

T.C.
RECEP TAYYİP ERDOĞAN ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

BAZI BENZİMİDAZOL TÜREVİ BİLEŞİKLERİN ASİTLİK
DAVRANIŞLARININ İNCELENMESİ

NURAY ÖZKAYA

TEZ DANIŞMANI
PROF. DR. OKTAY TORUL
TEZ JÜRİLERİ
DOÇ. DR. FATİH İSLAMOĞLU
PROF. DR. BAHİTTİN KAHVECİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ
KİMYA ANABİLİM DALI

RİZE-2015

Her Hakkı Saklıdır

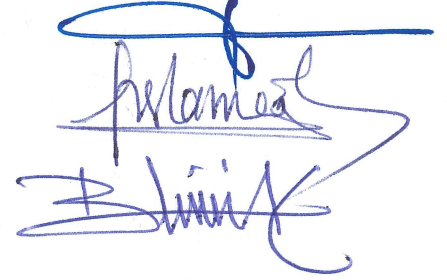
T.C.
RECEP TAYYIP ERDOĞAN ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

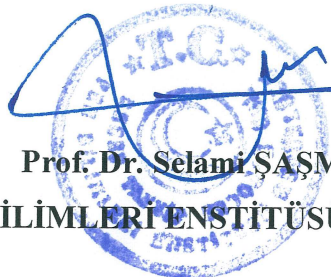
BAZI BENZİMİDOZOL TÜREVİ BİLEŞİKLERİN ASİTLİK
DAVRANIŞLARININ İNCELENMESİ

Prof. Dr. Oktay TORUL danışmanlığında, Nuray ÖZKAYA tarafından hazırlanan bu çalışma, Enstitü Yönetim Kurulu kararıyla oluşturulan jüri tarafından 02/09/2015 tarihinde Kimya Anabilim Dalı'nda **YÜKSEK LİSANS** tezi olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri	Ünvanı Adı Soyadı
Başkan	: Prof. Dr. Oktay TORUL
Üye	: Doç. Dr. Fatih İSLAMOĞLU
Üye	: Prof. Dr. Bahittin KAHVECİ

İmzası





Prof. Dr. Selami SAŞMAZ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRÜ

ÖNSÖZ

Yüksek lisans eğitimimde bilgisi ve tecrübesinden yararlandığım, eğitimi kişiliğini örnek edindiğim, çalışmalarım boyunca öneri ve yardımlarını esirgemeyen danışman hocam Sayın Prof. Dr. Oktay TORUL'a,

Çalışmam boyunca manevi desteklerini her zaman hissettiren, çalışmamın her aşamasında yorum, öneri ve bilgi desteğiyle çalışmama büyük katkısı olan hocam Sayın Doç. Dr. Fatih İSLAMOĞLU'na,

Ayrıca lisansüstü eğitimim boyunca bana yardımcı olan Kimya bölümünün Öğretim üyelerine ve Yrd. Doç. Dr. Mustafa EMİRİK'e,

Her zaman yanımda yer alan ve maddi manevi desteğini benden esirgemeyen aileme,

Sonsuz teşekkürlerimi ve saygılarımı sunarım.

Nuray ÖZKAYA

TEZ ETİK BEYANNAMESİ

Tarafımdan hazırlanan “Bazı Benzimidazol Türevi Bileşiklerin Asitlik Davranışlarının İncelenmesi” başlıklı bu tezin, Yükseköğretim Kurulu Bilimsel Araştırma ve Yayın Etiği Yönergesindeki hususlara uygun olarak hazırladığımı ve aksinin ortaya çıkması durumunda her türlü yasal işlemi kabul ettiğimi beyan ederim. 02/09/2015

Nuray ÖZKAYA

***Uyarı:** Bu tezde kullanılan özgün ve/veya başka kaynaklardan sunulan içeriğin kaynak olarak kullanımı, 5846 sayılı Fikir ve Sanat Eserleri Kanunundaki hükümlere tabidir.*

ÖZET

BAZI BENZİMİDAZOL TÜREVİ BİLEŞİKLERİN ASİTLİK DAVRANIŞLARININ İNCELENMESİ

Nuray ÖZKAYA

Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Kimya Ana Bilim Dalı
Yüksek Lisans Tezi
Danışmanı: Prof. Dr. Oktay TORUL

Bu çalışmada dört adet (Fenil[2-(2-bromobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (1), Fenil[2-(2-florobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (2), Fenil[2-(2-klorobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon(3) ve Fenil[2-(2-metilbenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (4)] benzimidazol türevi bileşiklerin moleküllerin geometrik optimizasyonu yapıldıktan sonra yarı deneysel kuantum kimyasal metotlar (AM1, MNDO, MNDOD, PM3, PM6, PM6-DH2, PM7 ve RM1) kullanılarak onbir farklı çözücü (Su, Etanol, Metanol, *N*-Propanol, 2-Propanol, *N*-Butanol, *Tert*-Butanol, Etilen Glikol, *N,N*-Dimetilformamit (DMF), Dimetilsülfoksit (DMSO) ve Asetonitril) fazında entalpi değişimleri (ΔH°) ve entropi değişimleri (ΔS°) MOPAC 2012 bilgisayar programıyla hesaplanmıştır. Elde edilen değerler yardımı ile her bir bileşiğin asitlik sabitleri (pKa) değerleri hesaplanmıştır. Teorik olarak bulunan pKa değerleriyle, deneysel veriler arasındaki paralellik araştırılmıştır. Yapılan hesaplamalar sonucunda yarı deneysel kuantum kimyasal metotlar ile yapılan hesaplamaların uygun sonuç verdiği bulunmuştur.

2015, 93 sayfa

Anahtar kelimeler: MOPAC 2012 bilgisayar programı, Asitlik sabiti (pKa), Benzimidazol

ABSTRACT

STUDIES on ACIDITY BEHAVIOURS of SOME BENZIMIDAZOLE DERIVATIVE COMPOUNDS

Nuray ÖZKAYA

Recep Tayyip Erdoğan University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Chemistry
Master Thesis
Supervisor: Prof. Dr. Oktay TORUL

In this study, four number (Phenyl[2-(2-bromobenzyl)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-yl]methanone (1), Phenyl[2-(2-fluorobenzyl)-1*H*-1,3-benzimidazole-5-yl]methanone (2), Phenyl[2-(2-chlorobenzyl)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-yl]methanone (3) and Phenyl[2-(2-methylbenzyl)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-yl]methanone(4)] benzimidazole derivative compounds were calculated enthalpy (ΔH°) and entropies (ΔS°) by a computer program MOPAC 2012 using semi-empirical quantum chemical methods (AM1, MNDO, MNDOD, PM3, PM6, PM6-DH2, PM7 and RM1) after completed the geometric optimization of molecules in eleven different solvent (Water, Ethanol, Methanol, *N*-Propanol, 2-Propanol, *N*-Butanol, *Tert*-Butanol, EthyleneGlycol, *N,N*-Dimethylformamide (DMF), Dimethyl Sulfoxide (DMSO) and Acetonitrile) phase. Acidity constants (pKa) values of each compound were calculated with the aid of the obtained values. The pKa values found as theoretically have been investigated parallels between the experimental data. The results of the calculation sare found to give suitable results of the calculations made with semi-empirical quantum chemical methods.

2015, 93 pages

Keywords: MOPAC 2012 computer program, Acidity constants (pKa), Benzimidazol

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ.....	I
TEZ ETİK BEYANNAMESİ.....	II
ÖZET.....	III
ABSTRACT.....	IV
İÇİNDEKİLER.....	IV
ŞEKİLLERİN DİZİNİ.....	VII
TABLolar DİZİNİ.....	IX
SEMBOLLER ve KISALTMALAR DİZİNİ.....	XII
1. GENEL BİLGİLER.....	1
1.1. Giriş.....	1
1.2. Moleküler Mekanik Yöntem.....	1
1.3. Elektronik Yapı Yöntemler.....	2
1.3.1. Yarı-Deneysel Yöntemler (Semi-Empirical Methods).....	3
1.3.2. Ab İnitio Yöntemler.....	5
1.3.2.1. Hartree-Fock Uyumlu Alan Teorisi (HF/SCF).....	5
1.3.2.2. Moller-Plesset Pertürbasyon Teorisi (MP).....	6
1.3.3. Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT).....	6
1.3.4. B3LYP Karma Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi.....	7
1.3.5. Hesaplamalarda Kullanılan Temel Setler.....	7
1.4. Geometrik Optimizasyon.....	7
1.4.1. Minimizasyon Yöntemleri.....	8
1.5. Benzimidazoller.....	9
1.6. Asitlik ve Bazlık Sabitlerini Etkileyen Faktörler.....	13
1.6.1. Çözücü Etkisi.....	14
1.6.2. Elektronegatiflik.....	14
1.6.3. Hibritleşme Etkisi.....	14
1.6.4. İndüktif Etkiler.....	15
1.6.5. Rezonans Etkileri.....	15
1.6.6. Sterik Etkiler.....	15
1.6.7. Büyüklük.....	16
2. YAPILAN ÇALIŞMALAR.....	17

2.1.	Çalışılan Moleküller.....	17
2.2.	Materyal ve Metot.....	19
2.2.1.	Hesaplama Metodu	19
2.2.2.	Geometri Optimizasyonu	19
2.3.	Denge Sabiti (K) ve Standart Serbest Enerji Değişimi ΔG° Arasındaki İlişki..	18
2.4.	Yarı Deneysel Yöntemlerle Asitlik Sabitinin Bulunması	20
3.	BULGULAR	22
4.	TARTIŞMA ve SONUÇLAR	59
5.	ÖNERİLER	88
	KAYNAKLAR	89
	ÖZGEÇMİŞ	93

ŞEKİLLERİN DİZİNİ

Şekil 1.	Benzimidazol molekülünün yapısı	9
Şekil 2.	Benzimidazol molekülünde tautomeri gösterimi.	10
Şekil 3.	Astemizol molekülünün yapısı.....	11
Şekil 4.	Mebendazol molekülünün yapısı.....	11
Şekil 5.	Bazı DNA bazları.	12
Şekil 6.	Benzimidazolün sentez yöntemleri	13
Şekil 7.	Çalışılan 1. Molekül (Fenil[2-(2-bromobenzil)-1 <i>H</i> -1,3-benzimidazol-5-il] metanon).	17
Şekil 8.	Çalışılan 2. Molekül(Fenil[2-(2-florobenzil)-1 <i>H</i> -1,3-benzimidazol-5-il] metanon).	17
Şekil 9.	Çalışılan 3. Molekül (Fenil[2-(2-klorobenzil)-1 <i>H</i> -1,3-benzimidazol-5-il] metanon)	18
Şekil 10.	Çalışılan 4. Molekül (Fenil[2-(2-metilbenzil)-1 <i>H</i> -1,3-benzimidazol-5- il] metanon).	18
Şekil 11.	AM1 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması	64
Şekil 12.	MNDO metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması	64
Şekil 13.	MNDOD metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması. ..	65
Şekil 14.	PM3 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması	65
Şekil 15.	PM6 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması	66
Şekil 16.	PM6-DH2 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması..	66
Şekil 17.	PM7 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması	67
Şekil 18.	RM1 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması	67
Şekil 19.	Su ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması	68
Şekil 20.	Etanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması	68
Şekil 21.	Metanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması.....	69
Şekil 22.	N-Propanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması	69
Şekil 23.	2-Propanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması	70
Şekil 24.	N-Butanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması	70
Şekil 25.	Tert-Butanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması	71
Şekil 26.	Etilen glikol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması	71
Şekil 27.	DMF ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması	72
Şekil 28.	DMSO ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması	72
Şekil 29.	Asetonitril ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması	73

Şekil 30.	1. Molekül için deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması	73
Şekil 31.	2. Molekül için deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması.	74
Şekil 32.	3. Molekül için deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması	74
Şekil 33.	4. Molekül için deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması	75

TABLULAR DİZİNİ

Tablo 1.	Bazı yarı deneysel hesaplama yöntemleri.	4
Tablo 2.	Çalışılan çözücülerin yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri.	23
Tablo 3.	1. Molekülün AM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri	27
Tablo 4.	1. Molekülün MNDO yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri	28
Tablo 5.	1. Molekülün MNDOD yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri	29
Tablo 6.	1. Molekülün PM3 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri	30
Tablo 7.	1. Molekülün PM6 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri	31
Tablo 8.	1. Molekülün PM6-DH2 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri	32
Tablo 9.	1. Molekülün PM7 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri	33
Tablo 10.	1. Molekülün RM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri	34
Tablo 11.	2. Molekülün AM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerler	35
Tablo 12.	2. Molekülün MNDO yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerler	36
Tablo 13.	2. Molekülün MNDOD yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri	37
Tablo 14.	2. Molekülün PM3 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerler	38
Tablo 15.	2. Molekülün PM6 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerler	39
Tablo 16.	2. Molekülün PM6-DH2 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerler	40
Tablo 17.	2. Molekülün PM7 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerler	41
Tablo 18.	2. Molekülün RM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerler	42
Tablo 19.	3. Molekülün AM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerler	43

Tablo 20.	3. Molekülün MNDO yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerler	44
Tablo 21.	3. Molekülün MNDOD yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerler	45
Tablo 22.	3. Molekülün PM3 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerler	46
Tablo 23.	3. Molekülün PM6 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri	47
Tablo 24.	3. Molekülün PM6-DH2 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerler	48
Tablo 25.	3. Molekülün PM7 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerler	49
Tablo 26.	3. Molekülün RM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerler	50
Tablo 27.	4. Molekülün AM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerler	51
Tablo 28.	4. Molekülün MNDO yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerler	52
Tablo 29.	4. Molekülün MNDOD yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerler	53
Tablo 30.	4. Molekülün PM3 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerler	54
Tablo 31.	4. Molekülün PM6 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerler	55
Tablo 32.	4. Molekülün PM6-DH2 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerler	56
Tablo 33.	4. Molekülün PM7 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri	57
Tablo 34.	4. Molekülün RM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerler	58
Tablo 35.	1. Molekülün çalışılan çözücü ortamlarında yarı deneysel kuantum kimyasal metoda göre hesaplanan pKa değerleri.....	60
Tablo 36.	2. Molekülün çalışılan çözücü ortamlarında yarı deneysel kuantum kimyasal metoda göre hesaplanan pKa değerleri.....	61
Tablo 37.	3. Molekülün çalışılan çözücü ortamlarında yarı deneysel kuantum kimyasal metoda göre hesaplanan pKa değerleri.....	62
Tablo 38.	4. Molekülün çalışılan çözücü ortamlarında yarı deneysel kuantum kimyasal metoda göre hesaplanan pKa değerleri.....	63
Tablo 39.	1. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin sıralanması	79

Tablo 40.	2. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin sıralanması	80
Tablo 41.	3. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin sıralanması	81
Tablo 42.	4. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin sıralanması	82
Tablo 43.	1. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin çalışılan modellere göre sıralanması	84
Tablo 44.	2. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin çalışılan modellere göre sıralanması	85
Tablo 45.	3. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin çalışılan modellere göre sıralanması	86
Tablo 46.	4. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin çalışılan modellere göre sıralanması	87

SEMBOLLER DİZİNİ

pKa	Asitlik İyonlaşma Sabitinin Eksi Logaritması
DMF	<i>N,N</i> -dimetilformamit
DMSO	Dimetilsülfoksit
NDDO	Neglect of Diatomic Differential Overlap
AM1	Austin Model 1
MNDO	Modified Neglect of Diatomic Differential Overlap
MNDOD	Modified Neglect of Diatomic Differential Overlap-D
PM3	Parameterized Model Number 3
PM6	Parametric–Method Number 6
PM7	Parameterization Method 7
RM1	Recife Model 1
MOPAC	Molecular Orbital PACkage
SPARC	Scalable Processor ARChitecture
Ψ	Dalga Fonksiyonu
H	Hamiltoniannın İşlemcisi
ΔH°	Oluşum Entalpisi
ΔG°	Standart Gibbs Serbest Enerjisi
ΔS°	Entropi Değişimi

1. GENEL BİLGİLER

1.1. Giriş

Teorik hesaplama yöntemleri kimya alanında büyük kolaylıklar sağlamaktadır. Öyleki, şu ana kadar herhangi bir şekilde elde edilmiş veya edilememiş birçok molekülün, gerçek koşullarda oluşamayacak veya oluşma olasılığı çok düşük olan bileşikler için kolayca uygulanabilmekte ve istenen sonuçlar alınabilmektedir. Laboratuvar ortamında yapılacak deneyler neticesinde moleküler yapı, elektron yükleri, bağ uzunlukları, bağ açıları, enerjiler, dipol moment vb. gibi birçok veriyi sağlayabilecek bir metot yoktur. Özellikle bazı teorik çalışmaların deneysel yöntemlerden daha hassas sonuçlar verdikleri gözlemlenmektedir. Bunun yanında teorik hesaplama yöntemlerinde elde edilen verilerin güvenilirliği oldukça yüksektir. Yüksek hassasiyet ve dikkat gerektiren deneysel çalışmalarda dahi elde edilen sonuçların doğruluğu kişinin gözlem, dikkat ve hassasiyetine bağlıdır. Ekonomik yönden yüksek maliyeti gerektiren deneysel çalışmalar, teorik çalışmalar yardımı ile sonuçlar hazırlanarak bilgisayar ortamında kısa süre içerisinde sonuçlandırılmaktadır. Bu tip teorik çalışmalar her zaman deneysel çalışmalara yardımcı olabilecek çalışmalar olduğu düşünülmeli ve hiçbir zaman teorik hesaplamaların deneysel çalışmaların yerini alacağı düşünülmemelidir. Her zaman araştırmacılar için gerçek ve güvenilir olan sonuç deneysel çalışmalar sonucunda elde edilen veriler olmalıdır. Artık günümüzde yapılan birçok çalışmada deneysel veriler ile teorik çalışma sonucu elde edilen veriler karşılaştırılarak yorumlanmaktadır. Yapılan birçok deneysel çalışma ile açıklanamayan bir sonuç teorik çalışma ile açıklanarak yapısı ve özellikleri açıklanabilmektedir. Kısaca özetlemek gerekirse, teorik çalışmalar sonucunda elde edilen veriler deneysel verileri yönlendirici ve aydınlatıcı bilgiler olmaktadır (Yılmaz, 2011).

1.2. Moleküler Mekanik Yöntem

Moleküler mekanik yöntemlere kuvvet alanı yöntemi de denir. Moleküllerin yapı ve özelliklerini yorumlamada temel fizik yasalarını kullanır. Moleküler mekanik hesaplamalarda moleküler sistemlerin çekirdek etkileşimleri esas alınır ve molekülün elektronları hesaba katılmaz (Ermeç, 2008).

Moleküler mekanik yöntemler, polar çözeltilerden ziyade apolar çözeltilerde organik molekülleri çalışmada çok etkili sonuçlar vermiştir. Bu tür moleküler mekanik metotlar; bağ gerilmesi, açılı bükülmesi, burulma, atomların ve moleküllerin bağ yapmayan (dispersiyon çekim, elektrostatik etkileşim) enerjilerini ifade etmek için basit analitiksel fonksiyonları kullanır. Bu analitiksel fonksiyonlar ve bunların birinci ve ikinci türevleri hızlı ve verimli bir şekilde değerlendirilebilir ve böylece bu metot daha büyük ve karmaşık moleküllere uygulanabilir (Kollman, 1985).

GAUSSIAN, MOPAC, SPARC, HYPERCHEM, QUANTA, SYBYL, ALCEMY, ECEPP, AMBER, CHARMM, MMx, BIO+ ve OPLS gibi birçok moleküler mekanik yöntemi mevcuttur. Bu gelişmiş programlar çok hızlıdır ve temel haldeki bir molekülün enerjisini hesaplayabilirler. Bir tepkime sistemi modellenerek bağ oluşumu ya da parçalanmasını içeren işlemlerin yapılamaması bu tip programların önemli bir dezavantajdır (Çelik vd., 2003).

1.3. Elektronik Yapı Yöntemleri

Elektronik yapı yöntemleri, hesaplamalar için temel olarak klasik fizikten daha fazla kuantum mekanik yasalarını kullanır. Bir molekülün enerji ve diğer ilgili özellikleri kuantum mekaniğine göre Schrödinger eşitliği çözerek elde edilir (Yılmaz, 2011). Schrödinger eşitliği:

$$H \Psi = E \Psi \quad (1)$$

Herhangi bir en küçük sistem için bile, Schrödinger eşitliğinin tam çözümü, matematiksel işlem olarak pratik değildir. Schrödinger eşitliğinin çözümü için, elektronik yapı yöntemleri, değişik yaklaşımlarla karakterize edilir. Elektronik yapı yöntemleri başlıca iki gruba ayrılır (Foresman ve Frisch, 1996).

1.3.1. Yarı-Deneysel Yöntemler (Semi-Empirical Methods)

MOPAC, AMPAC, HYPERCHEM ve GAUSSIAN gibi programlara uygulanmış AM1, MNDO, MNDOD, PM3, PM6, PM6-DH2, PM7 ve RM1 gibi yarı deneysel yöntemler hesaplamayı kolaylaştırmak için deneysel verilerden türetilmiş parametreleri kullanır. Yarı deneysel yöntemler araştırılmak istenen moleküler sistem için elde edilebilir Schrödinger denkleminin yaklaşım formunu çözer. Farklı yarı deneysel metotlar ayrı parametre setleri tarafından geniş olarak karakterize edilir (Foresman ve Frisch, 1996). Küçük bir molekül bile birçok elektron içerir ve buna bağlı olarak birçok etkileşim içerir. Yıllar önce bilgisayarların gücü daha yetersizdi ve ab initio hesaplamalar birkaç atom fazla içeren moleküller için imkansızdı. Günümüzde bilgisayarlar güçlüdür ve daha geniş kapsamlı ab initio metotlar pratik hale gelmiştir. Fakat büyük molekülleri çalışmak için yarı deneysel yöntemler önemini korumaktadır. Yarı deneysel hesaplamalar oluşum entalpisini direkt olarak birçok sıcaklık için verir. Oysaki ab initio sonuçlar kuantum ve termal düzeltmelere ihtiyaç duyar (Irikura ve Frurip, 1998). Yarı deneysel yöntemler yüksek seviyeli ab initio yöntemlerinden daha az hassas olsa da yarı deneysel yöntemlerle optimize edilmiş geometriler, daha yüksek seviyeli ab initio optimizasyonlar için iyi bir başlangıç tahmini olabilir (Cundari, 2001). Bazı yarı deneysel hesaplama yöntemleri Tablo 1’de verilmiştir (Yılmaz, 2011).

Tablo 1. Bazı yarı deneysel hesaplama yöntemleri

Kısaltma	Tanım
NDDO	Neglect of Diatomic Differential Overlap. Farklı atomlar üzerindeki orbitaller arasındaki örtüşmeyi ihmal eder.
AM1	Austin Model 1. Dewar ve arkadaşları (1985) tarafından moleküldeki büyük itmeleri ortadan kaldırmak için MNDO yönteminin çekirdek-çekirdek itme fonksiyonlarında küçük bir değişiklikle oluşturulmuştur (Çelik vd. 2003). Bu yöntemi geliştirmek için yaklaşık 200 bileşikten deneysel veri kullanılmıştır.
MNDO	Modified Neglect of Diatomic Differential Overlap. NDDO yaklaşımına benzer. Temel durum özellikleri üzerine odaklanmıştır; çoğunlukla oluşum ısısı ve geometriler ele alınmıştır. (Thiel, 1998)..
MNDOD	MNDOD parametreleri Na, Mg, Al, Si, P, S, Cl, Br, I, Zn, Cd, Hg olarak bildirilmiştir. 600'den fazla molekül kapsayan kapsamlı test hesaplamaları ve çeşitli özelliklerine göre, MNDOD, özellikle hipervalent bileşikler için kurulmuş yarı-deneysel yöntemler üzerinde önemli iyileştirmeler sağlamıştır.
PM3	MNDO-PM olarak adlandırılan ve MNDO'nun üçüncü parametrisasyonu olduğunu göstermek için PM3 şeklinde gösterilen yöntemdir. Çok sayıda element için parametreleri aynı anda optimize edebilen bir yaklaşımdır. (Öztürk Yıldırım ve Akkurt, 2008). Bu yöntemi geliştirmek için yaklaşık 500 bileşikten deneysel veri kullanılmıştır.
PM6	Bütün ana elementler ve geçişmetalleri için yeni ve daha hassas parametrisasyon. Bu yöntemi geliştirmek için 9000 bileşikten fazla deneysel ve ab initio veriler kullanılmıştır.
PM6-DH2	PM6-DH2, PM6' ya kıyasla çok gelişmiş etkileşim enerjileri veren yöntemdir. Dispersiyon etkileşimi ve hidrojen bağını kapsayan bir yarı-deneysel kuantum mekanik yöntemleri için kullanılmıştır.
PM7	Uygulanabilirlik oranını artırma girişiminde bulunmak için PM7 adlı yeni bir metod geliştirilmiştir. PM7 deneysel ve ab initio verileri ile parametrize edilip daha iyi tanımlamak için referans bilgisi sunulmuştur.
RM1	Yarı deneysel yöntemler için kullanılan en yeni metod RM1'dir. AM1'in daha geliştirilmiş halidir.

1.3.2. Ab İnitio Yöntemleri

Ab initio yöntemleri, moleküler mekanik ve yarı deneysel yöntemlerin aksine hesaplamalarında deneysel parametreleri kullanmaz. Ab initio yöntemlerinin hesaplamaları kuantum mekanik kanunlarına dayalıdır (Yılmaz, 2011):

- a) Işık hızı
- b) Elektronların ve çekirdeğin yükü ve kütlesi
- c) Planck sabit

Ab initio yöntemleri zor matematiksel hesaplamaların bir serisini kullanarak Schrödinger eşitliğinin çözümünü hesaplar. Yarı deneysel ve ab initio yöntemleri hesaplama fiyatı ve sonucun hassasiyeti açısından birbirinden ayrılır. Yarı deneysel hesaplamalar nispeten ucuz ve moleküler sistemlerin uygun kalitatif tanımlamalarını sağlar ve iyi parametre setleri olduğunda sistemler için yapı ve enerjilerin kantitatif tahmini oldukça hassas olur. Ab initio hesaplamaları sistemlerin geniş bir aralığı için yüksek kalitede hassasiyet sağlar. Herhangi bir sistem sınıfıyla sınırlandırılmamıştır (Yılmaz, 2011).

1.3.2.1. Hartree-Fock Öz Uyumlu Alan Teorisi (HF/SCF)

Hartree-Fock teorisi, ab initio yöntemlerinin ve yarı deneysel kuantum mekaniksel yöntemlerinin çoğunun başlangıç noktasıdır. Elektron-elektron itmesi özellikle hesaba katılmamıştır. Sadece onun ortalama etkisi hesaba katılır. Avantajı, çok elektronlu Schrödinger denklemini basit tek elektronlu denklemlere dönüştürmesidir (Yılmaz, 2011).

Hartree-Fock teorisinin en önemli problemi, moleküler bir sistem içindeki özellikle karşıt spinli elektronlar arasındaki korelasyonları tanımlamada yetersiz oluşudur (Arslan, 2005). Bu yöntemle ilgili elektron korelasyon eksikliği ve bunun geçiş metal sistemlerdeki önemi, sayısal sonuçların geçerliliğini sınırlar (Maseras ve Lledós, 2002).

