0,7314	0,7317	0,7466
3 N	-0,7884	-0,7883	-0,8764	-0,5897	-0,5896	-0,6717
4 C	0,3736	0,3734	0,7800	0,1616	0,1613	0,6170
5 C	0,3388	0,3387	0,0824	0,6443	0,6445	0,2291
6 C	0,7722	0,7725	0,8682	0,3970	0,3972	0,6029
7 N	-0,6843	-0,6841	-0,8289	-0,5141	-0,5140	-0,6492
8 C	0,9903	0,9907	1,0020	0,7279	0,7281	0,7528
9 N	-0,7325	-0,7328	-0,7986	-0,6063	-0,6066	-0,6526
10 O	-0,7381	-0,7393	-0,5886	-0,6711	-0,6722	-0,5084
11 O	-0,7279	-0,7289	-0,5918	-0,6207	-0,6217	-0,4951
12 O	-0,8209	-0,8222	-0,6135	-0,6995	-0,7007	-0,5075
13 H	0,4584	0,4589	0,3542	0,4129	0,4134	0,2969
14 H	0,4661	0,4669	0,3467	0,4184	0,4193	0,2872
15 H	0,4579	0,4588	0,3403	0,4113	0,4122	0,2813
16 H	0,4522	0,4528	0,3496	0,4103	0,4109	0,2933
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
UT2						
1 N	-0,9170	-0,7667	-0,6889	-0,7024	-0,6335	-0,5283
2 C	1,1084	0,9261	0,9520	0,7742	0,6738	0,6874
3 N	-1,0982	-0,7379	-0,8625	-0,8566	-0,5484	-0,6600
4 C	1,0397	0,3982	0,8303	0,7968	0,2104	0,6500
5 C	0,1449	0,4307	0,0827	0,2392	0,7647	0,2476
6 C	0,9583	0,5452	0,7709	0,6419	0,1539	0,5283
7 N	-1,0385	-0,6869	-0,8307	-0,8129	-0,5202	-0,6483
8 C	1,1937	0,9793	1,0057	0,8705	0,7064	0,7556
9 N	-1,0557	-0,7412	-0,8352	-0,8664	-0,6239	-0,6888
10 O	-0,7611	-0,6043	-0,5924	-0,5986	-0,5265	-0,4949
11 O	-0,7230	-0,7799	-0,5968	-0,5750	-0,6615	-0,4997
12 O	-0,7161	-0,8075	-0,6056	-0,5639	-0,6874	-0,5025
13 H	0,4620	0,4599	0,3394	0,4047	0,4118	0,2778
14 H	0,4669	0,4611	0,3448	0,4124	0,4136	0,2853
15 H	0,4506	0,4545	0,3303	0,4008	0,4127	0,2732

Çizelge 4.4. devamı

16 H	0,4851	0,4692	0,3558	0,4351	0,4543	0,3172
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
UT3						
1 N	-0,8895	-0,8902	-0,6447	-0,6799	-0,6808	-0,4906
2 C	1,2078	1,2080	0,9236	0,8699	0,8702	0,6857
3 N	-1,1003	-1,1004	-0,8488	-0,8682	-0,8682	-0,6613
4 C	0,9635	0,9642	0,7044	0,7494	0,7497	0,5656
5 C	0,1400	0,1396	0,1198	0,2294	0,2290	0,2483
6 C	0,8947	0,8944	0,7965	0,5795	0,5793	0,5498
7 N	-1,0372	-1,0373	-0,8326	-0,8162	-0,8162	-0,6556
8 C	1,1863	1,1862	0,9996	0,8614	0,8613	0,7505
9 N	-1,0453	-1,0454	-0,7994	-0,8517	-0,8519	-0,6500
10 O	-0,7215	-0,7225	-0,5742	-0,5820	-0,5828	-0,5003
11 O	-0,7496	-0,7500	-0,6021	-0,5909	-0,5913	-0,4999
12 O	-0,7299	-0,7304	-0,6191	-0,5749	-0,5754	-0,5115
13 H	0,4796	0,4806	0,3321	0,4253	0,4263	0,2778
14 H	0,4606	0,4612	0,3346	0,4070	0,4077	0,2756
15 H	0,4458	0,4461	0,3499	0,3945	0,3948	0,2929
16 H	0,4950	0,4958	0,3602	0,4474	0,4484	0,3229
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
UT4						
1 N	-0,7756	-1,0518	-0,8097	-0,5796	-0,8004	-0,5917
2 C	0,8776	1,2101	0,9776	0,6360	0,8782	0,7325
3 N	-0,6655	-0,8650	-0,7178	-0,5584	-0,6852	-0,5852
4 C	0,3428	0,8139	0,6550	0,1488	0,6049	0,5126
5 C	0,1810	0,1571	0,1035	0,5258	0,2471	0,2502
6 C	0,8419	0,9699	0,8327	0,4479	0,6506	0,5709
7 N	-0,6996	-1,0393	-0,817	-0,5248	-0,8135	-0,6401
8 C	0,9901	1,1846	0,9968	0,7305	0,8603	0,7475
9 N	-0,7291	-1,0426	-0,8028	-0,6030	-0,8493	-0,6559
10 O	-0,7710	-0,7153	-0,6061	-0,6978	-0,5726	-0,5205
11 O	-0,6173	-0,7525	-0,6140	-0,5205	-0,5949	-0,5176
12 O	-0,8304	-0,7338	-0,6225	-0,7079	-0,5784	-0,5141
13 H	0,4650	0,4650	0,3558	0,4173	0,4065	0,2964
14 H	0,4486	0,4528	0,3406	0,4018	0,3985	0,2815
15 H	0,4486	0,4447	0,3441	0,4066	0,3944	0,2880

