

**T.C.
ADYAMAN ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

**İMİDAZOLİDİN-2-TİYON TÜREVLERİNİN SENTEZİ,
KARAKTERİZASYONU, DFT ve DOKİNG HESAPLAMALARI**

Özlem KESKİN

KİMYA ANABİLİM DALI

ADYAMAN, 2018

**T.C.
ADYAMAN ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**İMİDAZOLİDİN-2-TİYON TÜREVLERİNİN SENTEZİ,
KARAKTERİZASYONU, DFT ve DOKİNG HESAPLAMALARI**

Özlem KESKİN

Yüksek Lisans Tezi

Kimya Anabilim Dalı

Bu tez 18/05/2018 tarihinde aşağıdaki jüri üyeleri tarafından oybirliği/oyçokluğu ile kabul edilmiştir.

**Dr. Öğr. Üyesi Murat GENÇ
Danışman**

**Doç. Dr. Cumhur KIRILMIŞ
Üye**

**Dr. Öğr. Üyesi Engin YILMAZ
Üye**

**Prof. Dr. Refet KARADAĞ
Enstitü Müdürü**

Not: Bu tezde kullanılan özgün ve başka kaynaktan yapılan bildirişlerin, çizelge ve fotoğrafların kaynak gösterilmeden kullanımı, 5846 sayılı Fikir ve Sanat Eserleri Kanunu'ndaki hükümlere tabidir.

BEYAN

“İmidazolidin-2-tiyon Türevlerinin Sentezi, Karakterizasyonu, DFT ve Doking Hesaplamaları” başlıklı tezimde çalışmaların tamamen akademik kurallara ve etik değerlere sadık kalınarak yürütüldüğünü ve yazımda yararlandığım eserlerin kaynakçada gösterilenlerden oluştuğunu ayrıca alıntılardan bilimsel etiğe uygun atıf yaparak yararlanmış olduğumu beyan ederim.

Özlem KESKİN
imza

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

İMİDAZOLİDİN-2-TİYON TÜREVLERİNİN SENTEZİ, KARAKTERİZASYONU, DFT ve DOKİNG HESAPLAMALARI

Özlem KESKİN

Adıyaman Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Kimya Anabilim Dalı

Danışman : Dr. Öğr. Üyesi Murat GENÇ
Yıl : 2018, Sayfa sayısı: 236

Jüri : Doç. Dr. Cumhuri KIRILMIŞ
: Dr. Öğr. Üyesi Engin YILMAZ

Bu çalışmanın birinci kısmında; İmidazolidin-2-tiyon bileşiğinin benzil, benzoil, mannich ve yağ asitleri türevleri sentezlendi.

Çalışmanın ikinci kısmında ise; sentezlenen bileşiklerin yapı analizleri NMR ve FT-IR teknikleri aydınlatıldı. Teorik NMR, FT-IR spektrumları, HOMO ve LUMO orbital enerjileri, Mulliken yükleri, NBO ve MEP analizleri, molekülün aktivitesini belirlemek için HOMO-1 ve LUMO+1 orbital enerjileri Gaussian 09 paket programı ile DFT teknikleri kullanılarak yapıldı. Teorik NMR ve FT-IR hesaplamalarının deneysel değerlerle uyumu araştırıldı. Ayrıca, sentezlenen tüm bileşiklerin Autodock Vina programı kullanılarak potansiyel MCF-7 kanser hücrelerine karşı etkinliği 1S9J ID kodlu protein ile belirlendi.

Anahtar Kelimeler: İmidazolidin, DFT, Doking

ABSTRACT

MSc Thesis

THE SYNTHESIS, CHARACTERIZATION, DFT and DOCKING CALCULATIONS OF IMIDAZOLIDINE-2-THIONE DERIVATIVES

Özlem KESKİN

Adiyaman University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Chemistry

Supervisor : Asst. Prof. Dr. Murat genç
Year : 2018, Number of pages: 236

Jury : Doç.Dr. Cumhuri KIRILMIŞ
: Asst. Prof. Dr. Engin YILMAZ

In the first part of this study; Benzoyl, benzyl, mannich and oil acid derivatives of the imidazolidin-2-thione compound were synthesized.

In the second part of the study; the structures of the molecules are clarified by FT-IR and NMR techniques. Theoretical calculations of the compounds have been done by using Gaussian 09 with DFT techniques. Theoretical NMR, FT-IR spectrums, HOMO and LUMO orbital energies, Mulliken charges, NBO and MEP analyses, HOMO-1 and LUMO+1 orbital energies for molecular activity have been done by using Gaussian 09 with DFT techniques. The compatibility of the theoretical NMR and FT-IR with experimental values has been investigated. Besides, all of the synthesized compounds potential activities to MCF-7 cancer cell lines have been determined with 1S9J protein code by using Autodock Vina program.

Key Words: İmidazolidine, DFT, Docking

TEŐEKKÜR

Bu arařtırmanın planlanmasında, yürütülmesinde ve alıřmalarım süresince benden bilgi, destek ve ilgisini esirgemeyen, akademik anlamda yetiřmemi saęlayan Sayın Yrd. Do. Dr. Murat GEN hocama sonsuz saygı ve teőekkürlerimi sunarım.

Ayrıca Adıyaman Üniversitesinde bana emeęi geen bütün hocalarıma ayrı ayrı teőekkür ederim.

Bu alıřmamda ki en büyük destekim anneme ve aileme teőekkür ediyorum.

Özlem KESKİN

İÇİNDEKİLER DİZİNİ

ÖZET.....	I
ABSTRACT.....	II
TEŞEKKÜR.....	III
İÇİNDEKİLER DİZİNİ.....	IV
ÇİZELGELER DİZİNİ.....	VI
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	X
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	XVI
1. GİRİŞ.....	17
2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR.....	18
2.1. Diazoller ve Türevleri.....	18
2.2. Diazollerin Adlandırılması.....	19
2.3. İmidazollerin Reaksiyonları.....	21
2.4. İmidazol ve Türevlerinin Elde Edilmesi.....	23
2.4.1. İmidazol'un Elde Edilmesi.....	23
2.4.2. İmidazol Türevlerinin Elde Edilmesi.....	23
2.4.3. İmidazol Halkasının İndirgenmesi.....	25
2.4.4. Mannich Reaksiyonu.....	25
2.4.5. Teorik Hesaplamalı Kimya.....	26
2.4.6. Teorik Hesaplamalı Kimya ile Hesaplanabilir Nicelikler.....	27
2.4.7. Halkalı Tiyoürelerle İlgili Literatür Çalışmaları.....	27
3. MATERYAL ve YÖNTEM.....	36
3.1. Kullanılan Araç ve Gereçler.....	36
3.2. Kullanılan Kimyasal Maddeler.....	36
3.3. Saflaştırma.....	36
3.4. Spektroskopik Ölçümler.....	36
3.5. Tepkime Şeması.....	37
3.6. Deneysel Çalışma.....	38
3.6.1. İmidazolidin-2-tiyon'un Benzil türevlerinin sentezi (1-3).....	38
3.6.2. İmidazolidin-2-tiyon'un Benzoil Türevlerinin Sentezi (4-7).....	38
3.6.3. İmidazolidin-2-tiyon'un Yağ Asitleri Türevlerinin Sentezi (11-14).....	38
3.6.4. İmidazolidin-2-tiyon'un Mannich Türevlerinin Sentezi (8-10).....	39
4. BULGULAR ve TARTIŞMA.....	40
4.1. Deneysel Bulgular.....	40
4.1.1. 1,3-Bis-(4-vinilbenzil)imidazolidin-2-tiyon (1) Karakterizasyonu.....	40
4.1.2. 1,3-Bis-(2-klorobenzi)imidazolidin-2-tiyon (2) Karakterizasyonu.....	42
4.1.3. 1,3-Bis-(3-metilbenzil)imidazolidin-2-tiyon (3) Karakterizasyonu.....	44
4.1.4. 1,3-Bis-(4-metilbenzoil)imidazolidin-2-tiyon (4) Karakterizasyonu.....	46
4.1.5. 1,3-Bis-(4-tersiyerbütibenzoil)imidazolidin-2-tiyon (5) Karakterizasyonu.....	48

4.1.6.	3-(3,5-dinitrobenzoil)- <i>IH</i> -imidazolidin-2-tiyon (6) Karakterizasyonu ..	50
4.1.7.	1,3-Bis-(4-nitrobenzoil)imidazolidin-2-tiyon (7) Karakterizasyonu.....	52
4.1.8.	1,3-Bis-(4-metilpiperidin-1-il-metil)-imidazolidin-2-tiyon (8) Karakterizasyonu.....	54
4.1.9.	1,3-Bis-(4-metilpiperazin-1-il-metil)imidazolidin-2-tiyon (9) Karakterizasyonu.....	56
4.1.10.	1,3-Bis-(4-etilpiperazin-1-il-metil)imidazolidin-2-tiyon (10) Karakterizasyonu.....	58
4.1.11.	1,3-Bisheksadekanoilimidazolidin-2-tiyon (11)Karakterizasyonu	60
4.1.12.	1,3-Bisoktadekanoilimidazolidin-2-tiyon (12)Karakterizasyonu	62
4.1.13.	1,3-Bistetradekanoilimidazolidin-2-tiyon (13) Karakterizasyonu	64
4.1.14.	1,3-Bisdodekanoilimidazolidin-2-tiyon (14) Karakterizasyonu	66
4.2.	Teorik Çalışma	68
4.2.1.	1,3-Bis-(4-vinilbenzil)imidazolidin-2-tiyon (1) Analizi	70
4.2.2.	1,3-Bis-(2-klorobenzil)imidazolidin-2-tiyon (2) Analizi	80
4.2.3.	1,3-Bis-(3-metilbenzil)imidazolidin-2-tiyon (3) Analizi	89
4.2.4.	1,3-Bis-(4-metilbenzoil)imidazolidin-2-tiyon (4) Analizi	98
4.2.5.	1,3-Bis-(4-tersiyerbütibenzoil)imidazolidin-2-tiyon (5) Analizi	108
4.2.6.	3-(3,5-dinitrobenzoil)- <i>IH</i> -imidazolidin-2-tiyon (6) Analizi	116
4.2.7.	1,3-Bis-(4-nitrobenzoil)imidazolidin-2-tiyon (7) Analizi	126
4.2.8.	1,3-Bis-(4-metilpiperidin-1-il-metil)-imidazolidin-2-tiyon (8) Analizi	136
4.2.9.	1,3-Bis-(4-metilpiperazin-1-il-metil)imidazolidin-2-tiyon (9) Analizi.	147
4.2.10.	1,3-Bis-(4-etilpiperazin-1-il-metil)imidazolidin-2-tiyon (10) Analizi	155
4.2.11.	1,3-Bisheksadekanoilimidazolidin-2-tiyon (11) Analizi	163
4.2.12.	1,3-Bisoktadekanoilimidazolidin-2-tiyon (12) Analizi.....	172
4.2.13.	1,3-Bistetradekanoilimidazolidin-2-tiyon (13) Analizi	186
4.2.14.	1,3-Bisdodekanoilimidazolidin-2-tiyon (14) Analizi	200
4.3.	Tartışma.....	212
5.	SONUÇLAR ve ÖNERİLER	228
	KAYNAKLAR	229
	KİŞİSEL BİLGİLER	233

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 4.1 (1) No'lu bileşiğin teorik IR analizi.....	71
Çizelge 4.2 (1) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹ H-NMR verileri ve regresyon analizi.	74
Çizelge 4.3 (1) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹³ C-NMR verileri ve regresyon analizi	75
Çizelge 4.4 (1) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları	76
Çizelge 4.5 (1) No'lu bileşiğin NBO analizi.....	77
Çizelge 4.6 (1) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri	79
Çizelge 4.7 (2) No'lu bileşiğin teorik IR analizi.....	81
Çizelge 4.8 (2) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹ H-NMR verileri ve regresyon analizi.	83
Çizelge 4.9 (2) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹³ C-NMR verileri ve regresyon analizi	84
Çizelge 4.10 (2) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları	85
Çizelge 4.11 (2) No'lu bileşiğin NBO analizi.....	86
Çizelge 4.12 (2) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri	88
Çizelge 4.13 (3) No'lu bileşiğin teorik IR analizi.....	90
Çizelge 4.14 (3) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹ H-NMR verileri ve regresyon analizi	92
Çizelge 4.15 (3) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹³ C-NMR verileri ve regresyon analizi	93
Çizelge 4.16 (3) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları	94
Çizelge 4.17 (3) No'lu bileşiğin NBO analizi.....	95
Çizelge 4.18 (3) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri	97
Çizelge 4.19 (4) No'lu bileşiğin teorik IR analizi.....	99
Çizelge 4.20 (4) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹ H-NMR verileri ve regresyon analizi	101
Çizelge 4.21 (4) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹³ C-NMR verileri ve regresyon analizi	102
Çizelge 4.22 (4) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları	103
Çizelge 4.23 (4) No'lu bileşiğin NBO analizi.....	104

Çizelge 4.24 (4) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri	106
Çizelge 4.25 (5) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹ H-NMR verileri ve regresyon analizi	109
Çizelge 4.26 (5) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹³ C-NMR verileri ve regresyon analizi	110
Çizelge 4.27 (5) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları	111
Çizelge 4.28 (5) No'lu bileşiğin NBO analizi.....	112
Çizelge 4.29 (5) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri	114
Çizelge 4.30 (6) No'lu bileşiğin teorik IR analizi.....	117
Çizelge 4.31 (6) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹ H-NMR verileri ve regresyon analizi	119
Çizelge 4.32 (6) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹³ C-NMR verileri ve regresyon analizi	120
Çizelge 4.33 (6) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları	121
Çizelge 4.34 (6) No'lu bileşiğin NBO analizi.....	122
Çizelge 4.35 (6) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri	124
Çizelge 4.36 (7) No'lu bileşiğin teorik IR analizi.....	127
Çizelge 4.37 (7) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹ H-NMR verileri ve regresyon analizi	129
Çizelge 4.38 (7) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹³ C-NMR verileri ve regresyon analizi	130
Çizelge 4.39 (7) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları	131
Çizelge 4.40 (7) No'lu bileşiğin NBO analizi.....	132
Çizelge 4.41 (7) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri	134
Çizelge 4.42 (8) No'lu bileşiğin teorik IR analizi.....	137
Çizelge 4.43 (8) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹ H-NMR verileri ve regresyon analizi	140
Çizelge 4.44 (8) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹³ C-NMR verileri ve regresyon analizi	141
Çizelge 4.45 (8) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları	142
Çizelge 4.46 (8) No'lu bileşiğin NBO analizi.....	143
Çizelge 4.47 (8) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri	145

Çizelge 4.48 (9) No'lu bileşiğin deneysel, teorik $^1\text{H-NMR}$ verileri ve regresyon analizi	148
Çizelge 4.49 (9) No'lu bileşiğin deneysel, teorik $^{13}\text{C-NMR}$ verileri ve regresyon analizi	149
Çizelge 4.50 (9) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları	150
Çizelge 4.51 (9) No'lu bileşiğin NBO analizi.....	151
Çizelge 4.52 (9) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri	153
Çizelge 4.53 (10) No'lu bileşiğin deneysel, teorik $^1\text{H-NMR}$ verileri ve regresyon analizi	156
Çizelge 4.54 (10) No'lu bileşiğin deneysel, teorik $^{13}\text{C-NMR}$ verileri ve regresyon analizi	157
Çizelge 4.55 (10) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları	158
Çizelge 4.56 (10) No'lu bileşiğin NBO analizi.....	159
Çizelge 4.57 (10) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri	161
Çizelge 4.58 (11) No'lu bileşiğin deneysel, teorik $^1\text{H-NMR}$ verileri ve regresyon analizi	164
Çizelge 4.59 (11) No'lu bileşiğin deneysel, teorik $^{13}\text{C-NMR}$ verileri ve regresyon analizi	165
Çizelge 4.60 (11) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları	166
Çizelge 4.61 (11) No'lu bileşiğin NBO analizi.....	168
Çizelge 4.62 (11) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri	170
Çizelge 4.63 (12) No'lu bileşiğin teorik IR analizi.....	173
Çizelge 4.64 (12) No'lu bileşiğin deneysel, teorik $^1\text{H-NMR}$ verileri ve regresyon analizi	178
Çizelge 4.65 (12) No'lu bileşiğin deneysel, teorik $^{13}\text{C-NMR}$ verileri ve regresyon analizi	179
Çizelge 4.66 (12) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları	180
Çizelge 4.67 (12) No'lu bileşiğin NBO analizi.....	182
Çizelge 4.68 (12) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri	184
Çizelge 4.69 (13) No'lu bileşiğin teorik IR analizi.....	187
Çizelge 4.70 (13) No'lu bileşiğin deneysel, teorik $^1\text{H-NMR}$ verileri ve regresyon analizi	192
Çizelge 4.71 (13) No'lu bileşiğin deneysel, teorik $^{13}\text{C-NMR}$ verileri ve regresyon analizi	193

Çizelge 4.72 (13) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları	194
Çizelge 4.73 (13) No'lu bileşiğin NBO analizi.....	196
Çizelge 4.74 (13) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri	198
Çizelge 4.75 (14) No'lu bileşiğin teorik IR analizi.....	201
Çizelge 4.76 (14) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹ H-NMR verileri ve regresyon analizi	204
Çizelge 4.77 (14) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹³ C-NMR verileri ve regresyon analizi	205
Çizelge 4.78 (14) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları	206
Çizelge 4.79 (14) No'lu bileşiğin NBO analizi.....	208
Çizelge 4.80 (14) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri	210
Çizelge 4.81 Bileşiklerin 1S9J proteinine doking bağlanma afinite değerleri.....	211
Çizelge 4.82 Bileşiklerin ΔE(eV) değerleri	221
Çizelge 4.83 Bileşiklerin R ² değerleri	222
Çizelge 4.84 Bileşiklerin Doking Bağlanması	227

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1 Diazollerin adlandırılması.....	18
Şekil 2.2 İmidazolün tautomerik formu	18
Şekil 2.3 İmidazolün rezonans yapısı.....	19
Şekil 2.4 İmidazol	19
Şekil 2.5 Dihidroimidazol ve Tetrahidroimidazollerin adlandırılması	20
Şekil 2.6 İmidazolün Benzo Türevi Bileşikler	20
Şekil 2.7 İmidazol Türevi Bileşikler	21
Şekil 2.8 İmidazollerin Protonlandırılması	21
Şekil 2.9 İmidazollerin alkilendirilmesi.....	22
Şekil 2.10 İmidazolün elde edilmesi	23
Şekil 2.11 α -Dikarbonil bileşiğinden imidazol türevinin elde edilmesi.....	24
Şekil 2.12 α -Halojenoketon bileşiğinden imidazol türevinin elde edilmesi	24
Şekil 2.13 α -Aminoketon bileşiğinden imidazol türevinin elde edilmesi.....	24
Şekil 2.14 1,2-diamin bileşiklerinden imidazol türevinin elde edilmesi.....	25
Şekil. 2.15 Mannich Reaksiyonu	25
Şekil 2.16 Mannich bazları reaksiyonları.....	26
Şekil 2.17 Halkalı tiyoürelerin halka kapanması	28
Şekil 2.18 Halkalı tiyoürelerin sentezi	29
Şekil 2.19 Halka genişlemesi	30
Şekil 2.20 2-İmidazolin türevlerininçeşitli uygulamaları.....	30
Şekil 2.21 Sıcaklık ve çözücünün reaksiyon üzerindeki etkisi	31
Şekil 2.22 Amonyak kaynağının reaksiyon üzerindeki etkisi.....	31
Şekil 2.23 P-ikame edicilerin reaksiyon üzerindeki etkisi	31
Şekil 2.24 İmidazolin-2- (ti) olanlara erişmek için yeni bir MCR tasarımı	32
Şekil 2.25 Sentez için Reaksiyon Koşulları	32
Şekil 2.26 Diflorometillenmiş Oksazolidinesanın Substrat Kapsamı	33
Şekil 2.27 7a Sentezi İçin Reaksiyon Koşulları	33
Şekil 2.28 Yeni Geliştirilen Metot	34
Şekil 2.29 Elde Edilen $\alpha 1/ \alpha 2$ –antagonistleri.....	35
Şekil 3.1 Tez kapsamında yapılan deneylerin şematik gösterimi	37
Şekil 4.1 1,3-Bis-(4-vinilbenzil)imidazolidin-2-tiyon bileşiği.....	40
Şekil 4.2 (1) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu.....	41

Şekil 4.3 (1) No'lu bileşiğin ¹ H-NMR spektrumu (DMSO-d ₆ , 300 MHz)	41
Şekil 4.4 (1) No'lu bileşiğin ¹³ C-NMR spektrumu (DMSO-d ₆ , 300 MHz)	41
Şekil 4.5 1,3-Bis-(2-klorobenzil)imidazolidin-2-tiyon bileşiği	42
Şekil 4.6 (2) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu	43
Şekil 4.7 (2) No'lu bileşiğin ¹ H-NMR spektrumu (CDCl ₃ -d, 300 MHz)	43
Şekil 4.8 (2) No'lu bileşiğin ¹³ C-NMR spektrumu (CDCl ₃ -d, 300 MHz)	43
Şekil 4.9 1,3-Bis-(3-metilbenzil)imidazolidin-2-tiyon bileşiği.....	44
Şekil 4.10 (3) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu	45
Şekil 4.11 (3) No'lu bileşiğin ¹ H-NMR spektrumu (CDCl ₃ -d, 300 MHz)	45
Şekil 4.12 (3) No'lu bileşiğin ¹³ C-NMR spektrumu (CDCl ₃ -d, 300 MHz)	45
Şekil 4.13 1,3-Bis-(4-metilbenzoil)imidazolidin-2-tiyon bileşiği.....	46
Şekil 4.14 (4) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu	47
Şekil 4.15 (4) No'lu bileşiğin ¹ H-NMR spektrumu (DMSO-d ₆ , 300 MHz)	47
Şekil 4.16 (4) No'lu bileşiğin ¹³ C-NMR spektrumu (DMSO-d ₆ , 300 MHz)	47
Şekil 4.17 1,3-Bis-(4-tertiyerbütibenzoil)imidazolidin-2-tiyon bileşiği.....	48
Şekil 4.18 (5) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu	49
Şekil 4.19 (5) No'lu bileşiğin ¹ H-NMR spektrumu (CDCl ₃ -d, 300 MHz)	49
Şekil 4.20 (5) No'lu bileşiğin ¹³ C-NMR spektrumu (CDCl ₃ -d, 300 MHz)	49
Şekil 4.21 3-(3,5-dinitrobenzoil)-1H-imidazolidin-2-tiyon bileşiği	50
Şekil 4.22 (6) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu	51
Şekil 4.23 (6) No'lu bileşiğin ¹ H-NMR spektrumu (DMSO-d ₆ , 300 MHz)	51
Şekil 4.24 (6) No'lu bileşiğin ¹³ C-NMR spektrumu (DMSO-d ₆ , 300 MHz)	51
Şekil 4.25 1,3-Bis-(4-nitrobenzoil)imidazolidin-2-tiyon bileşiği	52
Şekil 4.26 (7) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu	53
Şekil 4.27 (7) No'lu bileşiğin ¹ H-NMR spektrumu (DMSO-d ₆ , 300 MHz)	53
Şekil 4.28 (7) No'lu bileşiğin ¹³ C-NMR spektrumu (DMSO-d ₆ , 300 MHz)	53
Şekil 4.29 1,3-Bis-(4-metilpiperidin-1-il-metil)-imidazolidin-2-tiyon bileşiği	54
Şekil 4.30 (8) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu	55
Şekil 4.31 (8) No'lu bileşiğin ¹ H-NMR spektrumu (CDCl ₃ -d, 300 MHz)	55
Şekil 4.32 (8) No'lu bileşiğin ¹³ C-NMR spektrumu (CDCl ₃ -d, 300 MHz)	55
Şekil 4.33 1,3-Bis-(4-metilpiperazin-1-il-metil)imidazolidin-2-tiyon bileşiği	56
Şekil 4.34 (9) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu	57
Şekil 4.35 (9) No'lu bileşiğin ¹ H-NMR spektrumu (CDCl ₃ -d, 300 MHz)	57
Şekil 4.36 (9) No'lu bileşiğin ¹³ C-NMR spektrumu (CDCl ₃ -d, 300 MHz)	57

Şekil 4.37 1,3-Bis-(4-etilpiperazin-1-il-metil)imidazolidin-2-tiyonbileşiği	58
Şekil 4.38 (10) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu	59
Şekil 4.39 (10) No'lu bileşiğin ¹ H-NMR spektrumu (CDCl ₃ -d, 300 MHz)	59
Şekil 4.40 (10) No'lu bileşiğin ¹³ C-NMR spektrumu (CDCl ₃ -d, 300 MHz)	59
Şekil 4.41 1,3-Bisheksadekanoilimidazolidin-2-tiyon bileşiği	60
Şekil 4.42 (11) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu	61
Şekil 4.43 (11) No'lu bileşiğin ¹ H-NMR spektrumu (CDCl ₃ -d, 300 MHz)	61
Şekil 4.44 (11) No'lu bileşiğin ¹³ C-NMR spektrumu (CDCl ₃ -d, 300 MHz)	61
Şekil 4.45 1,3-Bisoktadekanoilimidazolidin-2-tiyonbileşiği	62
Şekil 4.46 (12) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu	63
Şekil 4.47 (12) No'lu bileşiğin ¹ H-NMR spektrumu (CDCl ₃ -d, 300 MHz)	63
Şekil 4.48 (12) No'lu bileşiğin ¹³ C-NMR spektrumu (CDCl ₃ -d, 300 MHz)	63
Şekil 4.49 1,3-Bistetradekanoilimidazolidin-2-tiyon bileşiği	64
Şekil 4.50 (13) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu	65
Şekil 4.51 (13) No'lu bileşiğin ¹ H-NMR spektrumu (CDCl ₃ -d, 300 MHz)	65
Şekil 4.52 (13) No'lu bileşiğin ¹³ C-NMR spektrumu (CDCl ₃ -d, 300 MHz)	65
Şekil 4.53 1,3-Bisdodekanoilimidazolidin-2-tiyon bileşiği	66
Şekil 4.54 (14) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu	67
Şekil 4.55 (14) No'lu bileşiğin ¹ H-NMR spektrumu (CDCl ₃ -d, 300 MHz)	67
Şekil 4.56 (14) No'lu bileşiğin ¹³ C-NMR spektrumu (CDCl ₃ -d, 300 MHz)	67
Şekil 4.57 Teorik hesaplamaları yapılan bileşikler	69
Şekil 4.58 (1) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü	70
Şekil 4.59 (1) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu	70
Şekil 4.60 (1) No'lu bileşiğin teorik ¹ H-NMR spektrumu	74
Şekil 4.61 (1) No'lu bileşiğin teorik ¹³ C-NMR spektrumu	75
Şekil 4.62 (1) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı	78
Şekil 4.63 (1) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu	79
Şekil 4.64 (2) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü	80
Şekil 4.65 (2) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu	80
Şekil 4.66 (2) No'lu bileşiğin teorik ¹ H-NMR spektrumu	83
Şekil 4.67 (2) No'lu bileşiğin teorik ¹³ C-NMR spektrumu	84
Şekil 4.68 (2) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı	87
Şekil 4.69 (2) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu	88
Şekil 4.70 (3) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü	89