1.3.2.2. Møller –Plesset Pertürbasyon Teorisi (MP)

Møller-Plesset Perturbasyon Teorisi elektron korelasyonu içerir. Schrodinger eşitliğinde ifade edilen Hamiltonian işlemcisi iki kısma ayrılır. MP teorisi kullanılarak yapılan ab initio hesaplamalarında daha güvenilir sonuçlar elde edilir (Yılmaz, 2011). MP hesaplamaları, oldukça uzun zaman aldığından genellikle bu tür hesaplamalar daha düşük teori kullanılarak elde edilen bir geometri ile daha çok single-point enerji hesaplamalarında kullanılır (Koyuncu, 2009). MP2 formalizmi metal-metal etkileşimlerini analiz etmek için daha iyi bir yöntem öne sürülmüştür. (Dennehy vd., 2008).

1.3.3. Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (DFT)

DFT (Density Functional Theory) yaklaşımı, elektron yoğunluk fonksiyonu ile elektron korelasyon modelinin ilkelerine dayanır. Temel hal enerjisinin elektron yoğunluğuyla belirtildiği bir fonksiyonunun var olduğunu açıklayan 1964’de yayınlanan Hohenberg-Kohn teoremi bu gibi metotların var oluş sebebidir. (Kohn and Sham, 1965) çalışmalarında elektronik enerjinin birkaç kısma ayrılabilceğini göstermişlerdir (Yılmaz, 2011).

DFT çok güvenilir bir metot olarak ortaya çıkmıştır (Xiaohong vd., 2010). İmidazol türevlerinin 1H-bağlı komplekslerinde deneysel matriksizolasyon FT-IR ve hesaplanmış DFT (B3LYP) verileri arasındaki korelasyonlar, H-bağı ile ilgili parametrelerde tahminler için DFT (B3LYP) yönteminin çok uygun olduğunu göstermiştir (Yılmaz, 2011). Deneysel ve hesaplanmış frekansların karşılaştırmasında DFT yöntemi, frekansları HF yönteminden daha iyi bir uyum içinde yorumlamıştır (Schone vd., 2003). DFT yöntemini çok sayıda ağır atomları içeren sistemler için kullanılması uygundur. DFT hesaplamalarının geçiş metali içeren sistemlerdeki sonuçları, HF hesaplamalarından elde edilen sonuçlardan birçok durumda deneysel verilerle daha uyumludur (Shoeib ve Sharp, 2009). Son yıllarda DFT ve MP2 yöntemleri moleküller arası yük transfer komplekslerinin bir kaçını çalışmak için uygulanmıştır (Wang vd., 2008). Büyük moleküllerin elektronik yapılarının hesabı için en çok kullanılan yöntem DFT’ dir (Tezcan ve Tokay, 2010).

1.3.4. B3LYP Karma Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi

HF teorisi, kinetik enerji için uygun bir ifade vermesine rağmen bu metotla korelasyon enerjilerinin hesaplanmamasından dolayı değiş tokuş enerjisi iyi sonuç vermez. DFT modelinde ise tam tersi kinetik enerji için uygun sonuçlar alınmaz fakat korelasyon enerji terimleri uyumlu bir biçimde hesaplanır ve değiş tokuş enerji terimi için iyi bir ifade bulunur. Tam enerji ifadesi için saf HF veya saf DFT modelleri yerine, bu modellerin her ikisinin enerji ifadelerinin, toplam elektronik enerji ifadesinde kullanılmaları sonucu, karma modeller üretilmiştir. Bu modeller toplam enerji, bağ uzunlukları, iyonizasyon enerjileri gibi birçok büyüklükleri saf modellerden daha iyi hesaplamaktadır (Yılmaz, 2011).

1.3.5. Hesaplamalarda Kullanılan Temel Setler

Temel set, bir sistem içinde (toplam elektronik dalga fonksiyonunu tahmin etmek için sırayla birleştiren) teorik hesaplamayı gerçekleştirmek için kullanılan orbitallerin matematiksel bir tanımıdır. Temel set, elektronlar tarafından işgal edilen uzayın bölgeleri üzerinde sınırlamalar koyar (Yılmaz, 2011). Büyük temel setler elektronlar üzerinde daha az sınırlamalar koyar ve orbitalleri daha hassas bir şekilde tahmin eder (Foresman ve Frisch, 1996; Fey, 1999). Elektronik yapı hesaplamaları için standart temel setler, 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. Böyle temel fonksiyonlar sıkıştırılmış fonksiyonlar olarak bilinir ve bileşen her bir Gaussian fonksiyonu ilkel fonksiyon olarak bilinir (Yılmaz, 2011).

1.4. Geometrik Optimizasyon

Geometri optimizasyonları genellikle potansiyel enerji yüzeyindeki minimumları araştırır, bunun neticesinde de moleküler sistemlerin denge yapılarını tahmin eder.

Optimizasyon aynı zamanda da geçiş yapılarını araştırır. Minimumlara yapılan optimizasyona ise minimizasyon denir (Ermeç, 2008).

1.4.1. Minimizasyon Yöntemleri

Moleküllerde minimum enerji durumunu ve molekülün geometrisini belirlemek için iyi bir başlangıç geometrisi elde edilmelidir. Başlangıç geometrisini doğru tahmin edebilmek için dört temel metot vardır (Yılmaz, 2011). Bunlar:

- a) X-ışınları veri tabanları kullanmak
- b) Literatürde bulunan standart geometriler kullanmak
- c) İskelet olarak adlandırılan iki boyutlu basit bir yapı çizmek
- d) Bu iki boyutlu yapıyı üç boyutlu yapıya dönüştürmek.

şeklinde sıralanabilir (Yılmaz, 2011).

Bir sistemin avantajlı bir araştırması, bilim ve algoritmalarda genel bir problemdir ve amaç fonksiyonlarını optimize etmek için birçok algoritma mevcuttur. İdeal olarak, minimizasyon işlemi, minimum uzaklığa ve yüzey şekline adapte olmalıdır. Çoğu program farklı optimizasyon seçimini sunar ve adım sayısı genellikle interaktif bir biçimde seçilebilir.

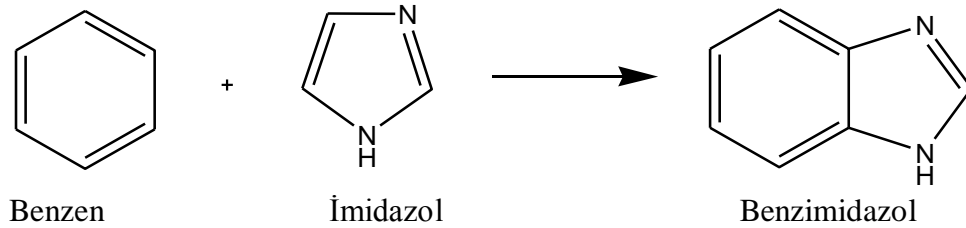
Genellikle, rutin minimize enerji, giriş koordinatları tarafından tanımlanan en yakın geometriye bağlı konformerin optimize edilmiş bir yapısını üretir. Yani en yakın enerji minimumuna düşer. Ancak bu garanti edilemez, ve eğer belirli bir konformasyon isteniyorsa kısıtlanmış optimizasyon gerekebilir. Sistemin küresel minimumunu bulmak için genel bir metot oluşturmak, moleküler mekaniklerde önemli bir problemdir (Yılmaz, 2011).

Bütün minimizasyon programlarında genel bir problem adım sayısını seçmektir. Minimumdan uzakta potansiyel enerji düzeyinin bir bölgesine hareketi ile ilgili olarak adım sayısı çok büyükse başlangıç yapısı tamamen bozulabilir. Genellikle programlar seçilecek başlangıç adım sayısına izin verir, ve son zamanlardaki algoritmalar,

optimizasyon işlemi boyunca adım sayısını değiştirmek için döngüler içerir. Yani adım sayısı önceki döngülere göre gerilme enerjisinde düşme olduğunda artar ya da enerji arttığında düşer (Yılmaz, 2011).

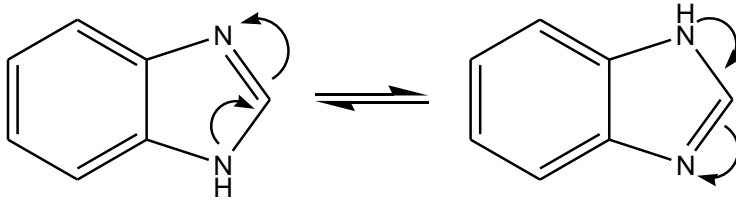
1.5. Benzimidazoller

Benzimidazol molekülü, imidazol halkasının 4. ve 5. konumlarına benzen molekülünün bağlanmasıyla meydana gelmiştir (Tarı, 2011). Yapısında iki farklı azot atomu bulunmaktadır. Üzerinde hidrojen atomu taşıyan azot atomuna “imino azotu” veya “pirol azotu”, tersiyer yapıdaki diğer azot atomuna ise “piridin azotu” veya “tersiyer azot” denmektedir. İmino azotunun taşıdığı hidrojen atomuna ise “imino hidrojeni” denir (Hofmann, 1953).



Şekil 1. Benzimidazol molekülünün yapısı.

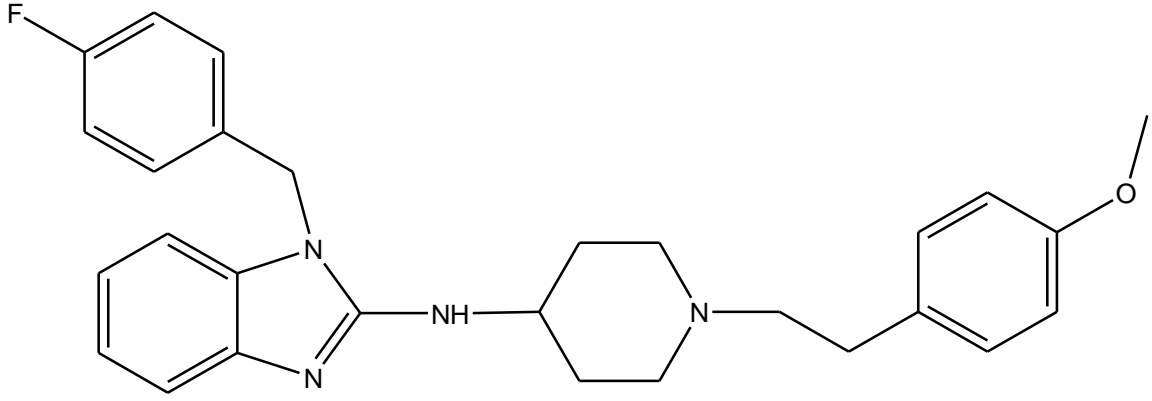
Benzimidazol türevi bileşiklerin çözünlük özelliklerine bakıldığında polar çözücülerde çok, polar olmayan çözücülerde ise az çözüldüğü bilinmektedir. (Hofmann, 1953). Molekülde bulunan tersiyer azottaki eşleşmemiş elektron çiftini reaksiyona girdiği gruba vermesinden dolayı bazik özellik gösterir. Diğer taraftan imino hidrojenin bulunması asidik özellikler göstermesine neden olmaktadır (Wright, 1951). Benzimidazol ile imidazol pKa değerleri karşılaştırıldığında benzimidazolün (pKa 5,5), imidazolden (pKa 7,0) daha zayıf bir baz olduğu görülür. Bunun sebebi imidazol ile benzen halkaları arasındaki konjugasyondur. Bu konjugasyondan dolayı oluşan rezonans halka dayanıklılığını artırır ve böylece piridin azotunun bazik karakteri azalmaktadır (Rogers ve Clayton, 1972). Benzimidazollerin bir diğer özelliği ise 1. pozisyondaki azot atomunun sahip olduğu hidrojenden dolayı kolaylıkla tautomerize olmasıdır (Özel, 2006).



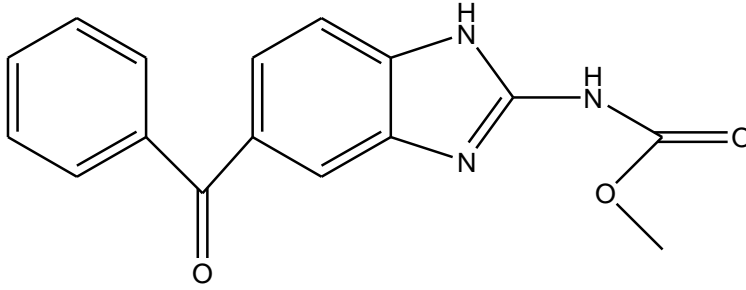
Şekil 2. Benzimidazol molekülünde tautomeri gösterimi.

Benzimidazol ve türevleri sanayide pek çok farklı alanda kullanıma sahiptir. Örneğin; tekstil endüstrisinde ıslatma, emülgatör, köpürtme, yumuşatma ve sülfür ve azo boyalarının hazırlanması amacıyla; boya endüstrisinde dispersant olarak (Özel, 2006); fotoğraf endüstrisinde fotoğraftaki bulanıklığın azaltılması ve hızın artırılmasında; ultraviole ışınları absorbe ederek deriyi koruduğu için güneş kremlerinde; yapısı bilinmeyen çeşitli maddelerin saptanmasında ayrıca olarak ve ayrıca optik kaydedici, lazer diskleri ve lazer boylarının hazırlanmasında da kullanılmaktadır (Wright, 1951).

Benzimidazol ve türevlerinin çeşitli ortamlardaki biyolojik aktiviteleri üzerine literatürde pek çok çalışma yapılmıştır (Demirmen, 2014). Özellikle 1, 2, 5 ve 6. konumlarına yapılan süstitüsyonların daha önemi olduğuna dikkat çekilmiştir (Benito vd., 2001). Ama diğer konumlarla da molekül antibakteriyel (Klimesova vd., 2002), antihistaminik, antifungal, antihelmintik, antialerjik gibi aktivitelere sahiptir. Bu özelliğinden dolayı da pek çok ilaçta etken madde olarak kullanılmaktadır. Örneğin benzimidazol karbamatlar bağırsak solucanlarına karşı kullanılmış ve gastrointerstinalen foksiyonların tedavisinde etkili olmuştur (Valdez, 2002). Bu moleküllere örnek olarak astemizol, mebendazol verilebilir (Güven, 2000).

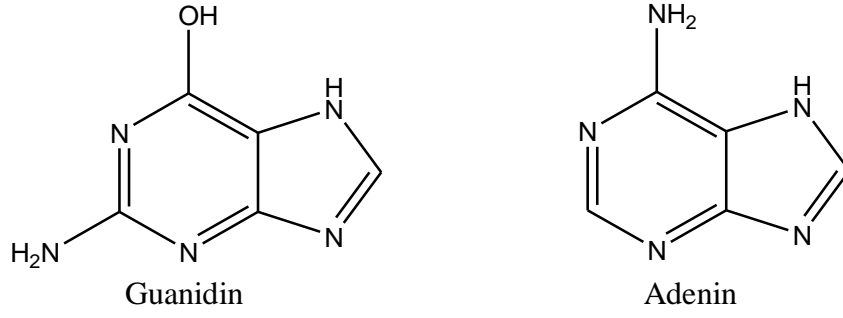


Şekil 3. Astemizol molekülünün yapısı.



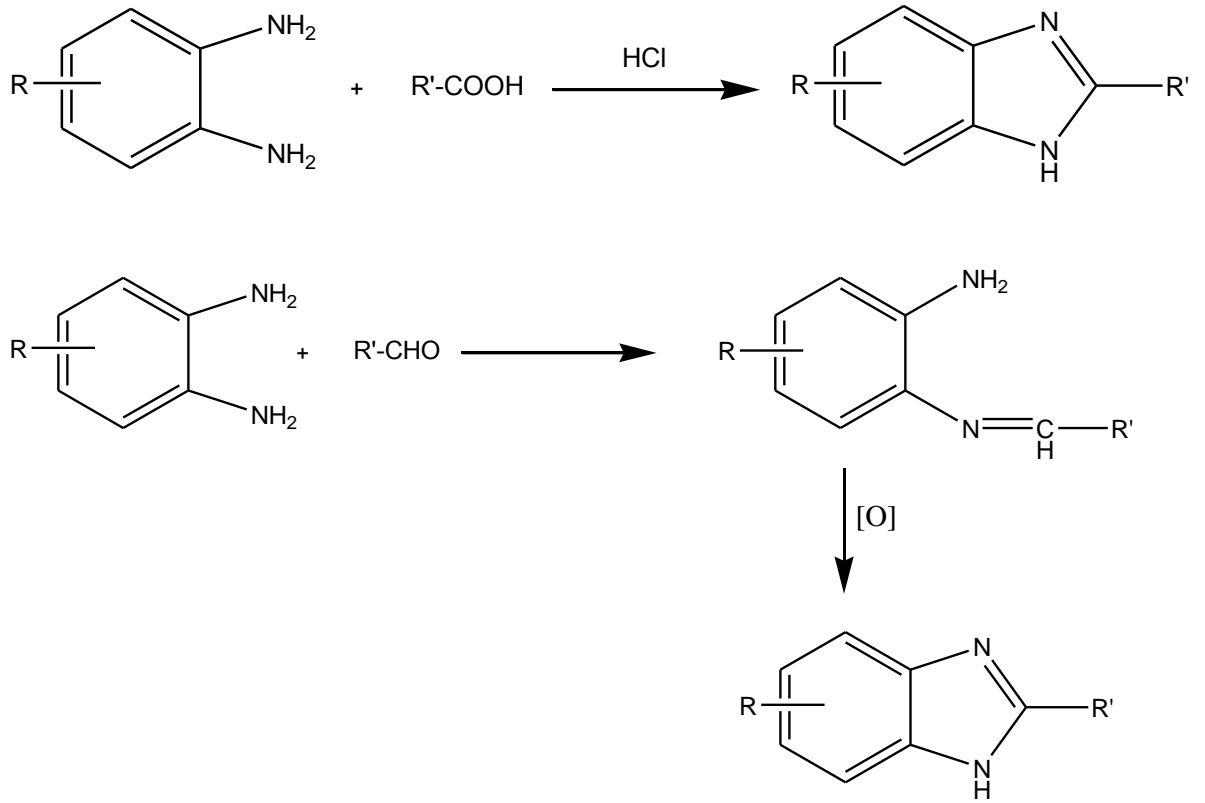
Şekil 4. Mebendazol molekülünün yapısı.

Benzimidazol ve türevlerinin enzim sistemlerine bağlanabilmesi için imidazol yapısındaki N-H grubu son derece önemlidir. Çünkü hidrojen yerine başka bir grup geçtiğinde etkinlik azalmakta hatta yok olabilmektedir (Güven, 2000). Canlı sistemlerde benzimidazol halkası B12 vitamini, triptofan ve serotonin gibi aminoasitlerin yapısında bulunmaktadır (Demirmen, 2014). Aynı zamanda DNA bazlarının temel yapılarının izosteri olduğundan pürin antimetaboliti olabilirler ve bu sayede canlı sistemlerdeki biyopolimerlerle daha kolay etkileşime girebileceği düşünülmektedir. Ayrıca vücutta oksijen azlığı meydana geldiğinde oksijen oranını yükselttiğini de belirtilmiştir (Güven, 2000).



Şekil 5. Bazı DNA bazları.

Benzimidazollerin oldukça anti-toksit olduğu ve kan basıncı üzerinde çok az da olsa etkisinin bulunduğu belirlenmiştir (Wright, 1951). Benzimidazol türevi bileşikler, genellikle o-fenilendiamin ya da türevlerinin uygun karboksilik asit veya aldehit türevleri ile reaksiyonu sonucu elde edilirler (Tarı, 2011). Benzimidazol yapısının sentezinde uygulanan en yaygın metod Phillips yöntemidir. Yönteme göre benzimidazol türevleri hidroklorik asit katalizörlüğünde 1,2- arildiamin türevinin karboksilik asit ile reaksiyonu sonucunda elde edilir (Wright, 1951). İkinci konumda heterosiklik grup taşıyan türevler elde etmek için yaygın olarak kullanılan bir diğer yöntem ise 1,2- arildiamin ile bir aldehitin Schiff bazı ara basamağından sonra bakır (II) asetat, kurşun (IV) asetat, sodyum bisülfid gibi oksitleyici madde etkisiyle kapatılmasıdır (Özel, 2006)



Şekil 6. Benzimidazolün sentez yöntemleri.

1.6. Asitlik ve Bazlık Sabitlerini Etkileyen Faktörler

Asit baz reaksiyonları tersinirdir ve denge konumunda kararlı denge ürünleri daha fazla bulunmaktadır. Kısaca ayrışmamış bir asidin ve eşlenik bazının göreceli kararlılığı asitlik kuvvetini etkiler (Yurtseven, 2006). Asitlik ve bazlığı etkileyen faktörleri aşağıdaki gibidir.

- Çözücü etkisi
- Elektronegatiflik
- Büyüklük
- Hibritleşme
- İndüktif etki
- Rezonans etki
- Sterik etkiler

1.6.1. Çözücü Etkisi

Çözücünün özellikleri, organik bileşiklerin asitlik ve bazlıklarını belirler. Bir çözücü de iyonlaşma şunlara bağlıdır (Yurtseven, 2006).

- Çözücünün dielektrik sabitine,
- Çözücünün, çözünenin iyonlarını sarma ve onları çözeltiliye çekme (solvasyon) özelliğine,
- Çözücünün asitliği veya bazlığına

Alkollerin dielektrik sabitleri suyunkinden çok küçüktür. Bu nedenle, asitlik sabitleri, alkoller içinde sudakilere göre 10000-100000 defa daha küçüktürler. Buna karşın, sıvı amonyağın çözdüğü asitler daha çok iyonlarına ayrışır, çünkü amonyak sudan daha bazik özelliğe sahiptir. Bunun yanında asetik asit sudan daha asidik olduğundan, içindeki asitlerden sadece birkaçı tamamen iyonlaşır (Gündüz, 1993).

1.6.2. Elektronegatiflik

Bir asitten protonun ayrılabilmesi ve bir baza aktarılabilmesi, o asidin kuvvetini belirler. Bu noktada protonun olduğu bağın kırılması ve konjuge bazın elektriksiz olarak daha negatif yapılması gerekir. Örneğin, H-X maddesindeki bağ ne kadar kuvvetli olursa hidrojenin kopması o kadar zorlaşacak ve ortamın asitliği de o kadar azalacaktır. Atomların bağ elektronlarını çekme gücü, elektronegatifliği yüksek olanlarda daha fazladır. Negatif yüklü atomun elektronegatifliği ne kadar fazla olursa, anyonu da o kadar kararlı yapar (Solomons, 2002).

1.6.3. Hibritleşme Etkisi

Organik bir asidin asitliği; sp^3 , sp^2 veya sp hibrit orbitaline sahip olmasına göre değişir. Karbon atomundaki hibritleşme incelenerek hibritleşmenin etkisi daha iyi anlaşılabilir. 2s orbitallerinin elektronları 2p orbitallerinin elektronlarından daha düşük enerjilidir. Çünkü 2p orbitallerindeki elektronlar çekirdeğe daha uzak kalmışlardır. Bundan dolayı melez orbitallerinin daha fazla s karakterine sahip olması, anyonun

elektronlarının daha düşük enerjili olacağını ve anyonun daha kararlı olacağını gösterir (Solomons, 2002).

1.6.4. İndüktif Etkiler

İndüktif etki elektron çekici veya elektron itici olabilir. Sübstitüentin uzaklığı da indüktif etkide belirleyici olabilir. Sübstitüentin uzaklığı arttıkça indüktif etki azalır (Yurtseven, 2006). Molekülde elektron çekici grupların komşu atomda oluşturduğu kısmi pozitif yük asidi kararsız yaparken, anyonun kararlılığını artırır. Yani elektron çeken gruplar asitliği arttırırken, bazlığı azaltırlar. Elektron iten gruplar ise bazlılığı artırıp, asitliği azaltırlar. Elektron veren (itici) gruplar, elektron çeken grupların aksine anyonun kararlılığını azaltırlar böylece elektron çeken grupların tam aksi bir etki yaparlar (Erdoğan, 2003).

1.6.5. Rezonans Etkiler

Rezonans teorisine göre; molekül ve iyonlar birden fazla eşdeğer rezonans yapıyla gösterilebiliyorsa rezonans kararlılığına sahiptirler (Solomons, 2002). Elektriksel yükleri ya da elektronları delokalize olmuş sistemler, lokalize sistemlere kıyasla daha kararlıdır, π elektronlarının delokalize olması yapıyı kararlı kılar. Anyonun kararlılığındaki ve dolayısıyla asidin asitlik gücündeki artış eşlenik bazdaki π elektronlarının delokalize olması sonucu gerçekleşir (Yurtseven, 2006).

1.6.6. Sterik Etkiler

Proton küçük bir iyondur ve bir molekülden diğer bir moleküle bağlanması her iki molekül için de önemli bir hacim değişikliği yaratmaz. Bu sayede de bir bileşiğin birincil, ikincil veya üçüncül olması durumundaki asitlik ve bazlıkları birbirine yakınlık gösterir (Yurtseven, 2006). Bu nedenle asit-baz reaksiyonları sterik etkilere çok duyarlı değildir. Ancak protonun ayrılması sonunda oluşan anyonun çözücü tarafından iyi solvatize edilmemesi, sterik olarak çok engelli bir bileşikte dolaylı bir sterik engel oluşturarak asitlikte azalmaya neden olur (Solomons, 1996).

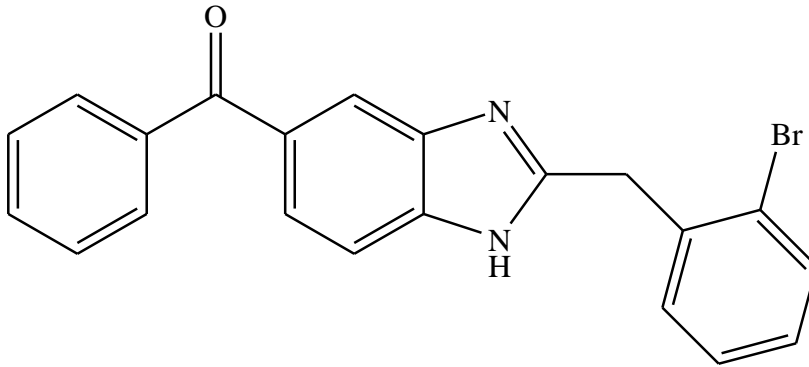
1.6.7. Büyüklük

Negatif yük, hacmi büyük olan atomlar tarafından, küçük atomlara göre daha iyi dağıtılırlar. Anyonun kararlılığı, yük dağılımının fazla olmasıyla artar. Büyüklüğün etkisi elektronegatiflikten daha önemlidir (Yurtseven, 2006). Kükürt atomunun elektronegativitesi 2,5 oksijen atomunun elektronegativitesi 3,5 olmasına rağmen, H₂S sudan daha asidiktir (Badger, 1961). HF asidi de bu duruma örnek olarak verilebilir. F atomu en elektronegatif halojen olmasına rağmen diğer halojenli asitler içinde asitlik kuvveti en az olan HF asididir (Yurtseven, 2006).