Çizelge 4.4. devamı

16 H	0,4929	0,5019	0,3845	0,4772	0,4537	0,3455
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
UT5						
1 N	-0,8158	-0,8158	-0,8554	-0,6076	-0,6076	-0,6208
2 C	0,9953	0,9957	1,0261	0,7218	0,7221	0,7429
3 N	-0,7918	-0,7917	-0,8746	-0,5972	-0,5971	-0,6709
4 C	0,4517	0,4524	0,7550	0,3013	0,3018	0,6017
5 C	0,1683	0,1686	-0,0228	0,3965	0,3973	0,1372
6 C	0,7759	0,7755	0,8490	0,4197	0,4187	0,5840
7 N	-0,6740	-0,6739	-0,7859	-0,5178	-0,5177	-0,6186
8 C	0,7957	0,7961	0,9023	0,6182	0,6185	0,7043
9 N	-0,6089	-0,6103	-0,5875	-0,5678	-0,5691	-0,5295
10 O	-0,7392	-0,7406	-0,5673	-0,6703	-0,6718	-0,4857
11 O	-0,7385	-0,7394	-0,6031	-0,6286	-0,6295	-0,5035
12 O	-0,6713	-0,6718	-0,6447	-0,5690	-0,5696	-0,5412
13 H	0,4543	0,4548	0,3494	0,4091	0,4097	0,2925
14 H	0,4615	0,4623	0,3399	0,4146	0,4155	0,2805
15 H	0,4567	0,4576	0,3391	0,4097	0,4106	0,2799
16 H	0,4798	0,4803	0,3805	0,4675	0,4681	0,3472
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
UT6						
1 N	-0,8209	-0,8210	-0,8536	-0,6163	-0,6165	-0,6213
2 C	0,9951	0,9954	1,0240	0,7287	0,7290	0,7407
3 N	-0,7971	-0,7970	-0,8673	-0,5979	-0,5977	-0,6656
4 C	0,2438	0,2444	0,6360	0,0529	0,0532	0,4914
5 C	0,3885	0,3881	0,0709	0,6766	0,6766	0,2278
6 C	0,7820	0,7822	0,8641	0,4234	0,4235	0,5966
7 N	-0,6162	-0,6169	-0,6719	-0,5189	-0,5195	-0,5578
8 C	0,8207	0,8211	0,9440	0,6032	0,6032	0,7295
9 N	-0,6937	-0,6940	-0,7436	-0,5833	-0,5834	-0,6166
10 O	-0,7414	-0,7423	-0,6020	-0,6321	-0,6331	-0,5022
11 O	-0,7503	-0,7513	-0,6025	-0,6771	-0,6781	-0,5166
12 O	-0,6632	-0,6637	-0,6293	-0,5621	-0,5628	-0,5290
13 H	0,4553	0,4557	0,3493	0,4105	0,4110	0,2924
14 H	0,4550	0,4556	0,3477	0,4078	0,4085	0,2886
15 H	0,4582	0,4588	0,3522	0,4142	0,4148	0,2946

Çizelge 4.4. devamı

16 H	0,4840	0,4847	0,3821	0,4705	0,4712	0,3475
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
UT7						
1 N	-0,7133	-0,7146	-0,6324	-0,6032	-0,6045	-0,4931
2 C	0,8031	0,8035	0,8666	0,5872	0,5875	0,6427
3 N	-0,6425	-0,6429	-0,7151	-0,5373	-0,5377	-0,5813
4 C	0,3872	0,3875	0,7081	0,1981	0,1983	0,5476
5 C	0,2724	0,2724	0,1431	0,6387	0,6384	0,2864
6 C	0,5944	0,5950	0,7163	0,2175	0,2185	0,4959
7 N	-0,7084	-0,7085	-0,8230	-0,5358	-0,5359	-0,6408
8 C	0,9746	0,9749	1,0040	0,7046	0,7049	0,7533
9 N	-0,7395	-0,7394	-0,8449	-0,6229	-0,6228	-0,6951
10 O	-0,6265	-0,6273	-0,6014	-0,5284	-0,5293	-0,5042
11 O	-0,6266	-0,6275	-0,6057	-0,5458	-0,5467	-0,5068
12 O	-0,8132	-0,8143	-0,6088	-0,6938	-0,6950	-0,5061
13 H	0,4499	0,4505	0,3447	0,4026	0,4033	0,2850
14 H	0,4502	0,4510	0,3265	0,4078	0,4087	0,2687
15 H	0,4718	0,4725	0,3666	0,4572	0,4579	0,3294
16 H	0,4662	0,4672	0,3552	0,4534	0,4544	0,3183
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
UT8						
1 N	-0,7761	-0,7761	-0,8135	-0,5765	-0,5766	-0,5924
2 C	0,8668	0,8669	0,9708	0,6274	0,6273	0,7286
3 N	-0,6716	-0,6718	-0,7181	-0,5695	-0,5696	-0,5888
4 C	0,3047	0,3063	0,6312	0,1896	0,1912	0,5007
5 C	0,1374	0,1368	-0,0075	0,3918	0,3914	0,1515
6 C	0,8511	0,8512	0,8184	0,4646	0,4643	0,5551
7 N	-0,6534	-0,6534	-0,7768	-0,4895	-0,4895	-0,6118
8 C	0,8039	0,8046	0,9008	0,6271	0,6276	0,7029
9 N	-0,6690	-0,6708	-0,6006	-0,6234	-0,6251	-0,5391
10 O	-0,7687	-0,7702	-0,5844	-0,6950	-0,6965	-0,4988
11 O	-0,6238	-0,6243	-0,6200	-0,5271	-0,5277	-0,5225
12 O	-0,6737	-0,6746	-0,6463	-0,5705	-0,5715	-0,5412
13 H	0,4605	0,4611	0,3503	0,4133	0,4140	0,2914
14 H	0,4496	0,4505	0,3386	0,4023	0,4033	0,2794
15 H	0,4905	0,4911	0,3803	0,4750	0,4757	0,3416