Şekil 4.71 (3) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu.....	89
Şekil 4.72 (3) No'lu bileşiğin teorik ¹ H-NMR spektrumu.....	92
Şekil 4.73 (3) No'lu bileşiğin teorik ¹³ C-NMR spektrumu.....	93
Şekil 4.74 (3) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı	96
Şekil 4.75 (3) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu.....	97
Şekil 4.76 (4) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü	98
Şekil 4.77 (4) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu.....	98
Şekil 4.78 (4) No'lu bileşiğin teorik ¹ H-NMR spektrumu.....	101
Şekil 4.79 (4) No'lu bileşiğin teorik ¹³ C-NMR spektrumu.....	102
Şekil 4.80 (4) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı	105
Şekil 4.81 (4) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu.....	106
Şekil 4.82 (4) No'lu bileşiğin doking bağlanması	107
Şekil 4.83 (5) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü	108
Şekil 4.84 (5) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu.....	108
Şekil 4.85 (5) No'lu bileşiğin teorik ¹ H-NMR spektrumu.....	109
Şekil 4.86 (5) No'lu bileşiğin teorik ¹³ C-NMR spektrumu.....	110
Şekil 4.87 (5) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı	113
Şekil 4.88 (5) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu.....	114
Şekil 4.89 (5) No'lu bileşiğin doking bağlanması	115
Şekil 4.90 (6) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü	116
Şekil 4.91 (6) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu.....	116
Şekil 4.92 (6) No'lu bileşiğin teorik ¹ H-NMR spektrumu.....	119
Şekil 4.93 (6) No'lu bileşiğin teorik ¹³ C-NMR spektrumu.....	120
Şekil 4.94 (6) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı	123
Şekil 4.95 (6) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu.....	124
Şekil 4.96 (6) No'lu bileşiğin doking bağlanması	125
Şekil 4.97 (7) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü	126
Şekil 4.98 (7) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu.....	126
Şekil 4.99 (7) No'lu bileşiğin teorik ¹ H-NMR spektrumu.....	129
Şekil 4.100 (7) No'lu bileşiğin teorik ¹³ C-NMR spektrumu.....	130
Şekil 4.101 (7) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı ..	133
Şekil 4.102 (7) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu	134
Şekil 4.103 (7) No'lu bileşiğin doking bağlanması	135
Şekil 4.104 (8) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü.....	136

Şekil 4.105 (8) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu.....	136
Şekil 4.106 (8) No'lu bileşiğin teorik ¹ H-NMR spektrumu.....	140
Şekil 4.107 (8) No'lu bileşiğin teorik ¹³ C-NMR spektrumu.....	141
Şekil 4.108 (8) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı ..	144
Şekil 4.109 (8) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu	145
Şekil 4.110 (8) No'lu bileşiğin doking bağlanması	146
Şekil 4.111 (9) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü	147
Şekil 4.112 (9) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu.....	147
Şekil 4.113 (9) No'lu bileşiğin teorik ¹ H-NMR spektrumu.....	148
Şekil 4.114 (9) No'lu bileşiğin teorik ¹³ C-NMR spektrumu.....	149
Şekil 4.115 (9) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı ..	152
Şekil 4.116 (9) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu	153
Şekil 4.117 (9) No'lu bileşiğin doking bağlanması	154
Şekil 4.118 (10) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü	155
Şekil 4.119 (10) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu.....	155
Şekil 4.120 (10) No'lu bileşiğin teorik ¹ H-NMR spektrumu.....	156
Şekil 4.121 (10) No'lu bileşiğin teorik ¹³ C-NMR spektrumu.....	157
Şekil 4.122 (10) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı	160
Şekil 4.123 (10) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu.....	161
Şekil 4.124 (10) No'lu bileşiğin doking bağlanması	162
Şekil 4.125 (11) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü	163
Şekil 4.126 (11) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu.....	163
Şekil 4.127 (11) No'lu bileşiğin teorik ¹ H-NMR spektrumu.....	164
Şekil 4.128 (11) No'lu bileşiğin teorik ¹³ C-NMR spektrumu.....	165
Şekil 4.129 (11) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı	169
Şekil 4.130 (11) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu.....	170
Şekil 4.131 (11) No'lu bileşiğin doking bağlanması	171
Şekil 4.132 (12) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü	172
Şekil 4.133 (12) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu.....	172
Şekil 4.134 (12) No'lu bileşiğin teorik ¹ H-NMR spektrumu.....	178
Şekil 4.135 (12) No'lu bileşiğin teorik ¹³ C-NMR spektrumu.....	179
Şekil 4.136 (12) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı	183
Şekil 4.137 (12) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu.....	184
Şekil 4.138 (12) No'lu bileşiğin doking bağlanması	185

Şekil 4.139 (13) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü.....	186
Şekil 4.140 (13) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu.....	186
Şekil 4.141 (13) No'lu bileşiğin teorik ¹ H-NMR spektrumu.....	192
Şekil 4.142 (13) No'lu bileşiğin teorik ¹³ C-NMR spektrumu.....	193
Şekil 4.143 (13) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı	197
Şekil 4.144 (13) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu.....	198
Şekil 4.145 (13) No'lu bileşiğin doking bağlanması	199
Şekil 4.146 (14) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü.....	200
Şekil 4.147 (14) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu.....	200
Şekil 4.148 (14) No'lu bileşiğin teorik ¹ H-NMR spektrumu.....	204
Şekil 4.149 (14) No'lu bileşiğin teorik ¹³ C-NMR spektrumu.....	205
Şekil 4.150 (14) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı	209
Şekil 4.151 (14) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu.....	210
Şekil 4.152 (14) No'lu bileşiğin doking bağlanması	211
Şekil 4.153 Teorik hesaplamaları yapılan moleküller.....	213
Şekil 4.154 Bileşiklerin ¹ H-NMR spektrumlarının karşılaştırılması	215
Şekil 4.155 Bileşiklerin ¹³ C-NMR spektrumlarının karşılaştırılması	216
Şekil 4.156 Bileşiklerin HOMO-LUMO enerji yüzeylerinin karşılaştırılması.....	218
Şekil 4.157 Bileşiklerin HOMO-1 – LUMO+1 enerji yüzeylerinin karşılaştırılması.....	220
Şekil 4.158 Bileşiklerin Elektron Yük Yoğunluğu	224

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

E	: Sistemin Enerjisi
ΔE	: Enerjide ki deęişim
eV	: Elektron volt
v_{as}	: Asimetrik gerilme
v_s	: Simetrik gerilme
ν	: Baę gerilme titreşimi
ω	: Dalgalanma titreşimi
$\gamma\nu$: Düzlem dıőı açı bükölme titreşimi
$\delta\nu$: Açı bükölme titreşimi
$\rho\nu$: Sallanma titreşimi
R^2	: Regresyon katsayısı

Kısaltmalar

B3LYP	: 3 parametrelili Becke karma metodu (DFT metodunun türevi)
BEND	: Eğilme Titreşimi
$CDCl_3$: Dötero kloroform
DFT	: Yoęunluk Fonksiyonel Teorisi
DMSO	: Dimetilsülfoksit
$DMSO-d_6$: Dötero dimetilsülfoksit
EN	: Erime Noktası
FT-IR	: Fourier Dönüşümlü İnfraret
KN	: Kaynama Noktası
MO	: Moleküler Orbital
NBO	: Doğal Baę Düzeni
NMR	: Nükleer Manyetik Rezonans
OUT	: Dıőa Sallanma Titreşimi
STRE	: Gerilme Titreşimi
THF	: Tetrahidrofuran
TORS	: Burulma Titreşimi

1. GİRİŞ

Heterohalkalı molekül içeren bileşiklerin doğada yaygın bulunmaları ve yaşam içinde çok çeşitli yerlerde kullanılmaları önemini artırmaktadır. Heterohalkalı bileşikler, organik bileşiklerin büyük bir kısmını oluşturmaktadır. Doğal bileşikler ve ilaçların birçoğu hetero halka içerir [1].

Heterohalkalı bileşiklerin türevlerinden özellikle azot atomu içeren moleküllerin farmasötik, biyolojik ve medikal kullanımları yanında teknolojik kullanımları da çok yaygındır.

İmidazol, bir çok doğal bileşiğin yapısında bulunması ve önemli fizyolojik olaylarda rol alan maddelerin (histidin, histamin, B₁₂ vitamini) yapısında bulunmasından dolayı önemli bir heterosiklik halkadır ve insan organizmasının yabancı olmadığı bir maddedir [2].

İmidazol ve türevleri tıpta ve veterinerlikte yaygın olarak kullanılan bileşiklerdir. İmidazol ve türevlerinin canlı metabolizmasındaki farklı görevleri yapılan çalışmalar sonucu ortaya konulmuştur. İmidazol türevlerinin literatür kayıtları arasında antikanser, antiinflamatuvar ve analjezik etkilere karşı çalışmaların varlığı günümüzde kullanılan birçok ilaç molekülünün yapısına da girmiş olması sebebiyle bizi bu tür çalışmaya yönlendirmiştir [3,4].

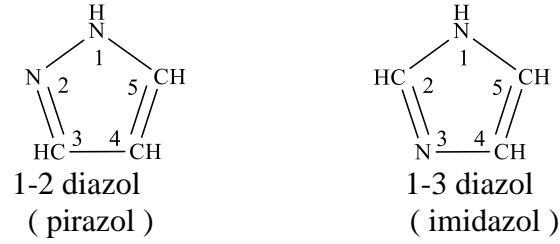
Bu çalışmada, imidazol yapısında biyolojik aktivite göstermesini beklediğimiz 14 bileşiğin sentezi yapılmıştır. Bu bileşikler imidazolidin-2-tiyon' un benzil, benzoil, mannich ve yağ asitleri kullanılarak sentezlenmiş türevleridir. Elde edilen bileşiklerin yapıları FT-IR, ¹H-NMR, ¹³C-NMR verileri ve analiz sonuçları kullanılarak aydınlatılmıştır. Elde edilen bileşiklerin Gaussian 09 paket programıyla teorik hesaplamaları yapıp deneysel verilerle karşılaştırılmıştır. Son olarak ise elde edilen bileşiklerin Autodock Vina programı kullanılarak 1S9J ID kodlu proteine doklama çalışmaları yapılmıştır.

2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR

2.1. Diazoller ve Türevleri

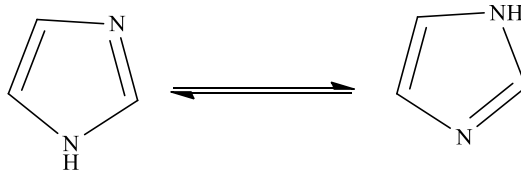
İki azot içeren beş üyeli halkalar diazoller olarak bilinen heterohalkalı bileşiklerin önemli bir sınıfını oluşturur. Heterohalkalı bileşikler, halkalarında sadece karbon atomlarını değil bunların yanında N, S ve O gibi diğer farklı atomları da içerirler; böyle atomlara hetero atomlar ismi verilir [5].

Bu bileşiklerden halkada iki N ihtiva eden beşli halkalar diazol halkalarıdır. Azot atomlarının halkadaki durumuna göre iki izomer (diazol) gözlenir. Bunlar 1,2-Diazol (Pirazol) ve 1,3-Diazol (İmidazol)'dür. Atomların numaralandırılmaları şu şekildedir [6];



Şekil 2.1 Diazollerin adlandırılması

Pirazol e.n. 70°C ve k.n. 188°C, İmidazol ise renksiz ve kokusuz katı bileşiktir. E.n. 90°C ve k.n. 256°C olan kararlı bileşiklerdir. Suda ve organik çözücülerde çözünür. Bazik bir bileşiktir. Tautomerik yapı gösterir [7].

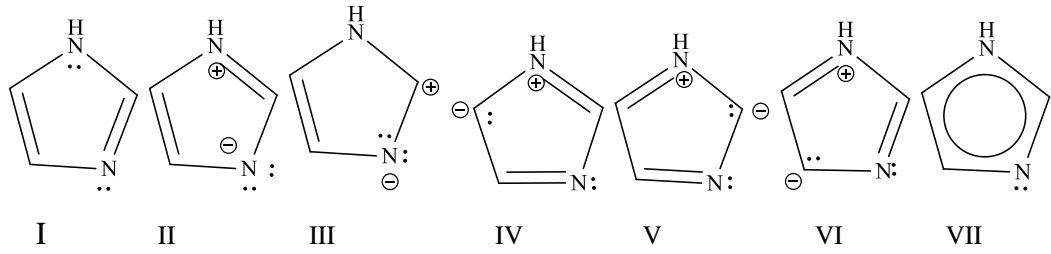


Şekil 2.2 İmidazolün tautomerik formu

Pirol'de ki bir α -CH yerine bir azometin azotu $-N=$ girmesi ile pirazol'un ve bir β -CH yerine bir azometin azotu girmesiyle imidazolun türediği düşünülebilir.

Pirazol'de, veya imidazolde halka karbon atomlarının ve hidrojen atomunun bağlı olduğu 1 numaralı N'in durumu pirol da ki karbon atomlarının ve azotun elektronik yapısı gibidir. Pirazol da ki 2 numaralı N ve imidazol da ki 3 numaralı N'ün elektronik durumu piridin azotundaki gibidir.

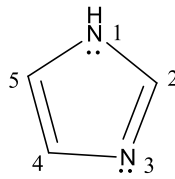
Diazoller de rezonanstan gelen yapıları da göz önünde bulundurulmalıdır. İmidazol I, II, III, IV, V,VI, VII ile gösterilen kanonik şekillerin bir rezonans hibritin den ibaret olabilir ve aromatik rezonans durumunu belirlemek amacı ile imidazol VII formülü ile gösterilebilir.



Şekil 2.3 İmidazolün rezonans yapısı

2.2. Diazollerin Adlandırılması

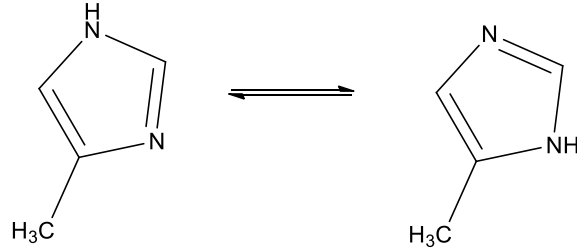
İmidazolde halka üyelerinin numaralandırılması aşağıda gösterildiği şekilde yapılır.



Şekil 2.4 İmidazol

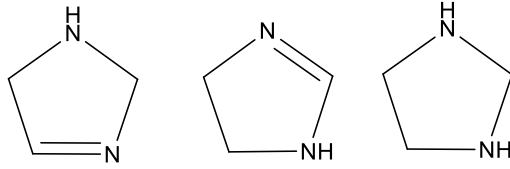
İmidazol halkasındaki tautomeri, bunların asimetrik süstitüe türevlerindeki adlandırmalarda yanılmalara neden olabilir. Örneğin; 4-metilimidazol ile 5-metilimidazol birbiriyle tautomerik bir denge oluşturur ve bunların

birbirinden ayrılması olanaksızdır. Bu nedenle bileşiğin adlandırılması 4(5)-metilimidazol şeklinde yapılır.



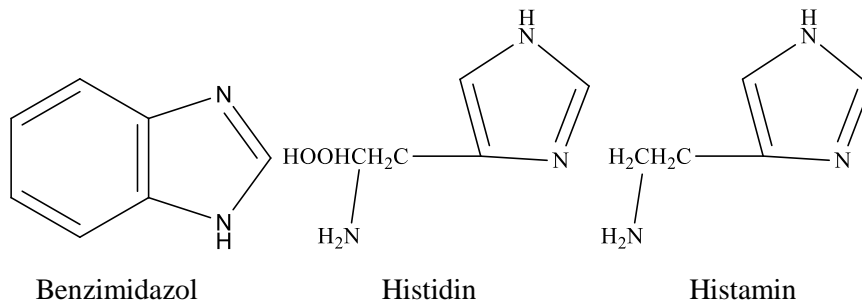
4(5)-metilimidazol

"Dihidroimidazol" lere ise "imidazolin" ve "tetrahidroimidazol" lere ise "imidazolidin" adı verilir.

 Δ^3 -İmidazolin Δ^1 -İmidazolin İmidazolidin

Şekil 2.5 Dihidroimidazol ve Tetrahidroimidazollerin adlandırılması

İmidazolun benzo türevi "benzimidazol" olarak bilinir.



Benzimidazol

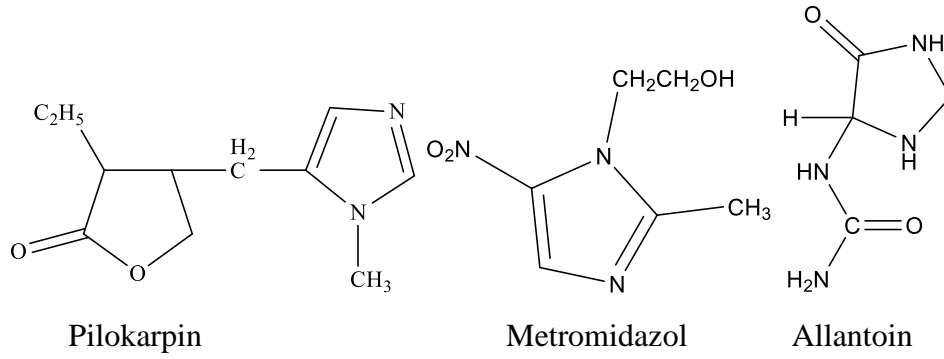
Histidin

Histamin

Şekil 2.6 İmidazolün Benzo Türevi Bileşikler

Birçok imidazol türevi büyük biyolojik önemi olan bileşiklerdir. Histidin (β -4-imidazolilalanin) önemli bir α -aminoasittir. Histidin ile yakından ilgili bir hormon olan histamin (β -4-imidazoliletilamin) in birçok fizyolojik etkisi vardır. İnsan

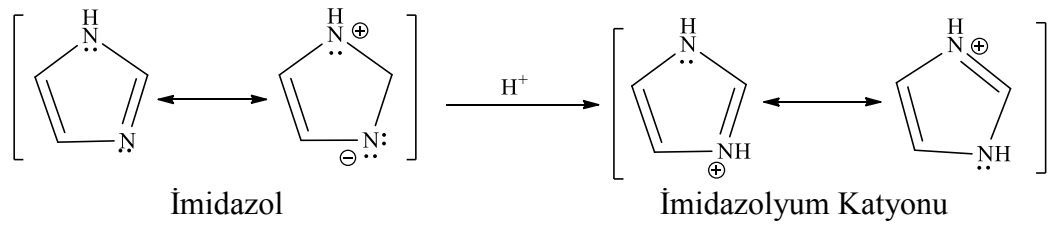
vücudunda fazla miktarda bulunmasının alerjiye neden olduğu kabul edilir ki bu nedenle bu alerjiye karşı "antihistaminik ilaçlar" ın sentezi önem kazanmıştır. "Pilokarpin" imidazol halkası içeren bir alkaloiddir. "Metromidazol" ise tıpta ilaç olarak kullanılanve mikroorganizmalara karşı etkin olan bir bileşiktir. Bazı hayvanların metabolizmasında oluşan bir ürün "Allantoin" de bir imidazol türevidir.



Şekil 2.7 İmidazol Türevi Bileşikler

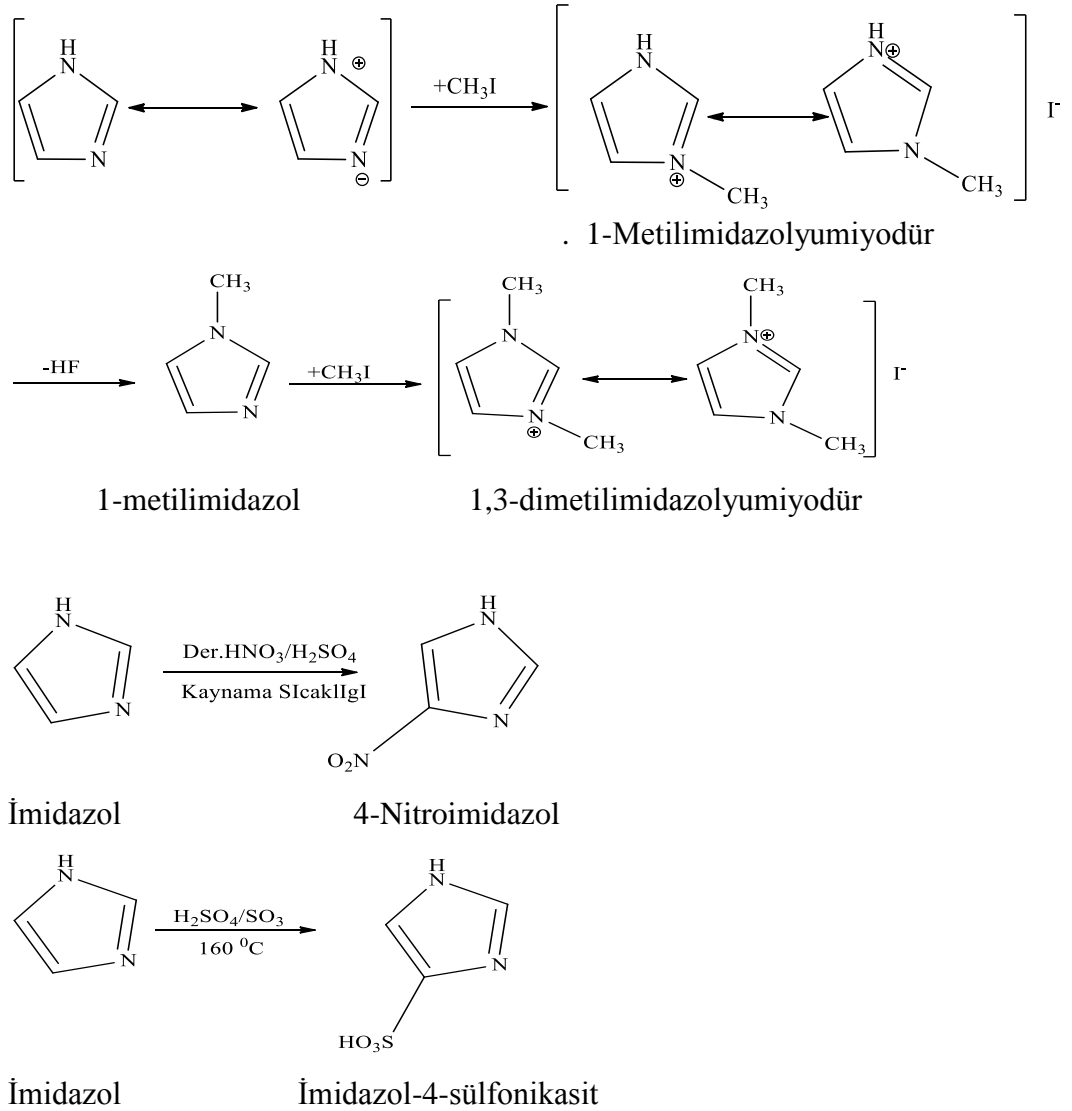
2.3. İmidazollerin Reaksiyonları

İmidazoller monobazik bileşik olarak kabul edilirler ve kuvvetli asitlerle azometin azotunda (imidazol için N-3) protonlandırılabilirler.



Şekil 2.8 İmidazollerin Protonlandırılması

İmidazoller azot atomlarından dolayı $(\text{CH}_3)_2\text{SO}_4$ ile alkilendirilebilirler veya CH_3I ile metillendirilebilirler.



Şekil 2.9 İmidazollerin alkillendirilmesi

İmidazollerin kolaylıkla klorlandırılmaları ($\text{Cl}_2/\text{H}_2\text{O}$ veya $\text{Cl}_2/\text{CHCl}_3$), bromlandırılmaları ($\text{Br}_2/\text{CHCl}_3$ veya $\text{KOB r}/\text{H}_2\text{O}$) ve iyotlandırılmaları (I_2/HIO_3) mümkündür. Bu halojenlendirmeler genellikle 4 numaralı karbonun süstitüsüyonu ile başlar, daha ileri bir reaksiyonla diğer halka karbon atomlarında da süstitüsyon meydana gelir. İmidazoller zayıf asitler gibi davranarak NaNH_2 , KNH_2 veya RMgBr ile halka NH'ında deprotonasyona uğrayarak metal tuzları oluşturabilirler. Oluşan tuzlar kolay hidroliz olabilirler ve içerdikleri anyon (örneğin imidazolil anyonu) elektrofil reaktiflerle kolaylıkla reaksiyon verebilirler. İmidazoller genellikle

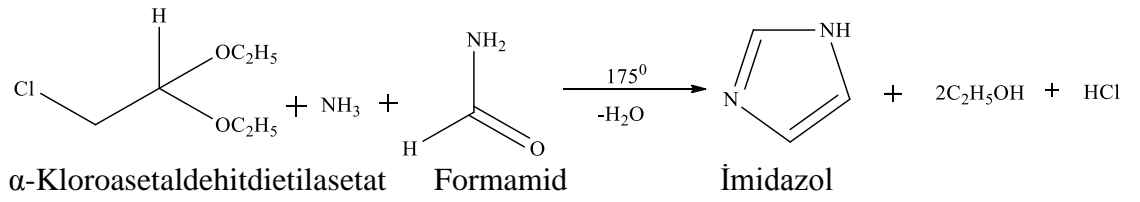
indirgenlere (örneğin; Na/sıvı NH₃, der.HI/kırmızı P, çinko/asit ve H₂/kat. gibi) dayanıklıdır [8].

2.4. İmidazol ve Türevlerinin Elde Edilmesi

Heinrich Debus tarafından imidazol ilk olarak 1858 yılında sentezlendi, ama çeşitli imidazol türevleri 1840'ların başlarında keşfedilmişti. İmidazolün sentezinde imidazol oluşturmak için amonyakla, glioksal ve formaldehit kullanılmıştır [9].

2.4.1. İmidazol'un Elde Edilmesi

İmidazolun yüksek verimle sentezinde kullanılan bir yöntem α -kloroasetaldehit dietilasetat'ın NH₃ ve formamid ile ısıtılmasıdır [10].