2. YAPILAN ÇALIŞMALAR

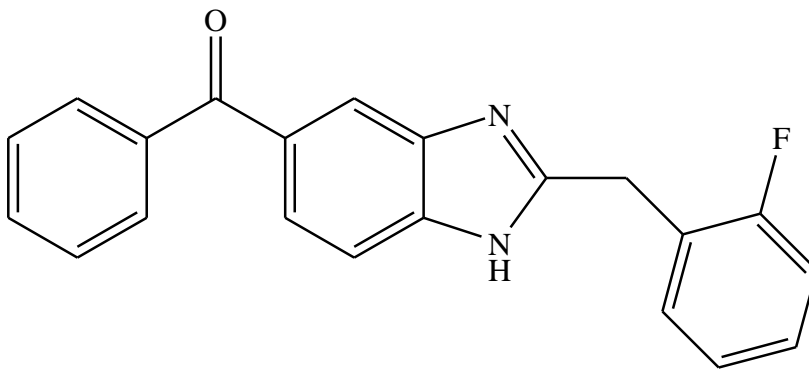
2.1. Çalışılan Moleküller

Yüksek lisans çalışmamızda dört adet (Fenil[2-(2-bromobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (1), Fenil[2-(2-florobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (2), Fenil[2-(2-klorobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (3) ve Fenil[2-(2-metilbenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (4)] benzimidazol türevi bileşik kullanılmıştır. Bu bileşiklerin molekül formülleri aşağıda Şekil 7-10'da verilmiştir.



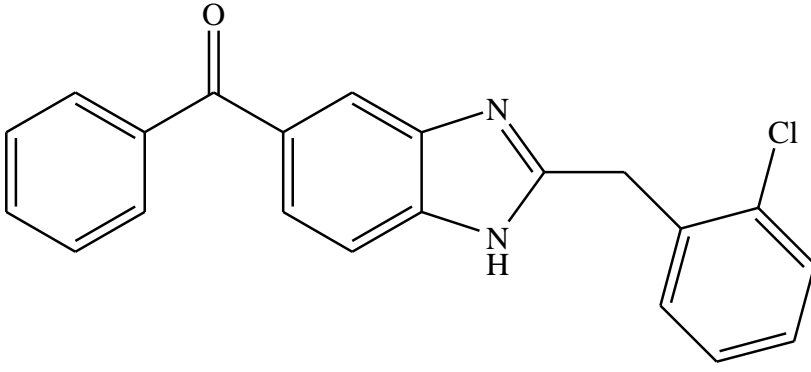
Fenil[2-(2-bromobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon

Şekil 7. Çalışılan 1. Molekül



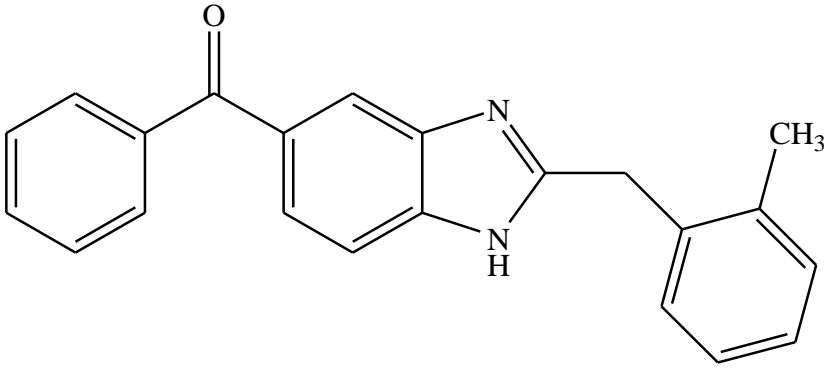
Fenil[2-(2-florobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon

Şekil 8. Çalışılan 2. Molekül



Fenil[2-(2-klorobenzil)-1H-1,3-benzimidazol-5-il]metanon

Şekil 9. Çalışılan 3. Molekül



Fenil[2-(2-metilbenzil)-1H-1,3-benzimidazol-5-il]metanon

Şekil 10. Çalışılan 4. Molekül

Bu dört farklı benzimidazol türevi bileşiğin pKa değerleri teorik olarak MOPAC 2012 bilgisayar programı ile tayin edildi. pKa değerleri hesaplanan moleküller, yukarıda açık yapıları ile birlikte verilmiştir. Bu moleküller Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi Fen – Edebiyat Fakültesi Organik Kimya Araştırma Laboratuvarı'nda sentezlenmiş ve bu sentez kısmı yayınlamıştır (Menteşe, 2013).

2.2. Materyal ve Metot

2.2.1. Hesaplama Metodu

Bilgisayar ile kimyasal hesaplamalarında kullanılan iki yöntem vardır. Bunlar moleküler mekanik ve elektronik yapı kuramıdır. Elektronik yapı kuramında yarı deneysel (semi-ampirik) ve ab-initio yöntemleri yer almaktadır. Yapılan temel hesaplamalar her iki yöntemde de aynıdır. Molekülün enerjisi hesaplanıp optimize edildikten, sonra atomların titreşim frekansları hesaplanır (Açıkkalp vd., 2011; Özöğüt ve Kalafatçıoğlu, 2011). Yarı-deneysel yöntem hesaplamalarında MOPAC 2012 programı kullanılmıştır. Hesaplamalar oda sıcaklığında ($T = 298^{\circ}\text{K}$) ve su, etanol, metanol, *n*-propanol, *izo*-propanol, *n*-butanol, *tert*-butanol, etilen glikol, *N,N*-dimetilformamit (DMF), dimetilsülfoksit (DMSO) ve asetonitril fazında yapılmıştır.

2.2.2. Geometri Optimizasyon

Molekülde hesaplamalar; molekülü tanımlayan bağ uzunlukları, bağ açıları gibi koordinatlarla tanımlanır ve enerjisi minimuma indirilir. Enerji değeri sabit olana kadar geometrisi değiştirilir. Gradient norm değeri 0 olduğunda uygun kabul edilir. Gradient norm değeri atomların konumlarının bir fonksiyonu olduğu molekülün enerjisindeki değişimin hızıdır. Gradient normun beklenen değeri 0,4'dür. Bu civardaki değerlerde molekülün enerjisinin minimum olduğu söylenebilir (Açıkkalp vd., 2011; Özöğüt ve Kalafatçıoğlu, 2011).

2.3. Denge Sabiti (K) ve Standart Serbest Enerji Değişimi ΔG° Arasındaki İlişki

Genel olarak $\Delta G^{\circ} = -2,303 R T / \log K$ olarak ifade edilir (R: gaz sabiti (1,987 kal/K.mol) T: sıcaklık birimi ($^{\circ}\text{K}$)). Bu denklemde $K > 1$ iken, ΔG° 'nin negatif değer alması reaksiyon dengeye ulaşırken ürün oluşumunun daha baskın olduğunu ifade eder. Örneğin $\Delta G^{\circ} \leq -3$ kkal/mol ise denge durumuna ulaşıldığında girenlerin neredeyse tamamının ürünlere dönüştüğü anlaşılır. $K < 0$ olur ve sistem ekzotermik olarak ifade edilir. Ters durumda ise ($\Delta H^{\circ} > 0$) sistem endotermik olarak ifade edilir. ΔH° değerinin negatif değer alması, ΔG° 'nin de negatif olmasına neden olur. Böylece, reaksiyon

ürünler lehine baskın hale gelir. İki farklı asidin iyonlaşması düşünüldüğünde, ΔH° değeri daha negatif olanın, daha iyi iyonlaşmış olduğu ve daha kuvvetli asit olduğu anlaşılır. ΔS° değeri ise sistemdeki düzensizlik değişimini ifade eder. Sistem düzenli bir yapıdan daha düzensiz bir yapıya geçmiş ise ΔS° 'in değeri sıfırdan büyüktür. ΔS° 'in (+) işaretli olması ΔG° üzerinde daha da azaltıcı bir etki yapar. Reaksiyon enerji yönünden incelendiğinde ürünler lehine ilerlemektedir. Sistemdeki entropi değişiminin (ΔS°) sıfıra yakın olması reaktif ve ürünlerin molekül sayılarının eşit olması anlamına gelir. Bu durumda entalpi değişiminin (ΔH°) büyüklüğü ve işareti, reaksiyonun hangi taraf lehine baskın olduğunu belirlemede önemli rol oynar. ΔH° eksi işaretli olursa ΔG° değeri de eksi değer alacağından reaksiyon ürünler lehine baskın, ΔH° değeri pozitif ve büyükse, standart serbest enerji (ΔG°) değeri de pozitif olacağından sistem girenler lehine baskın hale gelir (Demirtaş, 2003).

2.4. Yarı Deneysel Yöntemlerle Asitlik Sabitlerinin Bulunması

Zayıf bir asidin (HA) herhangi bir çözücü (S) ortamında iyonlaşması



reaksiyon denklemi ile ifade edilebilir. Bu çalışmamızda kullandığımız MOPAC 2012 bilgisayar programı ile yukarıdaki reaksiyonda yer alan tüm türlerin (HA, S, SH^+ ve A^-) entalpi değişimleri (ΔH°) ve entropi değişimleri (ΔS°) 298°K'de birincil işlem olarak hesaplandı. Hesaplanan bu değerler kullanılarak

$$\Delta G^\circ = \Delta H^\circ - T \Delta S^\circ \quad (3)$$

formülü yardımıyla her bir türün serbest enerji değişimi (ΔG°) hesaplandı. Hesaplanan bu serbest enerji değişimleri kullanılarak;

$$\Delta G^\circ = [\Delta G^\circ_{(\text{SH}^+)} + \Delta G^\circ_{(\text{A}^-)}] - [\Delta G^\circ_{(\text{HA})} + \Delta G^\circ_{(\text{S})}] \quad (4)$$

reaksiyonun toplam serbest enerji deęiřimi hesaplanmıřtır. Hesaplanan bu son toplam serbest enerji deęiřimi kullanılarak ařaęıda verilen;

$$pK_a = \Delta G^\circ / 2,303 R T \quad (5)$$

formül yardımıyla her bir molekül sekiz farklı yarı deneysel kuantum kimyasal metotla (AM1, MNDO, MNDOD, PM3, PM6, PM6-DH2, PM7 ve RM1) ve onbir farklı çözücü (su, etanol, metanol, *n*-propanol, *izo*-propanol, *n*-butanol, *tert*-butanol, etilen glikol, *N,N*-dimetilformamit (DMF), dimetilsülfoksit (DMSO) ve asetonitril) fazında pK_a deęerleri bu yöntem üzerinden hesaplanmıřtır.

3. BULGULAR

Çalışılan on bir farklı çözücünün (su, etanol, metanol, *n*-propanol, *izo*-propanol, *n*-butanol, *tert*-butanol, etilen glikol, *N,N*-dimetilformamit (DMF), dimetilsülfoksit (DMSO) ve asetonitril) sekiz farklı yarı deneysel kuantum kimyasal metotla (AM1, MNDO, MNDOD, PM3, PM6, PM6-DH2, PM7 ve RM1) hesaplanan $\Delta H_{(S)}$ (kcal/mol), $\Delta H_{(SH^+)}$ (kcal/mol), $\Delta S_{(S)}$ (cal/K.mol), $\Delta S_{(SH^+)}$ (cal/K.mol), $\Delta G_{(S)}$ (kcal/K.mol), $\Delta G_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol) ve ΔG (kcal/K.mol) değerleri Tablo 1’de verilmiştir. Aynı türden hesaplamalar çalışılan her bir benzimidazol türevi bileşik içinde yapılmıştır. Fenil[2-(2-bromobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (1. Molekül) için hesaplanan değerler Tablo 2-9’da, fenil[2-(2-florobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (2. Molekül) için Tablo 10-17’de, fenil[2-(2-klorobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (3. Molekül) için Tablo 18-25’de ve fenil[2-(2-metilbenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (4. Molekül) için ise Tablo 26-33 arasında verilmiştir.

Tablo 2. Çalışılan çözücülerin yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	MODEL	$\Delta H^{\circ}_{(S)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(S)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(SH^+)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)
Su	AM1	-5,9250	14,3462	4,5086	4,6194	-7,2686	12,9696
	MNDO	-6,0947	13,4150	4,4945	4,6108	-7,4341	12,0410
	MNDOD	-6,0938	13,4164	4,4946	4,8289	-7,4332	11,9774
	PM3	-5,3433	15,9066	4,4989	4,6035	-6,6840	14,5348
	PM6	-5,4306	14,1083	4,4997	4,6438	-6,7715	12,7244
	PM6- DH2	-5,4306	14,1082	4,4997	4,6438	-6,7715	12,7243
	PM7	-5,7800	14,6047	4,5051	4,8655	-7,1225	13,1548
	RM1	-5,7855	14,0431	4,5057	4,6148	-7,1282	12,6679
	Etanol	AM1	-6,2701	12,5739	6,4698	6,8374	-8,1981
MNDO		-6,3032	12,6761	6,4087	6,4821	-8,2130	10,7444
MNDOD		-6,2993	12,6759	6,5177	6,6553	-8,2416	10,6926
PM3		-5,6889	14,3903	6,4928	6,5753	-7,6238	12,4309
PM6		-5,4890	12,3120	6,7488	7,1322	-7,5001	10,1866
PM6- DH2		-5,5030	12,2914	7,0238	6,9442	-7,5961	10,2220
PM7		-5,5870	12,7708	6,7318	7,0602	-7,5931	10,6669
RM1		-5,5806	13,1119	6,5606	6,6802	-7,5357	11,1212
Metanol		AM1	-5,7053	13,8259	5,6929	5,7958	-7,4018
	MNDO	-5,7379	13,5332	5,7225	5,9576	-7,4432	11,7578
	MNDOD	-5,7354	13,4874	5,7083	5,8420	-7,4365	11,7465
	PM3	-5,1898	21,9471	5,7122	5,8687	-6,8920	20,1982
	PM6	-4,8346	13,7694	5,7450	5,8077	-6,5466	12,0387
	PM6- DH2	-4,8356	13,7665	5,7449	5,8033	-6,5476	12,0371
	PM7	-4,8938	14,4233	5,7402	5,9224	-6,6044	12,6584
	RM1	-5,0127	14,4897	5,6924	5,8744	-6,7090	12,7391

Tablo 2 (devam).

Propanol	AM1	-6,9583	11,8614	7,3775	7,4872	-9,1568	9,6302
	MNDO	-6,7777	12,1148	7,3199	7,4174	-8,9590	9,9044
	MNDOD	-6,7723	12,1206	7,3199	7,4174	-8,9536	9,9102
	PM3	-6,2245	13,8779	7,3929	7,4909	-8,4276	11,6456
	PM6	-6,0118	11,7414	7,6174	7,7469	-8,2818	9,4328
	PM6-DH2	-6,0462	11,7025	7,6184	7,7511	-8,3165	9,3927
	PM7	-6,1106	12,2868	7,5354	7,7230	-8,3561	9,9853
	RM1	-6,0950	12,5920	7,2971	7,3907	-8,2695	10,3896
İzo-Propanol	AM1	-6,8090	11,4922	7,3011	7,4385	-8,9847	9,2755
	MNDO	-6,5468	12,1655	7,2165	7,2800	-8,6973	9,9961
	MNDOD	-6,5414	12,1713	7,2166	7,2802	-8,6919	10,0018
	PM3	-6,3995	13,0915	7,2598	7,4275	-8,5629	10,8781
	PM6	-6,4947	10,4789	7,5649	7,5639	-8,7490	8,2249
	PM6-DH2	-6,5325	10,4326	7,5679	7,5707	-8,7877	8,1765
	PM7	-6,5352	11,0618	7,4667	7,6588	-8,7603	8,7795
	RM1	-6,4802	11,6790	7,1892	7,2907	-8,6226	9,5064
N-Butanol	AM1	-7,6385	11,1359	8,1930	8,2598	-10,0800	8,6745
	MNDO	-7,2508	11,6106	8,1165	8,1801	-9,6695	9,1729
	MNDOD	-7,2440	11,6178	8,1162	8,1806	-9,6626	9,1800
	PM3	-6,7634	13,3035	8,1549	8,2585	-9,1936	10,8425
	PM6	-6,4946	11,1843	8,4648	8,6035	-9,0171	8,6205
	PM6-DH2	-6,5519	11,1216	8,4690	8,6106	-9,0757	8,5556
	PM7	-6,5987	11,7193	8,3456	8,6501	-9,0857	9,1416
	RM1	-6,5895	12,0547	8,0511	8,1460	-8,9887	9,6272

Tablo 2 (devam).

T-Butanol	AM1	-7,1665	10,7734	7,9100	8,1991	-9,5237	8,3301
	MNDO	-6,4343	12,0532	7,7700	7,8168	-8,7498	9,7238
	MNDOD	-6,4274	12,0604	7,7703	7,8172	-8,7429	9,7309
	PM3	-7,1336	11,9949	7,8438	8,2178	-9,4711	9,5460
	PM6	-7,5134	8,9372	8,0700	8,4356	-9,9183	6,4234
	PM6-DH2	-7,5877	8,8487	8,0681	8,4439	-9,9920	6,3324
	PM7	-7,4751	9,1700	8,0002	9,5056	-9,8592	6,3373
	RM1	-7,5350	10,3549	7,7351	7,9076	-9,8401	7,9984
Etilen Glikol	AM1	-10,7547	8,5417	7,2972	7,4461	-12,9293	6,3228
	MNDO	-10,6155	8,5764	7,0821	7,4317	-12,7260	6,3618
	MNDOD	-10,6104	8,5820	7,0822	7,4319	-12,7209	6,3673
	PM3	-9,5260	10,8805	7,3129	7,5742	-11,7052	8,6234
	PM6	-9,2558	9,2557	7,7522	7,5307	-11,5660	7,0116
	PM6-DH2	-9,2810	9,2266	7,7525	7,5249	-11,5912	6,9842
	PM7	-9,2962	9,8639	7,6663	7,8204	-11,5808	7,5334
	RM1	-9,4013	9,6881	7,1471	7,5752	-11,5311	7,4307
DMF	AM1	-3,6953	14,0870	8,0465	7,8350	-6,0932	11,7522
	MNDO	-3,7465	14,9751	8,1955	7,5550	-6,1888	12,7237
	MNDOD	-3,7396	14,6150	8,3620	7,6842	-6,2315	12,3251
	PM3	-4,4671	14,2023	7,8324	7,8089	-6,8012	11,8752
	PM6	-4,0904	14,2316	8,0806	8,6494	-6,4984	11,6541
	PM6-DH2	-4,1489	14,2401	8,1321	8,5270	-6,5723	11,6991
	PM7	-4,3872	12,9895	7,9938	8,3784	-6,7694	10,4927
	RM1	-4,1518	11,0754	7,9793	8,1723	-6,5296	8,6401

Tablo 2 (devam).

DMSO	AM1	-3,9409	10,8666	7,7141	7,9301	-6,2397	8,5034
	MNDO	0,3907	14,3259	7,4554	7,6113	-1,8310	12,0577
	MNDOD	-3,3573	12,5451	7,3530	7,5695	-5,5485	10,2894
	PM3	-3,8843	11,2963	7,6986	7,9933	-6,1785	8,9143
	PM6	-3,2767	11,4005	7,7893	8,3376	-5,5979	8,9159
	PM6-DH2	-3,3087	11,3563	7,7917	8,1701	-5,6306	8,9216
	PM7	-3,7593	11,1304	7,7929	8,1678	-6,0816	8,6964
	RM1	-4,1328	11,0247	7,6323	7,8169	-6,4072	8,6953
Asetonitril	AM1	1,9248	19,6081	5,9667	5,8708	0,1467	17,8586
	MNDO	1,9200	20,7730	5,9595	5,8685	0,1441	19,0242
	MNDOD	1,9233	20,7769	5,9596	5,8686	0,1473	19,0281
	PM3	2,3256	19,7823	5,9857	5,8619	0,5419	18,0355
	PM6	2,0511	19,0889	5,9774	5,8824	0,2698	17,3359
	PM6-DH2	2,0395	19,0721	5,9771	5,8824	0,2583	17,3191
	PM7	1,8209	18,9652	5,9710	5,8680	0,0415	17,2165
	RM1	2,1761	18,9450	5,9671	5,8522	0,3979	17,2010

Tablo 3. 1. Molekülün AM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	9,0000	5,9706	15,1621	15,1953	4,4817	1,4424	-7,2686	12,9696	17,1989
Etanol	10,1509	4,8505	17,1010	12,3445	5,0548	3,3441	-8,1981	10,5364	17,0238
Metanol	9,1649	5,5697	15,4400	14,1751	4,5638	4,2097	-7,4018	12,0988	19,1465
N-Propanol	11,3380	4,4333	19,1008	11,2828	5,6459	2,7508	-9,1568	9,6302	15,8919
2-Propanol	11,1249	4,2700	18,7418	10,8673	5,5398	2,6191	-8,9847	9,2755	15,3395
N-Butanol	12,4811	3,9933	21,0266	10,1631	6,2152	2,1412	-10,0800	8,6745	14,6806
Tert-Butanol	11,7923	3,8348	19,8662	9,7596	5,8722	2,0849	-9,5237	8,3301	14,0665
Etilen Glikol	16,0091	2,9107	26,9702	7,4078	7,9720	0,5351	-12,9293	6,3228	11,8152
DMF	7,5446	5,4102	12,7102	13,7690	3,7570	4,2906	-6,0932	11,7522	18,3790
DMSO	7,7260	3,9146	13,0158	9,9627	3,8473	2,7681	-6,2397	8,5034	13,6639
Asetonitril	-0,1816	8,2213	-0,3060	20,9233	-0,0905	8,2482	0,1467	17,8586	26,0506

Tablo 4. 1. Molekülün MNDO yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	6,3517	1,9946	15,819	16,4300	1,6375	-2,9015	-7,4341	12,041	14,9361
Etanol	7,0172	1,7798	17,4768	14,6608	1,8091	1,2407	-8,2130	10,7444	18,3890
Metanol	6,3595	1,9477	15,8387	16,0436	1,6396	1,4591	-7,4432	11,7578	19,0205
N-Propanol	7,6546	1,6407	19,0642	13,5146	1,9734	1,0526	-8,9590	9,9044	17,9425
2-Propanol	7,4310	1,6559	18,5073	13,6397	1,9158	1,0850	-8,6973	9,9961	17,8626
N-Butanol	8,2616	1,5195	20,5761	12,5165	2,1300	0,8848	-9,6695	9,1729	17,5972
Tert-Butanol	7,4758	1,6108	18,6190	13,2682	1,9274	1,0364	-8,7498	9,7238	17,5826
Etilen Glikol	10,8731	1,0538	27,0801	8,6807	2,8032	0,2185	-12,726	6,3618	16,5031
DMF	5,2877	2,1077	13,1694	17,3615	1,3632	1,7014	-6,1888	12,7237	19,2507
DMSO	1,5644	1,9974	3,8963	16,4528	0,4033	1,8772	-1,831	12,0577	15,3626
Asetonitril	-0,1231	3,1514	-0,3066	25,9586	-0,0317	3,1608	0,1441	19,0242	22,0727

Tablo 5. 1. Molekölün MNDOD yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerler

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	6,3853	3,647	15,516	15,583	1,7614	-0,9968	-7,4332	11,9774	16,6524
Etanol	7,0797	3,2558	17,2039	13,9116	1,9530	2,6738	-8,2416	10,6926	19,6550
Metanol	6,3881	3,5767	15,5233	15,2828	1,7622	3,0516	-7,4365	11,7465	20,4724
N-Propanol	7,6914	3,0176	18,6902	12,8937	2,1217	2,3853	-8,9536	9,9102	19,1274
2-Propanol	7,4666	3,0454	18,1439	13,0128	2,0597	2,4317	-8,6919	10,0018	19,0657
N-Butanol	8,3004	2,7952	20,1702	11,9436	2,2897	2,1129	-9,6626	9,1800	18,6658
Tert-Butanol	7,5104	2,9630	18,2503	12,6604	2,0718	2,3456	-8,7429	9,7309	18,7476
Etilen Glikol	10,9276	1,9388	26,5542	8,2842	3,0144	1,0405	-12,7209	6,3673	17,1143
DMF	5,3530	3,7529	13,0079	16,0356	1,4767	3,3128	-6,2315	12,3251	20,3928
DMSO	4,7663	3,1330	11,5822	13,3870	1,3148	2,7412	-5,5485	10,2894	17,2643
Asetonitril	-0,1265	5,7939	-0,3075	24,7565	-0,0349	5,8043	0,1473	19,0281	24,7200

Tablo 6. 1. Molekülün PM3 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	6,7093	3,6861	15,663	15,039	2,0418	-0,7954	-6,6840	14,5348	18,3816
Etanol	7,6527	3,1525	17,8649	12,8617	2,3289	2,4585	-7,6238	12,4309	20,1843
Metanol	6,9181	5,1224	16,1501	20,8982	2,1054	4,4950	-6,892	20,1982	29,4798
N-Propanol	8,4595	2,9534	19,7485	12,0492	2,5744	2,1862	-8,4276	11,6456	19,6850
2-Propanol	8,5953	2,7587	20,0655	11,2551	2,6158	1,9792	-8,5629	10,8781	18,8045
N-Butanol	9,2284	2,7497	21,5435	11,2182	2,8084	1,9128	-9,1936	10,8425	19,1405
Tert-Butanol	9,5069	2,4209	22,1937	9,8768	2,8932	1,5587	-9,4711	9,546	17,6826
Etilen Glikol	11,7495	2,1869	27,4289	8,9222	3,5757	1,1214	-11,7052	8,6234	17,8743
DMF	6,8269	3,0116	15,9373	12,2867	2,0776	2,3925	-6,8012	11,8752	18,9913
DMSO	6,2019	2,2607	14,4782	9,2232	1,8874	1,6983	-6,1785	8,9143	14,9037
Asetonitril	-0,5440	4,5739	-1,2698	18,6605	-0,1655	4,6232	0,5419	18,0355	22,2824

Tablo 7. 1. Molekölün PM6 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deęerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	5,9849	1,3985	15,457	15,145	1,3787	-3,1148	-6,7715	12,7244	15,0024
Etanol	6,7382	1,3662	17,4027	14,7959	1,5522	0,9037	-7,6238	12,4309	19,4062
Metanol	6,0914	2,2199	15,7323	24,0409	1,4032	1,8018	-6,892	20,1982	27,4888
N-Propanol	7,4486	1,2799	19,2376	13,8612	1,7158	0,7686	-8,4276	11,6456	19,1260
2-Propanol	7,5682	1,1956	19,5464	12,9476	1,7434	0,6761	-8,5629	10,8781	18,3737
N-Butanol	8,1256	1,1917	20,9861	12,9053	1,8718	0,6339	-9,1936	10,8425	18,7982
Tert-Butanol	8,3709	1,0492	21,6195	11,3621	1,9283	0,4745	-9,4711	9,546	17,5634
Etilen Glikol	10,3455	0,9478	26,7193	10,2640	2,3831	0,2376	-11,7052	8,6234	18,1831
DMF	6,0111	1,3052	15,5250	14,1344	1,3847	0,8925	-6,8012	11,8752	18,1842
DMSO	5,4608	0,9797	14,1036	10,6102	1,2579	0,6049	-6,1785	8,9143	14,4398
Asetonitril	-0,4790	1,9822	-1,2370	21,4667	-0,1103	2,0151	0,5419	18,0355	19,6190