Çizelge 4.4. devamı

16 H	0,4718	0,4728	0,3768	0,4605	0,4616	0,3434
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
UT9						
1 N	-1,0524	-0,7812	-0,8117	-0,8001	-0,5860	-0,5922
2 C	1,1915	0,8697	0,9585	0,8658	0,6340	0,7198
3 N	-0,8669	-0,6827	-0,6970	-0,6874	-0,5742	-0,5706
4 C	0,6103	0,2988	0,5255	0,4247	0,0950	0,4024
5 C	0,1675	0,1696	0,0869	0,2595	0,5046	0,2436
6 C	0,9669	0,8047	0,8324	0,6430	0,4435	0,5655
7 N	-0,7994	-0,6898	-0,6207	-0,6383	-0,5851	-0,5190
8 C	1,1247	0,8473	0,9330	0,8287	0,6358	0,7154
9 N	-1,0176	-0,6502	-0,7751	-0,8304	-0,5396	-0,6377
10 O	-0,7551	-0,6204	-0,6220	-0,5977	-0,5220	-0,5239
11 O	-0,7148	-0,7818	-0,6224	-0,5718	-0,7042	-0,5315
12 O	-0,7643	-0,6728	-0,6150	-0,6072	-0,5709	-0,5106
13 H	0,4592	0,4617	0,3505	0,4018	0,4150	0,2918
14 H	0,4611	0,4582	0,3358	0,4088	0,4137	0,2778
15 H	0,4946	0,4897	0,3825	0,4469	0,4741	0,3438
16 H	0,4946	0,4791	0,3586	0,4537	0,4663	0,3255
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
UT10						
1 N	-0,7638	-0,7654	-0,6921	-0,6319	-0,6335	-0,5341
2 C	0,9141	0,9147	0,9494	0,6608	0,6615	0,6851
3 N	-0,7450	-0,7447	-0,8671	-0,5573	-0,5569	-0,6649
4 C	0,3970	0,3970	0,8174	0,2787	0,2790	0,6510
5 C	0,3822	0,3822	-0,0343	0,6511	0,6508	0,1399
6 C	0,5321	0,5328	0,7580	0,1434	0,1440	0,5198
7 N	-0,6481	-0,6478	-0,7959	-0,4912	-0,4911	-0,6284
8 C	0,7908	0,7914	0,9138	0,5943	0,5948	0,7115
9 N	-0,6605	-0,6617	-0,6396	-0,6293	-0,6304	-0,5780
10 O	-0,6079	-0,6087	-0,5982	-0,5268	-0,5277	-0,5005
11 O	-0,7845	-0,7860	-0,6030	-0,6652	-0,6669	-0,5041
12 O	-0,6685	-0,6694	-0,6395	-0,5655	-0,5664	-0,5364
13 H	0,4543	0,4552	0,3326	0,4072	0,4082	0,2710
14 H	0,4601	0,4611	0,3429	0,4122	0,4133	0,2835
15 H	0,4715	0,4722	0,3756	0,4547	0,4554	0,3380

Çizelge 4.4. devamı

16 H	0,4760	0,4769	0,3799	0,4647	0,4658	0,3464
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
UT11						
1 N	-0,6167	-0,9163	-0,6894	-0,6379	-0,6395	-0,5285
2 C	0,8329	1,1070	0,9464	0,6636	0,6643	0,6805
3 N	-0,7565	-1,0992	-0,8556	-0,5584	-0,5582	-0,6542
4 C	0,2227	0,8155	0,6758	0,1040	0,1046	0,5197
5 C	0,4613	0,1592	0,0758	0,7717	0,7715	0,2442
6 C	0,4985	0,9578	0,7679	0,2106	0,2113	0,5252
7 N	-0,5256	-0,7961	-0,6666	-0,5210	-0,5218	-0,5514
8 C	0,7908	1,1530	0,9503	0,5810	0,5810	0,7327
9 N	-0,7076	-1,0294	-0,7853	-0,6044	-0,6043	-0,6548
10 O	-0,6362	-0,7297	-0,6027	-0,6676	-0,6692	-0,5031
11 O	-0,5017	-0,7614	-0,5973	-0,5250	-0,5260	-0,4978
12 O	-0,6044	-0,7643	-0,6287	-0,5569	-0,5574	-0,5294
13 H	0,3843	0,4491	0,3405	0,4000	0,4007	0,2803
14 H	0,3687	0,4654	0,3338	0,4153	0,4163	0,2755
15 H	0,3664	0,4851	0,3494	0,4519	0,4530	0,3109
16 H	0,4229	0,5041	0,3856	0,4730	0,4736	0,3504
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
UT12						
1 N	-0,7716	-0,7715	-0,8161	-0,5796	-0,5795	-0,6048
2 C	0,8843	0,8851	0,9466	0,6331	0,6337	0,6844
3 N	-0,7587	-0,7596	-0,7158	-0,6383	-0,6392	-0,5745
4 C	0,4637	0,4627	0,7325	0,3126	0,3120	0,5562
5 C	0,2435	0,2452	-0,0084	0,5875	0,5878	0,1660
6 C	0,6756	0,6753	0,7876	0,2270	0,2276	0,5551
7 N	-0,6473	-0,6471	-0,8247	-0,4789	-0,4790	-0,6374
8 C	0,8023	0,8025	0,9340	0,6139	0,6143	0,7189
9 N	-0,6659	-0,6668	-0,6186	-0,6342	-0,6352	-0,5635
10 O	-0,7972	-0,7986	-0,6127	-0,6803	-0,6819	-0,5136
11 O	-0,6372	-0,6375	-0,6221	-0,5552	-0,5556	-0,5226
12 O	-0,6658	-0,6665	-0,6209	-0,5627	-0,5636	-0,5152
13 H	0,4584	0,4588	0,3495	0,4131	0,4137	0,2910
14 H	0,4518	0,4526	0,3355	0,4030	0,4039	0,2748
15 H	0,4871	0,4877	0,3917	0,4743	0,4751	0,3565