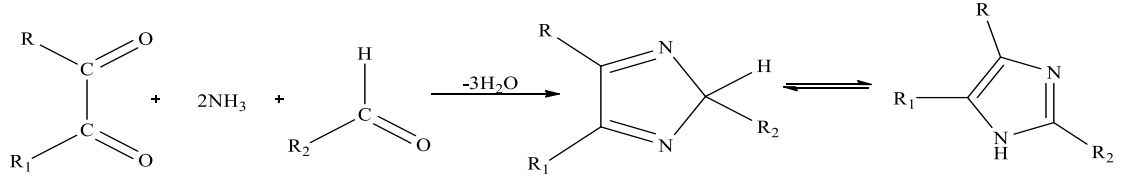
Şekil 2.10 İmidazolün elde edilmesi

2.4.2. İmidazol Türevlerinin Elde Edilmesi

Bu amaçla kullanılan yöntemlerden en önemli olanları şunlardır;

➤ α -Dikarbonil Bileşiklerinden

α -Dikarbonil bileşikleri aldehit ve NH₃ ile tepkimeye girerek imidazol türevlerini oluşturur.



α -Dikarbonil bileşiği Aldehit

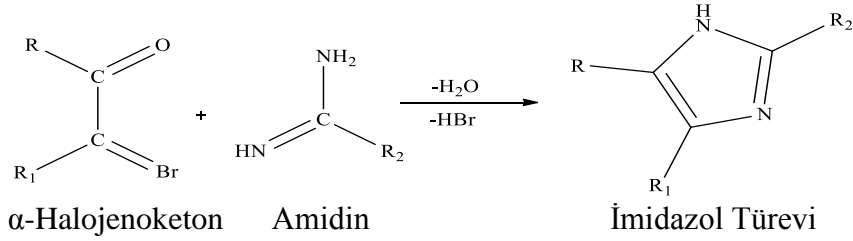
İmidazol Türevi

Şekil 2.11 α -Dikarbonil bileşiğinden imidazol türevinin elde edilmesi

Bu reaksiyonda α -dikarbonil bileşiği olarak glioksal ($R=H$, $R_1=H$) ve aldehit olarak daformaldehit ($R_2=H$) kullanılması halinde imidazol elde edilir, bu nedenle imidazole glioksalinde denir.

➤ **α -Halogenoketonlardan**

α -Halogenoketonların amidinler ile ısıtılması sonucu imidazol türevleri elde edilebilir.



α -Halogenoketon

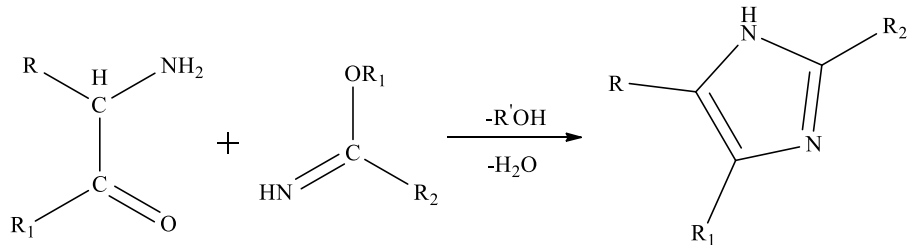
Amidin

İmidazol Türevi

Şekil 2.12 α -Halogenoketon bileşiğinden imidazol türevinin elde edilmesi

➤ **α -Aminoketonlardan**

α -Aminoketonların iminoesterler ile reaksiyonu da bir imidazol türevleri oluşumu ile sonuçlanır.



α -Aminoketon

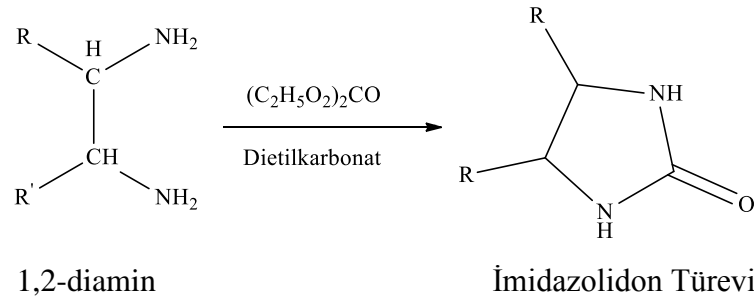
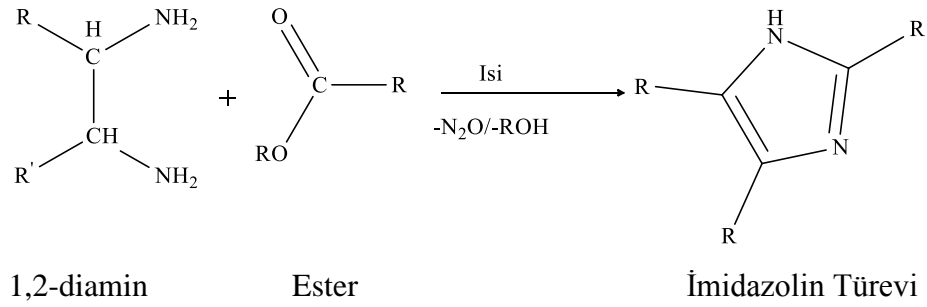
İminoester

İmidazol Türevi

Şekil 2.13 α -Aminoketon bileşiğinden imidazol türevinin elde edilmesi

2.4.3. İmidazol Halkasının İndirgenmesi

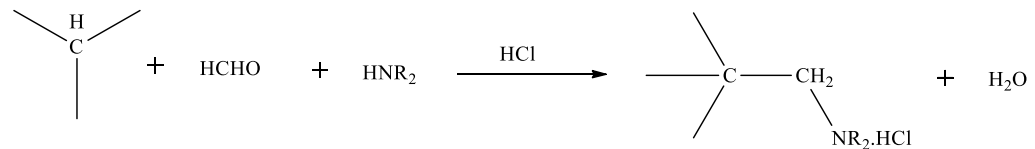
Bilinen indirgenlerle başarılmaz. İmidazolun indirgenmiş ürünleri olan imidazolin ve imidazolidon türevleri ancak sentezle elde edilebilirler: 1,2-diamin+ester den imidazolin türevi; 1,2-diamin+dietilkarbonattan imidazolidon türevi elde edilebilir [11].



Şekil 2.14 1,2-diamin bileşiklerinden imidazol türevinin elde edilmesi

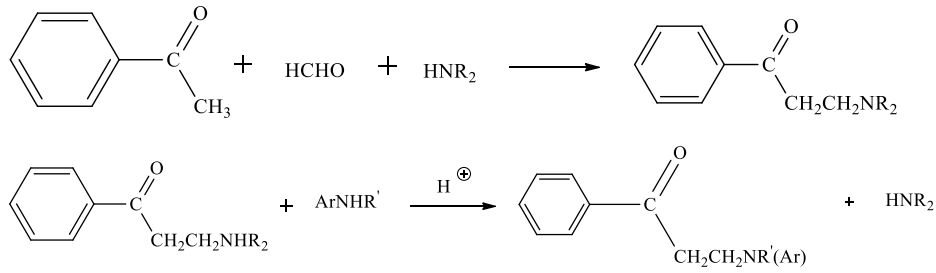
2.4.4. Mannich Reaksiyonu

Bir aktif hidrojenin metilamino veya süstitüe metilamino grubu ile yerdeğiřtirmesi Mannich Reaksiyonu olarak bilinir.



Şekil. 2.15 Mannich Reaksiyonu

Reaksiyon bir etkin hidrojenli bileşiğin, formaldehit ve amonyak ile kondenzasyonundan ibarettir. Etkin hidrojenli bileşik bir keton, asit, ester, fenol, nitroalkan ve monosüstitüe alkil olabilir. Amin bileşeni çoğunlukla bir sekonder amin (hidroklorürü halinde) dir, amonyak yerine amonyum tuzları da kullanılabilir. Aromatik aminler bu reaksiyonu kolayca vermezler, fakat alifatik aminlerden hazırlanan Mannich bazlarıyla reaksiyona girerek yeni ürünler oluştururlar.



Şekil 2.16 Mannich bazları reaksiyonları

Reaksiyon, etkin hidrojenli bileşik içine, amin, formaldehit ve bir çözücüde geri soğutucu altında kaynatılarak yapılır. Çözücü olarak etanol, metanol, nitrobenzen veya nitrometan kullanılır [12].

2.4.5. Teorik Hesaplamalı Kimya

Teorik hesaplamalı kimya, hesaplamalı kimya olarak ta bilinir; laboratuarda madde sentezlenmeden bilgisayar ortamında molekülü üç boyutlu görme, modelleme ve inceleme metotlarının bütünüdür. Özellikle madde sentezine gerek kalmadan, spektrum almadan, laboratuvar da ölçümler yapmadan programlar sayesinde bilgisayar ortamında sentez yapmak gibi düşünebiliriz. Laboratuvar da bir madde sentezi için reaktifler kullanılır, uzun zaman, para ve emek harcanır. Malzemenin bilgisayarda tasarımı bu sorunları ortadan kaldırmaktadır. Teorik hesaplamalı kimyanın teorik kısmı moleküler kuantum mekaniği ve klasik kuantumun istatistiksel mekaniğine dayanır. Hesaplamalı kuantum kimyası oldukça geliştirilmiş bir noktaya ulaşmıştır. Birçok atom, moleküller ve nano moleküllerin elektronik yapısı kolayca ve doğru bir şekilde hesaplanabilmektedir [13]. Bugün, gelişen teknoloji ve yazılım

programları sayesinde kolaylıkla kullanılacak programlar üretilmiştir. Son yıllarda kimya da hesaplama programları kullananların sayısında artış görülmektedir. Kimya da hemen hemen bütün konularda her açıdan niteliksel ve niceliksel bakımdan yaklaşık olarak hesaplama yapılabilecek program teorik kimyasal hesaplama programı tarif edilmiştir [14]. Moleküler modellemenin uygulama alanları şu şekilde sınıflandırılmaktadır;

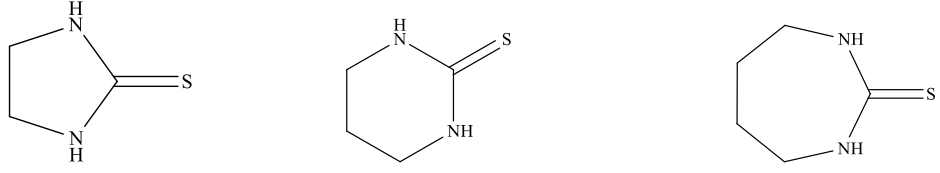
- İlaç Tasarımı
- Malzeme Dizaynı
- Kinetik Hesaplamalar
- Termokimyasal Hesaplamalar
- QSAR/QSPR/QSRR

2.4.6. Teorik Hesaplamalı Kimya ile Hesaplanabilir Nicelikler

- Molekül Geometrisi: Moleküllerin şekilleri, bağ uzunlukları, açıları, moleküler ve elektron geçişlerinin enerji durumları,
- Kimyasal Reaktivite: Molekülün elektron yoğunluğunun nerelerde olduğunu (nükleofilik yerler) molekülün nerelerden saldıracağını tespiti,
- IR, UV ve NMR Spektumları: Spektrumlardaki moleküle ait titreşim frekanslarını, absorpsiyon ve kimyasal kayma değerlerini hesaplama,
- Enzim ile Substrat Etkileşimi: İlaç tasarlama da, bir molekülün enzimin aktif bölgesine bağlanışını, uyumu, enzim-substrat ilişkisi,
- Bileşiklerin Fiziksel Özellikleri: Moleküle ait özellikler ve moleküller kısım ile materyal kısmın etkileşimi [15].

2.4.7. Halkalı Tiyöurelerle İlgili Literatür Çalışmaları

Halkalı tiyöurelerin en önemlileri 5, 6 ve 7 üyeli olanlardır. Bunlar arasında 5 ve 6 üyeli olanlar farmokolojik özelliklerinden dolayı çok fazla çalışma yapılmaktadır. Bu bileşiklerin en bilinen sentez yöntemi farklı diaminlerin CS₂ ile tepkimesinden elde edilen ditiyokarbamik asidin HCl ile halka kapanmasıdır.



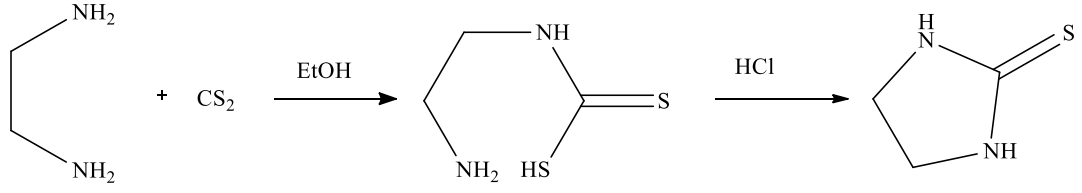
İmidazolidin-2-tiyon Tetrahydropirimidin-2-tiyon [1,3]-Diazepin-2-tiyon

Şekil 2.17 Halkalı tiyoürelerin halka kapanması

İmidazolidin-2-tiyon literatürde farklı isimlerle adlandırılmaktadır. Bunlardan birkaç tanesi aşağıda örnek olarak verilmiştir. Bunlar, Etilen tiyoüre, 2-tiyoksoimidazolidin, 1,3-Etilen-2-tiyöüre, 1,3-Etilentiyoüre, 2-imidazolidintiyon, merkapt-4,5-dihidroimidazol'dir. Bu bileşik normal laboratuvar şartlarında kararlı, erime noktası 195-204 °C olan, suda ve polar organik çözücülerde iyi çözünen bir moleküldür. Bu bileşik elektro kaplama, fungusit, vulkanizasyon hızlandırıcı, pestisit, korozyon önleyici, sentetik reçine, boya ve plastik yapımı gibi birçok farklı alanlarda kullanılmaktadır.

Doymuş imidazol, pirimidin ve diazepin ve benzo türevleri endüstri ve eczacılıkta çok yaygın olarak kullanılmaktadır. Bu, bileşiklerin sentez ve sentez metotları geliştirilmesindeki yoğun ilginin nedenini de açıklamaktadır [16-17]. Halkalı üre ve tiyoürelerin nötral H-bağı reseptörü yapımında ve güçlü anyon bağlama özelliği gösterdiği literatürde bilinmektedir [18-19]. Bu bileşiklerin HIV (human immunodeficiency virus) virüsünü inhibe ettiği ve replikasyonunu engellediği bilinmektedir. Bir imidazolin-2-tiyon türevi olan Methimazole® (1-methylimidazole-2-thione) tiroit bezi rahatsızlıklarının tedavisinde kullanılmaktadır. Bazı imidazol-2-tiyon halkası içeren ilaçlar romatizma tedavisinde kullanılacak ilaç olarak geliştirilmeye çalışılmaktadır.

Son zamanlarda literatürde bu bileşiklerin antioksidan ve ateş düşürücü etkileri de bildirilmiştir. Midaglizole, Deriglidole ve Efaroxangibi imidazolin türevlerinin antihiper glisemik olarak umut verici aktivite gösterdiği rapor edilmiştir [20-21]. Önemli biyolojik aktivitelerinden dolayı halkalı tiyoüre içeren bileşiklerin sentezi üzerinde yoğun araştırmaların yapılmasına yol açmaktadır.



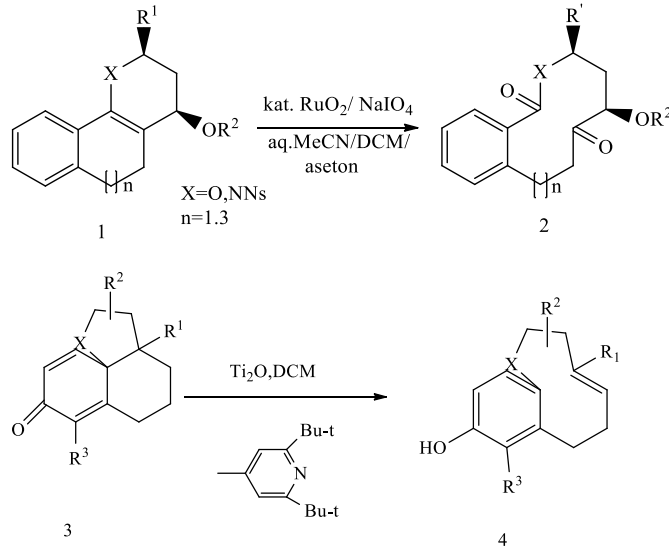
[1,3]Diazepin-2-tiyon

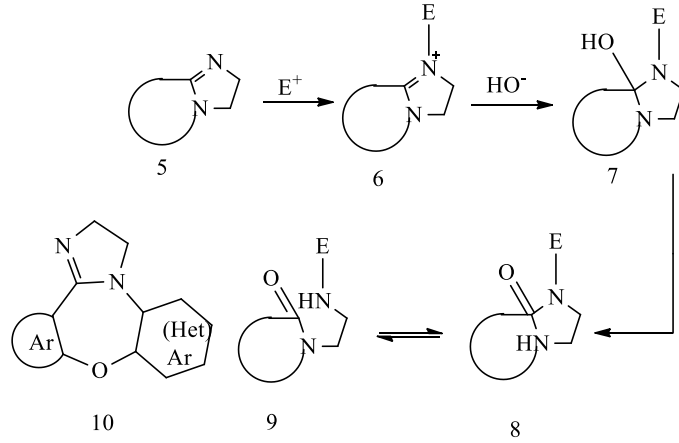
Tetrahidropirimidin-2-tiyon

İmidazolidin-2-tiyon

Şekil 2.18 Halkalı tiyörelerin sentezi

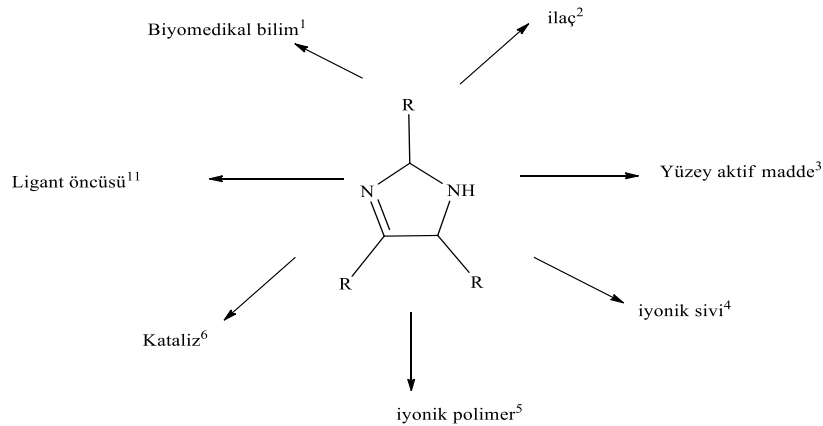
2017’de Alexander Sapegin, Angelina Osipyan ve Mikhail Krasavin’in yapmış oldukları çalışmada; İmidazolinle kaynaştırılmış [1,4] oksazepinler, iki adımda hazırlanmıştır. (Metil 2-hidroksiaroatlar, etilen diamin ve bis-elektrofilik aromatikler) Sulu K₂CO₃ (kolay, iyi hidrolitik) ile imidazolin N-alkilasyon işleminde halka genişlemesi sonucu elde edilen aren ile kaynaşmış on üyeli laktamlar, küçük moleküle önemli ölçüde katkıda bulunurken orta ölçekli halka sistemlerinde önemli ölçüde katkıda bulunmadığını ortaya koymuşlardır [22].



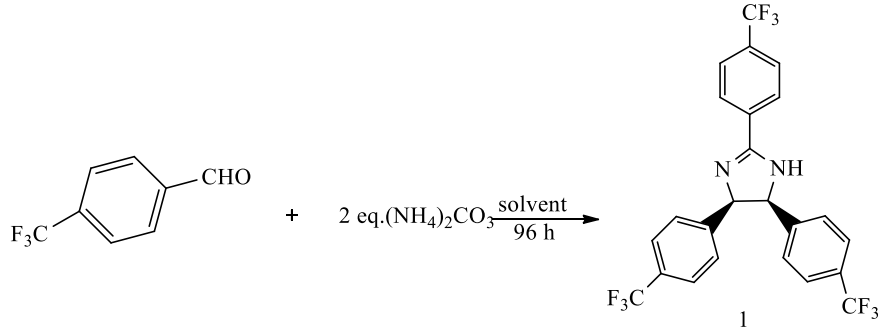


Şekil 2.19 Halka genişlemesi

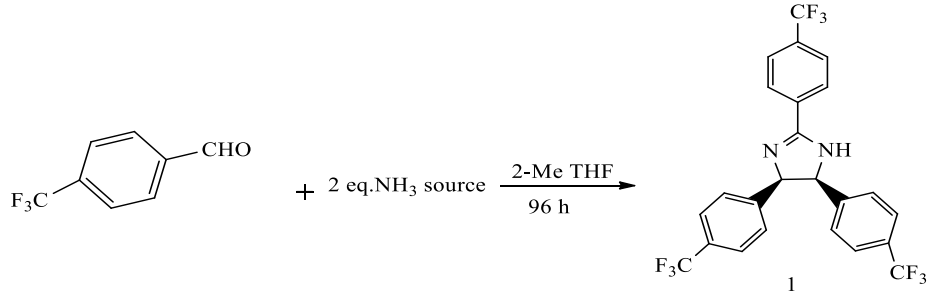
2017 yılında Hai Anh Le Phuong ve grubu, çevre açısından iyi huylu ve diyastereoselektif 2,4,5-trisübstütüe-2-imidazolinlerin sentezi çalışmasını yapmışlardır. 2,4,5-trisübstütüe edilmiş türevler geleneksel olarak aromatik aldehytlerin amonyak ile reaksiyonu, sert koşullar ve toksik çözücüler gerektirir. Bu çalışma da 2,4,5-trisübstütüe edilmiş cis veya trans diastereomerler elde etmek için sürdürülebilir, tek kaplı bir sentetik yol araştırılmıştır. 2-imidazolinlerin reaksiyon parametreleri, örneğin amonyak kaynağı, aromatik aldehytler, sıcaklık ve çözücünün etkisi araştırılmıştır. Sentezde, on altı farklı yeşil çözücü denenmiştir. Reaksiyon kinetiği ve kuantum çalışmaları (DFT B3LYP / 6-31G (d, p)) programı ile yapılmıştır [23].



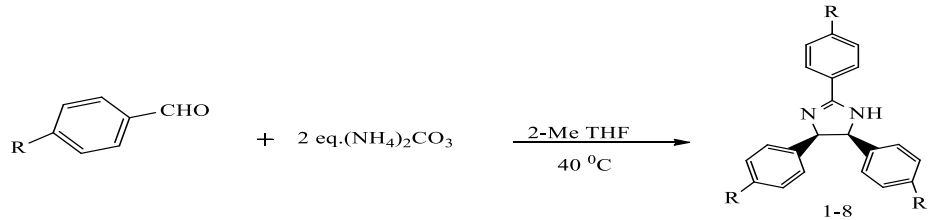
Şekil 2.20 2-İmidazolin türevlerininçeşitli uygulamaları



Şekil 2.21 Sıcaklık ve çözücünün reaksiyon üzerindeki etkisi



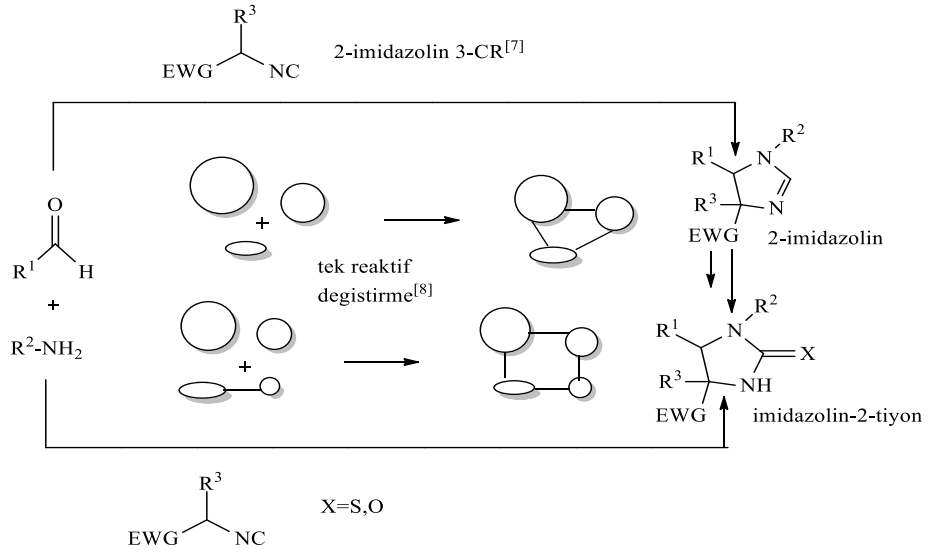
Şekil 2.22 Amonyak kaynağının reaksiyon üzerindeki etkisi



Şekil 2.23 P-ikame edicilerin reaksiyon üzerindeki etkisi

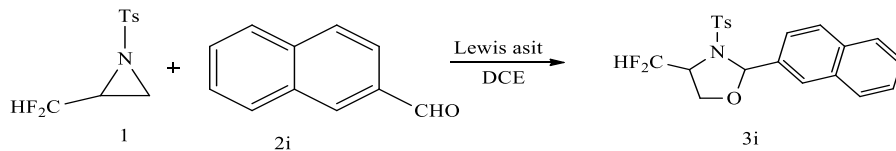
2018’de Art Kruithof ve grubunun yaptığı çalışma; integratif teori, deneyle öne çıkan bir araştırmadır. Çok bileşenli imidazolin-2-(ti) bileşiklerinin reaksiyonların da reaktiviteyi öngörme (MCR'ler) son derece zordur. Bu reaksiyonlar çoklu yollar ve doğal olarak reaktanların ve fonksiyonel grupların büyük değişimini içerir. Bugüne kadar, teorik kimya, deneysel kimyayı doğrulamak için kullanılmıştır. Bununla birlikte çok bileşenli bir reaksiyon sürecinin geliştirilmesi, reaktivite de en ilgili parametreleri belirleyerek zahmetli ve zaman

alan optimizasyon çalışmalarını önlemek, gerçekten teorik ve sentetik kimyayı çözmek için bütünleştiren kompleks ve karmaşık reaksiyon özelliklerini tam ayrıntılı olarak α -asidik izo (tiyo) siyanatların, aminler ve aldehitler yoğun fonksiyonel hale getirilmiş imidazolin-2- (ti) olanların yeni çok yönlü MCR'sinin geliştirilmesidir [24].