Tablo 8. 1. Molekölün PM6-DH2 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deęerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^{\cdot})}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^{\cdot})}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^{\cdot})}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	5,1378	0,5839	15,661	16,268	0,4708	-4,2639	-6,7715	12,7243	14,7611
Etanol	5,7635	0,4691	17,5681	13,0686	0,5282	0,3117	-7,5961	10,222	17,6016
Metanol	4,9679	0,5524	15,1432	15,3891	0,4553	0,4167	-6,5476	12,0371	18,5461
N-Propanol	6,3101	0,4310	19,2342	12,0083	0,5782	0,2587	-8,3165	9,3927	17,3897
2-Propanol	6,6676	0,3752	20,3240	10,4535	0,6110	0,1931	-8,7877	8,1765	16,5463
N-Butanol	6,8861	0,3926	20,9901	10,9381	0,6310	0,2046	-9,0757	8,5556	17,2048
Tert-Butanol	7,5813	0,2906	23,1093	8,0958	0,6947	0,0836	-9,992	6,3324	15,7132
Etilen Glikol	8,7947	0,3205	26,8079	8,9291	0,8059	0,0803	-11,5912	6,9842	17,8498
DMF	4,9867	0,5369	15,2003	14,9570	0,4570	0,4007	-6,5723	11,6991	18,2151
DMSO	4,2722	0,4094	13,0223	11,4060	0,3915	0,2927	-5,6306	8,9216	14,4534
Asetonitril	-0,1960	0,7947	-0,5974	22,1420	-0,0180	0,8001	0,2583	17,3191	17,8789

Tablo 9. 1. Molekülün PM7 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	6,3838	2,9755	16,009	16,314	1,6131	-1,8862	-7,1225	13,1548	16,7780
Etanol	6,8056	2,4128	17,0670	13,2289	1,7196	1,9003	-7,5931	10,6669	18,4407
Metanol	5,9194	2,8632	14,8447	15,6988	1,4957	2,4175	-6,6044	12,6584	20,1846
N-Propanol	7,4895	2,2586	18,7820	12,3836	1,8924	1,6946	-8,3561	9,9853	18,1436
2-Propanol	7,8517	1,9858	19,6905	10,8882	1,9840	1,3946	-8,7603	8,7795	16,9504
N-Butanol	8,1434	2,0677	20,4219	11,3373	2,0577	1,4546	-9,0857	9,1416	17,6242
Tert-Butanol	8,8367	1,4334	22,1605	7,8594	2,2328	0,7681	-9,8592	6,3373	14,7317
Etilen Glikol	10,3797	1,7040	26,0301	9,3428	2,6227	0,9224	-11,5808	7,5334	17,4139
DMF	6,0673	2,3734	15,2155	13,0129	1,5331	1,9165	-6,7694	10,4927	17,6455
DMSO	5,4509	1,9670	13,6696	10,7852	1,3773	1,5566	-6,0816	8,6964	14,9573
Asetonitril	-0,0372	3,8942	-0,0933	21,3517	-0,0094	3,8970	0,0415	17,2165	21,0814

Tablo 10. 1. Molekülün RM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	5,4454	1,4048	15,439	14,645	0,8445	-2,9594	-7,1282	12,6679	15,9922
Etanol	5,7567	1,2333	16,3217	12,8568	0,8928	0,9672	-7,5357	11,1212	18,7313
Metanol	5,1252	1,4127	14,5311	14,7272	0,7949	1,1758	-6,7090	12,7391	19,8290
N-Propanol	6,3173	1,1521	17,9111	12,0110	0,9798	0,8602	-8,2695	10,3896	18,5395
2-Propanol	6,5870	1,0542	18,6758	10,9900	1,0216	0,7498	-8,6226	9,5064	17,8572
N-Butanol	6,8667	1,0676	19,4688	11,1297	1,0650	0,7502	-8,9887	9,6272	18,3012
Tert-Butanol	7,5171	0,8870	21,3129	9,2467	1,1659	0,5396	-9,8401	7,9984	17,2122
Etilen Glikol	8,8089	0,8240	24,9754	8,5904	1,3662	0,4169	-11,5311	7,4307	18,0125
DMF	4,9881	0,9581	14,1426	9,9885	0,7736	0,7276	-6,5296	8,6401	15,1237
DMSO	4,8946	0,9643	13,8775	10,0523	0,7591	0,7380	-6,4072	8,6953	15,0814
Asetonitril	-0,3040	1,9075	-0,8618	19,8855	-0,0471	1,9215	0,3979	17,201	18,7718

Tablo 11. 2. Molekölün AM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deęerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	3,8405	1,0304	14,334	14,067	-0,4311	-3,1616	-7,2686	12,9696	17,5077
Etanol	4,3316	0,8371	16,1671	11,4279	-0,4862	0,9820	-8,1981	10,5364	20,2027
Metanol	3,9109	0,9612	14,5968	13,1225	-0,4390	1,0920	-7,4018	12,0988	21,0316
N-Propanol	4,8382	0,7651	18,0577	10,4450	-0,5430	0,9269	-9,1568	9,6302	20,2570
2-Propanol	4,7472	0,7369	17,7183	10,0603	-0,5328	0,8957	-8,9847	9,2755	19,6887
N-Butanol	5,3260	0,6892	19,8783	9,4085	-0,5978	0,8673	-10,0800	8,6745	20,2196
Tert-Butanol	5,0320	0,6618	18,7813	9,0349	-0,5648	0,8301	-9,5237	8,3301	19,2487
Etilen Glikol	6,8314	0,5023	25,4973	6,8578	-0,7668	0,7308	-12,9293	6,3228	20,7497
DMF	3,2195	0,9337	12,0161	12,7466	-0,3614	1,0414	-6,0932	11,7522	19,2481
DMSO	3,2969	0,6756	12,3050	9,2229	-0,3700	0,7858	-6,2397	8,5034	15,8990
Asetonitril	-0,0775	1,4188	-0,2893	19,3697	0,0087	1,4162	0,1467	17,8586	19,1194

Tablo 12. 2. Molekülün MNDO yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	1,3782	-2,1895	14,792	15,5290	-3,0299	-6,8171	-7,4341	12,0410	15,6879
Etanol	1,5226	-1,9537	16,3421	13,8568	-3,3474	-0,9562	-8,2130	10,7444	21,3485
Metanol	1,3799	-2,1380	14,8104	15,1638	-3,0336	-1,2340	-7,4432	11,7578	21,0006
N-Propanol	1,6609	-1,8010	17,8265	12,7735	-3,6514	-0,7129	-8,9590	9,9044	21,8019
2-Propanol	1,6124	-1,8177	17,3058	12,8917	-3,5447	-0,7613	-8,6973	9,9961	21,4768
N-Butanol	1,7926	-1,6680	19,2403	11,8301	-3,9410	-0,4936	-9,6695	9,1729	22,2898
Tert-Butanol	1,6221	-1,7681	17,4103	12,5406	-3,5661	-0,7054	-8,7498	9,7238	21,3343
Etilen Glikol	2,3593	-1,1568	25,3221	8,2047	-5,1867	0,3888	-12,7260	6,3618	24,6633
DMF	1,1473	-2,3136	12,3144	16,4095	-2,5224	-1,5620	-6,1888	12,7237	19,8729
DMSO	0,3394	-2,1925	3,6433	15,5505	-0,7463	-1,9702	-1,8310	12,0577	12,6648
Asetonitril	-0,0267	-3,4593	-0,2867	24,5351	0,0587	-3,4768	0,1441	19,0242	15,3446

Tablo 13. 2. Molekülün MNDOD yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	1,4099	-2,1588	14,754	15,508	-2,9867	-6,7803	-7,4332	11,9774	15,6170
Etanol	1,5632	-1,9272	16,3581	13,8447	-3,3115	-0,9404	-8,2416	10,6926	21,3053
Metanol	1,4105	-2,1172	14,7601	15,2093	-2,9880	-1,2268	-7,4365	11,7465	20,9442
N-Propanol	1,6983	-1,7862	17,7713	12,8317	-3,5976	-0,7141	-8,9536	9,9102	21,7472
2-Propanol	1,6486	-1,8027	17,2519	12,9503	-3,4924	-0,7620	-8,6919	10,0018	21,4241
N-Butanol	1,8328	-1,6546	19,1786	11,8862	-3,8824	-0,4976	-9,6626	9,1800	22,2274
Tert-Butanol	1,6583	-1,7539	17,3531	12,5995	-3,5129	-0,7070	-8,7429	9,7309	21,2797
Etilen Glikol	2,4129	-1,1476	25,2488	8,2444	-5,1113	0,3755	-12,7209	6,3673	24,5750
DMF	1,1820	-2,2215	12,3684	15,9585	-2,5038	-1,4753	-6,2315	12,3251	19,5851
DMSO	1,0524	-1,8546	11,0128	13,3227	-2,2294	-1,1902	-5,5485	10,2894	16,8771
Asetonitril	-0,0279	-3,4296	-0,2924	24,6375	0,0592	-3,4473	0,1473	19,0281	15,3744

Tablo 14. 2. Molekülün PM3 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	1,6094	-1,1754	14,899	15,084	-2,8306	-5,6704	-6,6840	14,5348	18,3790
Etanol	1,8357	-1,0053	16,9942	12,9004	-3,2286	-0,0431	-7,6238	12,4309	23,2401
Metanol	1,6595	-1,6334	15,3630	20,9611	-2,9187	-0,7636	-6,8920	20,1982	29,2453
N-Propanol	2,0292	-0,9418	18,7860	12,0855	-3,5690	0,1218	-8,4276	11,6456	23,7640
2-Propanol	2,0618	-0,8797	19,0876	11,2890	-3,6263	0,2009	-8,5629	10,8781	23,2682
N-Butanol	2,2137	-0,8768	20,4934	11,2520	-3,8934	0,2834	-9,1936	10,8425	24,2129
Tert-Butanol	2,2805	-0,7720	21,1120	9,9066	-4,0109	0,4233	-9,4711	9,5460	23,4513
Etilen Glikol	2,8184	-0,6974	26,0921	8,9491	-4,9570	0,7798	-11,7052	8,6234	26,0654
DMF	1,6376	-0,9603	15,1606	12,3237	-2,8802	-0,1020	-6,8012	11,8752	21,4546
DMSO	1,4877	-0,7209	13,7725	9,2510	-2,6165	0,0588	-6,1785	8,9143	17,7682
Asetonitril	-0,1305	-1,4585	-1,2079	18,7167	0,2295	-1,5269	0,5419	18,0355	15,7372

Tablo 15. 2. Molekülün PM6 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	1,4094	-2,2505	15,248	16,091	-3,1344	-7,0457	-6,7715	12,7244	15,5846
Etanol	1,5610	-1,8017	16,8881	12,8820	-3,4716	-0,7671	-7,5001	10,1866	20,3912
Metanol	1,3626	-2,1292	14,7411	15,2242	-3,0303	-1,2262	-6,5466	12,0387	20,3893
N-Propanol	1,7237	-1,6683	18,6483	11,9287	-3,8334	-0,5260	-8,2818	9,4328	21,0221
2-Propanol	1,8210	-1,4547	19,7003	10,4012	-4,0497	-0,2479	-8,7490	8,2249	20,7757
N-Butanol	1,8768	-1,5247	20,3040	10,9015	-4,1738	-0,2809	-9,0171	8,6205	21,5305
Tert-Butanol	2,0644	-1,1361	22,3332	8,1230	-4,5909	0,2320	-9,9183	6,4234	21,1647
Etilen Glikol	2,4073	-1,2401	26,0434	8,8669	-5,3536	0,3553	-11,5660	7,0116	24,2865
DMF	1,3526	-2,0612	14,6326	14,7378	-3,0079	-1,1648	-6,4984	11,6541	19,9956
DMSO	1,1651	-1,5769	12,6049	11,2751	-2,5911	-0,8048	-5,5979	8,9159	16,3002
Asetonitril	-0,0562	-3,0661	-0,6075	21,9230	0,1249	-3,1033	0,2698	17,3359	13,8379

Tablo 16. 2. Molekülün PM6-DH2 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^{\cdot})}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^{\cdot})}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^{\cdot})}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	0,6518	-3,0142	15,333	14,616	-3,9173	-7,3696	-6,7715	12,7243	16,0435
Etanol	0,7312	-2,4214	17,1998	11,7414	-4,3944	-1,1119	-7,5961	10,2220	21,1006
Metanol	0,6302	-2,8514	14,8257	13,8263	-3,7878	-1,7226	-6,5476	12,0371	20,6499
N-Propanol	0,8005	-2,2250	18,8310	10,7888	-4,8111	-0,7913	-8,3165	9,3927	21,7291
2-Propanol	0,8459	-1,9369	19,8980	9,3918	-5,0837	-0,4219	-8,7877	8,1765	21,6260
N-Butanol	0,8736	-2,0267	20,5501	9,8273	-5,2503	-0,4621	-9,0757	8,5556	22,4195
Tert-Butanol	0,9618	-1,5001	22,6249	7,2736	-5,7804	0,2225	-9,9920	6,3324	22,3273
Etilen Glikol	1,1157	-1,6545	26,2459	8,0223	-6,7056	0,3438	-11,5912	6,9842	25,6248
DMF	0,6326	-2,7713	14,8817	13,4380	-3,8021	-1,6383	-6,5723	11,6991	20,4352
DMSO	0,5420	-2,1134	12,7494	10,2477	-3,2573	-1,1427	-5,6306	8,9216	16,6668
Asetonitril	-0,0249	-4,1026	-0,5849	19,8934	0,1494	-4,1472	0,2583	17,3191	12,7642

Tablo 17. 2. Molekülün PM7 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^{\cdot-})}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^{\cdot-})}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^{\cdot-})}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	1,4198	-2,3111	15,09	14,605	-3,077	-6,6634	-7,1225	13,1548	16,6909
Etanol	1,5136	-1,8740	16,0868	11,8430	-3,2803	-0,8965	-7,5931	10,6669	20,6438
Metanol	1,3165	-2,2239	13,9921	14,0541	-2,8531	-1,3737	-6,6044	12,6584	20,7423
N-Propanol	1,6657	-1,7543	17,7033	11,0862	-3,6099	-0,6785	-8,3561	9,9853	21,2728
2-Propanol	1,7463	-1,5424	18,5597	9,7475	-3,7845	-0,4146	-8,7603	8,7795	20,9097
N-Butanol	1,8111	-1,6060	19,2491	10,1495	-3,9251	-0,4364	-9,0857	9,1416	21,7160
Tert-Butanol	1,9653	-1,1134	20,8878	7,0360	-4,2592	0,1559	-9,8592	6,3373	20,6116
Etilen Glikol	2,3085	-1,3235	24,5352	8,3640	-5,0030	0,1674	-11,5808	7,5334	24,2846
DMF	1,3494	-1,8434	14,3417	11,6496	-2,9244	-0,9719	-6,7694	10,4927	19,2146
DMSO	1,2123	-1,5278	12,8845	9,6552	-2,6273	-0,7449	-6,0816	8,6964	16,6604
Asetonitril	-0,0083	-3,0247	-0,0879	19,1147	0,0179	-3,0300	0,0415	17,2165	14,1270

Tablo 18. 2. Molekülün RM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	0,4618	-1,9644	14,685	13,687	-3,9142	-6,0432	-7,1282	12,6679	17,6671
Etanol	0,4882	-1,7246	15,5240	12,0162	-4,1379	-0,4914	-7,5357	11,1212	22,3034
Metanol	0,4346	-1,9754	13,8209	13,7643	-3,6840	-0,8776	-6,7090	12,7391	22,2545
N-Propanol	0,5357	-1,6111	17,0356	11,2257	-4,5409	-0,2579	-8,2695	10,3896	22,9421
2-Propanol	0,5586	-1,4741	17,7630	10,2715	-4,7348	-0,0632	-8,6226	9,5064	22,8006
N-Butanol	0,5823	-1,4929	18,5172	10,4020	-4,9358	-0,0220	-8,9887	9,6272	23,5297
Tert-Butanol	0,6375	-1,2403	20,2712	8,6421	-5,4033	0,3699	-9,8401	7,9984	23,6117
Etilen Glikol	0,7470	-1,1523	23,7547	8,0287	-6,3319	0,7346	-11,5311	7,4307	26,0283
DMF	0,4230	-1,3398	13,4513	9,3354	-3,5855	-0,2713	-6,5296	8,6401	18,4838
DMSO	0,4151	-1,3484	13,1992	9,3951	-3,5183	-0,2999	-6,4072	8,6953	18,3208
Asetonitril	-0,0258	-2,6673	-0,8197	18,5853	0,2185	-2,7325	0,3979	17,201	13,8522

Tablo 19. 3. Molekülün AM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	7,7375	5,0151	14,819	14,972	3,3213	0,5536	-7,2686	12,9696	17,4705
Etanol	8,7236	4,0742	16,7145	12,1628	3,7427	2,9589	-8,1981	10,5364	17,9508
Metanol	7,8762	4,6784	15,0910	13,9664	3,3791	3,6714	-7,4018	12,0988	19,7929
N-Propanol	9,7437	3,7238	18,6691	11,1167	4,1803	2,4781	-9,1568	9,6302	17,0847
2-Propanol	9,5606	3,5867	18,3182	10,7073	4,1018	2,3643	-8,9847	9,2755	16,5228
N-Butanol	10,7261	3,3543	20,5514	10,0135	4,6018	1,9829	-10,0800	8,6745	16,1356
Tert-Butanol	10,1341	3,2211	19,4172	9,6159	4,3478	1,9254	-9,5237	8,3301	15,4314
Etilen Glikol	13,7580	2,4449	26,3606	7,2988	5,9026	0,6859	-12,9293	6,3228	14,0355
DMF	6,4838	4,5444	12,4230	13,5663	2,7817	3,7154	-6,0932	11,7522	18,7791
DMSO	6,6396	3,2881	12,7217	9,8160	2,8486	2,4392	-6,2397	8,5034	14,3337
Asetonitril	-0,1561	6,9056	-0,2991	20,6153	-0,0670	6,9255	0,1467	17,8586	24,7044

Tablo 20. 3. Molekülün MNDO yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	5,3092	1,6672	15,03	15,61	0,8304	-2,9845	-7,4341	12,0410	15,6602
Etanol	5,8655	1,4877	16,6042	13,9288	0,9174	1,2143	-8,2130	10,7444	19,2543
Metanol	5,3157	1,6280	15,0479	15,2426	0,8314	1,3802	-7,4432	11,7578	19,7498
N-Propanol	6,3982	1,3714	18,1124	12,8399	1,0007	1,0731	-8,9590	9,9044	18,9358
2-Propanol	6,2113	1,3841	17,5833	12,9587	0,9715	1,0946	-8,6973	9,9961	18,8164
N-Butanol	6,9057	1,2701	19,5488	11,8916	1,0801	0,9482	-9,6695	9,1729	18,7105
Tert-Butanol	6,2488	1,3464	17,6894	12,6057	0,9774	1,0551	-8,7498	9,7238	18,5513
Etilen Glikol	9,0885	0,8809	25,7281	8,2473	1,4215	0,4572	-12,7260	6,3618	18,1235
DMF	4,4198	1,7617	12,5119	16,4947	0,6913	1,5557	-6,1888	12,7237	19,7769
DMSO	1,3076	1,6695	3,7017	15,6313	0,2045	1,6086	-1,8310	12,0577	15,2927
Asetonitril	-0,1029	2,6341	-0,2913	24,6626	-0,0161	2,6389	0,1441	19,0242	21,5351

Tablo 21. 3. Molekülün MNDOD yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	5,3995	1,9017	15,336	14,7	0,8294	-2,4788	-7,4332	11,9774	16,1024
Etanol	5,9867	1,6977	17,0038	13,1230	0,9196	1,4237	-8,2416	10,6926	19,4383
Metanol	5,4019	1,8650	15,3427	14,4164	0,8298	1,6178	-7,4365	11,7465	19,9710
N-Propanol	6,5039	1,5735	18,4727	12,1627	0,9990	1,2758	-8,9536	9,9102	19,1405
2-Propanol	6,3138	1,5880	17,9328	12,2752	0,9698	1,2990	-8,6919	10,0018	19,0229
N-Butanol	7,0189	1,4575	19,9355	11,2666	1,0782	1,1363	-9,6626	9,1800	18,9007
Tert-Butanol	6,3509	1,5450	18,0380	11,9427	0,9755	1,2543	-8,7429	9,7309	18,7526
Etilen Glikol	9,2405	1,0110	26,2453	7,8146	1,4194	0,5880	-12,7209	6,3673	18,2568
DMF	4,5266	1,9569	12,8566	15,1265	0,6953	1,7497	-6,2315	12,3251	19,6110
DMSO	4,0304	1,6337	11,4475	12,6281	0,6191	1,4492	-5,5485	10,2894	16,6680
Asetonitril	-0,1070	3,0212	-0,3039	23,3531	-0,0164	3,0261	0,1473	19,0281	21,9233

Tablo 22. 3. Molekülün PM3 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	5,3910	2,5523	15,5027	15,5076	0,7712	-2,0690	-6,6840	14,5348	18,3786
Etanol	6,1490	2,1829	17,6824	13,2629	0,8796	1,9207	-7,6238	12,4309	21,0958
Metanol	5,5588	3,5468	15,9851	21,5500	0,7952	3,3098	-6,8920	20,1982	29,6048
N-Propanol	6,7973	2,0450	19,5468	12,4250	0,9724	1,7552	-8,4276	11,6456	20,8560
2-Propanol	6,9064	1,9102	19,8606	11,6062	0,9880	1,6158	-8,5629	10,8781	20,0688
N-Butanol	7,4151	1,9039	21,3234	11,5682	1,0608	1,5878	-9,1936	10,8425	20,5632
Tert-Butanol	7,6389	1,6763	21,9670	10,1849	1,0928	1,3506	-9,4711	9,5460	19,2750
Etilen Glikol	9,4409	1,5143	27,1487	9,2006	1,3505	1,1118	-11,7052	8,6234	20,0899
DMF	5,4855	2,0853	15,7745	12,6700	0,7847	1,8514	-6,8012	11,8752	19,7431
DMSO	4,9833	1,5653	14,3303	9,5109	0,7129	1,3529	-6,1785	8,9143	15,7328
Asetonitril	-0,4371	3,1670	-1,2569	19,2426	-0,0625	3,1857	0,5419	18,0355	20,7418

Tablo 23. 3. Molekülün PM6 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^{\cdot})}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^{\cdot})}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^{\cdot})}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	5,0849	1,4461	15,276	15,652	0,5327	-3,2181	-6,7715	12,7244	15,7451
Etanol	5,6320	1,1577	16,9194	12,5301	0,5900	0,9819	-7,5001	10,1866	18,0785
Metanol	4,9160	1,3682	14,7684	14,8083	0,5150	1,2147	-6,5466	12,0387	19,2850
N-Propanol	6,2190	1,0720	18,6829	11,6029	0,6515	0,8779	-8,2818	9,4328	17,9409
2-Propanol	6,5699	0,9347	19,7368	10,1171	0,6883	0,7296	-8,7490	8,2249	17,0153
N-Butanol	6,7712	0,9797	20,3416	10,6037	0,7094	0,7683	-9,0171	8,6205	17,6965
Tert-Butanol	7,4479	0,7300	22,3747	7,9012	0,7803	0,4975	-9,9183	6,4234	16,0589
Etilen Glikol	8,6852	0,7969	26,0917	8,6247	0,9099	0,5257	-11,5660	7,0116	18,1934
DMF	4,8798	1,3245	14,6597	14,3353	0,5112	1,1721	-6,4984	11,6541	18,8134
DMSO	4,2036	1,0133	12,6283	10,9671	0,4404	0,8820	-5,5979	8,9159	14,9555
Asetonitril	-0,2026	1,9702	-0,6086	21,3242	-0,0212	1,9765	0,2698	17,3359	19,0638

Tablo 24. 3. Molekülün PM6-DH2 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	4,4035	0,6479	15,876	15,598	-0,3277	-4,0004	-6,7715	12,7243	15,8231
Etanol	4,9397	0,5205	17,8097	12,5307	-0,3676	0,6300	-7,5961	10,2220	18,8157
Metanol	4,2579	0,6129	15,3514	14,7558	-0,3168	0,7073	-6,5476	12,0371	19,6089
N-Propanol	5,4082	0,4783	19,4988	11,5141	-0,4024	0,5982	-8,3165	9,3927	18,7098
2-Propanol	5,7146	0,4163	20,6036	10,0232	-0,4252	0,5431	-8,7877	8,1765	17,9325
N-Butanol	5,9019	0,4356	21,2788	10,4880	-0,4392	0,5665	-9,0757	8,5556	18,6370
Tert-Butanol	6,4978	0,3224	23,4272	7,7626	-0,4835	0,4665	-9,9920	6,3324	17,2744
Etilen Glikol	7,5377	0,3556	27,1766	8,5616	-0,5609	0,5228	-11,5912	6,9842	19,6591
DMF	4,2740	0,5957	15,4094	14,3414	-0,3180	0,6905	-6,5723	11,6991	19,2799
DMSO	3,6616	0,4543	13,2015	10,9366	-0,2725	0,5355	-5,6306	8,9216	15,3601
Asetonitril	-0,1680	0,8819	-0,6056	21,2308	0,0125	0,8781	0,2583	17,3191	17,9264

Tablo 25. 3. Molekülün PM7 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	4,8004	1,611	15,721	15,373	0,1155	-2,9701	-7,1225	13,1548	17,1917
Etanol	5,1176	1,3063	16,7598	12,4655	0,1231	1,2696	-7,5931	10,6669	19,4065
Metanol	4,4512	1,5502	14,5775	14,7928	0,1071	1,5183	-6,6044	12,6584	20,6740
N-Propanol	5,6318	1,2228	18,4440	11,6690	0,1355	1,1825	-8,3561	9,9853	19,3883
2-Propanol	5,9042	1,0752	19,3361	10,2599	0,1421	1,0328	-8,7603	8,7795	18,4306
N-Butanol	6,1236	1,1195	20,0544	10,6830	0,1474	1,0756	-9,0857	9,1416	19,1556
Tert-Butanol	6,6449	0,7761	21,7617	7,4059	0,1599	0,7284	-9,8592	6,3373	16,7651
Etilen Glikol	7,8052	0,9226	25,5617	8,8036	0,1878	0,8666	-11,5808	7,5334	19,7930
DMF	4,5624	1,2850	14,9417	12,2619	0,1098	1,2523	-6,7694	10,4927	18,4046
DMSO	4,0989	1,0650	13,4236	10,1627	0,0986	1,0356	-6,0816	8,6964	15,7150
Asetonitril	-0,0280	2,1084	-0,0916	20,1195	-0,0007	2,1086	0,0415	17,2165	19,2843

Tablo 26. 3. Molekölün RM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deęerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	4,1077	0,2526	15,3	14,875	-0,4516	-4,1802	-7,1282	12,6679	16,0675
Etanol	4,3425	0,2218	16,1742	13,0588	-0,4774	0,3640	-7,5357	11,1212	19,4983
Metanol	3,8661	0,2540	14,3999	14,9586	-0,4250	0,3807	-6,7090	12,7391	20,2538
N-Propanol	4,7654	0,2072	17,7492	12,1998	-0,5239	0,3633	-8,2695	10,3896	19,5463
2-Propanol	4,9689	0,1896	18,5071	11,1627	-0,5463	0,3523	-8,6226	9,5064	19,0276
N-Butanol	5,1798	0,1920	19,2929	11,3045	-0,5694	0,3617	-8,9887	9,6272	19,5470
Tert-Butanol	5,6705	0,1595	21,1203	9,3919	-0,6234	0,3453	-9,8401	7,9984	18,8071
Etilen Glikol	6,6449	0,1482	24,7498	8,7253	-0,7305	0,3659	-11,5311	7,4307	20,0582
DMF	3,7628	0,1723	14,0148	10,1454	-0,4137	0,2956	-6,5296	8,6401	15,8789
DMSO	3,6922	0,1734	13,7521	10,2103	-0,4059	0,2943	-6,4072	8,6953	15,8027
Asetonitril	-0,2293	0,3430	-0,8540	20,1979	0,0252	0,3355	0,3979	17,201	17,1134