Çizelge 4.4. devamı

16 H	0,4768	0,4777	0,3617	0,4645	0,4655	0,3286
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
UT13						
1 N	-0,7760	-0,7759	-0,8045	-0,5861	-0,5860	-0,5936
2 C	0,8858	0,8864	0,9418	0,6409	0,6415	0,6800
3 N	-0,7806	-0,7823	-0,6906	-0,6491	-0,6508	-0,5560
4 C	0,4460	0,4465	0,6050	0,1982	0,1986	0,4555
5 C	0,2494	0,2500	0,0578	0,6535	0,6539	0,2294
6 C	0,6617	0,6618	0,7710	0,2607	0,2608	0,5398
7 N	-0,6746	-0,6765	-0,6351	-0,5645	-0,5664	-0,5224
8 C	0,8549	0,8553	0,9233	0,6270	0,6273	0,7145
9 N	-0,6612	-0,6607	-0,7471	-0,5611	-0,5605	-0,6390
10 O	-0,7983	-0,7998	-0,6080	-0,6787	-0,6803	-0,5106
11 O	-0,6381	-0,6386	-0,6255	-0,5558	-0,5563	-0,5255
12 O	-0,6562	-0,6572	-0,6211	-0,5552	-0,5562	-0,5252
13 H	0,4574	0,4581	0,3483	0,4125	0,4131	0,2902
14 H	0,4620	0,4631	0,3256	0,4166	0,4179	0,2774
15 H	0,4840	0,4850	0,3720	0,4721	0,4732	0,3344
16 H	0,4837	0,4847	0,3868	0,4691	0,4702	0,3510
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
UT14						
1 N	-0,7270	-0,7283	-0,6420	-0,6133	-0,6147	-0,5013
2 C	0,7928	0,7931	0,8605	0,5833	0,5835	0,6385
3 N	-0,6686	-0,6695	-0,7171	-0,5566	-0,5573	-0,5877
4 C	0,2437	0,2458	0,7014	0,0716	0,0729	0,5469
5 C	0,3378	0,3375	0,0082	0,6810	0,6809	0,1726
6 C	0,6137	0,6141	0,7131	0,2510	0,2518	0,4922
7 N	-0,6477	-0,6489	-0,7952	-0,5452	-0,5463	-0,6410
8 C	0,8069	0,8067	0,9213	0,5815	0,5813	0,7046
9 N	-0,7112	-0,7113	-0,6554	-0,6081	-0,6079	-0,5552
10 O	-0,6278	-0,6285	-0,6090	-0,5293	-0,5302	-0,5096
11 O	-0,6268	-0,6276	-0,6047	-0,5443	-0,5452	-0,5062
12 O	-0,6593	-0,6597	-0,6381	-0,5584	-0,5589	-0,5199
13 H	0,4553	0,4562	0,3420	0,4105	0,4115	0,2718
14 H	0,4686	0,4693	0,3742	0,4540	0,4547	0,3414
15 H	0,4649	0,4659	0,3634	0,4519	0,4530	0,3259

Çizelge 4.4. devamı

16 H	0,4844	0,4850	0,3774	0,4703	0,4709	0,3270
	HF			B3LYP		
	KAN	SU	GAZ	KAN	SU	GAZ
UT15						
1 N	-0,7270	-0,7283	-0,6379	-0,6133	-0,6147	-0,4962
2 C	0,7928	0,7931	0,8540	0,5833	0,5835	0,6326
3 N	-0,6686	-0,6695	-0,7033	-0,5567	-0,5573	-0,5731
4 C	0,2437	0,2458	0,5658	0,0716	0,0729	0,4306
5 C	0,3378	0,3375	0,1317	0,6810	0,6809	0,2824
6 C	0,6137	0,6141	0,7219	0,2510	0,2518	0,4944
7 N	-0,6477	-0,6489	-0,6524	-0,5452	-0,5463	-0,5400
8 C	0,8069	0,8067	0,9406	0,5815	0,5813	0,7234
9 N	-0,7112	-0,7113	-0,8003	-0,6081	-0,6079	-0,6633
10 O	-0,6278	-0,6285	-0,6065	-0,5293	-0,5302	-0,5081
11 O	-0,6268	-0,6276	-0,6089	-0,5443	-0,5452	-0,5086
12 O	-0,6593	-0,6597	-0,6329	-0,5584	-0,5589	-0,5333
13 H	0,4553	0,4562	0,3290	0,4105	0,4115	0,2703
14 H	0,4686	0,4693	0,3652	0,4540	0,4547	0,3279
15 H	0,4649	0,4659	0,3498	0,4519	0,4530	0,3124
16 H	0,4844	0,4850	0,3839	0,4703	0,4709	0,3484

5.SONUÇ

Bu çalışmada pürin katabolizmasındaki adenozin, guanozin, guanin, inozin, hipoksantin, ksantin ve ürik asit maddelerinin HF yönteminin 6-31G(d,p) temel setini ve DFT yönteminin B3LYP/6-31G(d,p) temel setini kullanarak teorik hesaplamasını yaptık.