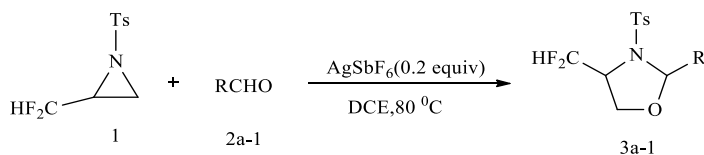


Şekil 2.24 İmidazolin-2- (ti) olanlara erişmek için yeni bir MCR tasarımı

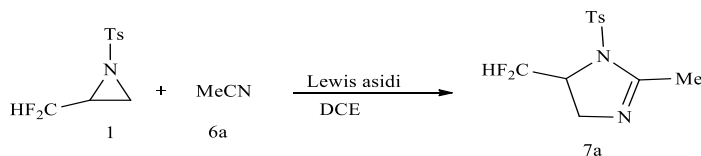
2016 yılında Takuya Ishikawa ve arkadaşları; Diflorometillenmiş Oksazolidinler Regio-reaksiyon ile 2-imidazolinlerin sentezi çalışmasını yapmışlardır. Difluorometillenmiş oksazolidinler ve 2-imidazolinler; 2-(difluorometil)-1-tosylaziridin, çeşitli aldehitler veya nitriller ile birlikte gümüş varlığında (I) heksafluoroantimonat veya titanyum (IV) florürü, regio reaksiyonla sentezlemişlerdir [25].



Şekil 2.25 Sentez için Reaksiyon Koşulları



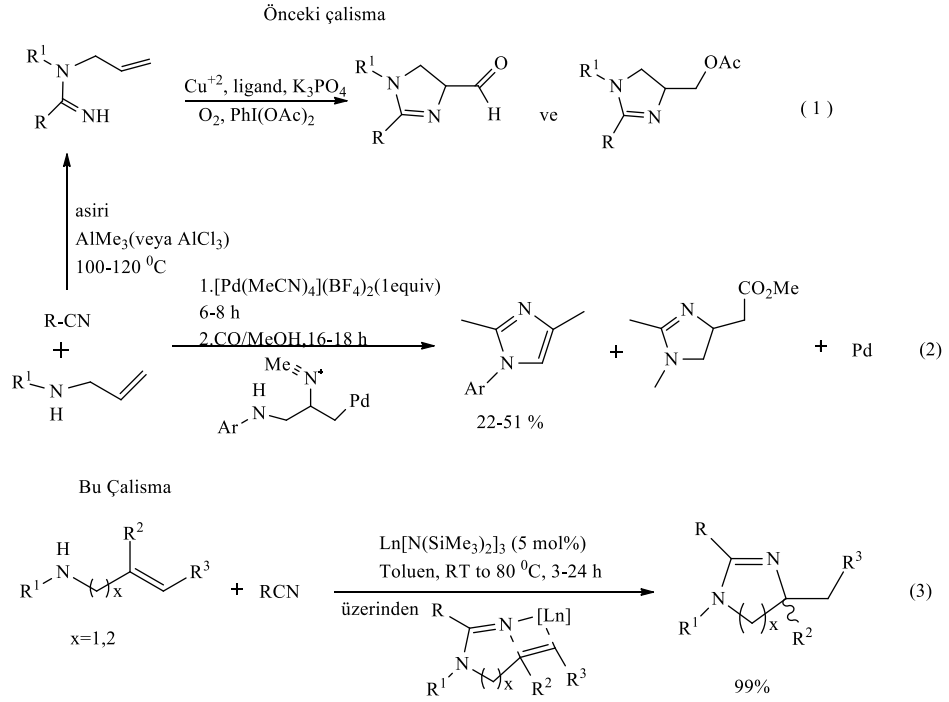
Şekil 2.26 Diflorometillenmiş Oksazolidinesanın Substrat Kapsamı



Şekil 2.27 7a Sentezi İçin Reaksiyon Koşulları

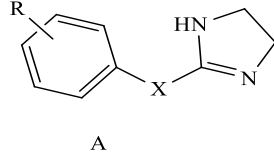
2015'te Shujian Huang, Yinlin Shao, Lixin Zhang, and Xigeng Zhou; aminoalkenlerin nitrillerle sikloamidlenmesi ile süstitüe edilmiş 2-imidazolinler ve tetrahidropirimidinlerin sentezlenmesi üzerine çalışmışlardır.

Aminoalkenlerin ilk katalitik sikloamidlenmesi nitriller ile nadir toprak kompleksleri kullanılarak elde edilmiştir. Bu reaksiyon istenen intramoleküler alkenilamidinlerin hidroaminasyonu ile yeni 2-imidazolinler ve tetrahidropirimidinleri basit tepkime koşulları altında yüksek verimlerde elde etmişlerdir [26].

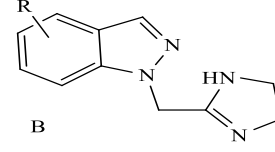


Şekil 2.28 Yeni Geliştirilen Metot

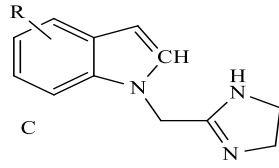
2016 yılında Anita Kornicka ve arkadaşları;[(Imidazolidin-2-il)imino]-*IH*-indollerin yeni hipotansiyon ajanlar olarak oluşturulması, in vitro ve in vivo biyolojik aktivitelerinin araştırılması hakkında çalışma yapmışlardır. Hipotansiyonlu α 2-AR agonistlerinin bir 1-[(imidazolidin-2-il)imino]-*IH*-indol analogları serisi, L-[(imidazolidin-2-il)imino]-*IH*-indazoller sentezlendi ve in vitro olarak α 1- ve α 2-adrenoseptörlerindeki aktivitelerin yanı sıra imidazolin II ve I2 reseptörlerinin en aktif 1-[(imidazolidin-2-il)imino]-*IH*-indoller, α 1 için yüksek veya orta derecede afiniteler gösterdiği, α 2-adrenoseptörleri için imidazolin-II üzerinde önemli bağlayıcı olduğu, İndol türevlerinin in vivo kardiyovasküler özellikleri, indol halkasının C-7 konumunda ikame edilmesi, yüksek kardiyovasküler aktivite göstermiştir [27].



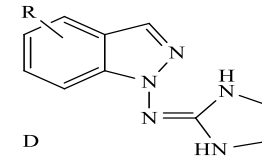
A
R=2,6-Cl, X=NH (klonidin)
 α_2/I_1 -agonist



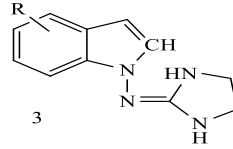
B
R= H, halojen, alkil, alkoksil
 α_1 - antagonistler (hipotansifler)
R=H, X=CH₂ (tolazolin)
 α_1/α_2 -antagonist



C
R= H, halojen, alkil, alkoksil
 α_2 - antagonistler (hipotansifler)



D
R=H, halojen (marsanidin)
R= F, Cl, CH₃, OCH₃,
(marsanidin ligantlar)
 α_2 - antagonistler (hipotansifler)



3
R=H, halojen, alkil, alkoksil

Şekil 2.29 Elde Edilen α_1/α_2 –antagonistleri

2014'te Alex ve Russell Martin; 1,2,4-triazol türevi bileşiklerin antimikrobiyal özellikleri ile ilgili literatürde yer alan çalışmalarını değerlendirmişlerdir. N grubu içeren heterohalkalı tıbbi bileşiklerin büyük bölümünde 1,2,4-triazol gruplarının olduğunu bu grupların genel olarak tautomer yapıda olduklarını da belirlemişlerdir [28].

2012 yılında Zarrouk ve grubu, 1*H*-1,2,4-triazol-3-amin (1), 4-amino-3-hidrazin-4*H* 1,2,4-triazol-3-iyol (2) ve 1*H*-1,2,4-triazol-3,5-diamin (3) bileşiklerinin nitrik asitte bakırın korozyonunu önleyici etkisini DFT metodunu kullanarak araştırmışlardır. Bileşiklerin etkili bir şekilde korozyonu önlediği sonucuna varmışlardır [29].

3. MATERYAL ve YÖNTEM**3.1. Kullanılan Araç ve Gereçler**

- Deney düzeneği için; üçayak ve kısıkaçlar, geri soğutucu, beherler, deney balonları, huniler, bagetler, pipetler, pisetler, saat camı, süzgeç kâğıtları, küçük numune şişeleri,
- Tartım için; Adventurer Pro AV264C (max. 260gr) model terazi,
- ısıtma ve karıştırma işlemleri için; termostatlı ve düz tablalı magnetik ısıtıcı,
- Erime noktası tayini için; STUART SMP30 model erime noktası tayini cihazı,
- GAUSSIAN09 ve GAUSS VIEV05 paket programları,
- ¹H-NMR ve ¹³C-NMR spektrumları için; BRUKER 300 MHz, (İnönü Üniversitesi, Malatya) Spektrum cihazı,
- IR spektrumları için PERKIN ELMER FT-IR (ATR) spektroskopi cihazı,

3.2. Kullanılan Kimyasal Maddeler

- Reaktifler; imidazolidin-2-tiyon, 4-vinilbenzilklorür, 2-klorobenzilklorür, 3-metil benzilklorür, 4-nitrobenzoilklorür, 4-metilbenzoilklorür, 4-tersiyerbütılbenzoil klorür, 3,5-dinitrobenzoilklorür, 4-metilpiperazin, N-metilpiperidin, N-etilpiperidin, palmatoilklorür, miristoilklorür, steroilklorür, laurilklorür, trietilenamin.
- Çözücü olarak; Etil alkol, su, tetrahidrofuran, DMSO, kloroform.

3.3. Saflaştırma

Kristallendirme yöntemiyle saflaştırma yapıldı.

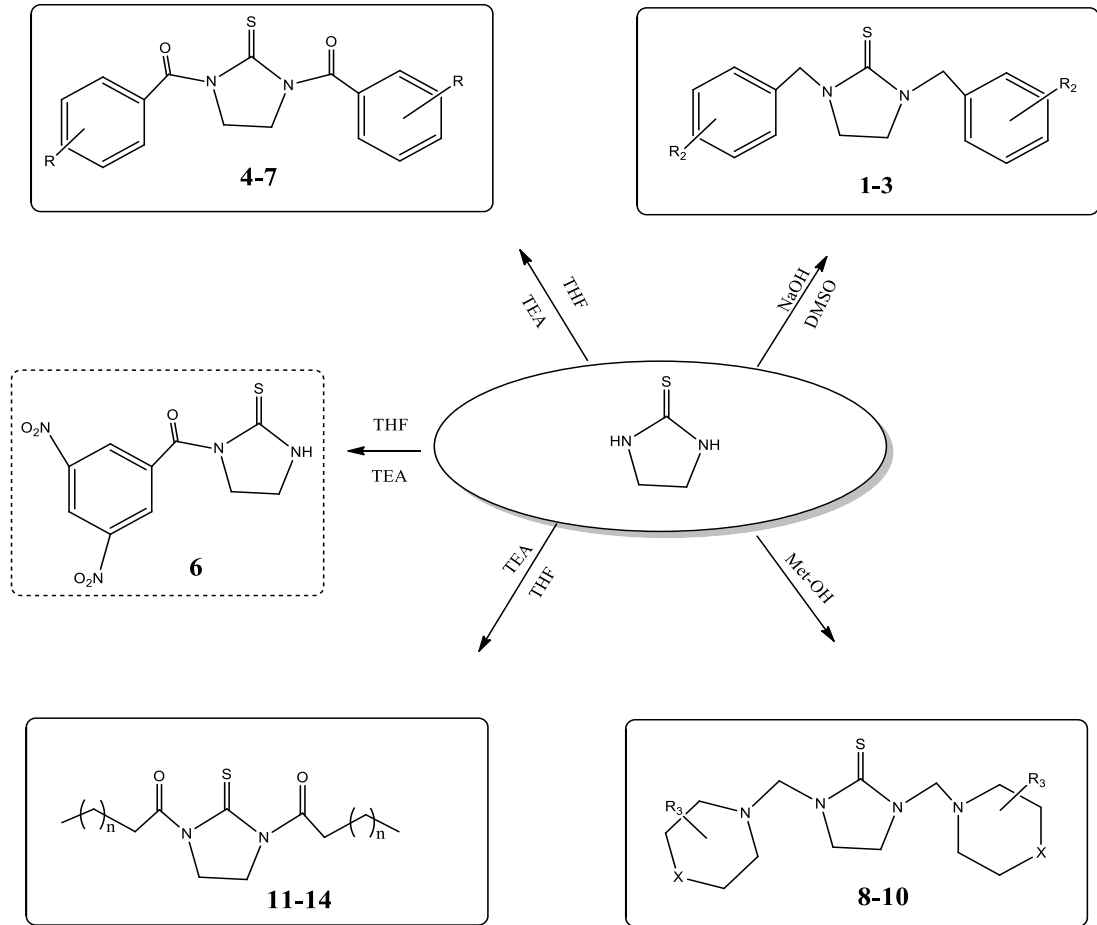
3.4. Spektroskopik Ölçümler

Bileşikleri karakterize etmek için;

$^1\text{H-NMR}$ ve $^{13}\text{C-NMR}$ spektrofotometresi BRUKER 300 MHz, (İnönü Üniversitesi, Malatya)

Infrared spektrofotometresi PERKIN ELMER FT-IR (ATR) (Adıyaman Üniversitesi, Adıyaman)

3.5. Tepkime Şeması



R = 2-Cl; 3-CH₃; 4-CH=CH₂,
 R₂ = 4-NO₂; 4-CH₃; 4TerBütil; 3,5-dinitro
 n = 9,11,13,15
 R₃ = 4-CH₃, x=H; 4-CH₃, x=N; 4-Etil, x=O

Şekil 3.1 Tez kapsamında yapılan deneylerin şematik gösterimi

3.6. Deneysel Çalışma**3.6.1. İmidazolidin-2-tiyon'un Benzil türevlerinin sentezi (1-3)**

50 ml'lik deney balonuna 0,01 mol (1,02 gr) imidazolidin-2-tiyon, 0,04 mol (1,6 gr) NaOH ve 20 ml DMSO konuldu. Magnetik karıştırıcıda oda sıcaklığında 20 dk karıştırıldı. Reaksiyon ortamına 2- klorobenzilchlorür (veya 3-metilbenzilchlorür veya 4-vinilbenzilchlorür) damla damla ilave edildi. Reaksiyona 35-40 °C'de 5 saat devam edildi. Tepkime sonunda buzlu su eklenerek madde çöktürüldü. Süzülerek oda sıcaklığında kurutuldu. Ham ürün etil alkolde kristallendirildi.

3.6.2. İmidazolidin-2-tiyon'un Benzoil Türevlerinin Sentezi (4-7)

50 ml. deney balonuna 0.01 mol (1,02 g.) imidazolidin-2-tiyon, 0,03 mol trietilenamin ve 20 ml THF konularak magnetik karıştırıcıda oda sıcaklığında 20 dk karıştırıldı. Reaksiyon ortamına 4-nitrobenzoilchlorür(veya4-metilbenzoilchlorür, 4-tersyerbütılbenzoilchlorür, 3,5-dinitrobenzoilchlorür) eklendi. Geri soğutucu altında sıcaklık kontrollü artırılarak, reaksiyona çözücünün kaynama sıcaklığında 24 saat devam edildi. Karışım sıcak olarak süzüldü. Vakum altında döner buharlaştırıcıda çözücüsü uzaklaştırıldı. Ham ürün etil alkolde kristallendirildi.

3.6.3. İmidazolidin-2-tiyon'un Yağ Asitleri Türevlerinin Sentezi (11-14)

50 ml. deney balonuna 0.01 mol (1,02 g.) imidazolidin-2-tiyon, 0,03 mol trietilenamin ve 20 ml THF konularak magnetik karıştırıcıda oda sıcaklığında 20 dk karıştırıldı. Reaksiyon ortamına palmatoil klorür (veya steroil klorür, miristoil klorür, lauril klorür) damla damla ilave edildi. Geri soğutucu altında sıcaklık kontrollü artırılarak, reaksiyona çözücünün kaynama sıcaklığında 24 saat devam edildi. Karışım sıcak olarak süzüldü. Vakum altında döner buharlaştırıcıda çözücüsü uzaklaştırıldı. Ham ürün etil alkolde kristallendirildi.

3.6.4. İmidazolidin-2-tiyon'un Mannich Türevlerinin Sentezi (8-10)

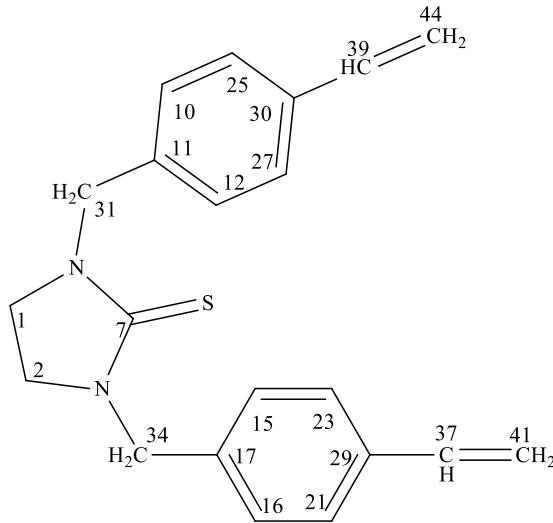
50 ml deney balonuna sırasıyla 20 ml Metilalkol, 0.01 mol imidazolidin-2-tiyon ve 0,03 mol formaldehit ilave edilip karıştırıldı magnetik karıştırıcıda oda sıcaklığında 20 dk. karıştırıldı. Daha sonra reaksiyon ortamına 4-metilpiperidin (veya N-metil piperazin, N-etil piperazin) damla damla eklendi. Reaksiyona 4 saat oda sıcaklığında devam edildi. Vakum altında döner buharlaştırıcıda çözücüsü uzaklaştırıldı. Ham ürün etil alkolde kristallendirildi.

4. BULGULAR ve TARTIŞMA

Bu bölümde sentezlenen bileşikler üzerindeki numaralandırma sadece proton ve proton sayılarının yerlerini belirlemek amacıyla yapılmıştır. Bileşik adlandırmalarıyla ilgili bir numaralandırma değildir.

4.1. Deneysel Bulgular

4.1.1. 1,3-Bis-(4-vinilbenzil)imidazolidin-2-tiyon (1) Karakterizasyonu



Erime Noktası: 316 °C'de erimedi.

Kararık kömürleşti.

% Verim: 68

Kimyasal Formül: C₂₁H₂₂N₂S

Molekül Ağırlığı: 334,48

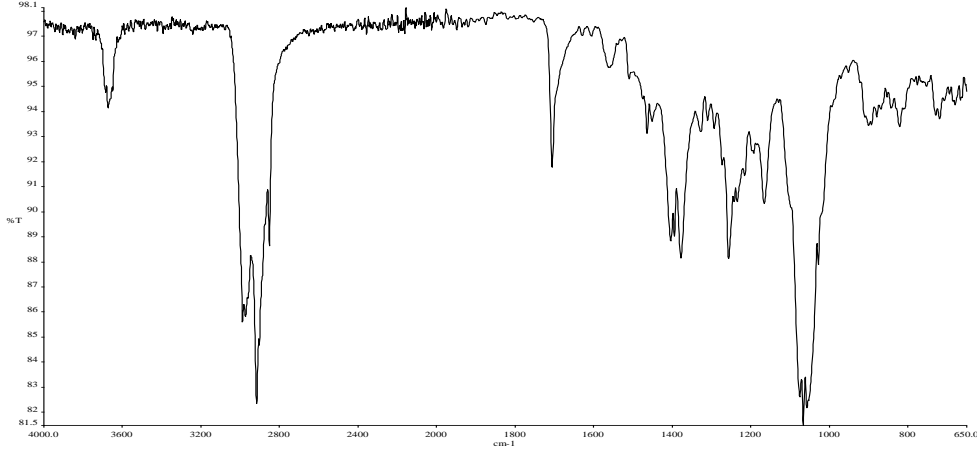
Şekil 4.1 1,3-Bis-(4-vinilbenzil)imidazolidin-2-tiyon bileşiği

IR (ATR, cm⁻¹): 3098-3058 (Aromatik C-H gerilme titreşimi), 2921-2865 (Alifatik C-H gerilme titreşimi), 1678 (Aromatik C=C gerilme titreşimi), 1623 (C-N gerilme titreşimi), 1112 (Alifatik C=C eğilme titreşimi), 819 (C=S eğilme titreşimi)

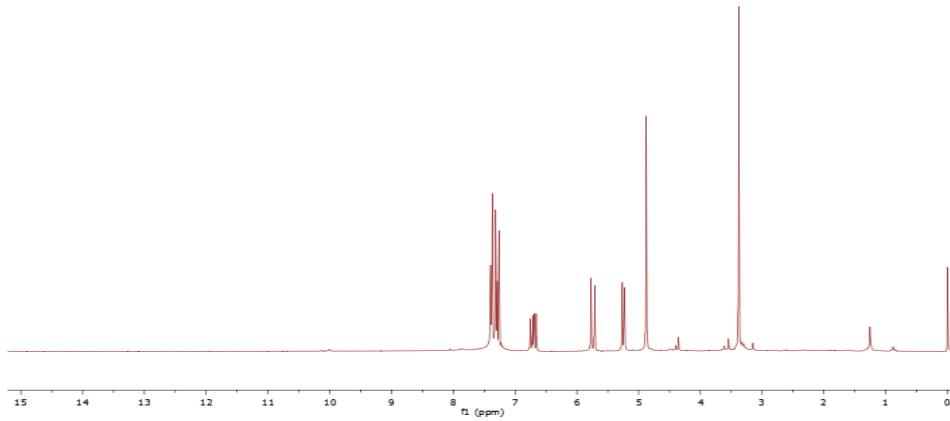
¹H-NMR: (300 MHz, DMSO-d₆) δ 3.40 (H₂, 2H), 3.40 (H₁, 2H), 4.87 (H₃₁, 2H), 5.25 (H₃₇, 1H), 5.25 (H₃₉, 1H), 5.75 (H₄₁, 2H), 5.75 (H₄₄, 2H), 7.30 (J=6 Hz, H_{21,23}, 2H), 7.30 (J=6 Hz, H_{25,27}, 2H), 7.38 (J=6 Hz, H_{15,16}, 2H), 7.38 (J=6 Hz, H_{10,12}, 2H)

¹³C-NMR: (300 MHz, DMSO-d₆) δ 45.43 (C-1 ve C-2), 51.06 (C-31 ve C-34), 114.00 (C-41 ve C-44), 128.09 (C-23 ve C-27), 126.24 (C-10, C-12, C-15 ve C-16),

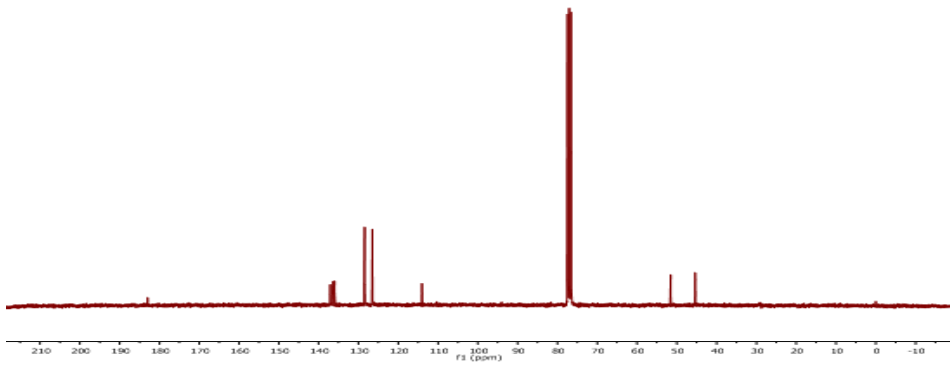
128.09 (C-21 ve C-25), 136.01 (C-29 ve C-30), 136.02 (C-37 ve C-39), 137.09 (C-11 ve C-17), 182.88 (C-7)



Şekil 4.2 (1) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu

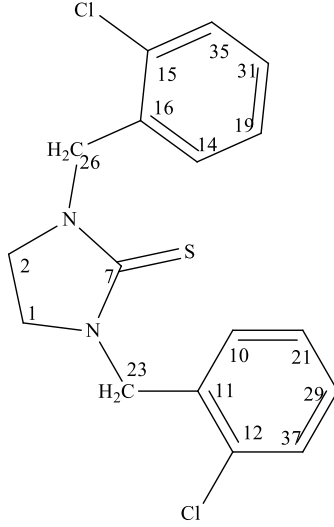


Şekil 4.3 (1) No'lu bileşiğin ¹H-NMR spektrumu (DMSO-d₆, 300 MHz)



Şekil 4.4 (1) No'lu bileşiğin ¹³C-NMR spektrumu (DMSO-d₆, 300 MHz)