Tablo 27. 4. Molekülün AM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^{\cdot-})}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^{\cdot-})}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^{\cdot-})}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	7,6842	4,7563	14,763	15,0810	3,2848	0,2621	-7,2686	12,9696	17,2155
Etanol	8,6668	3,8640	16,6509	12,2518	3,7049	2,7599	-8,1981	10,5364	17,7895
Metanol	7,8250	4,4370	15,0335	14,0685	3,3450	3,4401	-7,4018	12,0988	19,5957
N-Propanol	9,6804	3,5317	18,5981	11,1980	4,1381	2,2985	-9,1568	9,6302	16,9473
2-Propanol	9,4984	3,4016	18,2485	10,7856	4,0604	2,1916	-8,9847	9,2755	16,3914
N-Butanol	10,6563	3,1812	20,4731	10,0867	4,5554	1,8237	-10,0800	8,6745	16,0228
Tert-Butanol	10,0682	3,0549	19,3433	9,6863	4,3040	1,7723	-9,5237	8,3301	15,3221
Etilen Glikol	13,6686	2,3187	26,2603	7,3522	5,8430	0,5775	-12,9293	6,3228	13,9866
DMF	6,4416	4,3098	12,3757	13,6655	2,7536	3,4893	-6,0932	11,7522	18,5810
DMSO	6,5965	3,1184	12,6732	9,8878	2,8198	2,2781	-6,2397	8,5034	14,2014
Asetonitril	-0,1551	6,5492	-0,2980	20,7660	-0,0663	6,5690	0,1467	17,8586	24,3472

Tablo 28. 4. Molekülün MNDO yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	5,3675	1,9458	14,906	16,0530	0,9254	-2,8378	-7,4341	12,0410	15,7119
Etanol	5,9299	1,7363	16,4681	14,3239	1,0224	1,4316	-8,2130	10,7444	19,3666
Metanol	5,3741	1,9000	14,9245	15,6750	0,9266	1,6239	-7,4432	11,7578	19,8984
N-Propanol	6,4685	1,6005	17,9639	13,2041	1,1152	1,2682	-8,9590	9,9044	19,0163
2-Propanol	6,2795	1,6153	17,4392	13,3263	1,0827	1,2927	-8,6973	9,9961	18,9034
N-Butanol	6,9815	1,4823	19,3886	12,2289	1,2037	1,1236	-9,6695	9,1729	18,7623
Tert-Butanol	6,3174	1,5713	17,5444	12,9633	1,0892	1,2468	-8,7498	9,7238	18,6312
Etilen Glikol	9,1883	1,0281	25,5172	8,4813	1,5842	0,5560	-12,7260	6,3618	18,0596
DMF	4,4684	2,0561	12,4093	16,9626	0,7704	1,8265	-6,1888	12,7237	19,9686
DMSO	1,3220	1,9485	3,6714	16,0748	0,2279	1,8806	-1,8310	12,0577	15,5413
Asetonitril	-0,1040	3,0743	-0,2889	25,3622	-0,0179	3,0796	0,1441	19,0242	21,9777

Tablo 29. 4. Molekölün MNDOD yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deęerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	5,3961	1,9772	15,037	13,8020	0,9150	-2,1358	-7,4332	11,9774	16,3598
Etanol	5,9830	1,7651	16,6726	12,3215	1,0145	1,4628	-8,2416	10,6926	19,3825
Metanol	5,3985	1,9391	15,0439	13,5359	0,9154	1,6663	-7,4365	11,7465	19,9339
N-Propanol	6,4998	1,6360	18,1129	11,4199	1,1022	1,3075	-8,9536	9,9102	19,0691
2-Propanol	6,3098	1,6511	17,5835	11,5254	1,0700	1,3322	-8,6919	10,0018	18,9560
N-Butanol	7,0145	1,5154	19,5472	10,5785	1,1894	1,1610	-9,6626	9,1800	18,8141
Tert-Butanol	6,3469	1,6064	17,6867	11,2133	1,0762	1,2856	-8,7429	9,7309	18,6832
Etilen Glikol	9,2347	1,0511	25,7341	7,3373	1,5659	0,5845	-12,7209	6,3673	18,1067
DMF	4,5237	2,0346	12,6062	14,2027	0,7671	1,8060	-6,2315	12,3251	19,5955
DMSO	4,0279	1,6985	11,2245	11,8569	0,6830	1,4950	-5,5485	10,2894	16,6499
Asetonitril	-0,1069	3,1411	-0,2980	21,9268	-0,0181	3,1465	0,1473	19,0281	22,0454

Tablo 30. 4. Molekülün PM3 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	5,0396	2,1660	15,3550	15,4676	0,4638	-2,4433	-6,6840	14,5348	18,3117
Etanol	5,7482	1,8525	17,5140	13,2287	0,5290	1,6948	-7,6238	12,4309	21,2205
Metanol	5,1964	3,0100	15,8328	21,4945	0,4782	2,8675	-6,8920	20,1982	29,4794
N-Propanol	6,3542	1,7354	19,3605	12,3930	0,5848	1,5612	-8,4276	11,6456	21,0496
2-Propanol	6,4563	1,6211	19,6714	11,5762	0,5942	1,4440	-8,5629	10,8781	20,2908
N-Butanol	6,9318	1,6158	21,1202	11,5383	0,6380	1,4257	-9,1936	10,8425	20,8238
Tert-Butanol	7,1410	1,4226	21,7577	10,1586	0,6572	1,2267	-9,4711	9,5460	19,5866
Etilen Glikol	8,8255	1,2851	26,8901	9,1768	0,8122	1,0430	-11,7052	8,6234	20,5594
DMF	5,1280	1,7697	15,6242	12,6373	0,4719	1,6290	-6,8012	11,8752	19,8335
DMSO	4,6585	1,3284	14,1937	9,4864	0,4287	1,2007	-6,1785	8,9143	15,8647
Asetonitril	-0,4086	2,6877	-1,2449	19,1930	-0,0376	2,6989	0,5419	18,0355	20,2301

Tablo 31. 4. Molekülün PM6 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	5,1671	2,1660	15,5238	15,4676	0,5410	-2,4433	-6,7715	12,7244	16,5116
Etanol	5,7231	1,7340	17,1941	12,3827	0,5992	1,5554	-7,5001	10,1866	18,6429
Metanol	4,9955	2,0493	15,0082	14,6341	0,5230	1,8934	-6,5466	12,0387	19,9557
N-Propanol	6,3196	1,6057	18,9862	11,4664	0,6617	1,4085	-8,2818	9,4328	18,4614
2-Propanol	6,6761	1,4001	20,0573	9,9981	0,6990	1,1918	-8,7490	8,2249	17,4667
N-Butanol	6,8806	1,4674	20,6719	10,4790	0,7204	1,2527	-9,0171	8,6205	18,1699
Tert-Butanol	7,5683	1,0934	22,7379	7,8082	0,7924	0,8573	-9,9183	6,4234	16,4066
Etilen Glikol	8,8256	1,1935	26,5153	8,5232	0,9241	0,9182	-11,5660	7,0116	18,5717
DMF	4,9587	1,9838	14,8977	14,1666	0,5192	1,8291	-6,4984	11,6541	19,4624
DMSO	4,2716	1,5177	12,8333	10,8380	0,4472	1,3844	-5,5979	8,9159	15,4510
Asetonitril	-0,2059	2,9510	-0,6185	21,0733	-0,0216	2,9574	0,2698	17,3359	20,0451

Tablo 32. 4. Molekülün PM6-DH2 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	4,3341	2,1660	15,5861	15,4676	-0,3106	-2,4433	-6,7715	12,7243	17,3631
Etanol	4,8619	1,7400	17,4841	12,4258	-0,3484	1,8439	-7,5961	10,2220	20,0103
Metanol	4,1908	2,0490	15,0707	14,6322	-0,3003	2,1385	-6,5476	12,0371	21,0235
N-Propanol	5,3230	1,5989	19,1423	11,4177	-0,3814	1,7125	-8,3165	9,3927	19,8032
2-Propanol	5,6246	1,3918	20,2268	9,9393	-0,4030	1,5120	-8,7877	8,1765	18,8792
N-Butanol	5,8089	1,4564	20,8897	10,4001	-0,4162	1,5804	-9,0757	8,5556	19,6280
Tert-Butanol	6,3954	1,0779	22,9988	7,6976	-0,4583	1,2145	-9,9920	6,3324	17,9972
Etilen Glikol	7,4189	1,1889	26,6797	8,4900	-0,5316	1,3473	-11,5912	6,9842	20,4543
DMF	4,2066	1,9915	15,1276	14,2214	-0,3014	2,0813	-6,5723	11,6991	20,6541
DMSO	3,6039	1,5187	12,9601	10,8451	-0,2582	1,5956	-5,6306	8,9216	16,4061
Asetonitril	-0,1653	2,9482	-0,5945	21,0530	0,0118	2,9446	0,2583	17,3191	19,9936

Tablo 33. 4. Molekülün PM7 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik değerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^-)}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^-)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	4,9816	1,6531	15,7939	15,3425	0,2750	-2,9190	-7,1225	13,1548	17,0833
Etanol	5,3107	1,3405	16,8374	12,4409	0,2932	1,2531	-7,5931	10,6669	19,2199
Metanol	4,6192	1,5907	14,6450	14,7635	0,2550	1,5147	-6,6044	12,6584	20,5225
N-Propanol	5,8444	1,2548	18,5294	11,6459	0,3227	1,1587	-8,3561	9,9853	19,1774
2-Propanol	6,1271	1,1033	19,4257	10,2396	0,3383	1,0025	-8,7603	8,7795	18,2040
N-Butanol	6,3547	1,1488	20,1472	10,6619	0,3508	1,0442	-9,0857	9,1416	18,9207
Tert-Butanol	6,8957	0,7964	21,8624	7,3912	0,3807	0,6829	-9,8592	6,3373	16,4987
Etilen Glikol	8,0998	0,9467	25,6800	8,7862	0,4472	0,8134	-11,5808	7,5334	19,4805
DMF	4,7346	1,3186	15,0109	12,2377	0,2614	1,2407	-6,7694	10,4927	18,2414
DMSO	4,2536	1,0928	13,4857	10,1426	0,2348	1,0229	-6,0816	8,6964	15,5660
Asetonitril	-0,0290	2,1635	-0,0920	20,0797	-0,0016	2,1640	0,0415	17,2165	19,3406

Tablo 34. 4. Molekölün RM1 yarı deneysel kuantum kimyasal metotla hesaplanan termodinamik deęerleri

ÇÖZÜCÜ	$\Delta H^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/mol)	$\Delta H^{\circ}_{(A^{\cdot})}$ (kcal/mol)	$\Delta S^{\circ}_{(AH)}$ (cal/K.mol)	$\Delta S^{\circ}_{(A^{\cdot})}$ (cal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(AH)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(A^{\cdot})}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol)	$\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol)	$\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol)
Su	4,0203	1,7519	15,4735	15,1410	-0,5908	-2,7601	-7,1282	12,6679	17,6268
Etanol	4,2501	1,5380	16,3581	13,2923	-0,6246	1,7241	-7,5357	11,1212	21,0056
Metanol	3,7839	1,7617	14,5635	15,2261	-0,5561	1,9275	-6,7090	12,7391	21,9316
N-Propanol	4,6640	1,4368	17,9510	12,4179	-0,6854	1,6411	-8,2695	10,3896	20,9856
2-Propanol	4,8631	1,3147	18,7175	11,3623	-0,7147	1,5277	-8,6226	9,5064	20,3713
N-Butanol	5,0696	1,3314	19,5122	11,5067	-0,7450	1,5534	-8,9887	9,6272	20,9143
Tert-Butanol	5,5498	1,1061	21,3603	9,5599	-0,8156	1,3492	-9,8401	7,9984	20,0032
Etilen Glikol	6,5035	1,0276	25,0311	8,8814	-0,9557	1,3124	-11,5311	7,4307	21,2300
DMF	3,6827	1,1949	14,1741	10,3269	-0,5412	1,3562	-6,5296	8,6401	17,0670
DMSO	3,6137	1,2025	13,9084	10,3928	-0,5310	1,3608	-6,4072	8,6953	16,9943
Asetonitril	-0,2244	2,3788	-0,8637	20,5591	0,0330	2,3690	0,3979	17,201	19,1391

4. TARTIŞMA VE SONUÇLAR

Fenil[2-(2-bromobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (1. Molekül), fenil[2-(2-florobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (2. Molekül), fenil[2-(2-klorobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (3. Molekül) ve fenil[2-(2-metilbenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (4. Molekül)'ün su, etanol, metanol, *n*-propanol, *izo*-propanol, *n*-butanol, *tert*-butanol, etilen glikol, *N,N*-dimetilformamit (DMF), dimetilsülfoksit (DMSO) ve asetonitril ortamında yarı deneysel kuantum kimyasal metotlar (AM1, MNDO, MNDOD, PM3, PM6, PM6-DH2, PM7 ve RM1) yardımı ile hesaplanan $\Delta H^{\circ}_{(S)}$ (kcal/mol), $\Delta H^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/mol), $\Delta S^{\circ}_{(S)}$ (cal/K.mol), $\Delta S^{\circ}_{(SH^+)}$ (cal/K.mol),

$\Delta G^{\circ}_{(S)}$ (kcal/K.mol), $\Delta G^{\circ}_{(SH^+)}$ (kcal/K.mol) ve $\delta\Delta G^{\circ}$ (kcal/K.mol) değerleri

kullanılarak; $pKa = \Delta G^{\circ} / 2,303 R T$ (6)

formülü yardımıyla her bir molekülün pKa değerleri her bir çözücü ortam ve her bir yarı deneysel kuantum kimyasal metoda göre hesaplanmıştır. Bulunan pKa değerleri Tablo 34-37'de verilmiştir. Elde edilen bu değerlerin yarı deneysel kuantum kimyasal metotlara göre karşılaştırılması Şekil 11-18'de, çözücü ortam dikkate alınarak yapılan karşılaştırma grafikleri ise Şekil 19-29'da verilmiştir. Bu çalıştığımız moleküllerin pKa değerleri bir yüksek lisans tez çalışmasında deneysel olarak potansiyometrik titrasyon yöntemiyle yarı nötralizasyon metoduna göre ve teorik olarak SPARC bilgisayar programı ile hesaplanmıştır (Çakır, 2014). Bu çalışmadaki veriler kullanılarak bizim elde ettiğimiz sonuçlar ile karşılaştırma yapılmıştır. Çalışmamızda kullandığımız sekiz farklı metodun ortalama sonucu alınarak karşılaştırma yapılmıştır. Bu karşılaştırma grafiksel olarak Şekil 30-33'da verilmiştir.

Tablo 35. 1. Molekölün çalışılan çözücü ortamlarında yarı deneysel kuantum kimyasal metoda göre hesaplanan pKa değerleri

ÇÖZÜCÜ	METOT							
	AM1	MNDO	MNDOD	PM3	PM6	PM6-DH2	PM7	RM1
Su	12,6123	10,9529	12,2115	13,4795	11,0015	10,8246	12,3036	11,7274
Etanol	12,4839	13,4850	14,4134	14,8015	14,2309	12,9076	13,5229	13,7360
Metanol	14,0404	13,9481	15,0127	21,6181	20,1580	13,6002	14,8017	14,5410
N-Propanol	11,6538	13,1576	14,0265	14,4353	14,0254	12,7521	13,3050	13,5953
2-Propanol	11,2487	13,0989	13,9812	13,7896	13,4737	12,1337	12,4301	13,0950
N-Butanol	10,7655	12,9043	13,6879	14,0360	13,7850	12,6166	12,9241	13,4206
Tert-Butanol	10,3152	12,8937	13,7479	12,9670	12,8795	11,5228	10,8030	12,6220
Etilen Glikol	8,6643	12,1020	12,5502	13,1075	13,3340	13,0896	12,7699	13,2089
DMF	13,4777	14,1169	14,9544	13,9266	13,3348	13,3575	12,9398	11,0905
DMSO	10,0200	11,2656	12,6602	10,9291	10,5889	10,5990	10,9684	11,0595
Asetonitril	19,1033	16,1863	18,1276	16,3400	14,3870	13,1109	15,4594	13,7657

Tablo 36. 2. Molekülün çalışılan çözücü ortamlarında yarı deneysel kuantum kimyasal metoda göre hesaplanan pKa değerleri

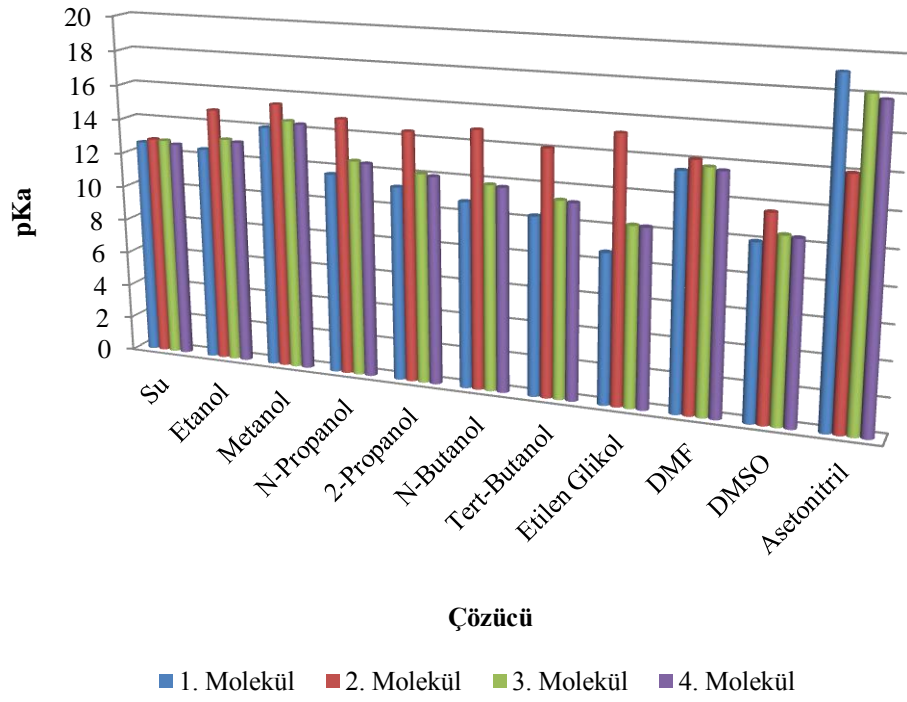
ÇÖZÜCÜ	METOT							
	AM1	MNDO	MNDOD	PM3	PM6	PM6-DH2	PM7	RM1
Su	12,8387	11,5042	11,4522	13,4776	11,4285	11,7650	12,2397	12,9556
Etanol	14,8150	15,6553	15,6235	17,0424	14,9532	15,4734	15,1384	16,3555
Metanol	15,4228	15,4001	15,3588	21,4461	14,9519	15,1429	15,2107	16,3196
N-Propanol	14,8548	15,9877	15,9476	17,4265	15,4158	15,9343	15,5997	16,8238
2-Propanol	14,4381	15,7493	15,7107	17,0630	15,2352	15,8587	15,3334	16,7201
N-Butanol	14,8274	16,3455	16,2998	17,7557	15,7887	16,4406	15,9247	17,2547
Tert-Butanol	14,1154	15,6448	15,6047	17,1972	15,5204	16,3730	15,1149	17,3149
Etilen Glikol	15,2161	18,0861	18,0213	19,1142	17,8097	18,7911	17,8083	19,0870
DMF	14,1150	14,5731	14,3621	15,7330	14,6631	14,9855	14,0904	13,5545
DMSO	11,6590	9,2873	12,3763	13,0297	11,9532	12,2221	12,2174	13,4350
Asetonitril	14,0206	11,2524	11,2743	11,5404	10,1476	9,3602	10,3596	10,1580

Tablo 37. 3. Molekölün çalışılan çözücü ortamlarında yarı deneysel kuantum kimyasal metoda göre hesaplanan pKa değerleri

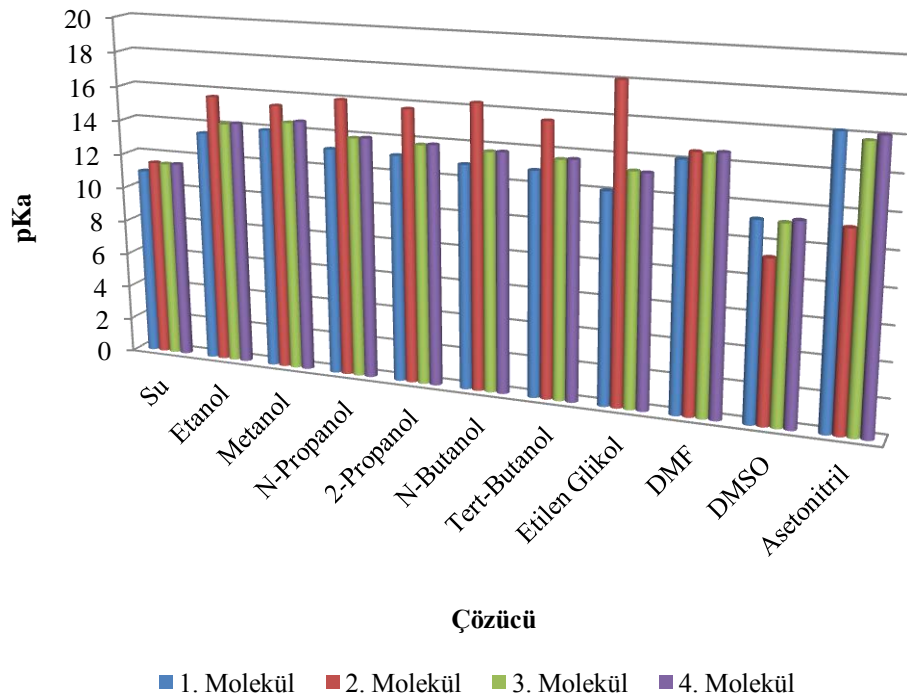
ÇÖZÜCÜ	METOT							
	AM1	MNDO	MNDOD	PM3	PM6	PM6-DH2	PM7	RM1
Su	12,8114	11,4839	11,8082	13,4773	11,5462	11,6034	12,6070	11,7826
Etanol	13,1636	14,1195	14,2544	15,4699	13,2573	13,7979	14,2311	14,2985
Metanol	14,5145	14,4829	14,6451	21,7097	14,1420	14,3795	15,1606	14,8525
N-Propanol	12,5285	13,8859	14,0361	15,2941	13,1564	13,7202	14,2178	14,3336
2-Propanol	12,1164	13,7984	13,9498	14,7168	12,4776	13,1502	13,5155	13,9533
N-Butanol	11,8325	13,7207	13,8602	15,0793	12,9772	13,6668	14,0471	14,3342
Tert-Butanol	11,3161	13,6040	13,7516	14,1347	11,7763	12,6676	12,2941	13,7916
Etilen Glikol	10,2924	13,2903	13,3880	14,7322	13,3415	14,4163	14,5145	14,7090
DMF	13,7710	14,5028	14,3811	14,4780	13,7962	14,1383	13,4964	11,6443
DMSO	10,5112	11,2144	12,2229	11,5372	10,9671	11,2638	11,5241	11,5884
Asetonitril	18,1162	15,7921	16,0767	15,2103	13,9798	13,1458	14,1415	12,5495

Tablo 38. 4. Molekölün çalışılan çözücü ortamlarında yarı deneysel kuantum kimyasal metoda göre hesaplanan pKa değerleri

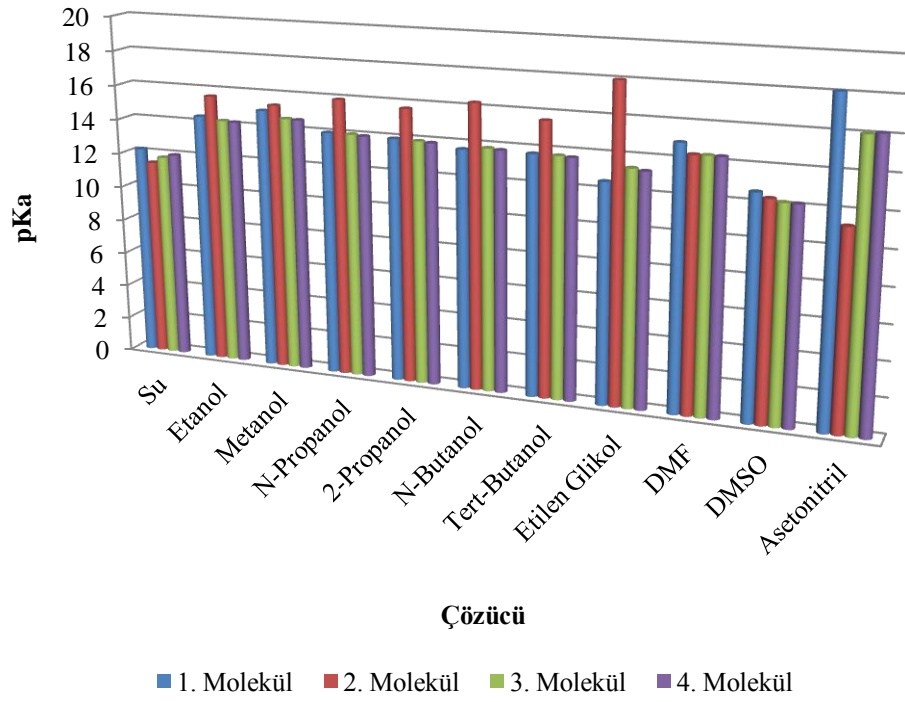
ÇÖZÜCÜ	METOT							
	AM1	MNDO	MNDOD	PM3	PM6	PM6-DH2	PM7	RM1
Su	12,6244	11,5218	11,9969	13,4283	12,1082	12,7327	12,5275	12,9260
Etanol	13,0454	14,2019	14,2135	15,5614	13,6712	14,6739	14,0943	15,4038
Metanol	14,3699	14,5918	14,6178	21,6178	14,6338	15,4169	15,0495	16,0828
N-Propanol	12,4278	13,9450	13,9837	15,4360	13,5381	14,5220	14,0631	15,3891
2-Propanol	12,0201	13,8622	13,9007	14,8796	12,8086	13,8444	13,3493	14,9386
N-Butanol	11,7498	13,7587	13,7967	15,2705	13,3243	14,3935	13,8749	15,3368
Tert-Butanol	11,2360	13,6625	13,7007	14,3632	12,0312	13,1976	12,0988	14,6687
Etilen Glikol	10,2566	13,2434	13,2780	15,0766	13,6190	14,9995	14,2854	15,5683
DMF	13,6258	14,6433	14,3697	14,5442	14,2721	15,1460	13,3767	12,5156
DMSO	10,4141	11,3967	12,2097	11,6339	11,3305	12,0309	11,4148	12,4622
Asetonitril	17,8542	16,1166	16,1663	14,8351	14,6994	14,6616	14,1828	14,0350