Birinci aşamada moleküllerin kendi tautomerleri içinde en kararlı tautomerini ΔG değerlerine bakarak tespit ettik. Buna göre;Guaninde 2.tautomer, guanozinde 1. tautomer, adenozinde 1. tautomer, inozinde 2. tautomer, hipoksantinde 2. tautomer, ksantinde 6. tautomer ve ürik asitde 1. tautomer bulduk.

Tautomerlerin kendi içerisinde kararlılık sıralaması yapılacak olursa; HF yönteminin 6-31G(d,p) temel seti ve DFT yönteminin B3LYP/6-31G(d,p) temel seti kullanıldığında su, gaz ve kan fazlarında guanozin 1. tautomer(GZT1) en kararlı , hipoksantin 2. tautomer (HPT2)de en kararsız çıkar.

HF yöntemi —————→ Kararlılık azalır.

Su:GZT1>NT2>ADT1>UT1>KT6>GUT2>HPT2

Gaz: GZT1>NT2>ADT1>UT1>KT6>GUT2>HPT2

Kan: GZT1>NT2>ADT1>UT1>KT6>GUT2>HPT2

DFT yöntemi —————→ Kararlılık azalır.

Su:GZT1>NT2>ADT1>UT1>KT6>GUT2>HPT2

Gaz: GZT1>NT2>ADT1>UT1>KT6>GUT2>HPT2

Kan: GZT1>NT2>ADT1>UT1>KT6>GUT2>HPT2

Kararlı tautomer yapıları bulduktan sonra moleküllerin mulliken yüklerine ve nükleofilitelerine bakarak aktif merkezlerini tespit ettik. Bunun sonucuna göre Se atomu bağladı. Tekrar ΔG değerlerini kontrol ettik.

Buna göre Se atomu bağlandıktan sonraki ΔG değerlerini HF yönteminin 6-31G(d,p) temel seti ve DFT yönteminin B3LYP/6-31G(d,p) temel seti kullanarak elde ettiğimiz sonuçları incelediğimizde su, gaz ve kan fazlarında guanozin 1. tautomer(GZT1) en kararlı , hipoksantin 2. tautomer (HPT2) de en kararsız çıkar.

HF yöntemi $\longrightarrow$ Kararlılık azalır.

Su: GZT1>NT2>ADT1>UT1>KT6>GUT2>HPT2

Gaz: GZT1>NT2>ADT1>UT1>KT6>GUT2>HPT2

Kan: GZT1>NT2>ADT1>UT1>KT6>GUT2>HPT2

DFT yöntemi $\longrightarrow$ Kararlılık azalır.

Su: GZT1>NT2>ADT1>UT1>KT6>GUT2>HPT2

Gaz: GZT1>NT2>ADT1>UT1>KT6>GUT2>HPT2

Kan: GZT1>NT2>ADT1>UT1>KT6>GUT2>HPT2



Reaksiyonuna göre $\delta\Delta G = (\text{Ürünler}) - (\text{Reaktifler})$

$$\square\Delta G = (\Delta G_{\text{M-Se}}) - (\Delta G_{\text{M}} + \Delta G_{\text{Se}})$$

Yukarıdaki tepkimeye göre her bir molekülün HF/6-31G(d,p) yöntemi ve B3LYP/6-31G(d,p) yöntemi ile su, gaz ve kan fazlarında Se bağlandıktan sonraki ΔG değerleri ile selenyumsuz moleküllerin ΔG değerlerini karşılaştırdık. Daha sonra

$\square\Delta G = (\Delta G_{\text{M-Se}}) - (\Delta G_{\text{M}} + \Delta G_{\text{Se}})$ formülüne göre ΔG değerlerini hesapladık.

Guanin HF Yöntemi

$$\text{Su } \delta\Delta G = (-1842941,74) - \{(-338471,99) + (-1505245,89)\} = 776,14 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Gaz } \delta\Delta G = (-1842552,78) - \{(-338427,69) + (-1505233,34)\} = 1108,25 \text{ kcal/mol}$$

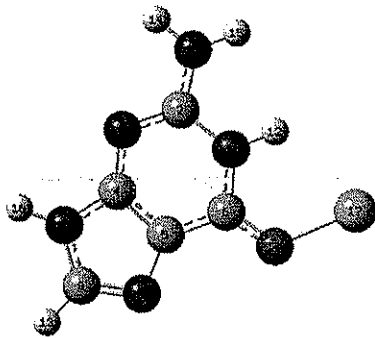
$$\text{Kan } \delta\Delta G = (-1842941,42) - \{(-338471,99) + (-1505245,89)\} = 776,46 \text{ kcal/mol}$$

Guanin DFT Yöntemi

$$\text{Su } \delta\Delta G = (-1846064,37) - \{(-340461,20) + (-1506401,64)\} = 1222,37 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Gaz } \delta\Delta G = (-1845640,47) - \{(-340412,38) + (-1506387,96)\} = 1159,87 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Kan } \delta\Delta G = (-1846064,06) - \{(-340461,01) + (-1506400,51)\} = 797,46 \text{ kcal/mol}$$