4.1.2. 1,3-Bis-(2-klorobenzil)imidazolidin-2-tiyon (2) Karakterizasyonu



Erime Noktası: 113,8 °C

% Verim: 63

Kimyasal Formül: C₁₇H₁₆Cl₂N₂S

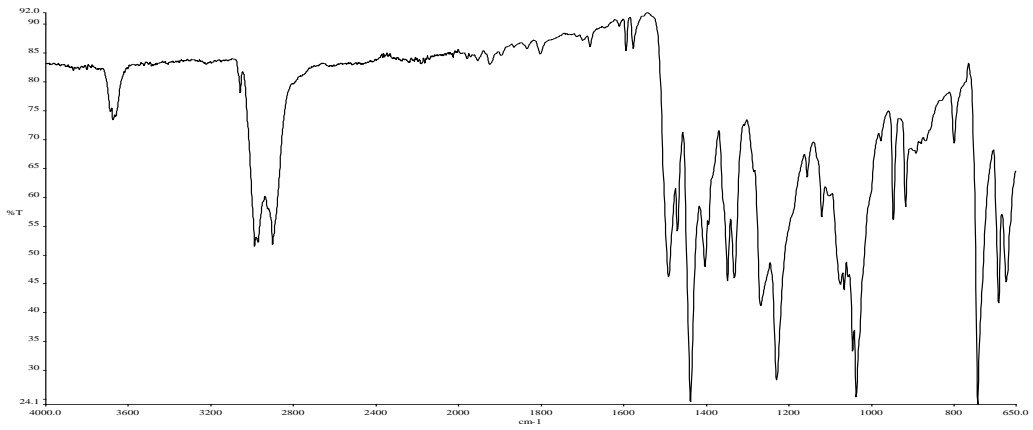
Molekül Ağırlığı: 351,29

Şekil 4.5 1,3-Bis-(2-klorobenzil)imidazolidin-2-tiyon bileşiği

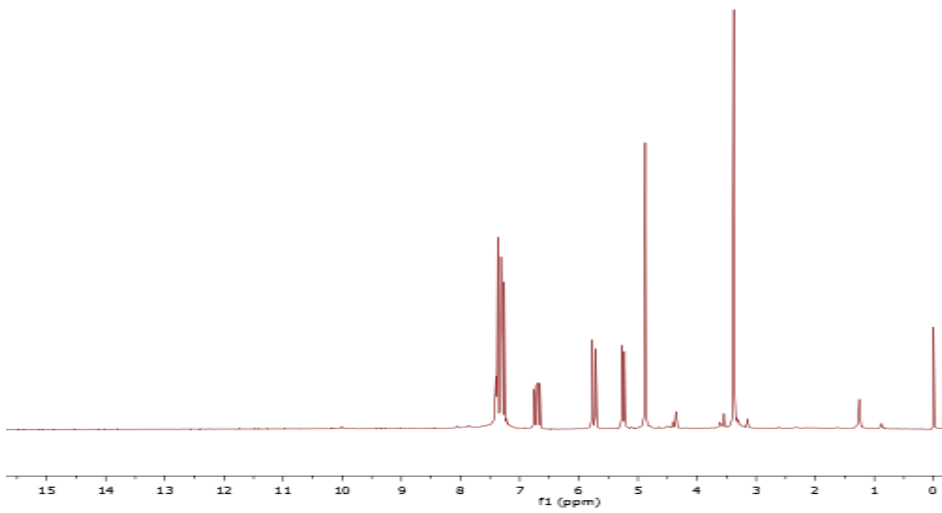
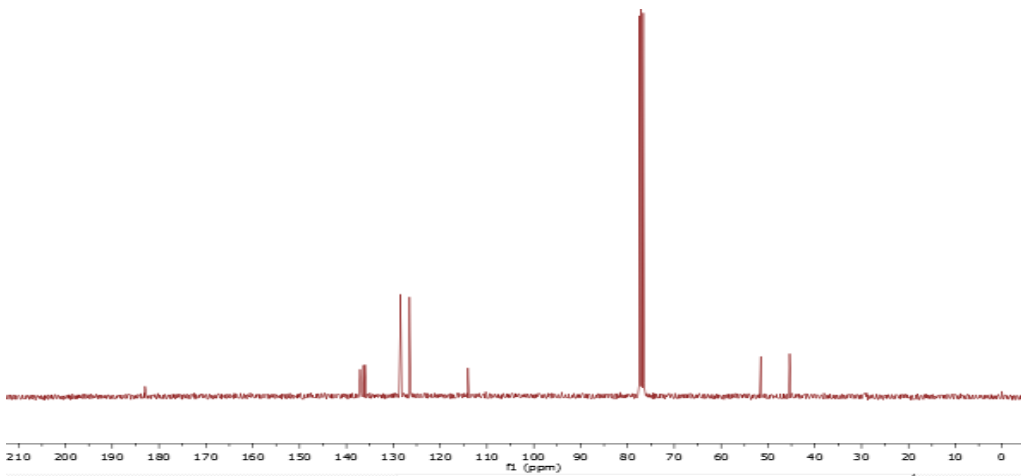
IR (ATR, cm⁻¹): 3068-3043 (Aromatik C-H gerilme titreşimi), 2987-2896 (Alifatik C-H gerilme titreşimi), 1678 (Aromatik C=C gerilme titreşimi), 1592 (C-N gerilme titreşimi), 799 (C=S eğilme titreşimi), 741 (C- Cl eğilme titreşimi)

¹H-NMR: (300 MHz, CDCl₃-d) δ 3.47 (H₂, 2H), 3.47 (H₁, 2H), 5.02 (H₂₃, 2H), 5.02 (H₂₆, 2H), 7.25 (H_{19,21, 29, 31} 4H), 7.38 (H_{35,37} 2H), 7.47 (H_{10,14}, 2H)

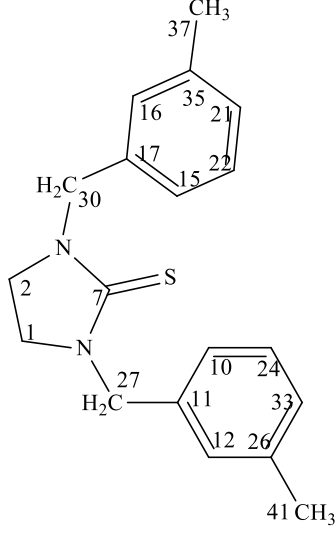
¹³C-NMR: (300 MHz, CDCl₃-d) δ 45.73 (C-1ve C-2), 48.73 (C-23 ve C-26), 127.23 (C-19 ve C-21), 128.92 (C-29ve C-31), 129.57 (C-33, C-35), 129.85 (C-10 ve C-14), 133.68 (C-11 ve C-16), 133.92 (C-12 ve C-15), 183.55 (C-7)



Şekil 4.6 (2) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu

Şekil 4.7 (2) No'lu bileşiğin ¹H-NMR spektrumu (CDCl₃-d, 300 MHz)Şekil 4.8 (2) No'lu bileşiğin ¹³C-NMR spektrumu (CDCl₃-d, 300 MHz)

4.1.3. 1,3-Bis-(3-metilbenzil)imidazolidin-2-tiyon (3) Karakterizasyonu



Erime Noktası: 146,9 °C

% Verim: 64

Kimyasal Formül: C₁₉H₂₂N₂S

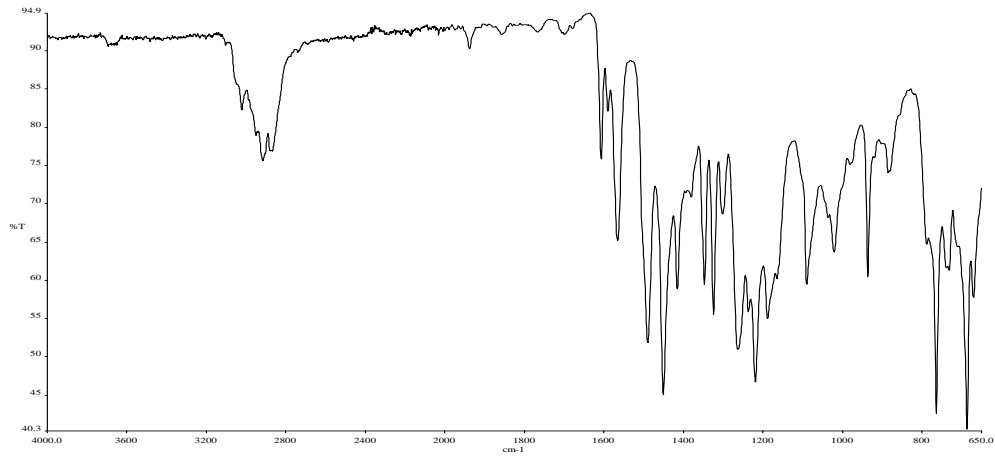
Molekül Ağırlığı: 310,46

Şekil 4.9 1,3-Bis-(3-metilbenzil)imidazolidin-2-tiyon bileşiği

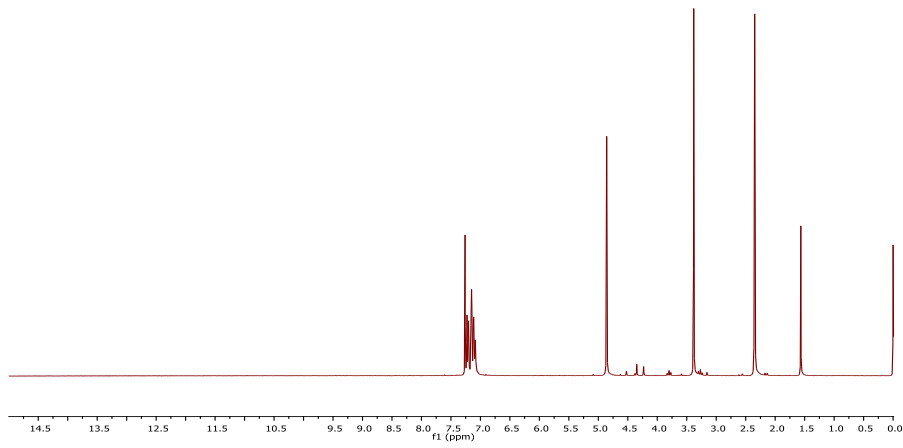
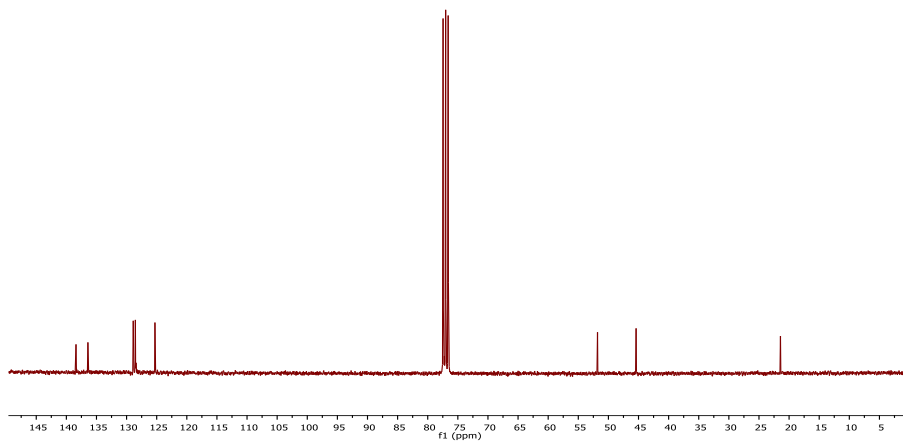
IR (ATR, cm⁻¹): 3078–3017 (Aromatik C-H gerilme titreşimi), 2936-2886 (Alifatik C-H gerilme titreşimi), titreşimi), 1605 (C-N gerilme titreşimi), 1587 (Aromatik C=C gerilme), 761.23 (C=S eğilme titreşimi)

¹H-NMR: (300 MHz, CDCl₃-d) δ 2.32 (H₄₁, 3H), 2.32 (H₃₇, 3H), 3.38 (H₃₀, 2H), 3.38 (H₂₇, 2H), 4.85 (H₂, 2H), 4.85 (H₁, 2H)

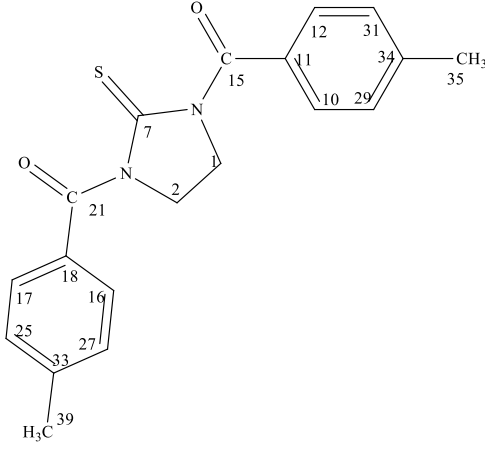
¹³C-NMR: (300 MHz, CDCl₃-d) δ 21.54 (C-37ve C-41), 45.13 (C-1 ve C-2), 52.44 (C-27 ve C-30), 124.89 (C-10ve C-15), 128.57 (C-12, C-16, C-22, C-24, C-33, C-35), 136.53 (C-21 ve C-26), 138.49 (C-11 ve C-17), 182.88 (C-12 ve C-15)



Şekil 4.10 (3) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu

Şekil 4.11 (3) No'lu bileşiğin ¹H-NMR spektrumu (CDCl₃-d, 300 MHz)Şekil 4.12 (3) No'lu bileşiğin ¹³C-NMR spektrumu (CDCl₃-d, 300 MHz)

4.1.4. 1,3-Bis-(4-metilbenzoil)imidazolidin-2-tiyon (4) Karakterizasyonu



Erime Noktası: 166,9 °C

% Verim: 68

Kimyasal Formül: C₁₉H₁₈N₂O₂S

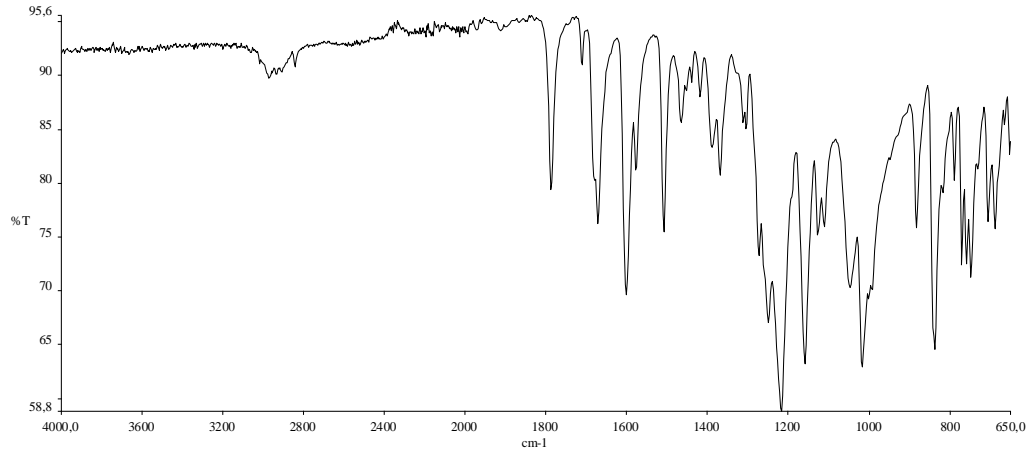
Molekül Ağırlığı: 338,42

Şekil 4.13 1,3-Bis-(4-metilbenzoil)imidazolidin-2-tiyon bileşiği

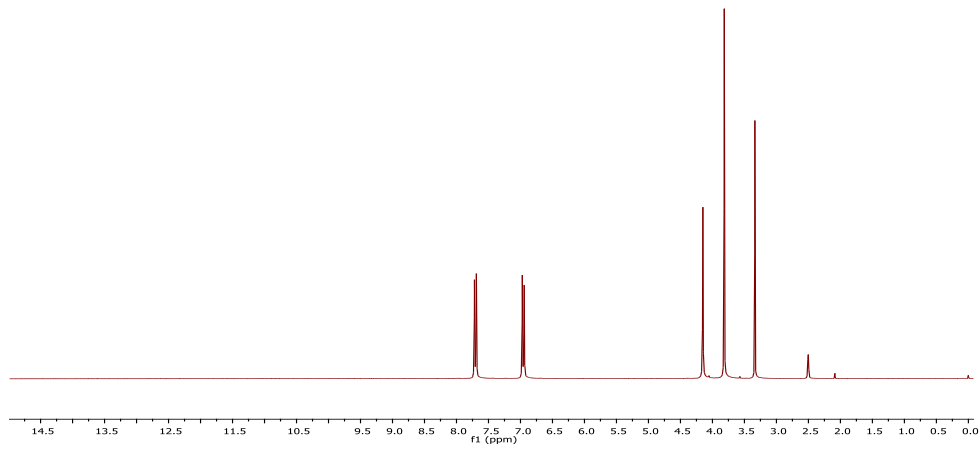
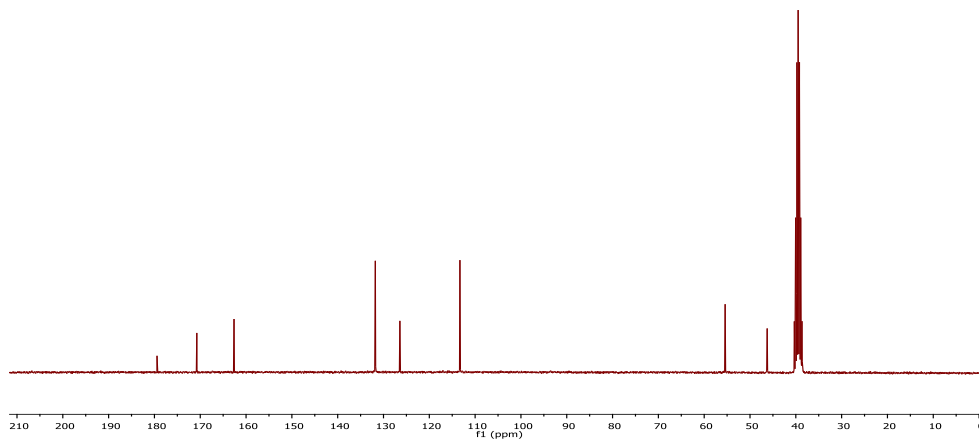
IR (ATR, cm⁻¹): 3012–2951 (Aromatik C-H gerilme titreşimi), 2855-2815 (Alifatik C-H gerilme titreşimi), 1787 (C=O gerilme titreşimi), 1603 (C-N gerilme titreşimi), 1507 (Aromatik C=C gerilme), 791 (C=S eğilme titreşimi)

¹H-NMR: (300 MHz, DMSO-d₆) δ 3.81 (H₃₉, 3H), 3.81 (H₃₅, 3H), 4.13 (H₂, 2H), 4.13 (H₁, 2H), 6.95 (J=6 Hz, H_{29,31}, 2H), 6.95 (J=6 Hz, H_{25,27}, 2H), 7.71 (J=6 Hz, H_{16,17}, 2H), 7.71 (J=6 Hz, H_{10,12}, 2H)

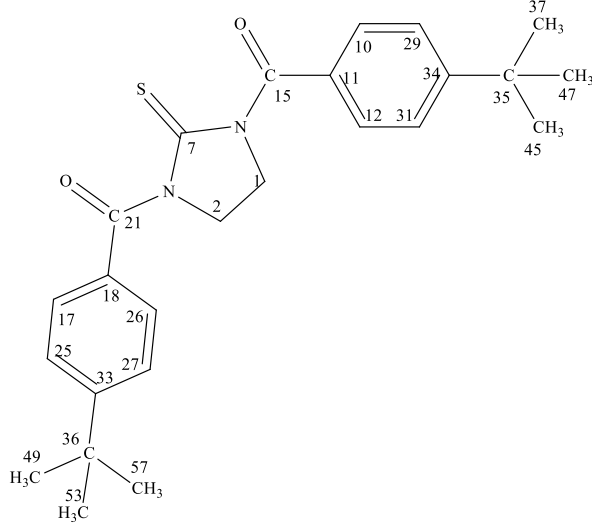
¹³C-NMR: (300 MHz, DMSO-d₆) δ 45.90 (C-35 ve C-39), 55.42 (C-1 ve C-2), 113.26 (C-25, C-27, C-29 ve C-31), 126.42 (C-10, C-16, C-17), 131.79 (C-11, C-18), 162.17 (C-33 ve C-34), 170.81 (C-15 ve C-21), 179.07 (C-7)



Şekil 4.14 (4) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu

Şekil 4.15 (4) No'lu bileşiğin ¹H-NMR spektrumu (DMSO-d₆, 300 MHz)Şekil 4.16 (4) No'lu bileşiğin ¹³C-NMR spektrumu (DMSO-d₆, 300 MHz)

4.1.5. 1,3-Bis-(4-tertiyerbütılbenzoil)imidazolidin-2-tiyon (5) Karakterizasyonu



Erime Noktası: 214,9 °C

% Verim: 70

Kimyasal Formül: C₂₅H₃₀N₂O₂S

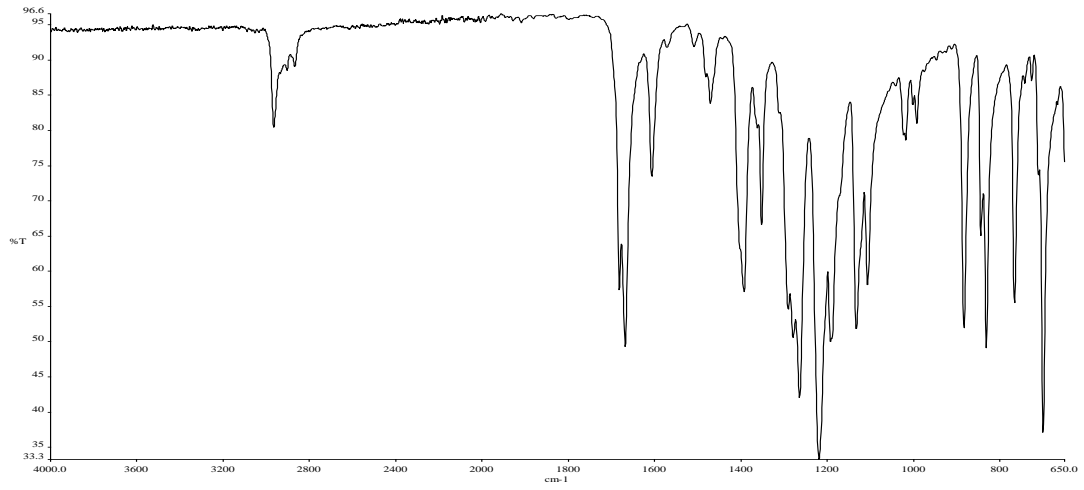
Molekül Ağırlığı: 422,58

Şekil 4.17 1,3-Bis-(4-tertiyerbütılbenzoil)imidazolidin-2-tiyon bileşiği

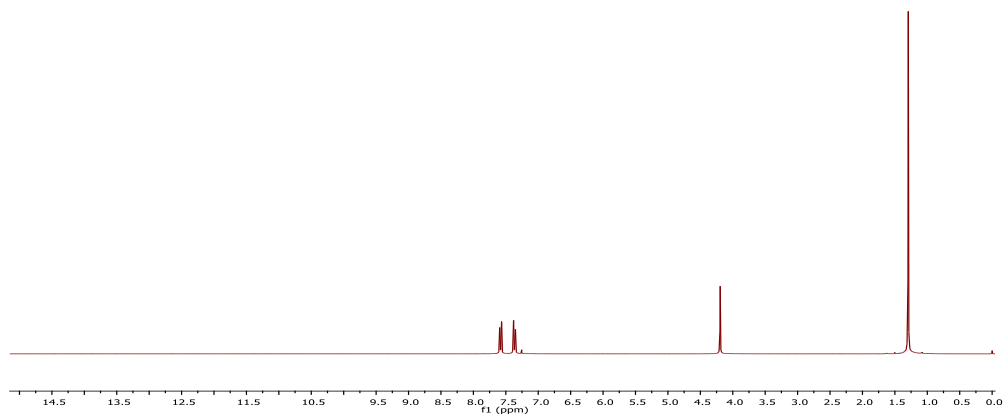
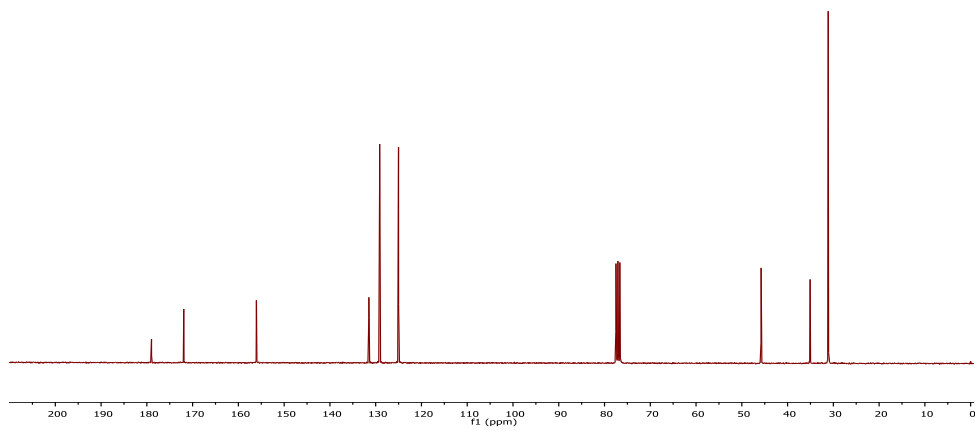
IR (ATR, cm⁻¹): 2982–2946 (Aromatik C-H gerilme titreşimi), 2875 - 2845 (Alifatik C-H gerilme titreşimi), 1666 (C=O gerilme titreşimi), 1603 (C-N gerilme titreşimi), 1466 (Aromatik C=C gerilme), 763 (C=S eğilme titreşimi)

¹H-NMR: (300 MHz, CDCl₃-d) δ 1.28 (H₅₇, 3H), 1.28 (H₅₃, 3H), 1.28 (H₄₉, 3H), 4.19 (H₂, 2H), 4.19 (H₁, 2H), 7.37 (J=9 Hz, H_{29,31}, 2H), 7.37 (J=9Hz, H_{25,27}, 2H), 7.58 (J=9 Hz, H_{17,26}, 2 H), 7.58 (J=9Hz, H_{10,12}, 2H)

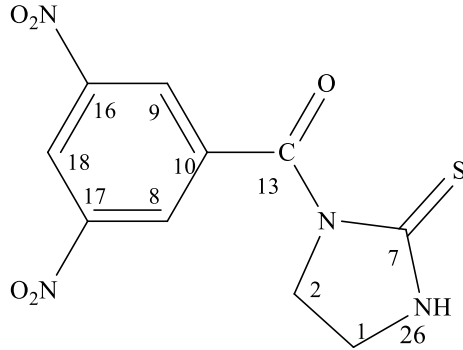
¹³C-NMR: (300 MHz, CDCl₃-d) δ 35.07 (C-37, C-41, C-45, C- 49, C- 53ve C-57), 42.60 (C-35 ve C-36), 45.79 (C-1 ve C-2), 125.06 (C-25, C-29 ve C-31), 129.13 (C-10, C-12, C-16, C-17), 131.49 (C-11 ve C-18), 156.96 (C-33 ve C-34), 171.93 (C-15 ve C-21), 179.86 (C-7)



Şekil 4.18 (5) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu

Şekil 4.19 (5) No'lu bileşiğin ¹H-NMR spektrumu (CDCl₃-d, 300 MHz)Şekil 4.20 (5) No'lu bileşiğin ¹³C-NMR spektrumu (CDCl₃-d, 300 MHz)