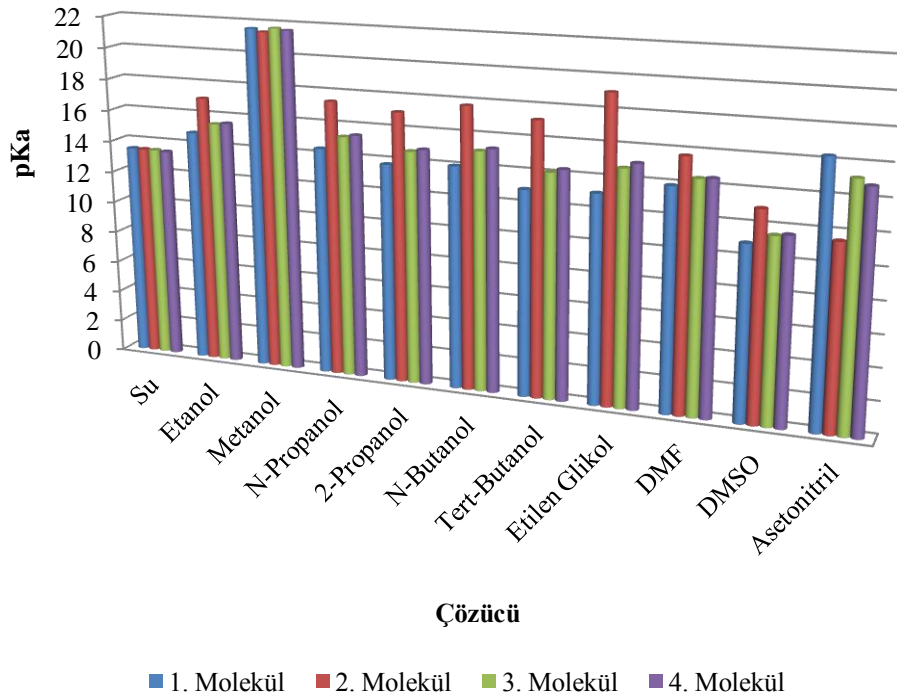
Şekil 11. AM1 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



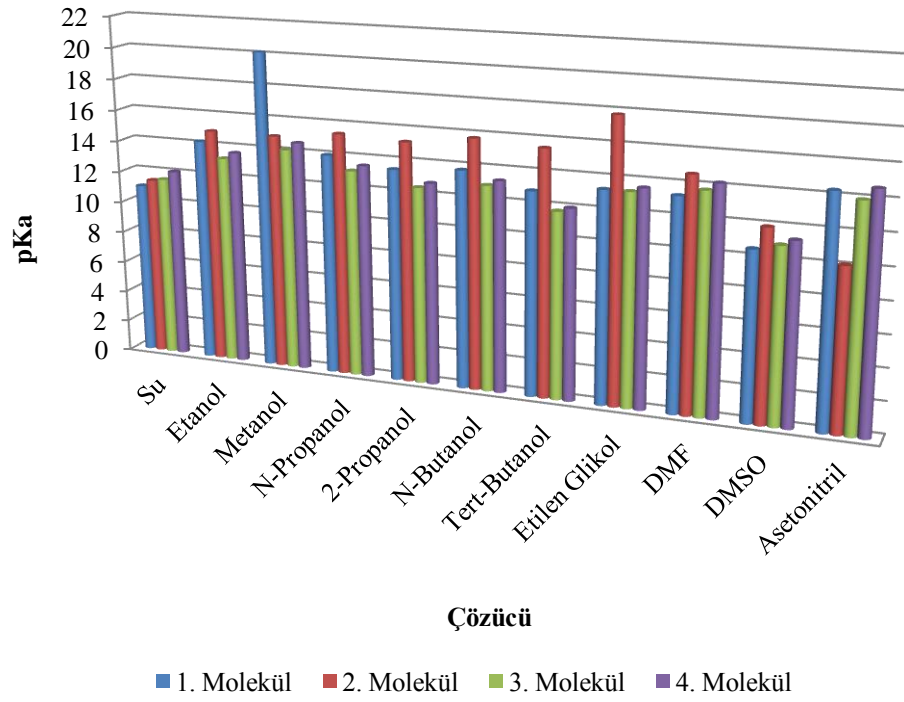
Şekil 12. MNDO metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



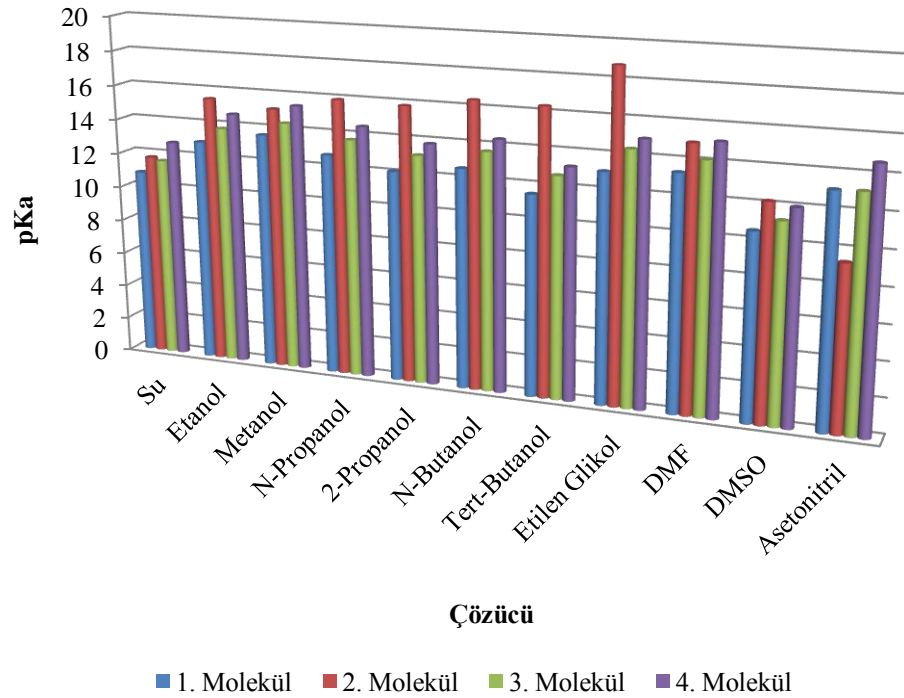
Şekil 13. MNDOD metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



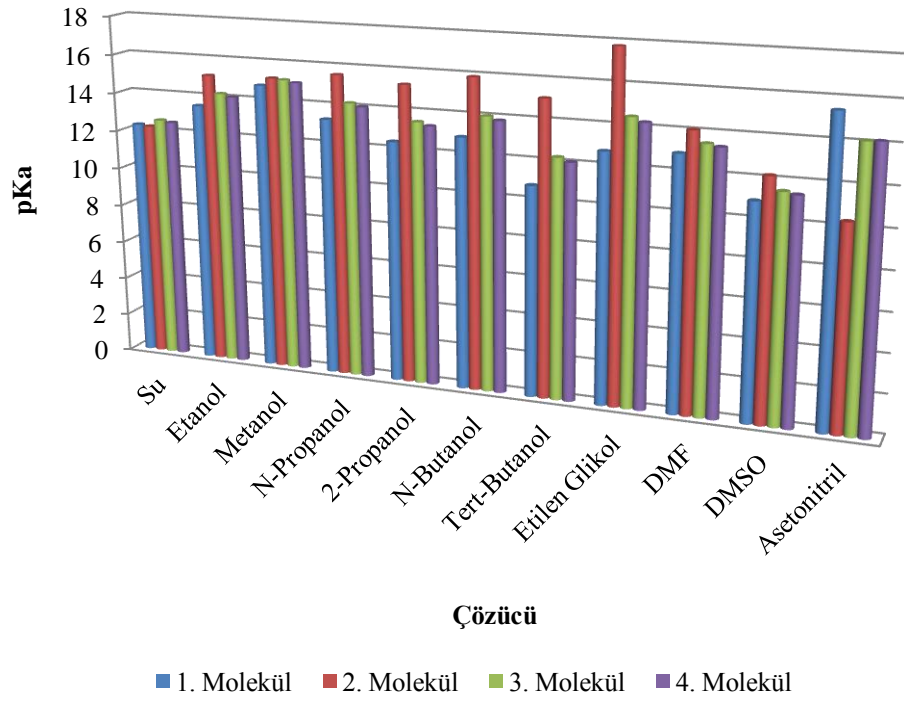
Şekil 14. PM3 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



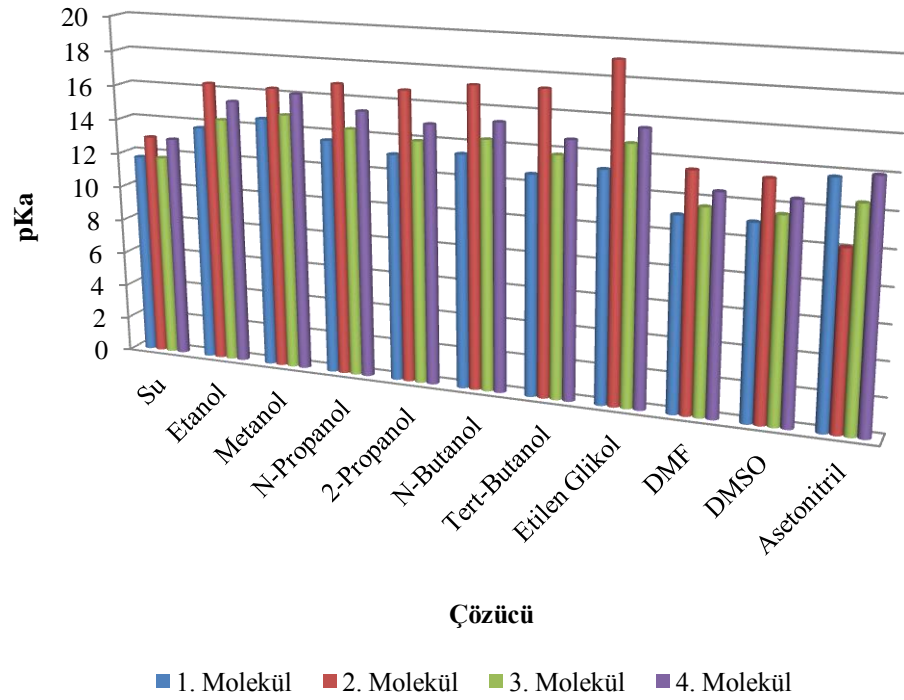
Şekil 15. PM6 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



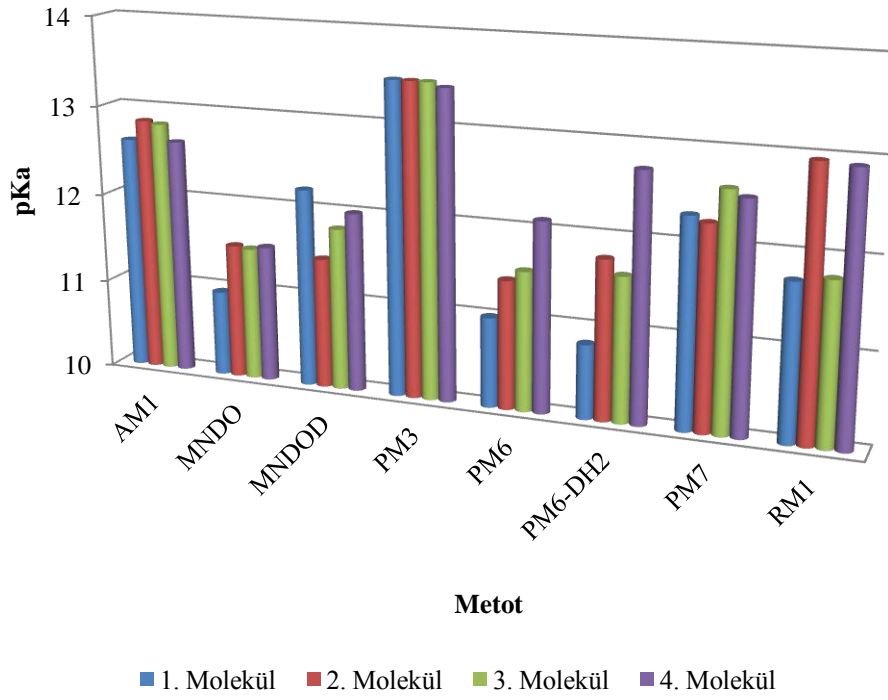
Şekil 16. PM6-DH2 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



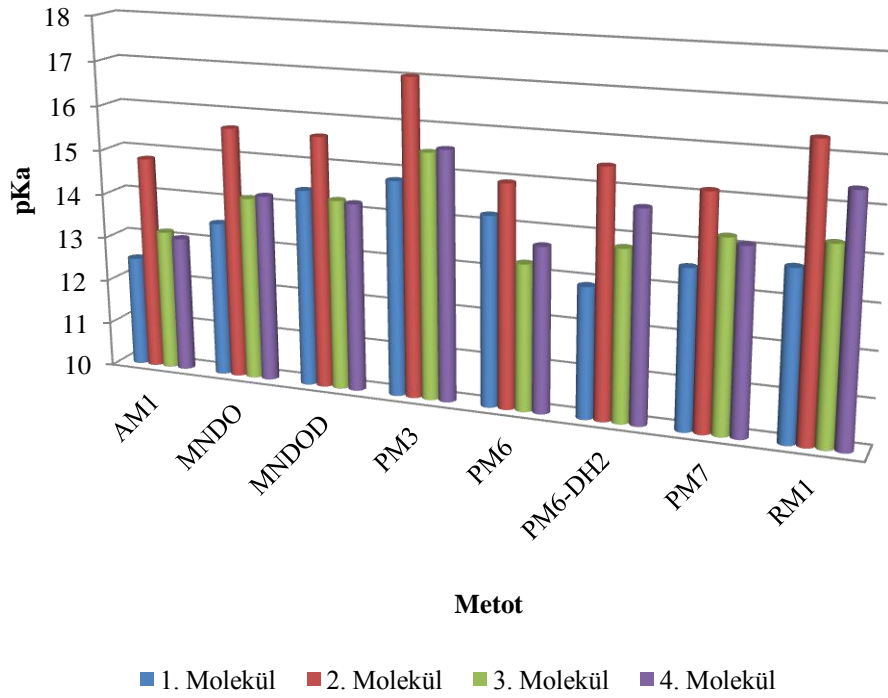
Şekil 17. PM7 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



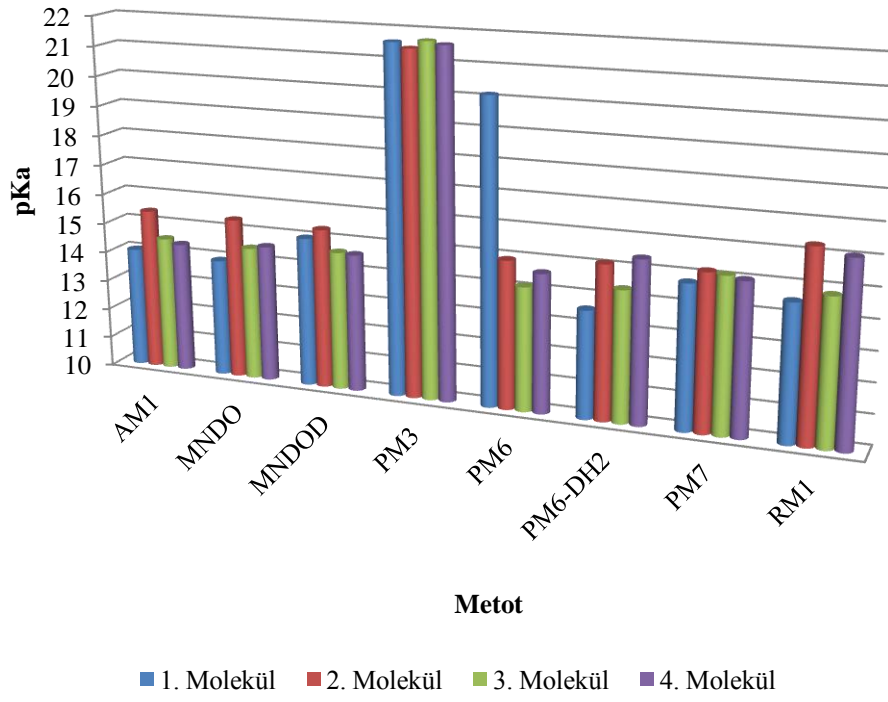
Şekil 18. RM1 metoduna göre moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



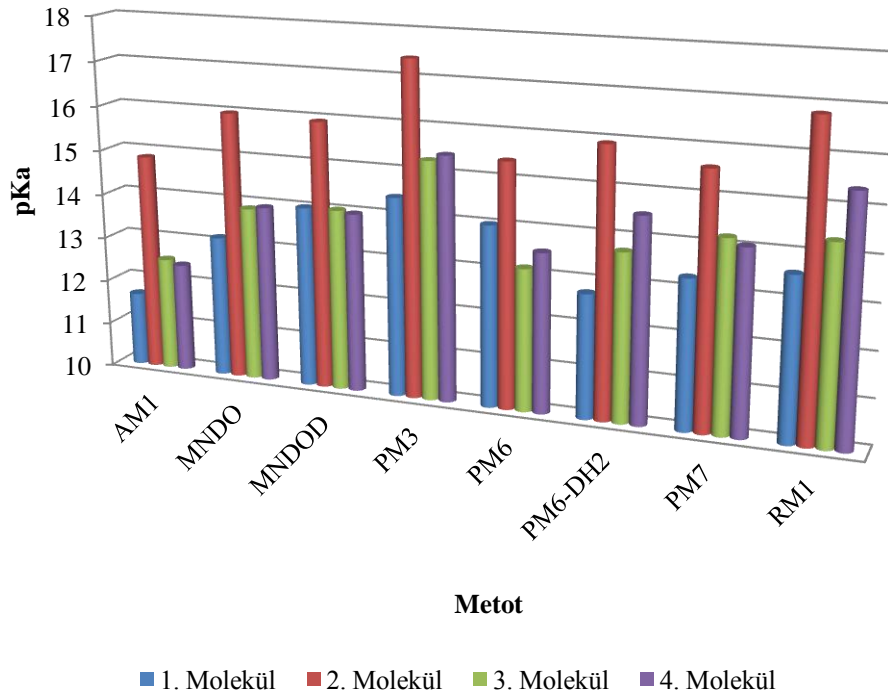
Şekil 19. Su ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



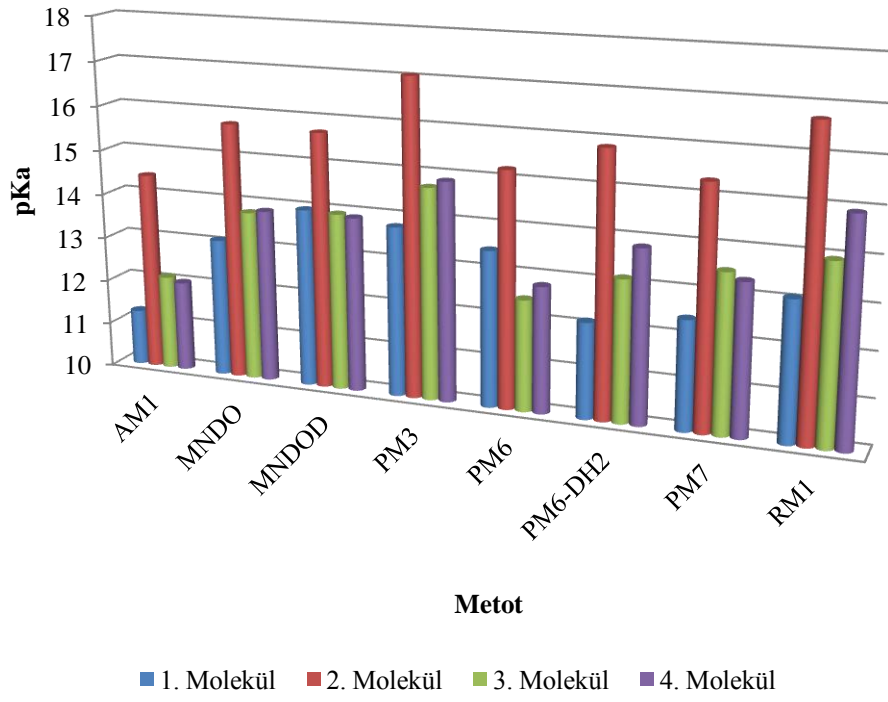
Şekil 20. Etanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



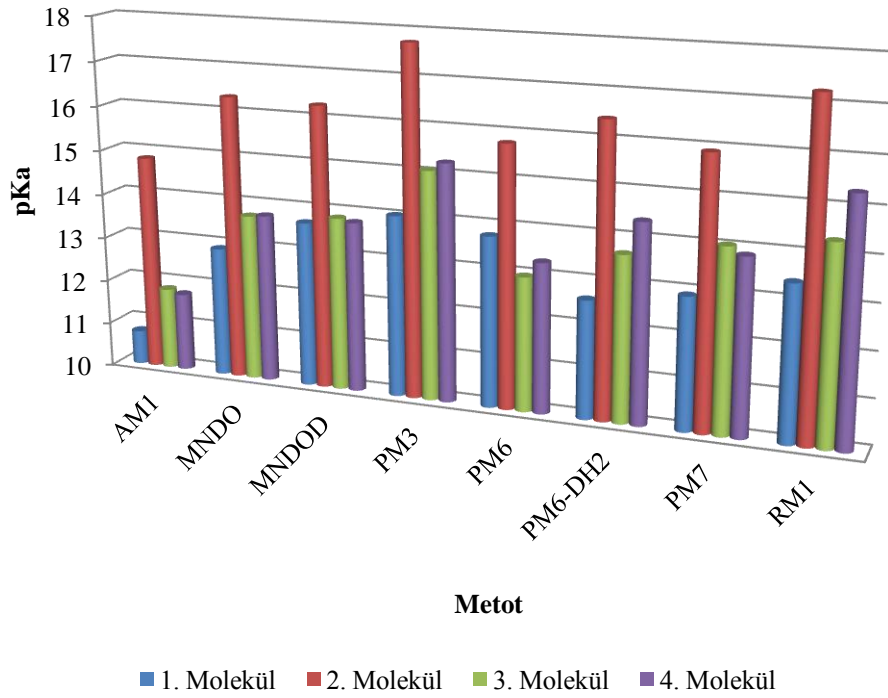
Şekil 21. Metanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



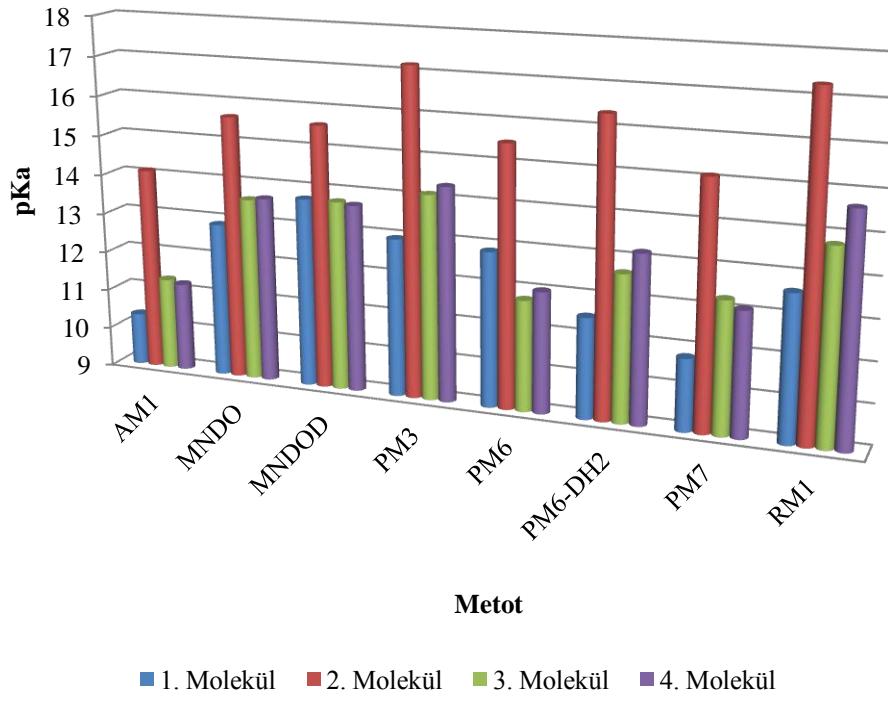
Şekil 22. N-Propanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



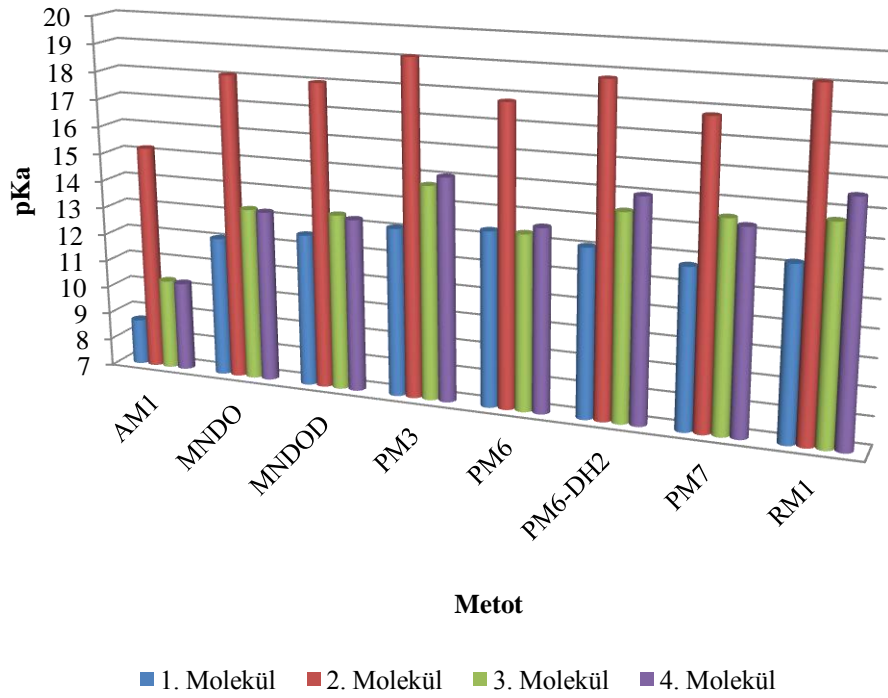
Şekil 23. 2-Propanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



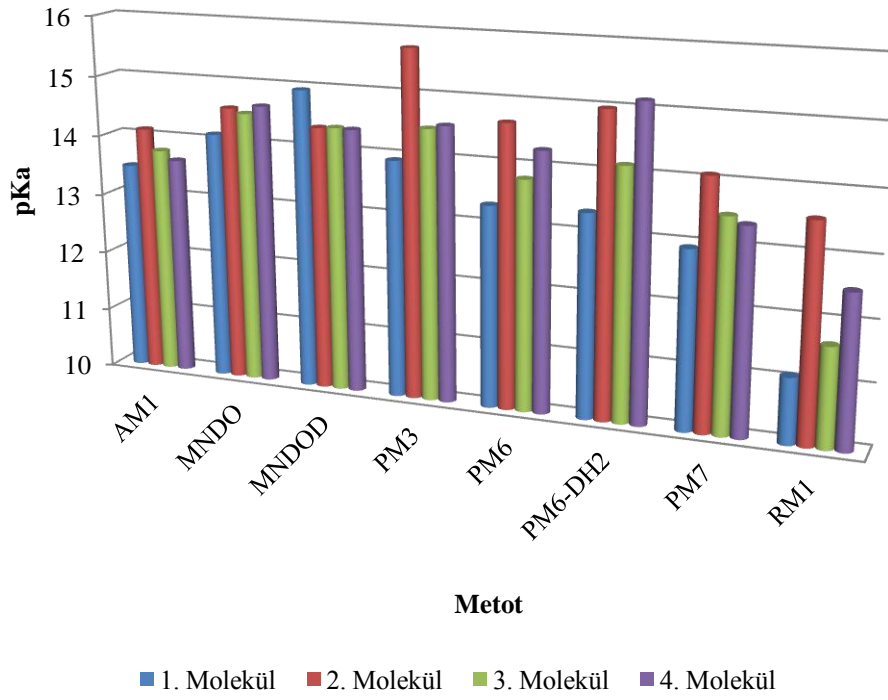
Şekil 24. N-Butanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