Guanin

Guanozin HF Yöntemi

$$\text{Su } \delta\Delta G = (-2152547,98) - (-648065,29) + (-1505245,89) = 763,2 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Gaz } \delta\Delta G = (-2152102,61) - \{(-647977,87) + (-1505233,34)\} = 1108,6 \text{ kcal/mol}$$

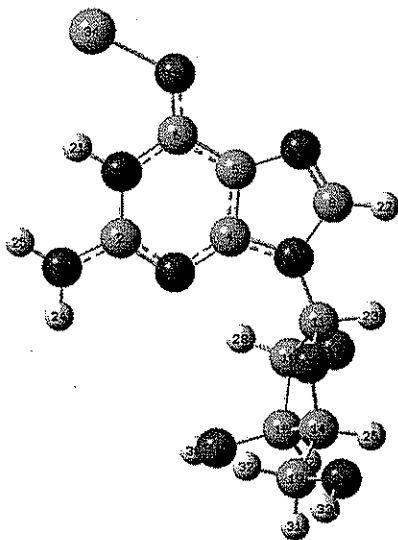
$$\text{Kan } \delta\Delta G = (-2152547,98) - \{(-648061,27) + (-1505245,89)\} = 759,18 \text{ kcal/mol}$$

Guanozin DFT Yöntemi

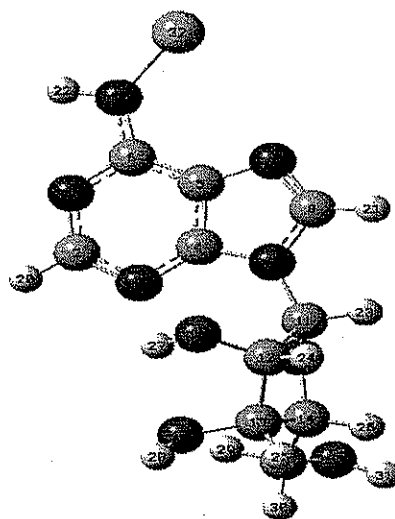
$$\text{Su } \delta\Delta G = (2157425,48) - \{(-651796,21) + (-1506401,64)\} = 772,37 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Gaz } \delta\Delta G = (-2156924,52) - \{(-651717,20) + (-1506387,96)\} = 1180,64 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Kan } \delta\Delta G = (-2157426,75) - \{(-651795,83) + (-1506400,51)\} = 769,59 \text{ kcal/mol}$$



Guanozin



Adenozin

Adenozin HF Yöntemi

$$\text{Su } \delta\Delta G = (-2105193,06) - \{(-601019,22) + (-1505245,89)\} = 1072,05 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Gaz } \delta\Delta G = (-2105118,29) - \{(-600962,81) + (-1505233,34)\} = 1077,86 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Kan } \delta\Delta G = (-2105192,92) - \{(-601020,73) + (-1505245,89)\} = 1073,7 \text{ kcal/mol}$$

Adenozin DFT Yöntemi

$$\text{Su } \delta\Delta G = (-2109829,32) - \{(-604545,90) + (-1506401,64)\} = 1118,22 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Gaz } \delta\Delta G = (-2109744,49) - \{(-604482,77) + (-1506387,96)\} = 1126,24 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Kan } \delta\Delta G = (-2109829,77) - \{(-604545,58) + (-1506400,51)\} = 1116,32 \text{ kcal/mol}$$

İnozin HF Yöntemi

$$\text{Su } \delta\Delta G = (-2118002,78) - \{(-613504,83) + (-1505245,89)\} = 747,94 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Gaz } \delta\Delta G = (-2117567,77) - \{(-613444,49) + (-1505233,34)\} = 1110,06 \text{ kcal/mol}$$

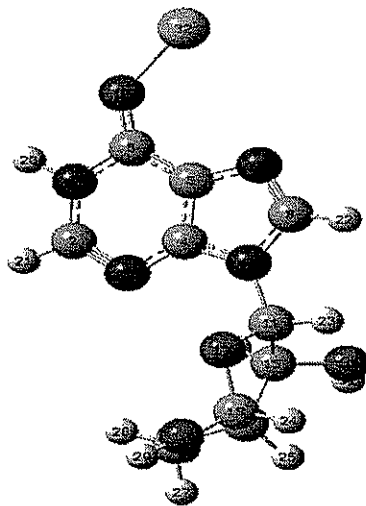
$$\text{Kan } \delta\Delta G = (-2117945,80) - \{(-613503,13) + (-1505245,89)\} = 803,22 \text{ kcal/mol}$$

İnozin DFT Yöntemi

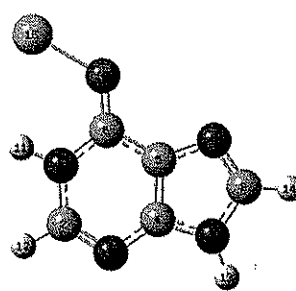
$$\text{Su } \delta\Delta G = (-2122674,94) - \{(-617050,62) + (-1506401,64)\} = 777,32 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Gaz } \delta\Delta G = (-2122491,28) - \{(-616980,88) + (-1506387,96)\} = 877,56 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Kan } \delta\Delta G = (-2122618,02) - \{(-617051,48) + (-1506400,51)\} = 833,97 \text{ kcal/mol}$$