4.1.6. 3-(3,5-dinitrobenzoil)-1H-imidazolidin-2-tiyon (6) Karakterizasyonu



Erime Noktası: 216,7 °C

% Verim: 75

Kimyasal Formül: C₁₉H₈N₄O₅S

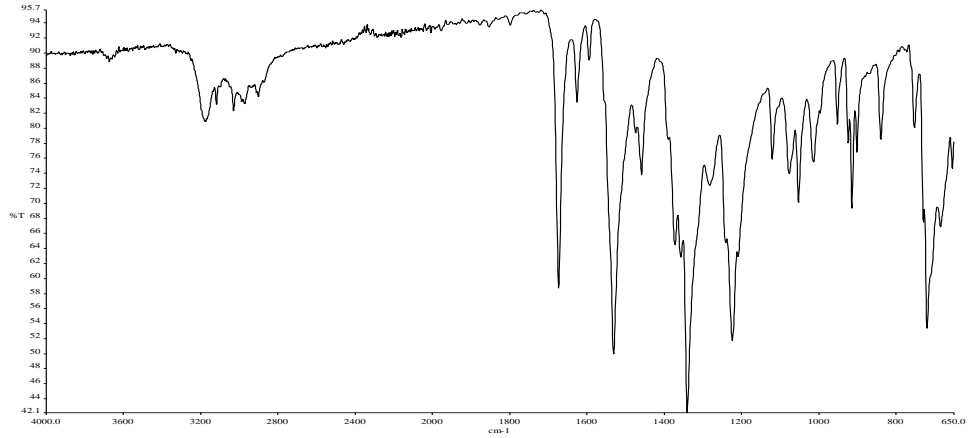
Molekül Ağırlığı: 296,26

Şekil 4.21 3-(3,5-dinitrobenzoil)-1H-imidazolidin-2-tiyon bileşiği

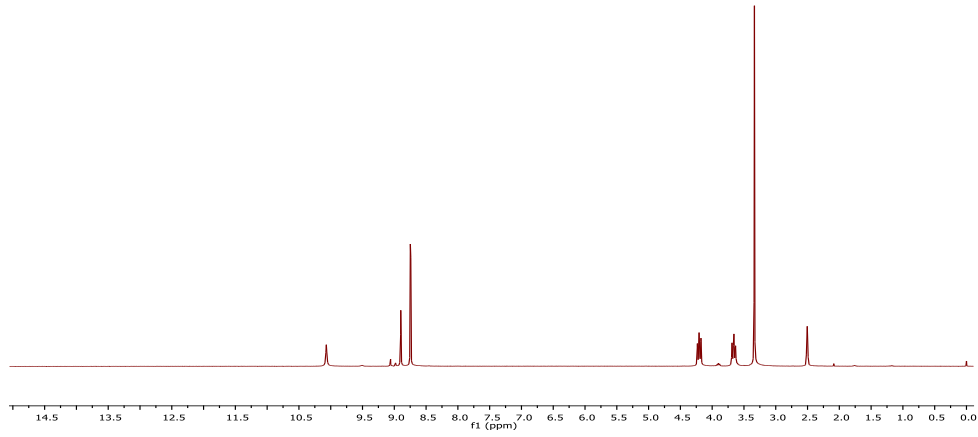
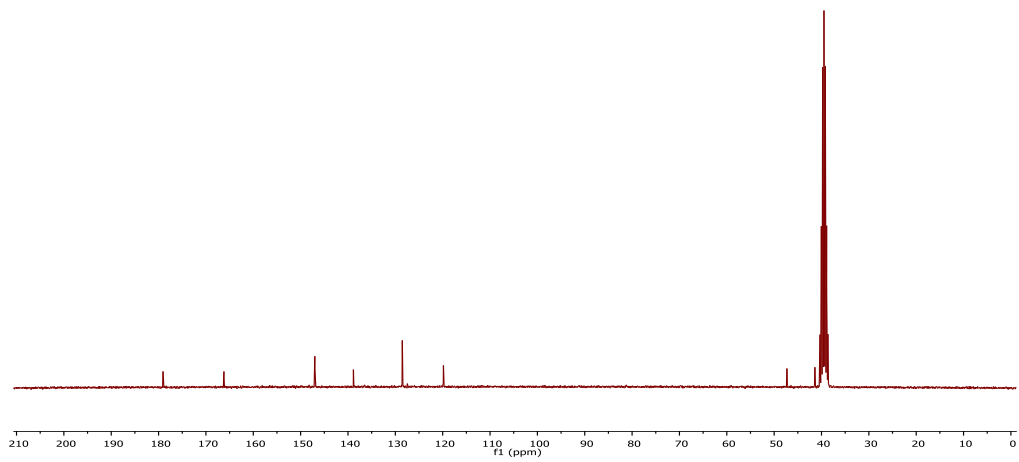
IR (ATR, cm⁻¹): 3220–3129 (Aromatik C-H gerilme titreşimi), 2926-2881 (Alifatik C-H gerilme titreşimi), 1671 (C=O gerilme titreşimi), 1623 (C-N gerilme titreşimi), 1458 (Aromatik C=C gerilme), 718 (C=S eğilme titreşimi)

¹H-NMR: (300 MHz, DMSO-d₆) δ 3.36 (J=6Hz, H₂, 2H), 4.19 (J=6Hz, H₁, 2H), 8.74 (H_{8,9}, 2H), 8.91 (H₁₈, 1H), 10.07 (H₂₆, 1H)

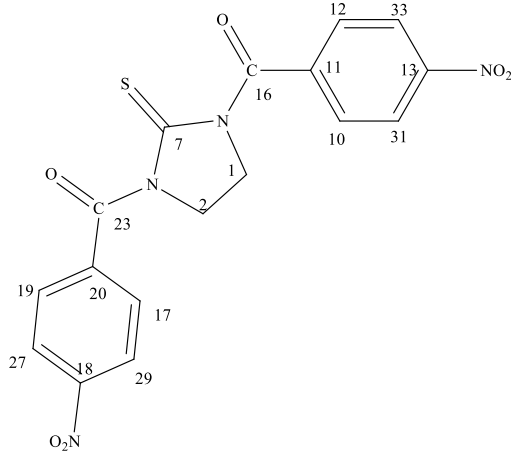
¹³C-NMR: (300 MHz, DMSO-d₆) δ 41.25 (C-1), 47.26 (C-2), 119.81 (C-18), 128.07 (C-8), 138.96 (C-9, C-10), 146.93 (C-16 ve C-17), 165.78 (C-13), 178.70 (C-7)



Şekil 4.22 (6) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu

Şekil 4.23 (6) No'lu bileşiğin ¹H-NMR spektrumu (DMSO-d₆, 300 MHz)Şekil 4.24 (6) No'lu bileşiğin ¹³C-NMR spektrumu (DMSO-d₆, 300 MHz)

4.1.7. 1,3-Bis-(4-nitrobenzoil)imidazolidin-2-tiyon (7) Karakterizasyonu



Erime Noktası: 71,1 °C

% Verim: 46

Kimyasal Formül: C₁₇H₁₂N₄O₆S

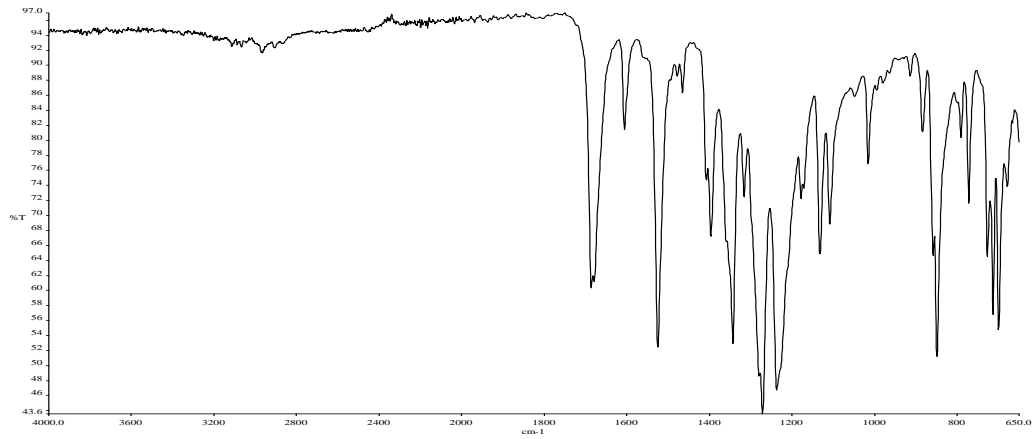
Molekül Ağırlığı: 400,37

Şekil 4.25 1,3-Bis-(4-nitrobenzoil)imidazolidin-2-tiyon bileşiği

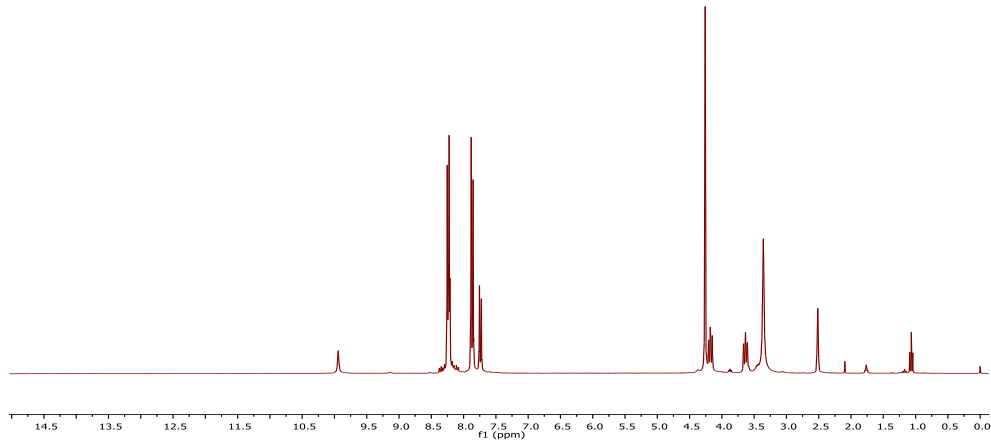
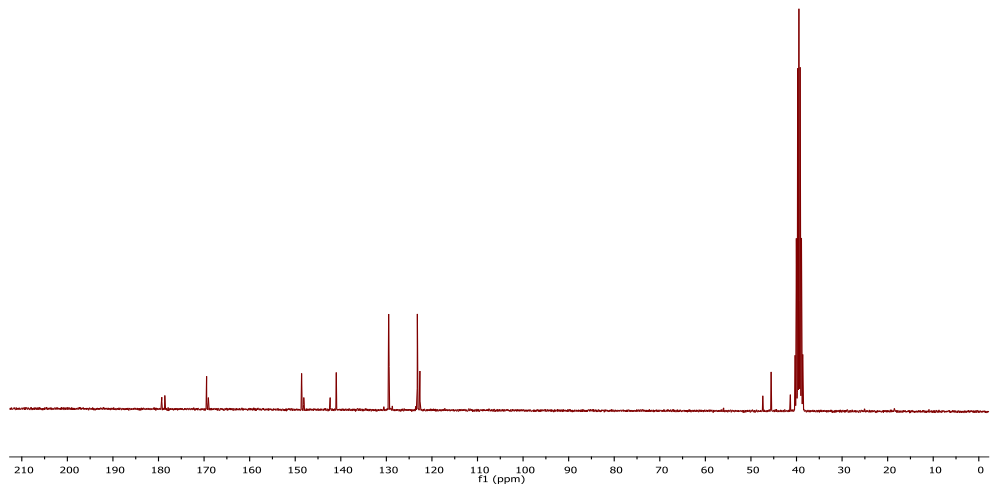
IR (ATR, cm⁻¹):2962-2896 (Alifatik C-H gerilme titreşimi), 1683 (C=O gerilme titreşimi), 1603(C-N gerilme titreşimi), 1522 (Aromatik C=C gerilme), 789 (C=S eğilme titreşimi)

¹H-NMR: (300 MHz, DMSO-d₆) δ 4.25 (H_{1,2}, 4H), 7.87 (J= 9 Hz, H_{10,12,17,19}, 4H), 8.24 (J= 9 Hz, H_{27,29,32,32} 4H)

¹³C-NMR: (300 MHz, DMSO-d₆) δ 45.60 (C-1, C-2), 123.12 (C-27, C-29, C-31, C-33), 129.05 (C-10, C-12, C-17, C-19), 140.62 (C-11, C-20, 148.58 (C-13, C-18), 169.46 (C-16, C-23), 178.40 (C-7)

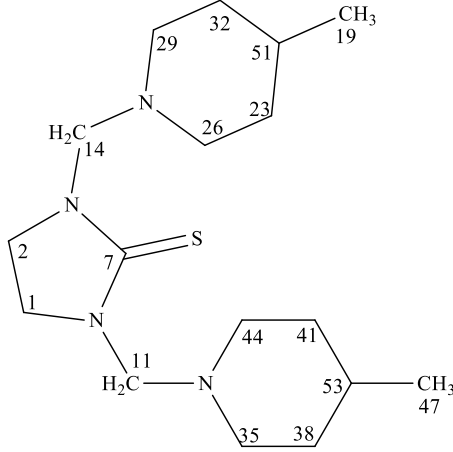


Şekil 4.26 (7) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu

Şekil 4.27 (7) No'lu bileşiğin ¹H-NMR spektrumu (DMSO-d₆, 300 MHz)Şekil 4.28 (7) No'lu bileşiğin ¹³C-NMR spektrumu (DMSO-d₆, 300 MHz)

4.1.8. 1,3-Bis-(4-metilpiperidin-1-il-metil)-imidazolidin-2-tiyon (8)

Karakterizasyonu



Erime Noktası: 151,8 °C

% Verim: 78

Kimyasal Formül: C₁₇H₃₂N₄S Molekül

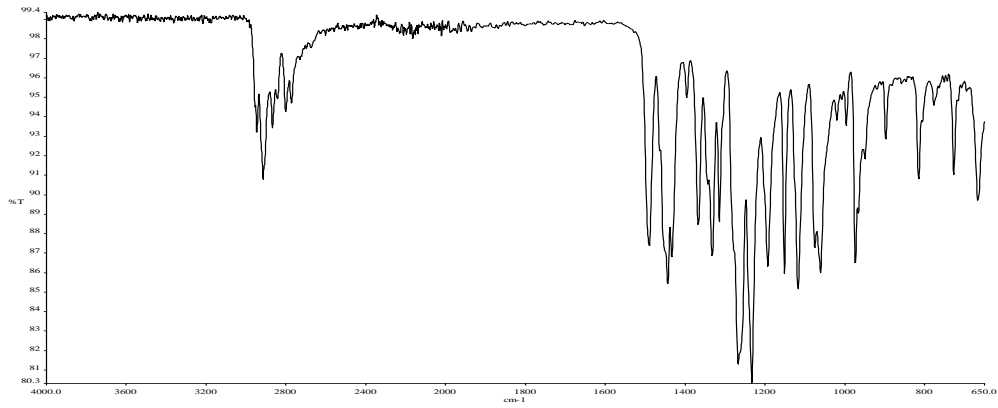
Ağırlığı: 324,53

Şekil 4.29 1,3-Bis-(4-metilpiperidin-1-il-metil)-imidazolidin-2-tiyon bileşiği

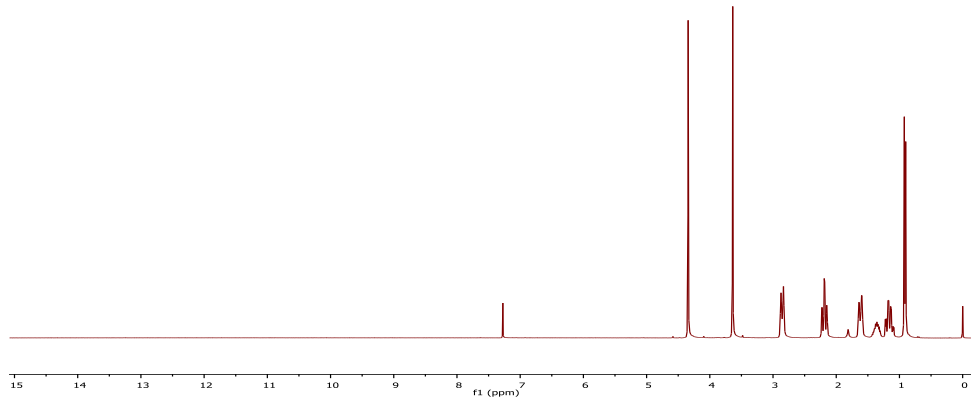
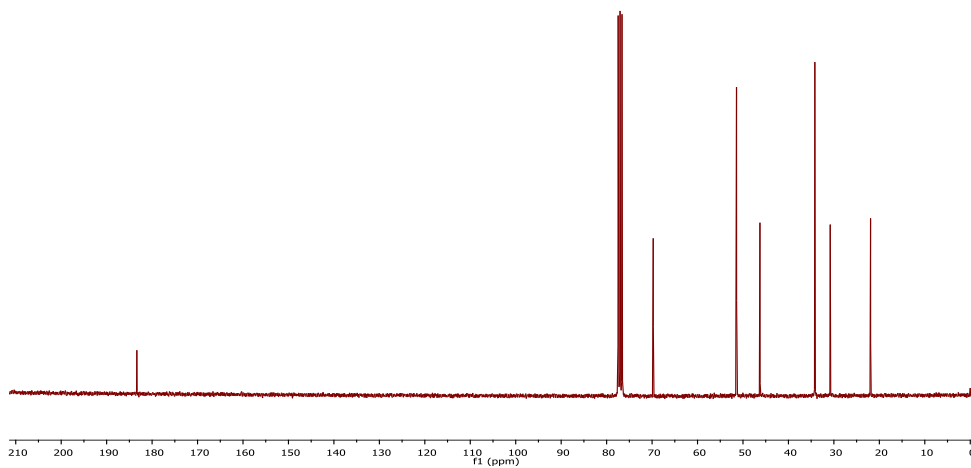
IR (ATR, cm⁻¹): 2946-2865 (Alifatik C-H gerilme titreşimi), 1489 (C-N gerilme titreşimi), 773 (C=S eğilme titreşimi)

¹H-NMR: (300 MHz, CDCl₃-d) δ 0.91 (H_{19,47}, 2H), 0.99 (H_{19,29,38,47}, 5H), 2.19 (H_{19,26,29,32,38,41,51,53}, 10H), 2.85 (H_{26,29,35,44}, 7H), 3.63 (H_{1,2}, 4H), 4.32 (H₁₄, 1H), 4.32 (H_{11,14}, 2H)

¹³C-NMR: (300 MHz, CDCl₃-d) δ 21.54 (C-19, C-47), 29.50 (C-51, C-53), 34.16 (C-23, C-32, C-38 ve C-41), 51.06 (C-44), 45.73 (C-1 ve C-2), 51.06 (C-26 ve C-29), 69.61 (C-11 ve C-14), 183.18 (C-7)

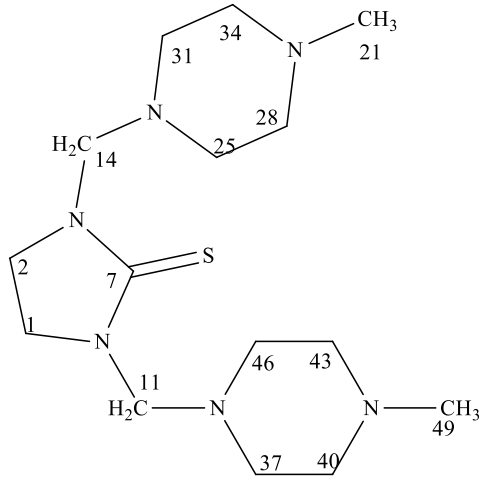


Şekil 4.30 (8) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu

Şekil 4.31 (8) No'lu bileşiğin ¹H-NMR spektrumu (CDCl₃-d, 300 MHz)Şekil 4.32 (8) No'lu bileşiğin ¹³C-NMR spektrumu (CDCl₃-d, 300 MHz)

4.1.9. 1,3-Bis-(4-metilpiperazin-1-il-metil)imidazolidin-2-tiyon (9)

Karakterizasyonu



Erime Noktası: 96,5 °C

% Verim: 83

Kimyasal Formül: C₁₅H₃₀N₆S

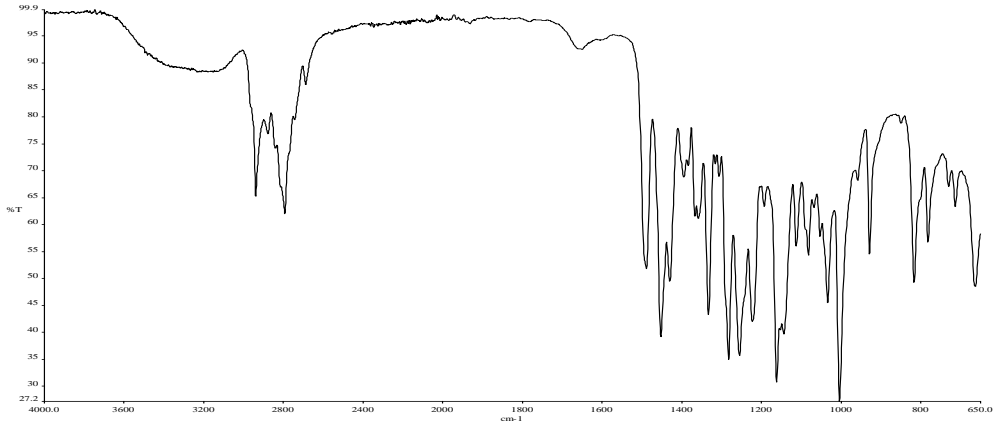
Molekül Ağırlığı: 326,50

Şekil 4.33 1,3-Bis-(4-metilpiperazin-1-il-metil)imidazolidin-2-tiyon bileşiği

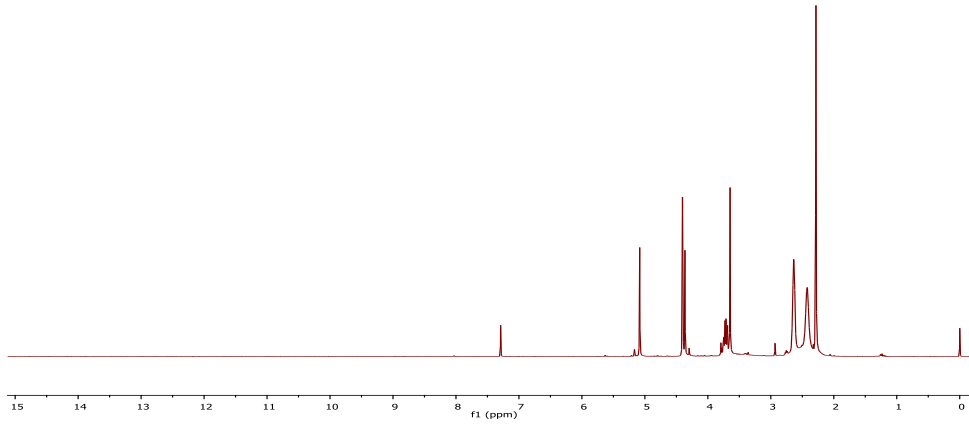
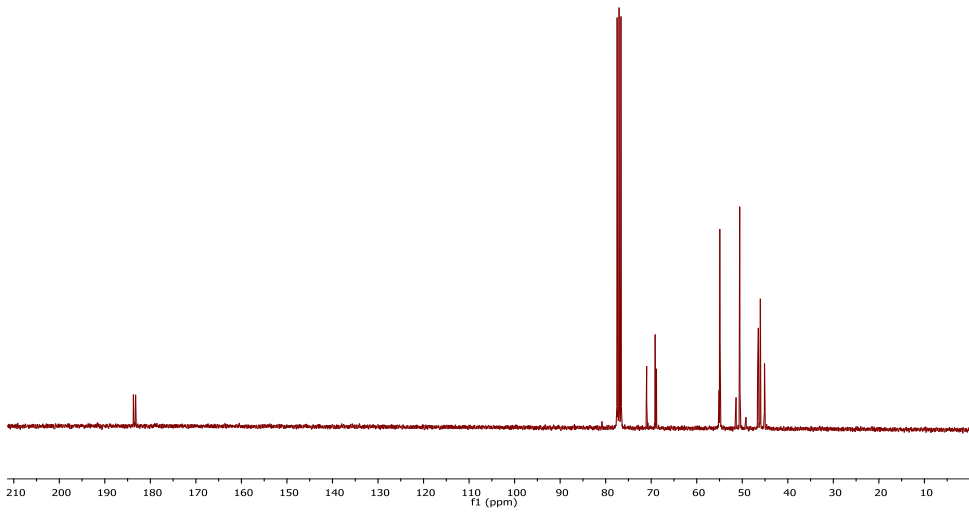
IR (ATR, cm⁻¹): 2936-2784 (Alifatik C-H gerilme titreşimi), 1673 (C-N gerilme titreşimi), 778 (C=S eğilme titreşimi)

¹H-NMR: (300 MHz, CDCl₃-d) δ 2.28 (H_{21,25,37,40,43,49}, 7H), 2.42 (H_{21,28,31,37,49}, 6 H), 2.63 (H_{25,28,31,40,43,46}, 6H), 3.65 (H_{1,2}, 4H), 4.58 (H_{11,14}, 2H), 5.08 (H_{11,14}, 2H)

¹³C-NMR: (300 MHz, CDCl₃-d) δ 46.03 (C-21, C-28 ve C-49), 46.47 (C-1, C-2), 50.38 (C-31, C-34, C-38 ve C-46), 54.67 (C-25, C-37, C-40, C-43), 69.24 (C-11 ve C-14), 183.18(C-7)

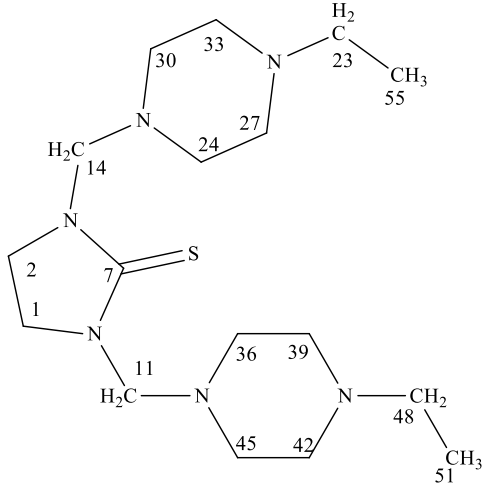


Şekil 4.34 (9) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu

Şekil 4.35 (9) No'lu bileşiğin ¹H-NMR spektrumu (CDCl₃-d, 300 MHz)Şekil 4.36 (9) No'lu bileşiğin ¹³C-NMR spektrumu (CDCl₃-d, 300 MHz)

4.1.10. 1,3-Bis-(4-etilpiperazin-1-il-metil)imidazolidin-2-tiyon (10)