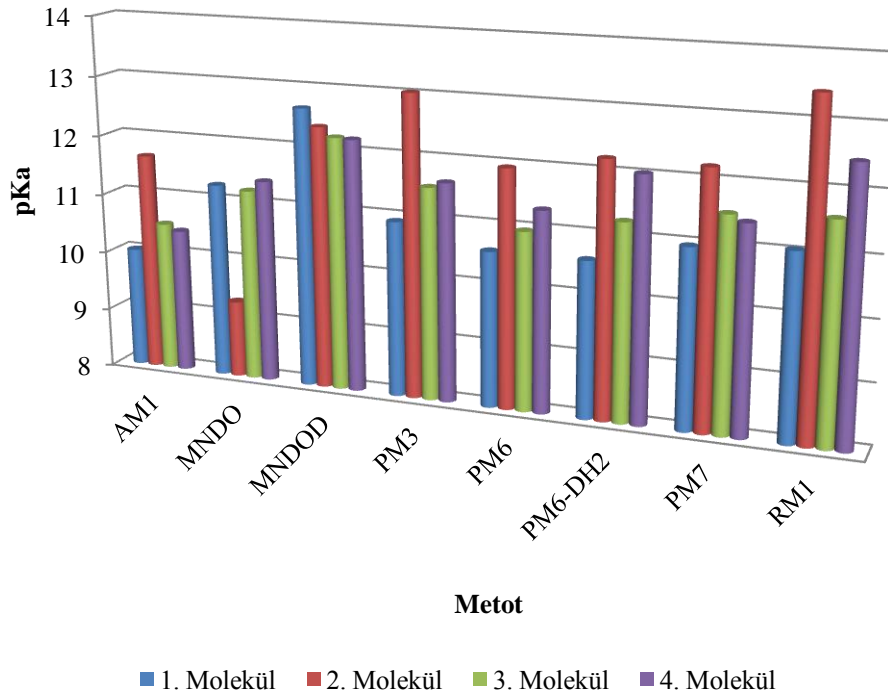
Şekil 25. Tert-Butanol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



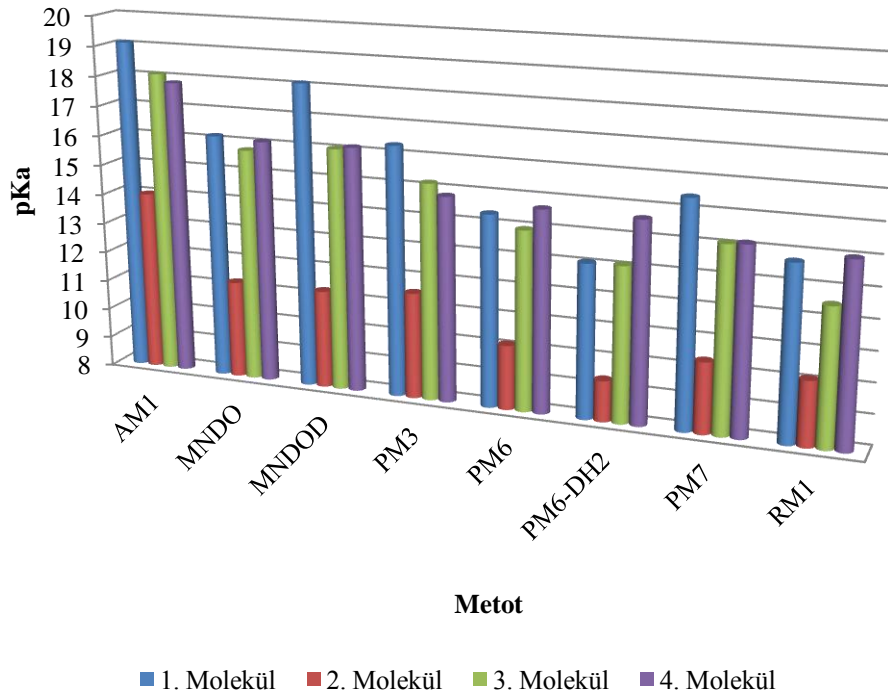
Şekil 26. Etilen glikol ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



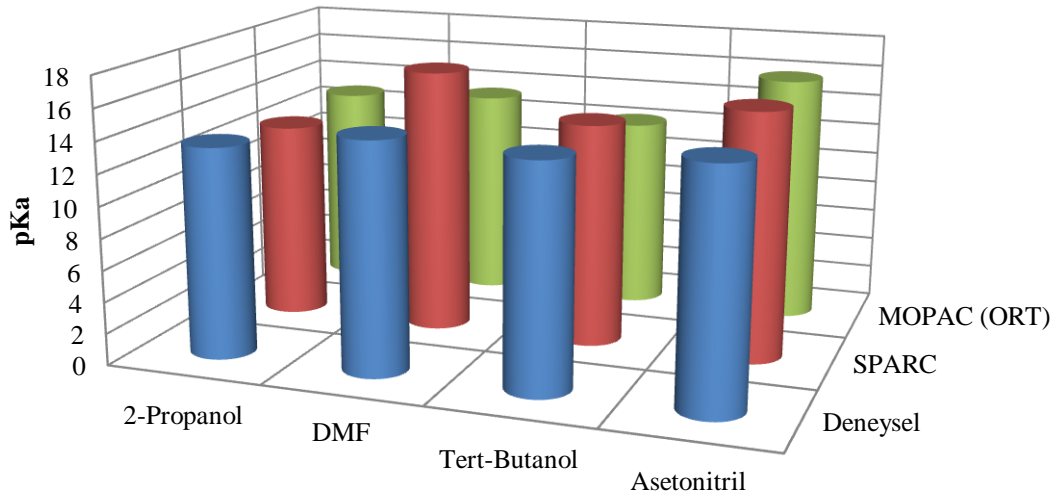
Şekil 27. DMF ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



Şekil 28. DMSO ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması

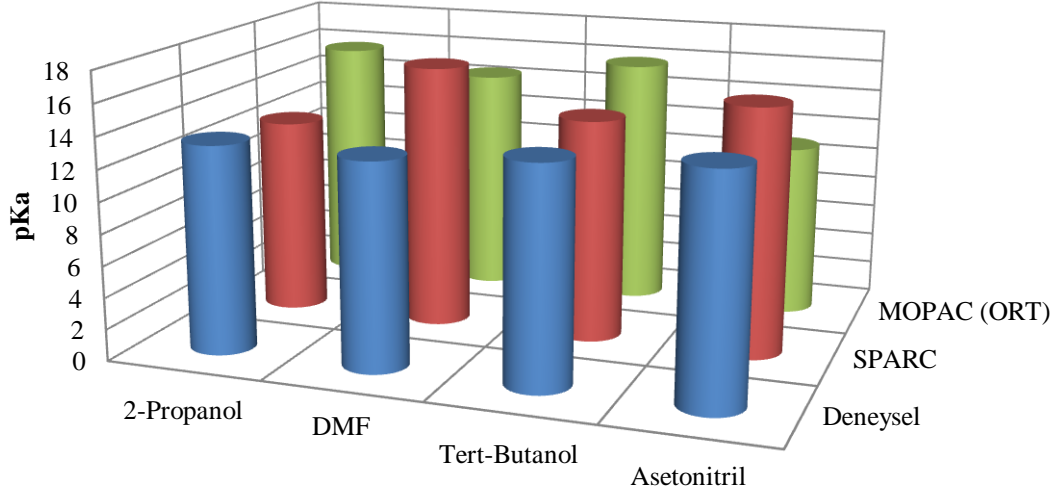


Şekil 29. Asetonitril ortamında moleküllerin pKa değerlerinin karşılaştırılması



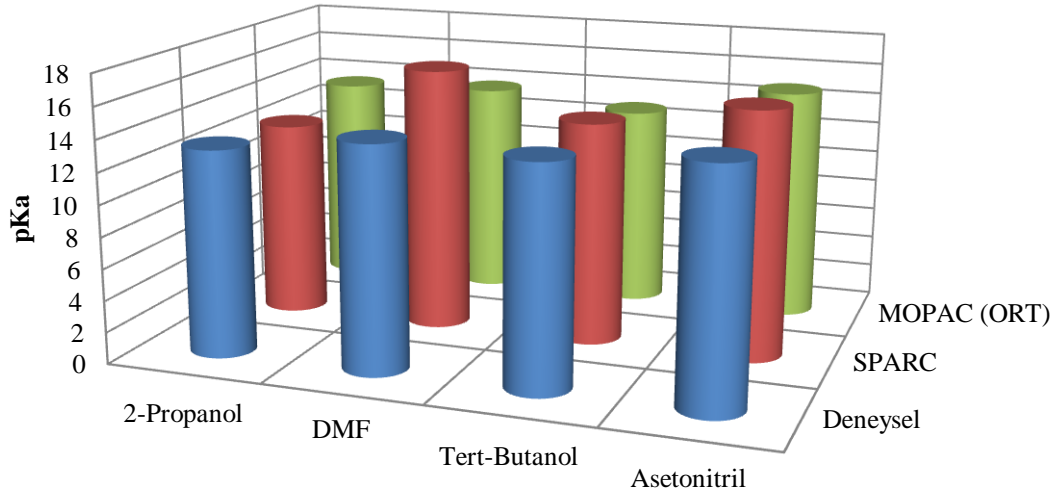
	2-Propanol	DMF	Tert-Butanol	Asetonitril
■ Deneysel	13,40	14,63	14,25	14,88
■ SPARC	12,57	16,84	14,20	15,78
■ MOPAC (ORT)	12,91	13,40	12,22	15,81

Şekil 30. 1. Molekül için deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması (*Deneysel ve SPARC değerleri kaynak (Çakır, 2014)'den alınmıştır.)



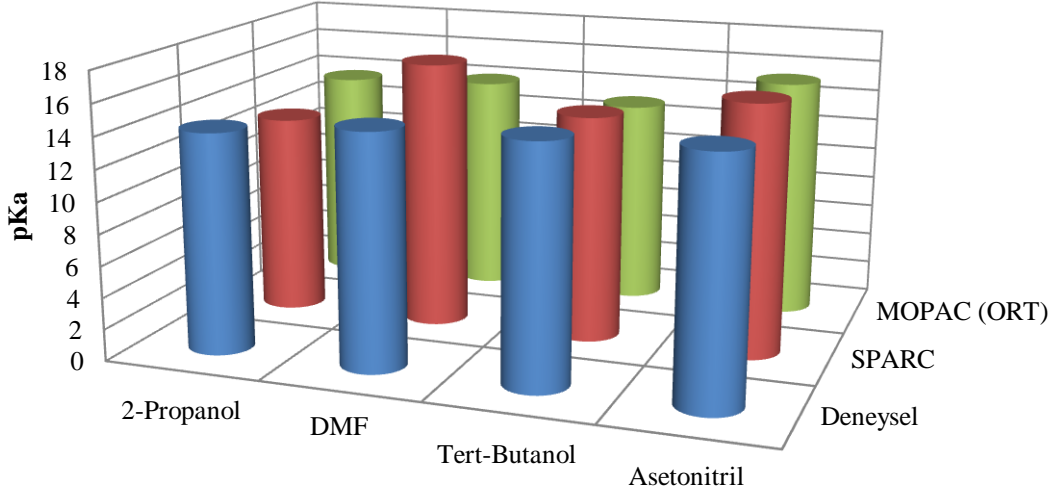
	2-Propanol	DMF	Tert-Butanol	Asetonitril
Deneysel	13,24	13,10	13,84	14,33
SPARC	12,54	16,81	14,16	15,76
MOPAC (ORT)	15,76	14,51	15,86	11,01

Şekil 31. 2. Molekül için deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması (*Deneysel ve SPARC değerleri kaynak (Çakır, 2014)'den alınmıştır.)



	2-Propanol	DMF	Tert-Butanol	Asetonitril
Deneysel	13,14	14,30	14,05	14,80
SPARC	12,54	16,82	14,18	15,76
MOPAC (ORT)	13,46	13,78	12,92	14,88

Şekil 32. 3. Molekül için deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması (*Deneysel ve SPARC değerleri kaynak (Çakır, 2014)'den alınmıştır.)



	2-Propanol	DMF	Tert-Butanol	Asetonitril
■ Deneyisel	14,01	14,85	15,07	15,27
■ SPARC	12,78	17,04	14,40	15,99
■ MOPAC (ORT)	13,70	14,06	13,12	15,32

Şekil 33. 4. Molekül için deneysel ve teorik pKa değerlerinin karşılaştırılması (*Deneyisel ve SPARC değerleri kaynak (Çakır, 2014)'den alınmıştır.)

Dört adet benzimidazol türevi bileşiğindeki halka sisteminde N-H protonunun zayıf asidik özellik gösterdiği bilinir. Sonuçlar çözücülerin dielektrik sabitine göre incelendiğinde teorik olarak asitlik sıralaması dielektrik sabitinin artmasıyla asitlik sabiti artar. Bu sonuca göre asitlik sabiti artışı ; su (D : 78) > DMSO (D : 46) > etilen glikol (D : 38) > DMF (D : 37) > asetonitril (D : 36) > metanol (D : 33) > etanol (D : 24) > n-propanol (D : 20,3) > 2-propanol (D : 19,4) > n-butanol (D : 17,5) > tert-butanol (D : 12) şeklindedir. Elde edilen sonuçlar pK_a değerindeki artışa göre (veya asitlikteki azalmaya göre sıralandığında) incelendiğinde 1. Molekülde;

AM1'e göre, etilenglikol > DMSO > tert-butanol > n-butanol > 2-Propanol > n-propanol > etanol > su > DMF > metanol > asetonitril,

MNDO'ya göre, su > DMSO > etilen glikol > tert-butanol > n-butanol > 2-propanol > n-propanol > etanol > metanol > DMF > asetonitril,

MNDOD'a göre, su > etilen glikol > DMSO > n-butanol > tert-butanol > 2-propanol > n-propanol > etanol > DMF > metanol > asetonitril,

PM3'e göre, DMSO > tert-butanol > etilen glikol > su > 2-propanol > DMF > n-butanol > n-propanol > etanol > asetonitril > metanol,

PM6'ya göre, DMSO > su > tert-butanol > etilen glikol > DMF > 2-propanol > n-butanol > n-propanol > etanol > asetonitril > metanol,

PM6-DH2'ye göre, DMSO > su > tert-butanol > 2-propanol > n-butanol > n-propanol > etanol > etilen glikol > asetonitril > DMF > metanol,

PM7'ye göre, tert-butanol > DMSO > su > 2-propanol > etilen glikol > n-butanol > DMF > n-propanol > etanol > metanol > asetonitril,

RM1'e göre, DMSO > DMF > su > tert-butanol > 2-propanol > etilen glikol > n-butanol > n-propanol > etanol > asetonitril > metanol,

2. Molekülde;

AM1'e göre, DMSO > su > asetonitril > DMF > tert-butanol > 2-propanol > etanol > n-butanol > n-propanol > etilen glikol > metanol,

MNDO'ya göre, DMSO > asetonitril > su > DMF > metanol > tert-butanol > etanol > 2-propanol > n-propanol > n-butanol > etilen glikol,

MNDOD'a göre, asetonitril > su > DMSO > DMF > metanol > tert-butanol > etanol > 2-propanol > n-propanol > n-butanol > etilen glikol,

PM3'e göre, asetonitril > DMSO > su > DMF > etanol > 2-propanol > tert-butanol > n-propanol > n-butanol > etilen glikol > metanol,

PM6'ya göre, asetonitril > su > DMSO > DMF > metanol > etanol > 2-propanol > n-propanol > tert-butanol > n-butanol > etilen glikol,

PM6-DH2'ye göre, asetonitril > su > DMSO > DMF > metanol > etanol > 2-propanol > n-propanol > tert-butanol > n-butanol > etilen glikol

PM7'ye göre, asetonytril > DMSO > su > DMF > tert-butanol > etanol > metanol > 2-propanol > n-propanol > n-butanol > etilen glikol,

RM1'e göre, asetonytril > su > DMSO > DMF > metanol > etanol > 2-propanol > n-propanol > n-butanol > tert-butanol > etilen glikol,

3. Molekülde;

AM1'e göre, etilen glikol > DMSO > tert-butanol > n-butanol > 2-propanol > n-propanol > su > etanol > DMF > metanol > asetonytril,

MNDO'ya göre, DMSO > su > etilen glikol > tert-butanol > n-butanol > 2-propanol > n-propanol > etanol > metanol > DMF > asetonytril,

MNDOD'a göre, su > DMSO > etilen glikol > tert-butanol > n-butanol > 2-propanol > n-propanol > etanol > DMF > metanol > asetonytril,

PM3'e göre, DMSO > su > tert-butanol > DMF > 2-propanol > etilen glikol > n-butanol > asetonytril > n-propanol > etanol > metanol,

PM6'ya göre, DMSO > su > tert-butanol > 2-propanol > n-butanol > n-propanol > etanol > etilen glikol > DMF > asetonytril > metanol,

PM6-DH2'ye göre, DMSO > su > tert-butanol > asetonytril > 2-propanol > n-butanol > n-propanol > etanol > DMF > metanol > etilen glikol,

PM7'ye göre, DMSO > tert-butanol > su > DMF > 2-propanol > n-butanol > asetonytril > n-propanol > etanol > etilen glikol > metanol,

RM1'e göre, DMSO > DMF > su > asetonytril > tert-butanol > 2-propanol > etanol > n-propanol > n-butanol > etilen glikol > metanol,

4. Molekülde;

AM1'e göre, etilen glikol > DMSO > tert-butanol > n-butanol > 2-propanol > n-propanol > su > etanol > DMF > metanol > asetonitril,

MNDO'ya göre, DMSO > su > etilen glikol > tert-butanol > n-butanol > 2-propanol > n-propanol > etanol > metanol > DMF > asetonitril,

MNDOD'a göre, su > DMSO > etilen glikol > tert-butanol > n-butanol > 2-propanol > n-propanol > etanol > DMF > metanol > asetonitril,

PM3'e göre, DMSO > su > tert-butanol > DMF > asetonitril > 2-propanol > etilen glikol > n-butanol > n-propanol > etanol > metanol,

PM6'ya göre, DMSO > tert-butanol > su > 2-propanol > n-butanol > n-propanol > etilen glikol > etanol > DMF > metanol > asetonitril,

PM6-DH2'ye göre, DMSO > su > tert-butanol > 2-propanol > n-butanol > n-propanol > asetonitril > etanol > etilen glikol > DMF > metanol,

PM7'ye göre, DMSO > tert-butanol > su > 2-propanol > DMF > n-butanol > n-propanol > etanol > asetonitril > etilen glikol > metanol,

RM1'e göre, DMSO > DMF > su > asetonitril > tert-butanol > 2-propanol > n-butanol > n-propanol > etanol > etilen glikol > metanol şeklindedir. Bu sıralamaların daha iyi anlaşılabilmesi için bu veriler bir tablo halinde Tablo 38-41'de verilmiştir. Burada asidik kuvvet bakımından 1. molekülün etilen glikol ortamında AM1 metoduna göre ($pK_a = 8,6643$) diğer moleküllere oranla daha kuvvetli, 3. molekülün metanol ortamında PM3 metoduna göre ($pK_a = 21,7097$) diğer moleküllere oranla daha az kuvvetli asidik özellik gösterdiği tespit edilmiştir

Tablo 39. 1. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin sıralanması

AM1	MNDO	MNDOD	PM3	PM6	PM6-DH2	PM7	RM1
Etilen Glikol (8,6643)	Su (10,9529)	Su (12,2115)	DMSO (10,9291)	DMSO (10,5889)	DMSO (10,5990)	Tert-Butanol (10,8030)	DMSO (11,0595)
DMSO (10,0200)	DMSO (11,2656)	Etilen Glikol (12,5502)	Tert-Butanol (12,9670)	Su (11,0015)	Su (10,8246)	DMSO (10,9684)	DMF (11,0905)
Tert-Butanol (10,3152)	Etilen Glikol (12,1020)	DMSO (12,6602)	Etilen Glikol (13,1075)	Tert-Butanol (12,8795)	Tert-Butanol (11,5228)	Su (12,3036)	Su (11,7274)
N-Butanol (10,7655)	Tert-Butanol (12,8937)	N-Butanol (13,6879)	Su (13,4795)	Etilen Glikol (13,3340)	2-Propanol (12,1337)	2-Propanol (12,4301)	Tert-Butanol (12,6220)
2-Propanol (11,2487)	N-Butanol (12,9043)	Tert-Butanol (13,7479)	2-Propanol (13,7896)	DMF (13,3348)	N-Butanol (12,6166)	Etilen Glikol (12,7699)	2-Propanol (13,0950)
N-Propanol (11,6538)	2-Propanol (13,0989)	2-Propanol (13,9812)	DMF (13,9266)	2-Propanol (13,4737)	N-Propanol (12,7521)	N-Butanol (12,9241)	Etilen Glikol (13,2089)
Etanol (12,4839)	N-Propanol (13,1576)	N-Propanol (14,0265)	N-Butanol (14,0360)	N-Butanol (13,7850)	Etanol (12,9076)	DMF (12,9398)	N-Butanol (13,4206)
Su (12,6123)	Etanol (13,4850)	Etanol (14,4134)	N-Propanol (14,4353)	N-Propanol (14,0254)	Etilen Glikol (13,0896)	N-Propanol (13,3050)	N-Propanol (13,5953)
DMF (13,4777)	Metanol (13,9481)	DMF (14,9544)	Etanol (14,8015)	Etanol (14,2309)	Asetonitril (13,1109)	Etanol (13,5229)	Etanol (13,7360)
Metanol (14,0404)	DMF (14,1169)	Metanol (15,0127)	Asetonitril (16,3400)	Asetonitril (14,3870)	DMF (13,3575)	Metanol (14,8017)	Asetonitril (13,7657)
Asetonitril (19,1033)	Asetonitril (16,1863)	Asetonitril (18,1276)	Metanol (21,6181)	Metanol (20,1580)	Metanol (13,6002)	Asetonitril (15,4594)	Metanol (14,5410)

Tablo 40. 2. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin sıralanması

AM1	MNDO	MNDOD	PM3	PM6	PM6-DH2	PM7	RM1
DMSO (11,6590)	DMSO (9,2873)	Asetonitril (11,2743)	Asetonitril (11,5404)	Asetonitril (10,1476)	Asetonitril (9,3602)	Asetonitril (10,3596)	Asetonitril (10,1580)
Su (12,8387)	Asetonitril (11,2524)	Su (11,4522)	DMSO (13,0297)	Su (11,4285)	Su (11,7650)	DMSO (12,2174)	Su (12,9556)
Asetonitril (14,0206)	Su (11,5042)	DMSO (12,3763)	Su (13,4776)	DMSO (11,9532)	DMSO (12,2221)	Su (12,2397)	DMSO (13,4350)
DMF (14,1150)	DMF (14,5731)	DMF (14,3621)	DMF (15,7330)	DMF (14,6631)	DMF (14,9855)	DMF (14,0904)	DMF (13,5545)
Tert-Butanol (14,1154)	Metanol (15,4001)	Metanol (15,3588)	Etanol (17,0424)	Metanol (14,9519)	Metanol (15,1429)	Tert-Butanol (15,1149)	Metanol (16,3196)
2-Propanol (14,4381)	Tert-Butanol (15,6448)	Tert-Butanol (15,6047)	2-Propanol (17,0630)	Etanol (14,9532)	Etanol (15,4734)	Etanol (15,1384)	Etanol (16,3555)
Etanol (14,8150)	Etanol (15,6553)	Etanol (15,6235)	Tert-Butanol (17,1972)	2-Propanol (15,2352)	2-Propanol (15,8587)	Metanol (15,2107)	2-Propanol (16,7201)
N-Butanol (14,8274)	2-Propanol (15,7493)	2-Propanol (15,7107)	N-Propanol (17,4265)	N-Propanol (15,4158)	N-Propanol (15,9343)	2-Propanol (15,3334)	N-Propanol (16,8238)
N-Propanol (14,8548)	N-Propanol (15,9877)	N-Propanol (15,9476)	N-Butanol (17,7557)	Tert-Butanol (15,5204)	Tert-Butanol (16,3730)	N-Propanol (15,5997)	N-Butanol (17,2547)
Etilen Glikol (15,2161)	N-Butanol (16,3455)	N-Butanol (16,2998)	Etilen Glikol (19,1142)	N-Butanol (15,7887)	N-Butanol (16,4406)	N-Butanol (15,9247)	Tert-Butanol (17,3149)
Metanol (15,4228)	Etilen Glikol (18,0861)	Etilen Glikol (18,0213)	Metanol (21,4461)	Etilen Glikol (17,8097)	Etilen Glikol (18,7911)	Etilen Glikol (17,8083)	Etilen Glikol (19,0870)

Tablo 41. 3. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin sıralanması

AM1	MNDO	MNDOD	PM3	PM6	PM6-DH2	PM7	RM1
Etilen Glikol (10,2924)	DMSO (11,2144)	Su (11,8082)	DMSO (11,5372)	DMSO (10,9671)	DMSO (11,2638)	DMSO (11,5241)	DMSO (11,5884)
DMSO (10,5112)	Su (11,4839)	DMSO (12,2229)	Su (13,4773)	Su (11,5462)	Su (11,6034)	Tert-Butanol (12,2941)	DMF (11,6443)
Tert-Butanol (11,3161)	Etilen Glikol (13,2903)	Etilen Glikol (13,3880)	Tert-Butanol (14,1347)	Tert-Butanol (11,7763)	Tert-Butanol (12,6676)	Su (12,6070)	Su (11,7826)
N-Butanol (11,8325)	Tert-Butanol (13,6040)	Tert-Butanol (13,7516)	DMF (14,4780)	2-Propanol (12,4776)	Asetonitril (13,1458)	DMF (13,4964)	Asetonitril (12,5495)
2-Propanol (12,1164)	N-Butanol (13,7207)	N-Butanol (13,8602)	2-Propanol (14,7168)	N-Butanol (12,9772)	2-Propanol (13,1502)	2-Propanol (13,5155)	Tert-Butanol (13,7916)
N-Propanol (12,5285)	2-Propanol (13,7984)	2-Propanol (13,9498)	Etilen Glikol (14,7322)	N-Propanol (13,1564)	N-Butanol (13,6668)	N-Butanol (14,0471)	2-Propanol (13,9533)
Su (12,8114)	N-Propanol (13,8859)	N-Propanol (14,0361)	N-Butanol (15,0793)	Etanol (13,2573)	N-Propanol (13,7202)	Asetonitril (14,1415)	Etanol (14,2985)
Etanol (13,1636)	Etanol (14,1195)	Etanol (14,2544)	Asetonitril (15,2103)	Etilen Glikol (13,3415)	Etanol (13,7979)	N-Propanol (14,2178)	N-Propanol (14,3336)
DMF (13,7710)	Metanol (14,4829)	DMF (14,3811)	N-Propanol (15,2941)	DMF (13,7962)	DMF (14,1383)	Etanol (14,2311)	N-Butanol (14,3342)
Metanol (14,5145)	DMF (14,5028)	Metanol (14,6451)	Etanol (15,4699)	Asetonitril (13,9798)	Metanol (14,3795)	Etilen Glikol (14,5145)	Etilen Glikol (14,7090)
Asetonitril (18,1162)	Asetonitril (15,7921)	Asetonitril (16,0767)	Metanol (21,7097)	Metanol (14,1420)	Etilen Glikol (14,4163)	Metanol (15,1606)	Metanol (14,8525)