İnozin



Hipoksantin

Hipoksantin HF Yöntemi

$$\text{Su } \delta\Delta G = (-1808430,66) - \{(-303929,95) + (-1505245,89)\} = 745,18 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Gaz } \delta\Delta G = (-1808017,90) - \{(-303892,43) + (-1505233,34)\} = 1107,87 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Kan } \delta\Delta G = (-1808430,66) - \{(-303929,96) + (-1505245,89)\} = 745,19 \text{ kcal/mol}$$

Hipoksantin DFT Yöntemi

$$\text{Su } \delta\Delta G = (-1811344,90) - \{(-305716,91) + (-1506401,64)\} = 773,65 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Gaz } \delta\Delta G = (-1810915,88) - \{(-305676,75) + (-1506387,96)\} = 1148,83 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Kan } \delta\Delta G = (-1811344,90) - \{(-305716,91) + (-1506400,51)\} = 772,52 \text{ kcal/mol}$$

Ksantin HF Yöntemi

$$\text{Su } \delta\Delta G = (-1855067,18) - \{(-350931,52) + (-1505245,89)\} = 1110,23 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Gaz } \delta\Delta G = (-1855016,15) - \{(-350891,54) + (-1505233,34)\} = 1108,73 \text{ kcal/mol}$$

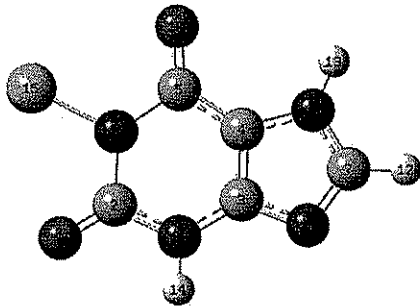
$$\text{Kan } \delta\Delta G = (-1855427,03) - \{(-350931,52) + (-1505245,89)\} = 750,38 \text{ kcal/mol}$$

Ksantin DFT Yöntemi

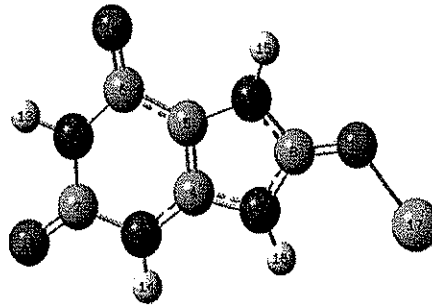
$$\text{Su } \delta\Delta G = (-1858569,37) - \{(-352943,00) + (-1506401,64)\} = 775,27 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Gaz } \delta\Delta G = (-1858134,63) - \{(-352898,01) + (-1506387,96)\} = 1151,34 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Kan } \delta\Delta G = (-1855073,96) - \{(-352943,00) + (-1506400,51)\} = 777,6 \text{ kcal/mol}$$



Ksantin



Ürik asit

Ürik asit HF Yöntemi

$$\text{Su } \delta\Delta G = (-1902395,35) - \{(-397927,06) + (-1505245,89)\} = 777,6 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Gaz } \delta\Delta G = (-1901984,42) - \{(-397876,54) + (-1505233,34)\} = 1125,46 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Kan } \delta\Delta G = (-1902061,34) - \{(-397927,12) + (-1505245,89)\} = 1111,67 \text{ kcal/mol}$$

Ürik asit DFT Yöntemi

$$\text{Su } \delta\Delta G = (-1905786,81) - \{(-400164,07) + (-1506401,64)\} = 778,9 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Gaz } \delta\Delta G = (-1905324,23) - \{(-400107,53) + (-1506387,96)\} = 1171,26 \text{ kcal/mol}$$

$$\text{Kan } \delta\Delta G = (-1905765,45) - \{(-400164,07) + (-1506400,51)\} = 799,13 \text{ kcal/mol}$$

Sonuçlar gösteriyor ki ürik asit miktarını kontrol etmek için, bizim çalışmamızda bulunan sonuçlara göre, Se atomunun bağlanması gereken en uygun molekülün hipoksantin olduğu saptanmıştır. Araştırmacılar Gut hastalığı tedavisinde, Selenyum ile invivo çalışmalar yaparak yeni tedavi yöntemleri geliştirebilirler.

KAYNAKLAR DİZİNİ

- Aslan, S., 1985, Modern Teşhis İlaç ve Tedavi. Beta Basım Yayın Dağıtım, İstanbul, I. Cilt; 258-273s.
- Atkins, P.W., and Friedman, R.S., 1997, Molecular Quantum Mechanics, Third Edition, Oxford University Press, Malta
- Buckner, J.S., and Newman, S. M., 1990, Uric acid stroge in the epidermal cells of *Manduca sexta*: Localization and movement during the pupal transformation, *Journal Of Insect Physiology*, 36, 219-225, 227-229 p.
- Chen, W.K., Lu, C.H., Xu, J., Yang, Y.C., and Li, J.Q., 2002, A theoretical study on the tautomers of uric acid molecule, *Chinese Journal Of Structural Chemistry*, 21, 186-190 p.
- Coşkun, N., ve Aksoy, Ç., 2009, An Imidazolidin-1-ol, nitron and oxadiazinane ring-chain-ring tautomeric dynamic combinatorial library, *Tetrahedron Letters*, 50, 3008-3012 p.
- Demir, T.A., Öğretir, C., Görgün, K., Yaman, (Özkütük) M., 2004, Quantum chemical studies on tautomerization of uric acid, *Journal Of Molecular Structure (Theochem)*, 684, 149- 157 p.
- Dimoglo, A., ve Kandemirli, F., 2005 , Moleküler orbital teorisinin prensipleri ve uygulamaları, GYTE Basımevi, Gebze-Kocaeli.
- Eleen Frisch, Roy D. Dennington II, Todd A, Keith with Alice B. Nielsen, Andrew J. Holder. "Gauss View Reference", *Gaussian, Inc*, U.S.A, 1 (2003)
- Foresman, J.B. And Frisch, A., M, 1996 Exploring Chemistry with electronic structure Methods, Second edition, Gaussian Inc. USA.