Karakterizasyonu



Erime Noktası: 131,9 °C

% Verim: 85

Kimyasal Formül: C₁₇H₃₄N₆S

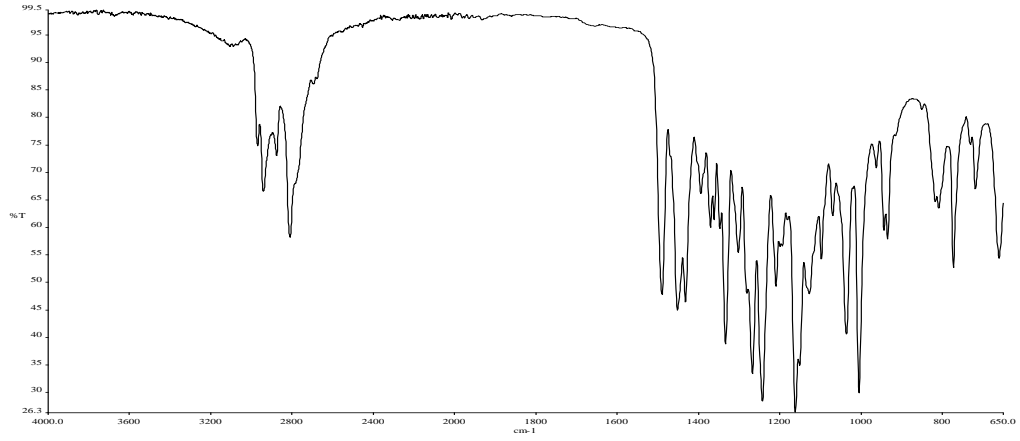
Molekül Ağırlığı: 354,56

Şekil 4.37 1,3-Bis-(4-etilpiperazin-1-il-metil)imidazolidin-2-tiyon bileşiği

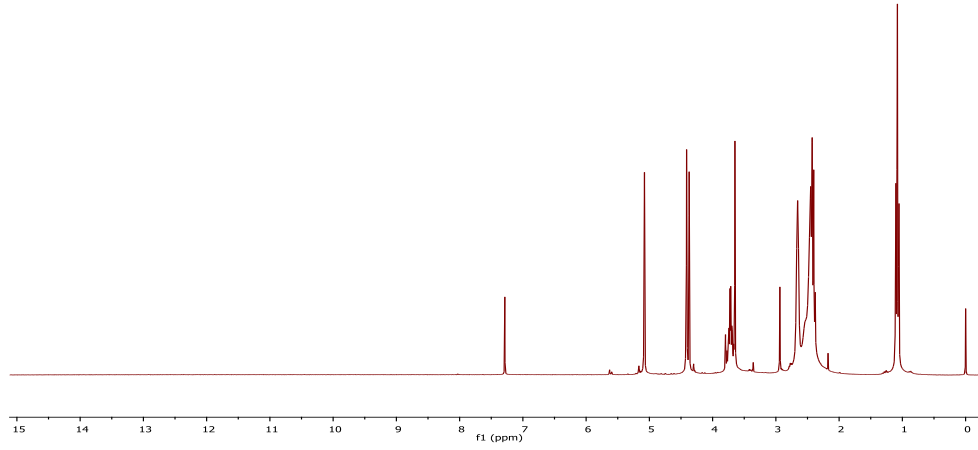
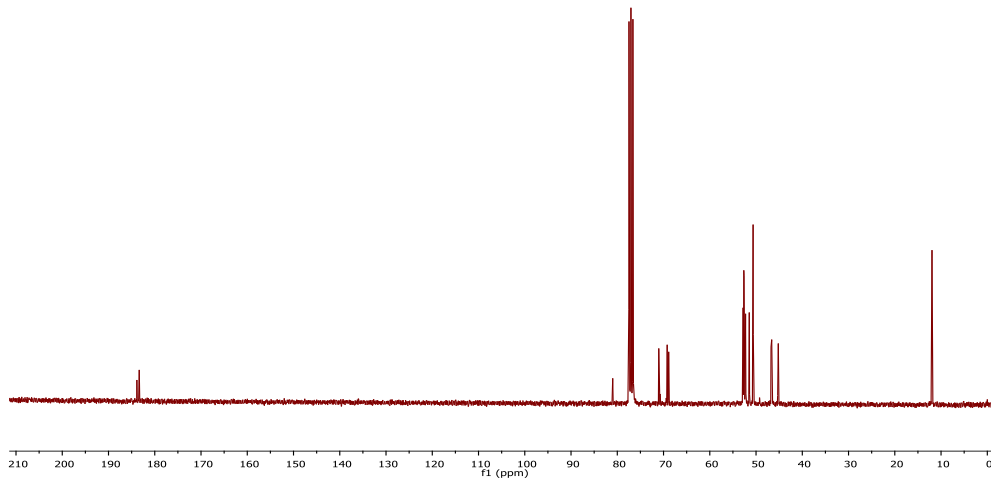
IR (ATR, cm⁻¹): 2962-2810 (Alifatik C-H gerilme titreşimi), 1486 (C-N gerilme titreşimi), 768 (C=S eğilme titreşimi)

¹H-NMR: (300 MHz, CDCl₃-d) δ 1.08 (H_{51,55}, 6 H), 2.42 (H_{21,24,27,30,33,36,39,42,45,48}, 14H), 2.66 (H_{24,27,30,33,42,45}, 6H), 3.65 (H_{1,2}, 4H), 4.39 (H_{11,16}, 2H), 5.07 (H_{11,14}, 2H)

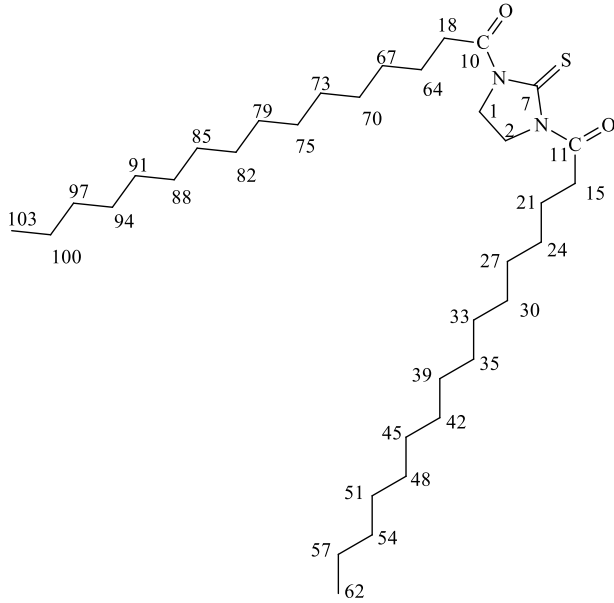
¹³C-NMR: (300 MHz, CDCl₃-d) δ 12.30 (C-51, C-55), 46.10 (C-1, C-2), 50.08 (C-24, C-27, C-30 ve C-45), 52.71 (C-33, C-36, C-42, C-48), 68.64 (C-21 ve C-39), 70.89 (C-11 ve C-14), 183.18 (C-7)



Şekil 4.38 (10) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu

Şekil 4.39 (10) No'lu bileşiğin ¹H-NMR spektrumu (CDCl₃-d, 300 MHz)Şekil 4.40 (10) No'lu bileşiğin ¹³C-NMR spektrumu (CDCl₃-d, 300 MHz)

4.1.11. 1,3-Bisheksadekanoilimidazolidin-2-tiyon (11)Karakterizasyonu



Erime Noktası: 113,8 °C

% Verim: 81

Kimyasa Formül: C₃₅H₆₆N₂O₂S

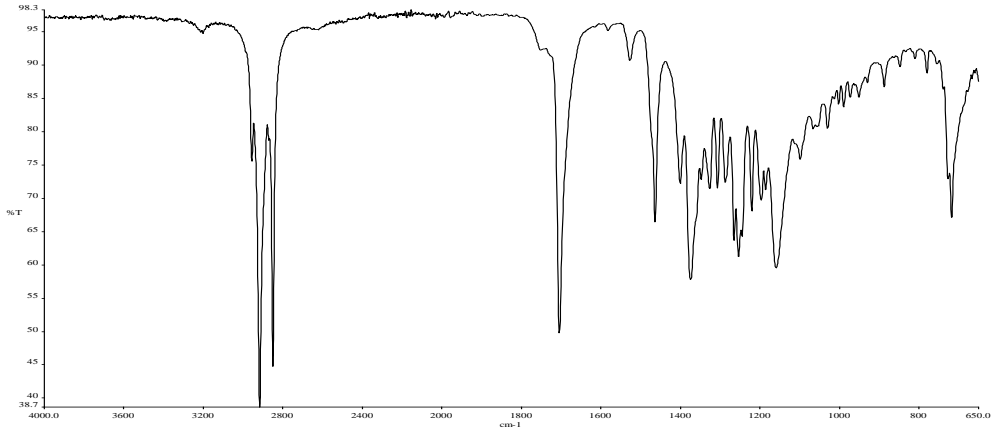
Molekül Ağırlığı: 578,98

Şekil 4.41 1,3-Bisheksadekanoilimidazolidin-2-tiyon bileşiği

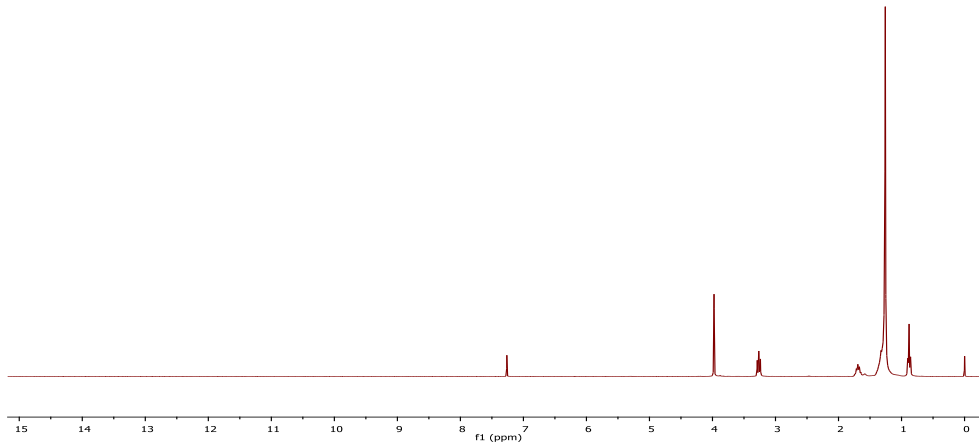
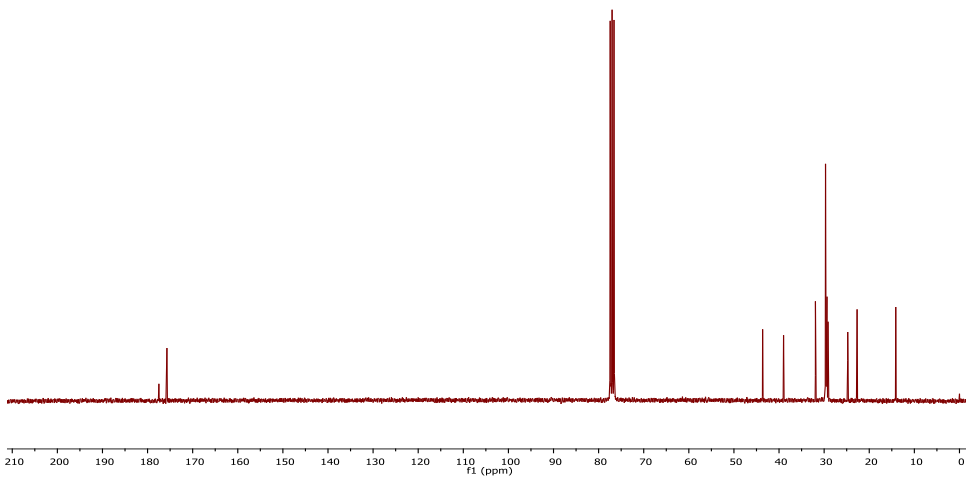
IR (ATR, cm⁻¹): 2911-2845 (Alifatik C-H gerilme titreşimi), 1704 (C=O gerilme titreşimi), 1461 (C-N gerilme titreşimi), 715 (C=S eğilme titreşimi)

¹H-NMR:(300 MHz, CDCl₃-d) δ 0.84 (H_{42,51,60,103},6H), 1.27 (H_{24,27,30,33,36,39,45,48,54,57,60,67,70,73,76,79,82,85,88,91,94,97,100,103}, 44H), 1.27 (H_{45,48}, 2H), 1.65 (H_{21,42,51,64}, 6H), 3.25 (H_{15,18}, 4H), 3.96 (H_{1,2}, 4H)

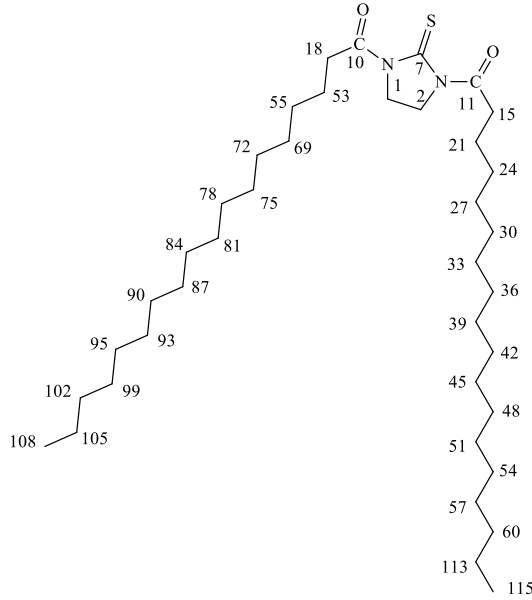
¹³C-NMR: (300 MHz, CDCl₃-d) δ 14.26 (C-60, C-103), 24.55 (C-57, C-100), 29.36 (C-21, C-64), 29.42 (C-45, C-48), 29.51 (C-42, C-51 ve C-67), 29.62 (C-24, C-27, C-39, C-70, C-76, C-82, C-88, C-94), 29.69 (C-30, C-33, C-36, C-73, C-79, C-85, C-91), 31.86 (C-54, C-97), 39.12 (C-1, C-2), 43.77 (C-15, C-18), 175.59 (C-10, C-11), 177.54 (C-7)



Şekil 4.42 (11) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu

Şekil 4.43 (11) No'lu bileşiğin ¹H-NMR spektrumu (CDCl₃-d, 300 MHz)Şekil 4.44 (11) No'lu bileşiğin ¹³C-NMR spektrumu (CDCl₃-d, 300 MHz)

4.1.12. 1,3-Bisoktadekanoilimidazolidin-2-tiyon (12) Karakterizasyonu



Erime Noktası: 86,9 °C

% Verim: 79

Kimyasal Formül: C₃₉H₇₄N₂O₂S

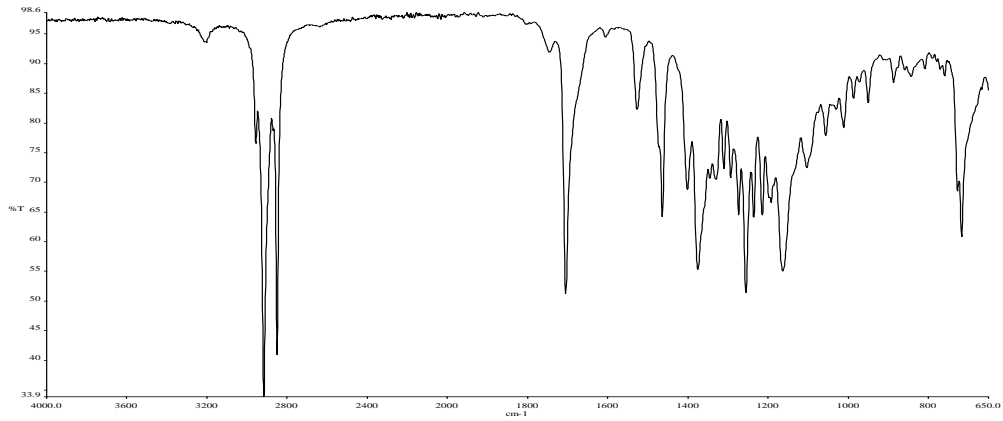
Molekül Ağırlığı: 635,08

Şekil 4.45 1,3-Bisoktadekanoilimidazolidin-2-tiyon bileşiği

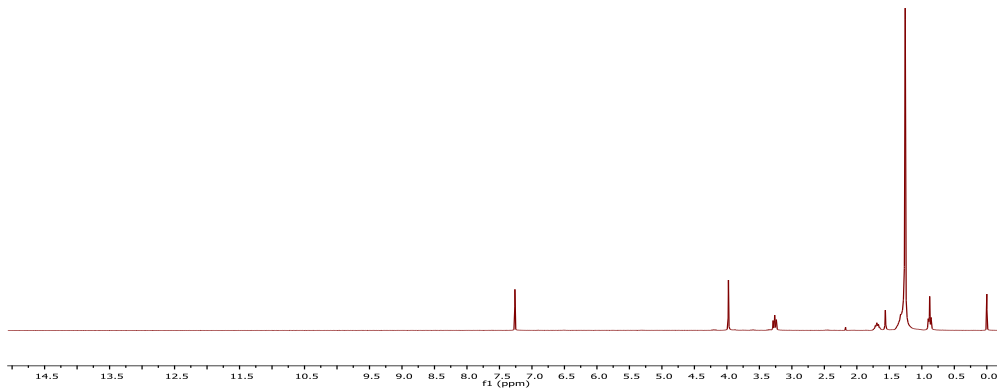
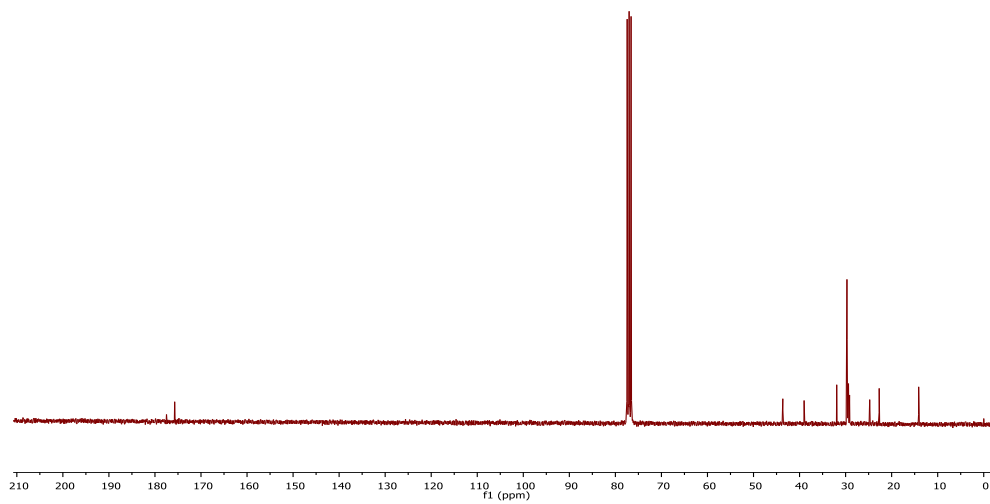
IR (ATR, cm⁻¹): 2951-2845 (Alifatik C-H gerilme titreşimi), 1701 (C=O gerilme titreşimi), 1458 (C-N gerilme titreşimi), 715 (C=S eğilme titreşimi)

¹H-NMR: (300 MHz, CDCl₃-d) δ 0.88 (H_{108,115}, 6 H), 1.26 (H_{33,36,39,42,45,48,51,54,57,60,75,78,81,84,87,90,93,96,99,102,105,112}, 41H), 1.55 (H_{30,42,51,72,112}, 7H), 1.69 (H_{27,69}, 4H), 2.17 (H_{21,24,63,66}, 8H), 3.26 (H_{1,2}, 4H), 3.99 (H_{15,18}, 4H)

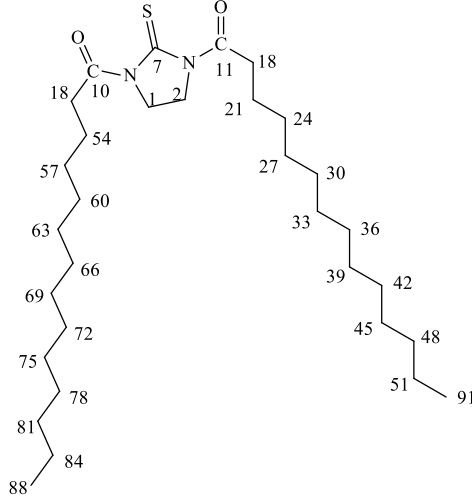
¹³C-NMR: (300 MHz, CDCl₃-d) δ 14.15 (C-108, C-115), 22.68 (C-112), 24.74 (C-105), 31.91 (C-21, C-63), 29.14 (C-57), 29.37 (C-51), 29.43 (C-45, C-48), 29.52 (C-66), 29.63 (C-24, C-42), 29.70 (C-27, C-30, C-33, C-36, C-39, C-54, C-60, C-69, C-72, C-75, C-78, C-81, C-84, C-84, C-87, C-90, C-93, C-96, C-99, C-102), 38.97 (C-15, C-18), 43.68 (C-1, C-2), 175.72 (C-10, C-11), 177.46 (C-7)



Şekil 4.46 (12) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu

Şekil 4.47 (12) No'lu bileşiğin ¹H-NMR spektrumu (CDCl₃-d, 300 MHz)Şekil 4.48 (12) No'lu bileşiğin ¹³C-NMR spektrumu (CDCl₃-d, 300 MHz)

4.1.13. 1,3-Bistetradekanoilimidazolidin-2-tiyon (13) Karakterizasyonu



Erime Noktası: 71,1 °C

% Verim: 82

Kimyasal Formül: C₃₁H₅₈N₂O₂S

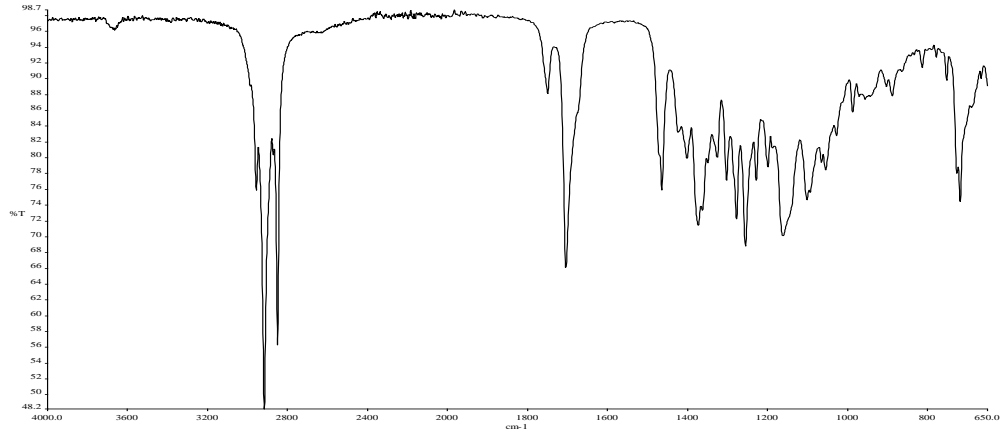
Molekül Ağırlığı: 522,87

Şekil 4.49 1,3-Bistetradekanoilimidazolidin-2-tiyon bileşiği

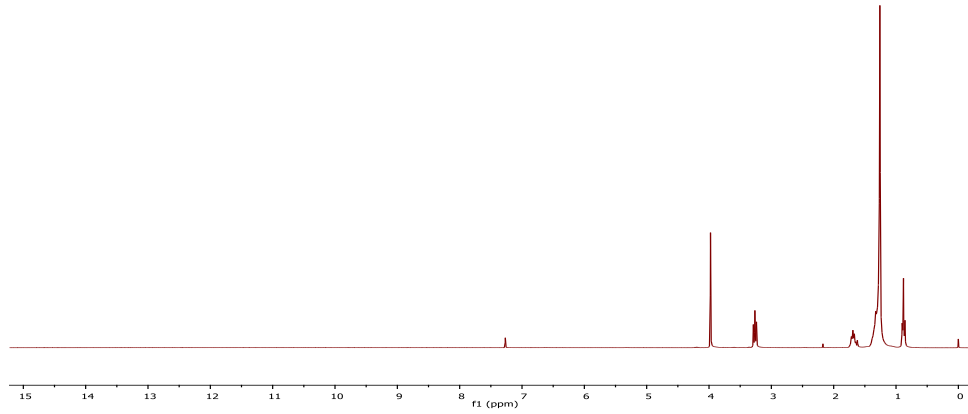
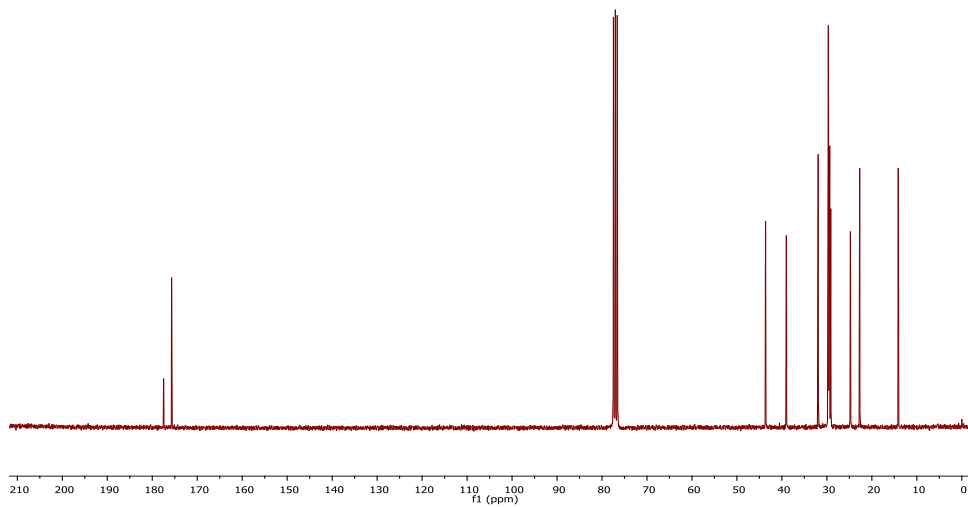
IR (ATR, cm⁻¹): 2951 -2840 (Alifatik C-H gerilme titreşimi), 1701 (C=O gerilme titreşimi), 1458 (C-N gerilme titreşimi), 715 (C=S eğilme titreşimi)

¹H-NMR: (300 MHz, CDCl₃-d) δ 0.88 (J=8 Hz, H_{87,91}, 6H), 1.26 (H_{21,24,27,30,33,36,39,42,45,48,51,54,57,60,63,66,69,72,75,78,81,84}, 44H), 3.25 (J=8 Hz, H_{15,18}, 4H), 3.98 (s, H_{1,2}, 4H)