Tablo 42. 4. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin sıralanması

AM1	MNDO	MNDOD	PM3	PM6	PM6-DH2	PM7	RM1
Etilen Glikol (10,2566)	DMSO (11,3967)	Su (11,9969)	DMSO (11,6339)	DMSO (11,3305)	DMSO (12,0309)	DMSO (11,4148)	DMSO (12,4622)
DMSO (10,4141)	Su (11,5218)	DMSO (12,2097)	Su (13,4283)	Tert-Butanol (12,0312)	Su (12,7327)	Tert-Butanol (12,0988)	DMF (12,5156)
Tert-Butanol (11,2360)	Etilen Glikol (13,2434)	Etilen Glikol (13,2780)	Tert-Butanol (14,3632)	Su (12,1082)	Tert-Butanol (13,1976)	Su (12,5275)	Su (12,9260)
N-Butanol (11,7498)	Tert-Butanol (13,6625)	Tert-Butanol (13,7007)	DMF (14,5442)	2-Propanol (12,8086)	2-Propanol (13,8444)	2-Propanol (13,3493)	Asetonitril (14,0350)
2-Propanol (12,0201)	N-Butanol (13,7587)	N-Butanol (13,7967)	Asetonitril (14,8351)	N-Butanol (13,3243)	N-Butanol (14,3935)	DMF (13,3767)	Tert-Butanol (14,6687)
N-Propanol (12,4278)	2-Propanol (13,8622)	2-Propanol (13,9007)	2-Propanol (14,8796)	N-Propanol (13,5381)	N-Propanol (14,5220)	N-Butanol (13,8749)	2-Propanol (14,9386)
Su (12,6244)	N-Propanol (13,9450)	N-Propanol (13,9837)	Etilen Glikol (15,0766)	Etilen Glikol (13,6190)	Asetonitril (14,6616)	N-Propanol (14,0631)	N-Butanol (15,3368)
Etanol (13,0454)	Etanol (14,2019)	Etanol (14,2135)	N-Butanol (15,2705)	Etanol (13,6712)	Etanol (14,6739)	Etanol (14,0943)	N-Propanol (15,3891)
DMF (13,6258)	Metanol (14,5918)	DMF (14,3697)	N-Propanol (15,4360)	DMF (14,2721)	Etilen Glikol (14,9995)	Asetonitril (14,1828)	Etanol (15,4038)
Metanol (14,3699)	DMF (14,6433)	Metanol (14,6178)	Etanol (15,5614)	Metanol (14,6338)	DMF (15,1460)	Etilen Glikol (14,2854)	Etilen Glikol (15,5683)
Asetonitril (17,8542)	Asetonitril (16,1166)	Asetonitril (16,1663)	Metanol (21,6178)	Asetonitril (14,6994)	Metanol (15,4169)	Metanol (15,0495)	Metanol (16,0828)

Sonuçlar otoprotoliz sabitine göre incelendiğinde çözücülerin otoprotoliz sabiti değerlerinin küçükten büyüğe doğru sıralanışı; su (pKs = 14), etilen glikol (pKs = 15,8), metanol (pKs = 16,5), DMF (pKs = 18), etanol (pKs = 18,7), n-propanol (pKs = 19,2), 2-propanol (pKs = 20,6), n-butanol (pKs = 21,6), tert-butanol (pKs = 22), asetonitril (pKs = 33) ve DMSO (pKs = 33) şeklindedir. 1. molekül, n-butanol ortamında AM1 ve tert-butanol ortamında AM1, PM7 metoduna göre, 2. molekül, DMSO ortamında MNDO, AM1, PM6, PM7, PM6-DH2, MNDOD, PM3, RM1 ve asetonitril ortamında PM6-DH2, PM6, RM1, PM7, MNDO, MNDOD, PM3, AM1 metoduna göre, 3. molekül, DMSO ortamında AM1, PM6, MNDO, PM6-DH2, PM7, PM3, RM1, MNDOD ve asetonitril ortamında RM1, PM6-DH2, PM6, PM7, PM3, MNDO, MNDOD, metoduna göre, 4. molekül, DMSO ortamında AM1, PM6, MNDO, PM7, PM3, PM6-DH2, MNDOD, RM1 ve asetonitril ortamında RM1, PM7, PM6-DH2, PM6, PM3, MNDO, MNDOD metoduna göre diğer metodlara göre daha fazla asidik özelliğe sahip olduğu gözlenmiştir. Burada yapılan değerlendirmeyi tablosal olarak ifade etmek gerekirse, elde edilen değerlerin her bir çözücü ortamında metotlara göre değişimi Tablo 42-45 arasında verilmiştir.

Çözücülerin farklıdırma ve seviyeleme etkileri incelendiğinde tüm bileşiklerin çalışılan çözücüler içerisinde farklıdırıldığı görülmüştür.

Tablo 43. 1. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin çalışılan modellere göre sıralanması

Su	Etanol	Metanol	N-Propanol	2-Propanol	N-Butanol	Tert-Butanol	Etilen Glikol	DMF	DMSO	Asetonitril
PM6-DH2 (10,8246)	AM1 (12,4839)	PM6-DH2 (13,6002)	AM1 (11,6538)	AM1 (11,2487)	AM1 (10,7655)	AM1 (10,3152)	AM1 (8,6643)	RM1 (11,0905)	AM1 (10,0200)	PM6-DH2 (13,1109)
MNDO (10,9529)	PM6-DH2 (12,9076)	MNDO (13,9481)	PM6-DH2 (12,7521)	PM6-DH2 (12,1337)	PM6-DH2 (12,6166)	PM7 (10,8030)	MNDO (12,1020)	PM7 (12,9398)	PM6 (10,5889)	RM1 (13,7657)
PM6 (11,0015)	MNDO (13,4850)	AM1 (14,0404)	MNDO (13,1576)	PM7 (12,4301)	MNDO (12,9043)	PM6-DH2 (11,5228)	MNDOD (12,5502)	PM6 (13,3348)	PM6-DH2 (10,5990)	PM6 (14,3870)
RM1 (11,7274)	PM7 (13,5229)	RM1 (14,5410)	PM7 (13,3050)	RM1 (13,0950)	PM7 (12,9241)	RM1 (12,6220)	PM7 (12,7699)	PM6-DH2 (13,3575)	PM3 (10,9291)	PM7 (15,4594)
MNDOD (12,2115)	RM1 (13,7360)	PM7 (14,8017)	RM1 (13,5953)	MNDO (13,0989)	RM1 (13,4206)	PM6 (12,8795)	PM6-DH2 (13,0896)	AM1 (13,4777)	PM7 (10,9684)	MNDO (16,1863)
PM7 (12,3036)	PM6 (14,2309)	MNDOD (15,0127)	PM6 (14,0254)	PM6 (13,4737)	MNDOD (13,6879)	MNDO (12,8937)	PM3 (13,1075)	PM3 (13,9266)	RM1 (11,0595)	PM3 (16,3400)
AM1 (12,6123)	MNDOD (14,4134)	PM6 (20,1580)	MNDOD (14,0265)	PM3 (13,7896)	PM6 (13,7850)	PM3 (12,9670)	RM1 (13,2089)	MNDO (14,1169)	MNDO (11,2656)	MNDOD (18,1276)
PM3 (13,4795)	PM3 (14,8015)	PM3 (21,6181)	PM3 (14,4353)	MNDOD (13,9812)	PM3 (14,0360)	MNDOD (13,7479)	PM6 (13,3340)	MNDOD (14,9544)	MNDOD (12,6602)	AM1 (19,1033)

Tabo 44. 2. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin çalışılan modellere göre sıralanması

Su	Etanol	Metanol	N-Propanol	2-Propanol	N-Butanol	Tert-Butanol	Etilen Glikol	DMF	DMSO	Asetonitril
PM6 (11,4285)	AM1 (14,8150)	PM6 (14,9519)	AM1 (14,8548)	AM1 (14,4381)	AM1 (14,8274)	AM1 (14,1154)	AM1 (15,2161)	RM1 (13,5545)	MNDO (9,2873)	PM6-DH2 (9,3602)
MNDOD (11,4522)	PM6 (14,9532)	PM6-DH2 (15,1429)	PM6 (15,4158)	PM6 (15,2352)	PM6 (15,7887)	PM7 (15,1149)	PM7 (17,8083)	PM7 (14,0904)	AM1 (11,6590)	PM6 (10,1476)
MNDO (11,5042)	PM7 (15,1384)	PM7 (15,2107)	PM7 (15,5997)	PM7 (15,3334)	PM7 (15,9247)	PM6 (15,5204)	PM6 (17,8097)	AM1 (14,1150)	PM6 (11,9532)	RM1 (10,1580)
PM6-DH2 (11,7650)	PM6-DH2 (15,4734)	MNDOD (15,3588)	PM6-DH2 (15,9343)	MNDOD (15,7107)	MNDOD (16,2998)	MNDOD (15,6047)	MNDOD (18,0213)	MNDOD (14,3621)	PM7 (12,2174)	PM7 (10,3596)
PM7 (12,2397)	MNDOD (15,6235)	MNDO (15,4001)	MNDOD (15,9476)	MNDO (15,7493)	MNDO (16,3455)	MNDO (15,6448)	MNDO (18,0861)	MNDO (14,5731)	PM6-DH2 (12,2221)	MNDO (11,2524)
AM1 (12,8387)	MNDO (15,6553)	AM1 (15,4228)	MNDO (15,9877)	PM6-DH2 (15,8587)	PM6-DH2 (16,4406)	PM6-DH2 (16,3730)	PM6-DH2 (18,7911)	PM6 (14,6631)	MNDOD (12,3763)	MNDOD (11,2743)
RM1 (12,9556)	RM1 (16,3555)	RM1 (16,3196)	RM1 (16,8238)	RM1 (16,7201)	RM1 (17,2547)	PM3 (17,1972)	RM1 (19,0870)	PM6-DH2 (14,9855)	PM3 (13,0297)	PM3 (11,5404)
PM3 (13,4776)	PM3 (17,0424)	PM3 (21,4461)	PM3 (17,4265)	PM3 (17,0630)	PM3 (17,7557)	RM1 (17,3149)	PM3 (19,1142)	PM3 (15,7330)	RM1 (13,4350)	AM1 (14,0206)

Tablo 45. 3. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin çalışılan modellere göre sıralanması

Su	Etanol	Metanol	N-Propanol	2-Propanol	N-Butanol	Tert-Butanol	Etilen Glikol	DMF	DMSO	Asetonitril
MNDO (11,4839)	AM1 (13,1636)	PM6 (14,1420)	AM1 (12,5285)	AM1 (12,1164)	AM1 (11,8325)	AM1 (11,3161)	AM1 (10,2924)	RM1 (11,6443)	AM1 (10,5112)	RM1 (12,5495)
PM6 (11,5462)	PM6 (13,2573)	PM6-DH2 (14,3795)	PM6 (13,1564)	PM6 (12,4776)	PM6 (12,9772)	PM6 (11,7763)	MNDO (13,2903)	PM7 (13,4964)	PM6 (10,9671)	PM6-DH2 (13,1458)
PM6-DH2 (11,6034)	PM6-DH2 (13,7979)	MNDO (14,4829)	PM6-DH2 (13,7202)	PM6-DH2 (13,1502)	PM6-DH2 (13,6668)	PM7 (12,2941)	PM6 (13,3415)	AM1 (13,7710)	MNDO (11,2144)	PM6 (13,9798)
RM1 (11,7826)	MNDO (14,1195)	AM1 (14,5145)	MNDO (13,8859)	PM7 (13,5155)	MNDO (13,7207)	PM6-DH2 (12,6676)	MNDOD (13,3880)	PM6 (13,7962)	PM6-DH2 (11,2638)	PM7 (14,1415)
MNDOD (11,8082)	PM7 (14,2311)	MNDOD (14,6451)	MNDOD (14,0361)	MNDO (13,7984)	MNDOD (13,8602)	MNDO (13,6040)	PM6-DH2 (14,4163)	PM6-DH2 (14,1383)	PM7 (11,5241)	PM3 (15,2103)
PM7 (12,6070)	MNDOD (14,2544)	RM1 (14,8525)	PM7 (14,2178)	MNDOD (13,9498)	PM7 (14,0471)	MNDOD (13,7516)	PM7 (14,5145)	MNDOD (14,3811)	PM3 (11,5372)	MNDO (15,7921)
AM1 (12,8114)	RM1 (14,2985)	PM7 (15,1606)	RM1 (14,3336)	RM1 (13,9533)	RM1 (14,3342)	RM1 (13,7916)	RM1 (14,7090)	PM3 (14,4780)	RM1 (11,5884)	MNDOD (16,0767)
PM3 (13,4773)	PM3 (15,4699)	PM3 (21,7097)	PM3 (15,2941)	PM3 (14,7168)	PM3 (15,0793)	PM3 (14,1347)	PM3 (14,7322)	MNDO (14,5028)	MNDOD (12,2229)	AM1 (18,1162)

Tablo 46. 4. Molekülün çalışılan çözücü ortamına göre pKa değerlerinin çalışılan modellere göre sıralanması

Su	Etanol	Metanol	N-Propanol	2-Propanol	N-Butanol	Tert-Butanol	Etilen Glikol	DMF	DMSO	Asetonitril
MNDO (11,5218)	AM1 (13,0454)	AM1 (14,3699)	AM1 (12,4278)	AM1 (12,0201)	AM1 (11,7498)	AM1 (11,2360)	AM1 (10,2566)	RM1 (12,5156)	AM1 (10,4141)	RM1 (14,0350)
MNDOD (11,9969)	PM6 (13,6712)	MNDO (14,5918)	PM6 (13,5381)	PM6 (12,8086)	PM6 (13,3243)	PM6 (12,0312)	MNDO (13,2434)	PM7 (13,3767)	PM6 (11,3305)	PM7 (14,1828)
PM6 (12,1082)	PM7 (14,0943)	MNDOD (14,6178)	MNDO (13,9450)	PM7 (13,3493)	MNDO (13,7587)	PM7 (12,0988)	MNDOD (13,2780)	AM1 (13,6258)	MNDO (11,3967)	PM6-DH2 (14,6616)
PM7 (12,5275)	MNDO (14,2019)	PM6 (14,6338)	MNDOD (13,9837)	PM6-DH2 (13,8444)	MNDOD (13,7967)	PM6-DH2 (13,1976)	PM6 (13,6190)	PM6 (14,2721)	PM7 (11,4148)	PM6 (14,6994)
AM1 (12,6244)	MNDOD (14,2135)	PM7 (15,0495)	PM7 (14,0631)	MNDO (13,8622)	PM7 (13,8749)	MNDO (13,6625)	PM7 (14,2854)	MNDOD (14,3697)	PM3 (11,6339)	PM3 (14,8351)
PM6-DH2 (12,7327)	PM6-DH2 (14,6739)	PM6-DH2 (15,4169)	PM6-DH2 (14,5220)	MNDOD (13,9007)	PM6-DH2 (14,3935)	MNDOD (13,7007)	PM6-DH2 (14,9995)	PM3 (14,5442)	PM6-DH2 (12,0309)	MNDO (16,1166)
RM1 (12,9260)	RM1 (15,4038)	RM1 (16,0828)	RM1 (15,3891)	PM3 (14,8796)	PM3 (15,2705)	PM3 (14,3632)	PM3 (15,0766)	MNDO (14,6433)	MNDOD (12,2097)	MNDOD (16,1663)
PM3 (13,4283)	PM3 (15,5614)	PM3 (21,6178)	PM3 (15,4360)	RM1 (14,9386)	RM1 (15,3368)	RM1 (14,6687)	RM1 (15,5683)	PM6-DH2 (15,1460)	RM1 (12,4622)	AM1 (17,8542)

5. ÖNERİLER

Yüksek lisans tezimizde çalıştığımız fenil[2-(2-bromobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (1. Molekül), fenil[2-(2-florobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (2. Molekül), fenil[2-(2-klorobenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (3. Molekül) ve fenil[2-(2-metilbenzil)-1*H*-1,3-benzimidazol-5-il]metanon (4. Molekül) bileşikleri dışında daha çok benzimidazol türevi bileşiklerin pKa değerleri hesaplamaları MOPAC 2012 bilgisayar programı ile daha farklı çözücü gruplarında yer alan birçok çözücü içerisinde yapılabilir. Özellikle deneysel olarak voltametri, kalorimetri, nükleer magnetikrezonans (NMR), elektroforez, yüksek performanslı sıvı kromatografi (HPLC), UV/GB spektroskopisi, florometri, polarimetri, kinetik metotlar gibi farklı metotlar kullanılarak çalışmalar daha da zenginleştirilebilir.

Günümüzde pKa'nın belirlenmesinde de birçok bilgisayar programları mevcuttur ve birçok çalışmada yaygın şekilde kullanılmaktadır. Bu programlardan bazıları seçilmek suretiyle bu moleküller için hesaplama yapılabilir ve sonuçlar karşılaştırılabilir. Böylece metotlar arasında karşılaştırma imkanı da doğmuş olur.

KAYNAKLAR

- Açıklalp, E., Özöğüt, D. ve Fidan, S., 2011.** 1,2,4-Triazol ve Türevlerinin pKa'larının Teorik Hesaplanması. Eskişehir Osmangazi Üniversitesi Mühendislik Mimarlık Fakültesi Dergisi, 24(2), 51-69
- Arslan, T., 2005.** Schiff Bazları ve Schiff Bazlarının Lantanit Kompleksleri Üzerinde Deneysel ve Teorik Çalışmalar. Doktora Tezi. İonnina Üniversitesi, Yunanistan ve Osmangazi Üniversitesi, Kimya Bölümü, Eskişehir.
- Badger, G.M., 1961.** The Chemistry of Heterocyclic Compounds, Acedemic Press.
- Benito J., Garcia, M., Blanco, J., Mettet C. ve Fernandez J., 2001.** Carbohydrate-based Receptors with Multiple Thiourea Binding Sites. Multipoint Hydrogen Bond Recognition of Dicarboxylates and Monosaccharides. Journal of Organic Chemistry, 66, 1366-1372.
- Cundari, T.R., 2001.** Computational Organometallic Chemistry. Marcel Dekker Inc., 428, New York.
- Çakır, K., 2014.** Mebendazol Çekirdeği İçeren Bazı 2-Substitüe Benzimidazol Türevi Bileşiklerin pKa Değerlerinin Deneysel ve Teorik Olarak Belirlenmesi. Yüksek Lisans Tezi. Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kimya Anabilim Dalı, Rize.
- Çelik, İ., Akkurt, M., İde, S., Tutar, A., ve Çakmak, O., 2003.** C₇H₈Br₄ Molekülünün Konformasyon Analizi ve Kuantum Mekanik Yöntemle Optimizasyonu, Elde Edilen Elektronik ve Yapısal Parametrelerin X-Isınları Yapı Analiz Sonuçları ile Karşılaştırılması. Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Dergisi, 16(1), 27-35.
- Demirmen, S., 2014.** Piridil-Benzimidazol Ligantları İçeren Metal Komplekslerinin Sentezi, Karakterizasyonu Ve Katalitik Özellikleri. Yüksek Lisans Tezi. Çanakkale Onsekiz Mart Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kimya Anabilim Dalı, Çanakkale.
- Demirtas, E., 2003.** Bazı Piridin N-Oksit Türevlerinin Asitlik-Bazlık Davranışlarının Teorik Olarak İncelenmesi. Yüksek Lisans Tezi. Osmangazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Eskişehir.
- Dennehy, M., Ferullo, R.M., Quinzani, O.V., Mandolesi, Castellani, N. And Jennings M., 2008.** Unusual coordination in a silver thionate complex. Synthesis, structural characterization and theoretical calculations of dinuclear and polynuclear silver(I) thiosaccharinates with pyridine and 1,10-phenanthroline. Polyhedron, 27, 2243-2250.

- Erdogdu, E., 2003.** Bazı Tienil ve Fenil Piridin Türevlerinin Asitlik Ve Bazlıkları Üzerine Kuantum Kimyasal Çalışmalar.Yüksek Lisans Tezi. Osmangazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Eskişehir.
- Ermeç, M., 2008.** 2,4 ve 6-bromonikotinik Asit Moleküllerinin ve Yapılarının Titresim Spektroskopisi Yöntemiyle Deneysel ve Teorik Olarak İncelenmesi. Yüksek Lisans Tezi, Afyon Kocatepe Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, 113, Afyonkarahisar.
- Foresman, J.B. and Frisch, Æ., 1996.** Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods. GaussianInc., 2.Edition, 303 p., Pittsburgh, PA.
- Gündüz T., 1993.** Kalilalif Analiz Ders Kitabı. Bilge Yayıncılık.
- Güven M., 2000.** Benzimidazol Türevlerinin Sentez ve Özelliklerinin İncelenmesi. Yüksek Lisans Tezi. İnönü Üniversitesi, Malatya.
- Hofmann, K., 1953.** Imidazoleandits Derivatives. Interscience Publishers, New York.
- Irikura, K.K. and Frurip, D.J., 1998.** ACS Symposium Series, Computational Thermochemistry, Prediction ND Estimation of Molecular Thermodynamics. American Chemical Society, 470, USA.
- Klimešová V., Koci J., Pour M., Stachel J., Waisser K. ve Kaustová J., 2002.** Synthesisand Preliminary Evaluation of Benzimidazole Derivatives as Antimicrobial Agents. Journal Medical Chemistry, 37, 409-418.
- Kollman, P., 1985.** Theory of Complex Molecular Interactions: Computer Graphics, Distance Geometry, Molecular Mechanics, and Quantum Mechanics. 18, 105-111.
- Koyuncu, G.Ü., 2009.** Bazı Biyolojik Aktif Heterosiklik Bilesikler Üzerinde Teorik Çalışmalar. Doktora Tezi, Osman Gazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, 214, Eskişehir.
- Maseras, F. and Lledós, A., 2002.** Computational Modeling of Homogeneous Catalysis. Kluwer Academic Publishers, 365, Dordrecht.
- Menteşe, E., 2013.** Efficient Microwave-Assisted Synthesis of Some New Benzimidazoles Containing the Mebendazole Nucleus. Journal of Chemical Research, 37(3), 168-170.
- Özel S., 2006.** Halkalı Tiyoüreler ve N-Substitüe Türevlerinin Sentezi. Yüksek Lisans Tezi. Fırat Üniversitesi, Elazığ.
- Özöğüt, D. ve Kalafatçıoğlu, N., 2011.**Theoretical Studieson Acid-Base Behaviour of Some Alkyl Substituted Pyridine Derivatives. Journal of Engineering and Architecture Faculty of Eskişehir Osmangazi University, 24(2), 145-165.

- Öztürk Yıldırım, S. ve Akkurt M., 2008.** 2-Hidroksi-1,2difenil-ethanonun CNDO/2 Yaklaşımı ile Konformasyonunun Tayini ve X-ışınları Yapı Analiz Sonuçlarının Karşılaştırılması. Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi, 24(1-2), 191-201.
- Rogers K.S. ve Clayton C.C., 1972.** Effects of pH on Benzimidazole Fluorescence. Analytical Biochemistry, 48: 199-201.
- Schoone, K., Smets, J., Ramaekers, R., Houben, L., Adamowicz, L. And Maes, G., 2003.** Correlations between experimental matrix-isolation FT-IR and DFT(B3LYP) calculated data for isolated 1:1 H-bonded complexes of water and pyridine or imidazole derivatives. Journal of Molecular Structure, 649, 61–68.
- Shoeb, T. and Sharp, B.L., 2009.** A structural and free energy analysis of Ag⁺ complexes to five small peptides. Inorganica Chimica Acta, 362, 1925-1934.
- Solomons, T.W.G., 1996.** Organic Chemistry, 6th edition., John Wiley&Sons,USA.
- Solomons, T.W.G., 2002.** Organic Chemistry, 7th edition.
- Tarı, Ö., 2011.** Bazı Yeni Heterosiklik Yapı Taşıyan Bileşiklerin Sentezi, Yapılarının Aydınlatılması ve Biyolojik Etkilerinin Araştırılması. Yüksek Lisans Tezi. Mersin Üniversitesi, Mersin.
- Tezcan, H. ve Tokay, N., 2010.** Synthesis, spectroscopy, and quantum-chemical calculations on 1-substituted phenyl-3,5-diphenyl formazans. Spectrochimica Acta Part A, 75, 54-60.
- Thiel, W., 1998.** ACS Symposium Series, Computational Thermochemistry, Prediction and Estimation of Molecular Thermodynamics. Chapter 8 of Thermochemistry from Semi-empirical Molecular Orbital Theory, American Chemical Society, 470, USA.
- Valdez J. C. 2002.** Synthesis and Antiparasitic Activity of 1H Benzimidazole Derivatives. Bioorganic&Medicinal Chemistry Letters, 12, 2221-2224.
- W. Kohn and L. J. Sham, 1965.** Physical Review, 137, A1697
- Wang, H., Lu, T., He, T. and Chen, D., 2008.** Theoretical Studies on the Structure and Spectrum of Imidazole-Chloranil Charge Transfer Complex. Chinese Journal of Chemical Physics, 21, No.6, 560-568.
- Wright J.B., 1951.** The Chemistry of the Benzimidazoles. Chemical Reviews, 48, 397-547.
- Xiaohong, L., Ruizhou, Z. and Xianzhou, 2010.** Computational study of imidazole as high energetic materials. Journal of Hazardous Materials, 183, 622-633.

Yılmaz, F., 2011. Bazı İmidazol Türevlerinin Metal Kompleksleri Üzerine Yapılan Kuantum Kimyasal Hesaplamalar. Yüksek Lisans Tezi. Afyon Kocatepe Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kimya Anabilim Dalı, Afyon.

Yurtseven, E., 2006. Bazı Süstitüe Piridin N-Oksit Türevlerinin Asitlik ve Bazlık Davranışlarının Teorik Olarak İncelenmesi. Yüksek Lisans Tezi. Osmangazi Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Kimya Anabilim Dalı, Eskişehir.

ÖZGEÇMİŞ

27 Mart 1990 yılında Muğla'nın Milas ilçesinde doğdu. İlkokul ve Ortaokulu Selimiye İlköğretim Okulu'nda, liseyi Milas Lisesi'nde tamamladı. 2009-2010 Eğitim Öğretim yılında Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Kimya Bölümünde lisans öğrenimine başladı. 2013-2014 Eğitim Öğretim yılında Recep Tayyip Erdoğan Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Kimya Anabilim Dalı'nda yüksek lisans öğrenimine başladı.