KAYNAKLAR DİZİNİ (devam)

Frisch, A. and Frisch, M.J., 1999, Gaussian 98 Users Reference, Second edition Gaussian Inc., USA

Hinchliffe, A., 1997, Modelling Molecular Structures, John Wiley & Sons, New York.

Jain, S.K., and Levine, S.N., 1995;. Elevated lipid peroxidation and vitamin E-quinone levels in heart ventricles of streptozotocin-treated diabetic rats. Free Radic Biol Med, 18: 337-341p.

Jensen, F., 1999, Introduction to Computational chemistry., John Wiley & Sons, England.

Kalandarishvili, A. G., Terent'ev, P.B., Application Of Mass Spectrometry For The Analysis Of Organic Tautomeric Compounds, Mass Spectrometry Reviews, 15, 339-363, 1996.

Karelson, Mati, Lobanov, V.S., and Katritzky, Alan R., 1996, Quantum-Chemical Descriptors in QSAR/QSPR Studies, Chem. Rev., 96, 1027-1043.

Katritzky, A.R., Pozharskii, A.F., Handbook Of Heterocyclic Chemistry, 85-90, 47-53, 137-140, 2nd Edition, 2000.

Katritzky, A.R., Karelson, M. and Harris, P.A., Heterocyclic and References cited therein, 32, 329, 1989.

Katritzky, A.R., ve Lagowski, J.M., Adv. Heterocycle Chem., 1 ve 2(1963).

Khan, B.T., Somayajulu, M.R., and Khan, M.M.T., 1978, Platinum group metal complexes of adenosine and xanthosine, Journal Of Inorganic and Nuclear Chemistry, 40, 1251-1253 p.

KAYNAKLAR DİZİNİ (devam)

- Lafont, R. and Pennetier, J.L., 1975, Uric acid metabolism during pupal-adult development of *Pieris brassicae*, *Journal Of Insect Physiology*, 21, 1323-1336 p.
- Meng, F., and Zhao, X., 2008, Theoretical study of inosine tetrad and octamer interacting with alkali metal ions, *Journal Of Molecular Structure: Theochem*, 869, 94-97 p.
- Mukano, Y., Momochi, M., Takanashi, Y., Suzuki, M., Wakabayashi, H., Teramae, H., Kobayashi, K., 2010, İmino-enamine tautomerism and dynamic prototropy in 1-imino-3 amino-1H-indens, *Tetrahedron*, 66, 605-611 p.
- Nedeltcheva, D., Kamounah, F.S., Mirolo, L., Fromm, K.M., and Antonov, L., 2009, Solid State Tautomerism In 2-((phenylimino)methyl)naphthalene-1-ol, *Dyes and Pigments*, 83, 121-126 p.
- Nguyen, T., Brunson, D., Crespi, C. L., Penman, B.W., Wishnok, J.S. and Tannenbaum, S.R., 1992, DNA damage and mutation in human cells exposed to nitric oxide in vitro, *Proc Natl Acad Sci USA*, 89, 3030-3034 p.
- Ni, B., Xing, L., Wang, H., and Song, Z., 2009, Theoretical Study Of Interaction Of 2,6-dithiopurine With Li^+ , Na^+ , K^+ , Be^{2+} , Mg^{2+} , and Ca^{2+} Metal Cations, *Journal of Structural Chemistry*, 20, 169-175 p.
- Öğretir, C., Demir, T.A., and Özkaya, M., 2005, Quantum chemical studies on some potentially tautomeric oxazolidin-4-one derivatives and their thio and azo analogs, *Journal of Molecular Structure: Theochem*, 732, 183–199 p.
- Rosemeyer, H., 2004, The chemodiversity of purine as a constituent of natural products, *Chemistry & Biodiversity*, 1, 361-401 p.

KAYNAKLAR DİZİNİ (devam)

Sigel, A., and Sigel, H., 1996, Dichotomy of metal ion binding to N1 and N7 of purines, Interaction of metal ions with nucleotides, nucleic acids, and their constituents, 32, 61- 87 p

Szegezdi, J., and Csizmadia, F., 2007, Tautomer generation. pKa based dominance conditions for generating dominant tautomers, ChemAxon, 1037 Budapest, Hungary.

Ujjinamatada, R.K., Bhan, A., and Hosmane, R.S., 2006, Design of inhibitörs against guanase: Synthesis and biochemical evaluation of analogues of azepinomycin, Bioorganic& Medicinal Chemistry Letters, 16, 5551-5554 p.

Uyar, T., 1990, Organik kimya, 1111-1113 s.

Yenikaya, C., Öğretir, C., and Berber, H., 2005, A quantum chemical study on structure of 1,2-Bis(diphenylphosphinoyl)ethane and hydroquinone cocrystal, Journal of Molecular Structure: Theochem, 725, 207.

Taşal, S., 2008, Bazı kinolin türevleri üzerine kuantum kimyasal çalışmalar, yüksek lisans tezi, Osmangazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, 68s.

Tokullugil, A., Dirican, M., ve Ulukaya, E., 1997, Biyokimya, Nobel Tıp kitabevleri, 29, 343-351s.