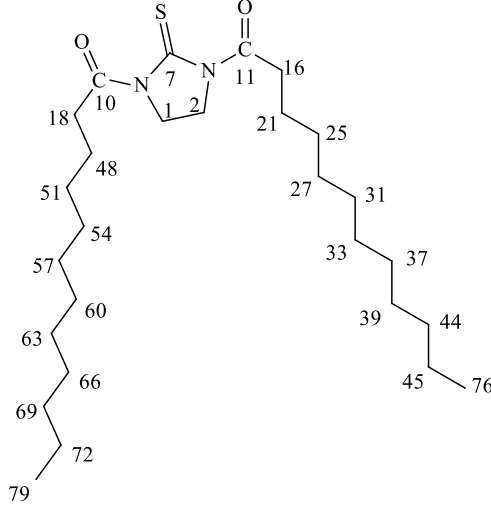
¹³C-NMR: (300 MHz, CDCl₃-d) δ 14.14 (C-91), 22.72 (C-87), 24.77 (C-51), 29.14 (C-84), 29.36 (C-21, C-54), 29.43 (C-24, C-42, C-45, C-57), 29.51 (C-72, 78), 29.62 (C-60, C-66), 29.66 (C-27), 29.67 (C-30, C-33, C-48), 29.69 (C-36, C-39, C-63, C-69), 39.02 (C-75, C-81), 43.60 (C-15, C-18), 43.60 (C-1, C-2), 175.59 (C-10, C-11), 177.24 (C-78)



Şekil 4.50 (13) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu

Şekil 4.51 (13) No'lu bileşiğin ¹H-NMR spektrumu (CDCl₃-d, 300 MHz)Şekil 4.52 (13) No'lu bileşiğin ¹³C-NMR spektrumu (CDCl₃-d, 300 MHz)

4.1.14. 1,3-Bisdodekanoilimidazolidin-2-tiyon (14) Karakterizasyonu



Erime Noktası: 64,4 °C

% Verim: 84

Kimyasal Formül: C₂₇H₅₀N₂O₂S

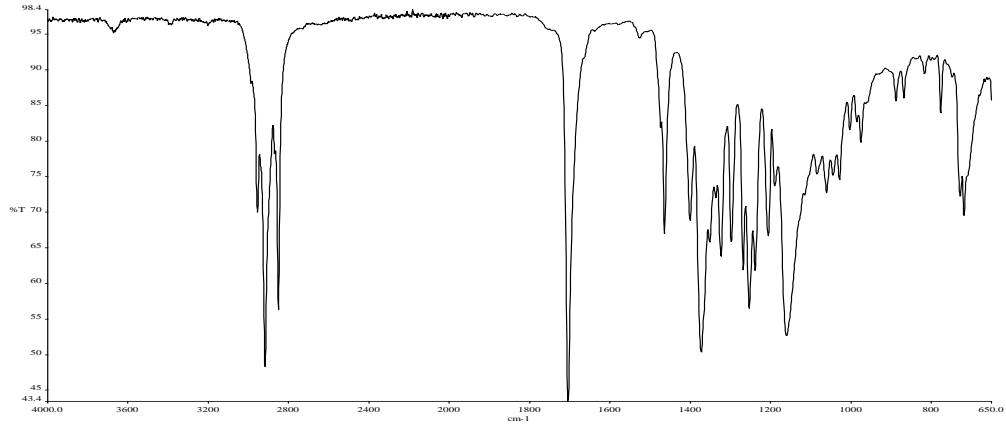
Molekül Ağırlığı: 466,76

Şekil 4.53 1,3-Bisdodekanoilimidazolidin-2-tiyon bileşiği

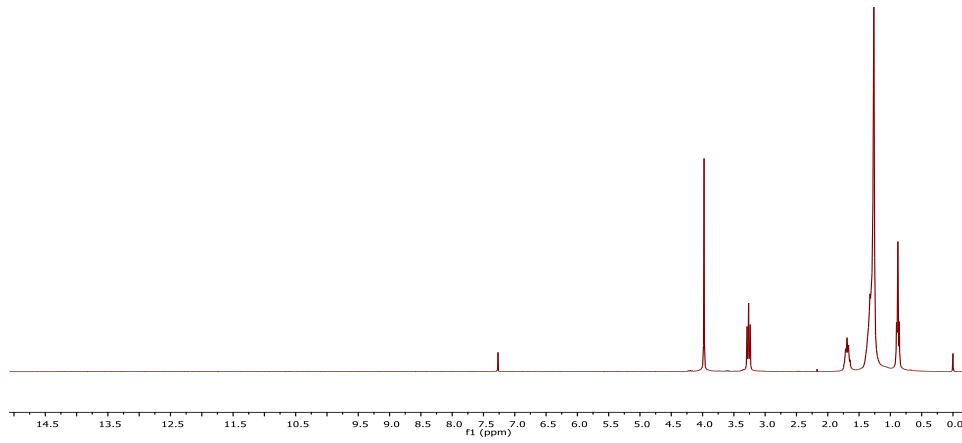
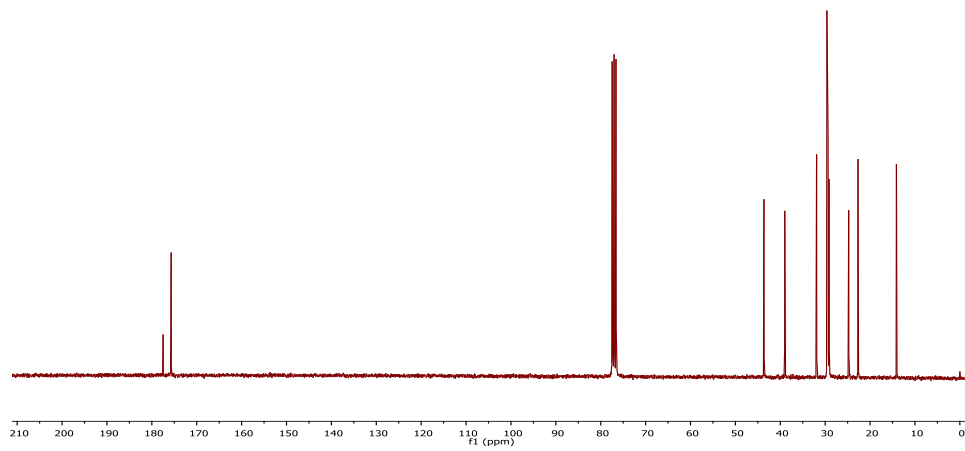
IR (ATR, cm⁻¹): 2946-2845 (Alifatik C-H gerilme titreşimi), 1704 (C=O gerilme titreşimi), 1458 (C-N gerilme titreşimi), 713 (C=S eğilme titreşimi)

¹H-NMR: (300 MHz, CDCl₃-d) δ 0.87 (J= 6 Hz, H_{75,79,6H}), 1.27 (H_{24,27,30,33,36,39,42,45,51,54,57,60,63,66,69,72}, 31H), 1.69 (J= 6 Hz, H_{21,48}, 4H), 3.25 (J= 6 Hz, H_{15,18}, 4H), 3.97 (s, H_{1,2}, 4H)

¹³C-NMR: (300 MHz, CDCl₃-d) δ 14.10 (C-75, C-79), 24.72 (C-45, C-72), 22.65 (C-48), 29.13 (C-21, C-51), 29.35 (C-24, C-54), 29.42 (C-30, C-36, C-60), 29.50 (C-27, C-57), 29.62 (C-33, C-39, C-63, C-66), 31.87 (C-42, C-69), 43.58 (C-1, C-2), 38.97 (C-15, C-18), 175.59 (C-10, C-11), 177.24 (C-7)



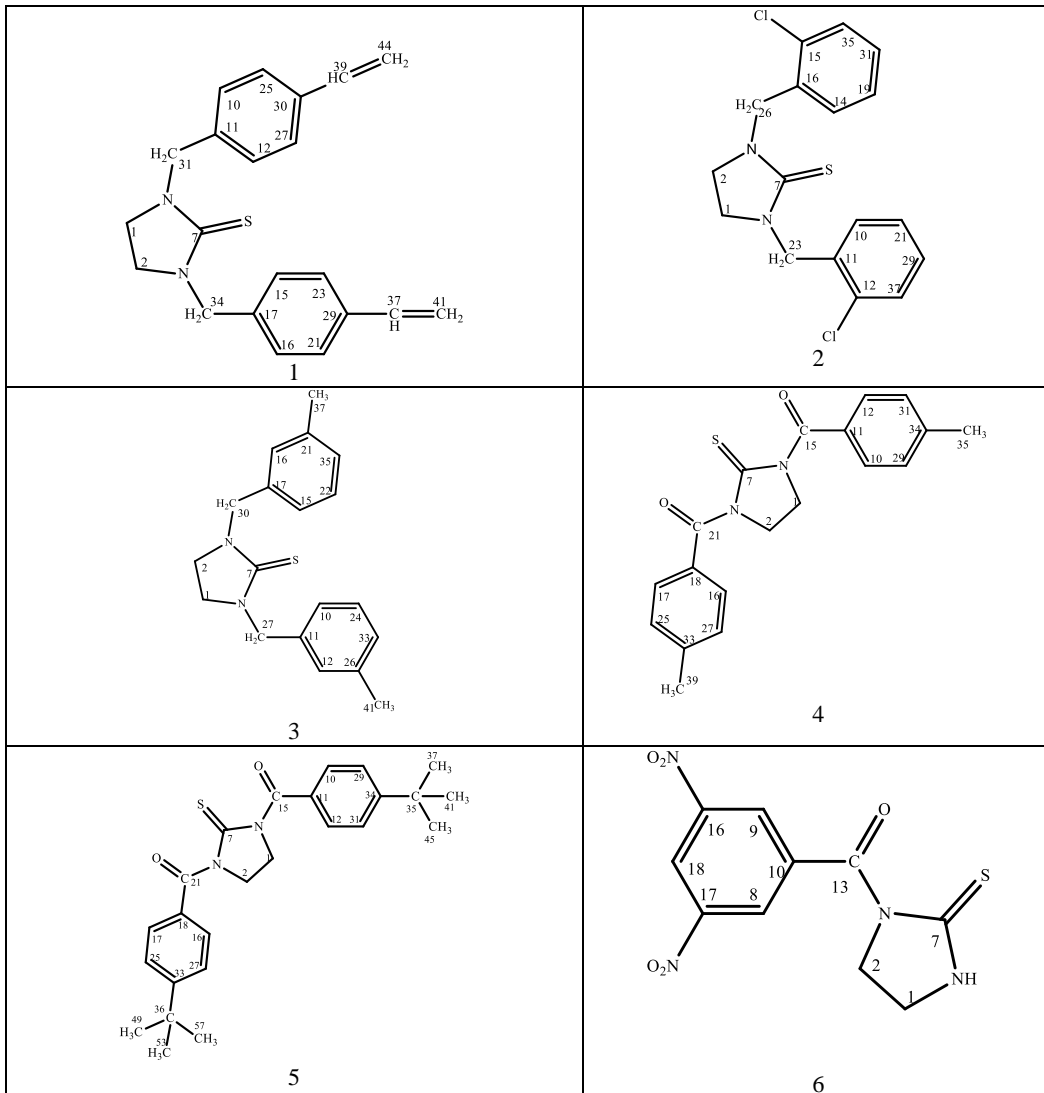
Şekil 4.54 (14) No'lu bileşiğin deneysel IR spektrumu

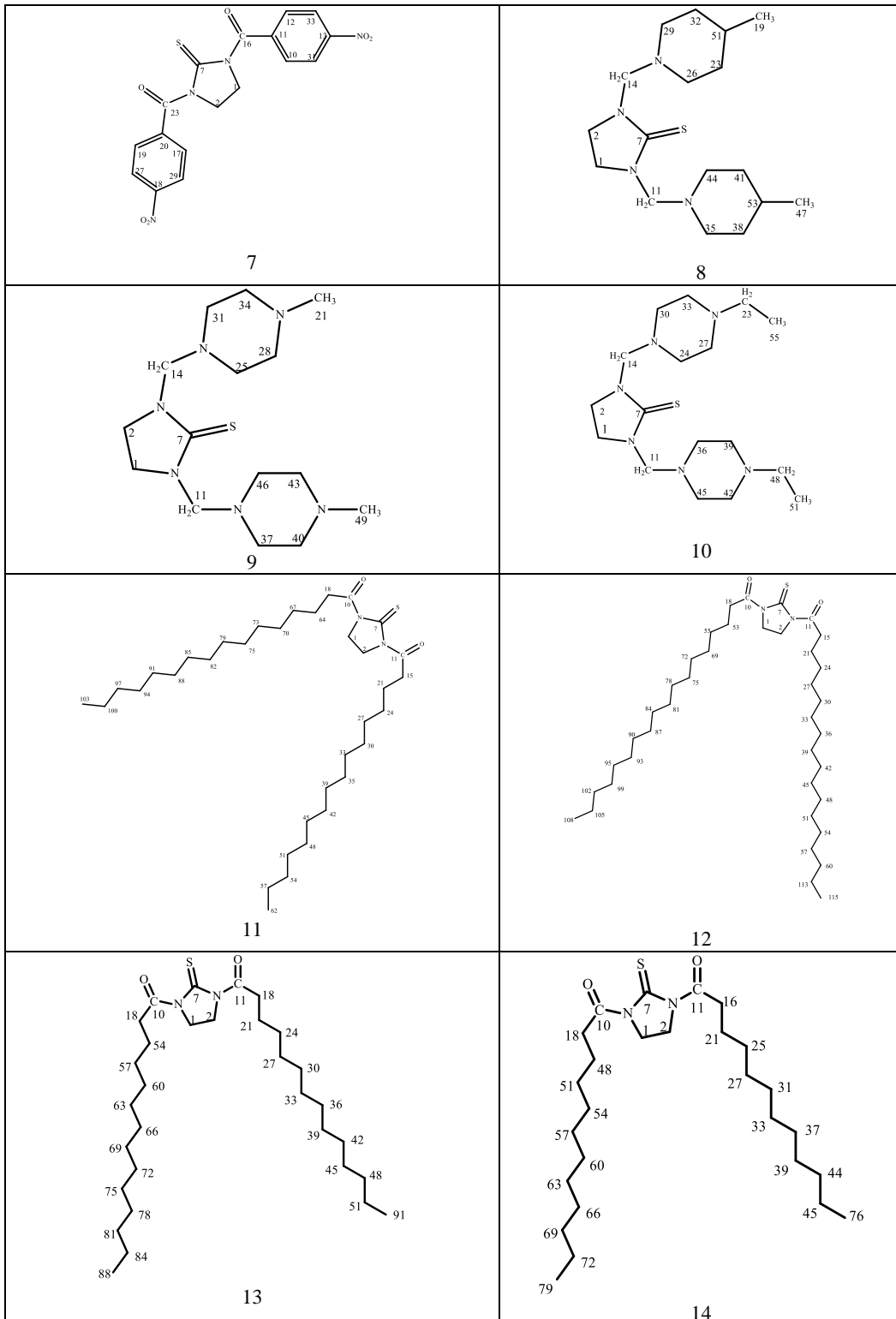
Şekil 4.55 (14) No'lu bileşiğin ¹H-NMR spektrumu (CDCl₃-d, 300 MHz)Şekil 4.56 (14) No'lu bileşiğin ¹³C-NMR spektrumu (CDCl₃-d, 300 MHz)

4.2. Teorik Çalışma

Çalışmanın teorik kısmında GAUSSIAN 09 paket programı kullanılarak sentezlenen maddelerin her bir tekli bağı (sigma bağları) semi empirik yöntem ile en düşük enerjili konformerleri belirlendi. B3LYP/6-311+G(d,p) yöntemi ile optimize edildi. Aynı program kullanılarak DFT metodu ile teorik hesaplamaları yapıldı. Gauss View 5.0 kullanılarak; maddelerin üç boyutlu görünümleri, NBO analizi sonuçları, teorik NMR spektrumları, teorik IR, molekül orbital gösterimi ve HOMO-LUMO enerji yüzeyleri ve enerji değişimleri hesaplandı.

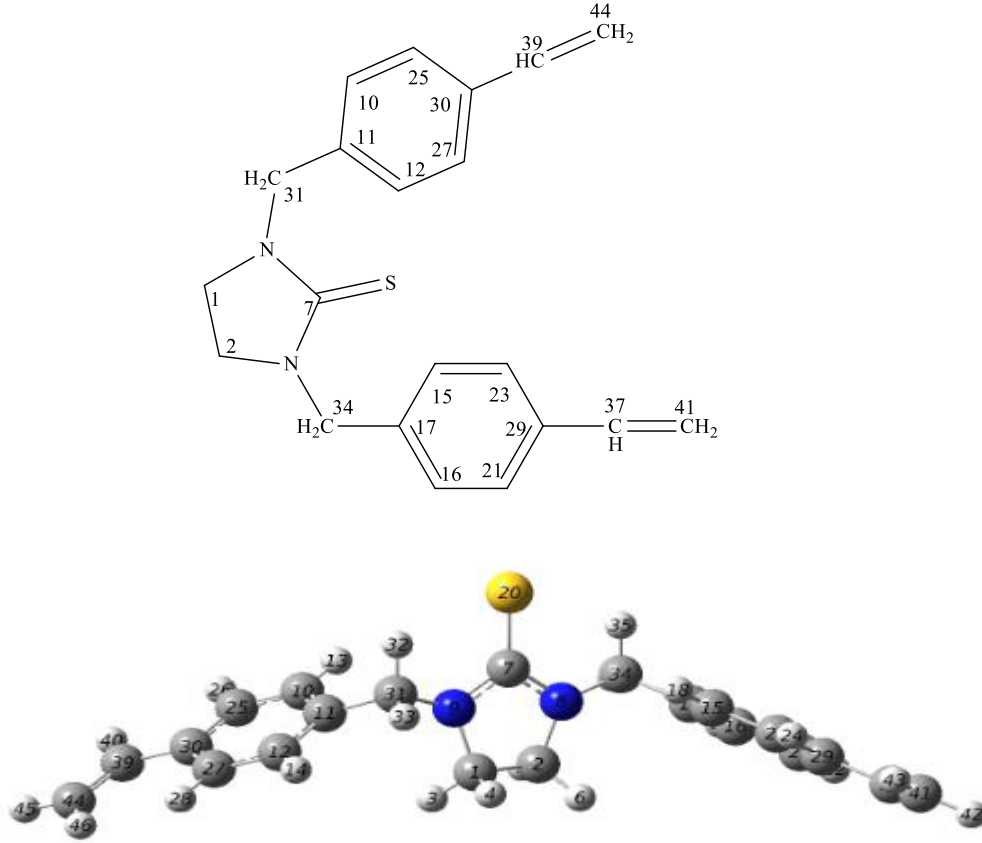
Teorik hesaplamaları yapılan moleküller aşağıda şekil 4. 57' de verilmiştir.



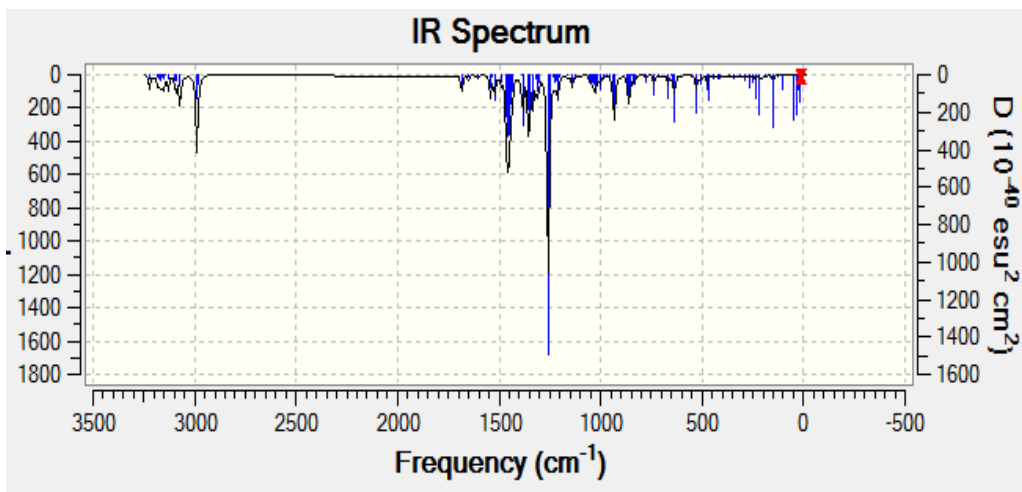


Şekil 4.57 Teorik hesaplamaları yapılan bileşikler

4.2.1. 1,3-Bis-(4-vinilbenzil)imidazolidin-2-tiyon (1) Analizi



Şekil 4.58 (1) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü



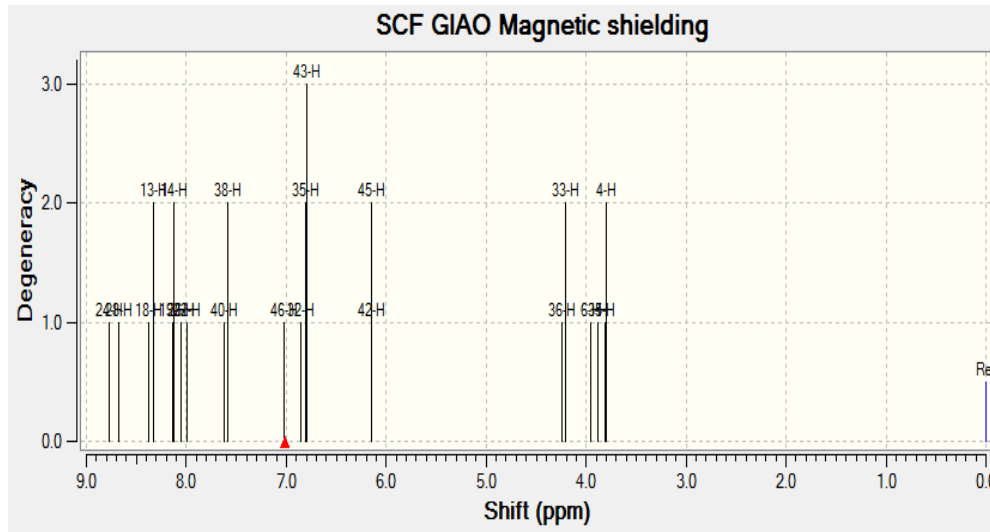
Şekil 4.59 (1) No'lu bileşiğin teorik IR spektrum

Çizelge 4.1 (1) No'lu bileşiğin teorik IR analizi

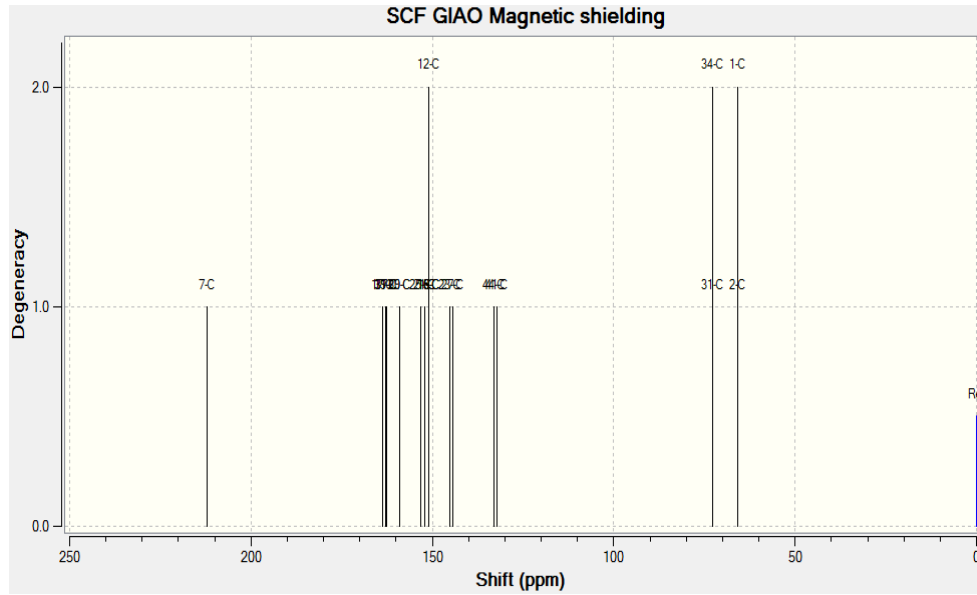
TED	B3LYP/6-311+ (d,p)
Titreşim Türü	
STRE CH	3095 (45) + 3089 (51)
STRE CH	3177 (71) + 3159 (26)
STRE CH	3182 (11) + 3156 (85)
STRE CH	3185 (30) + 3167 (69)
STRE CH	3170 (35) + 3153 (63)
STRE CH	3170 (62) + 3153 (36)
STRE CH	3185 (68) + 3167 (29)
STRE CH	3177 (25) + 3159 (70)
STRE CH	3182 (84) + 3156 (11)
STRE CH	3130 (90)
STRE CH	3131 (89)
STRE CH	3223 (56) + 3143 (35)
STRE CH	3223 (42) + 3143 (56)
STRE CH	3222 (59) + 3142 (32)
STRE CH	3222 (40) + 3142 (57)
STRE CH	2987 (46) + 2978 (50)
STRE CH	2987 (48)
STRE CH	3095 (49) + 3089 (47)
STRE CH	3073 (91)
STRE CH	2992 (11) + 2991 (81)
STRE CH	3071 (91)
STRE CH	2992 (81) + 2991 (11)
STRE CC	1684 (60)
STRE CC	1685 (61)
STRE CC	1650 (26) + 1438 (13)
STRE CC	1650 (10) + 1140 (25)
STRE CC	1650 (28) + 1437 (11) + 1141 (14)
STRE CC	1650 (10) + 1437 (17) + 1227 (20)
STRE CC	1650 (11) + 1604 (26)
STRE CC	1650 (11) + 1604 (28)
STRE CC	855 (10) + 840 (10)
STRE CC	1604 (21) + 1230 (11)
STRE CC	1604 (22) + 1318 (14) + 1053 (11)
STRE NC	1003 (11)
STRE NC	1003 (10)
STRE CC	1230 (20)
STRE CC	1227 (16) + 739 (10)
STRE NC	1304 (13) + 1259 (10) + 1003 (11)
STRE NC	1304 (12) + 1259 (10) + 1003 (11)
STRE NC	1160 (11) + 1042 (16)
STRE NC	1160 (14) + 1042 (14)
STRE SC	1042 (15) + 528 (42)
BEND CCC	1604 (10) + 553 (11)
BEND CCC	655 (10) + 447 (11) + 423 (13)
BEND CNC	1013 (22)
BEND HCN	1234 (13) + 1212 (36) + 1123 (13)
BEND HCC	1543(15) + 1437 (11) + 1201(15) + 1141 (17)
BEND HCC	1543 (14) + 1201 (13) + 1141 (11)
BEND HCC	1544 (17) + 1230 (11) + 1203 (14) + 1140 (11)
BEND HCC	1544 (13) + 1438 (12) + 1203 (19) + 1140 (15)
BEND HCC	1544 (16) + 1203 (17)

BEND HCC	1544 (16) + 1203 (10) + 1140 (10)
BEND HCC	1543 (19) + 1201 (17) + 1141 (10)
BEND HCC	1543 (13) + 1201 (11) + 1141 (17)
BEND HCC	1354 (15) + 1352 (16) + 1321 (14)
BEND HCC	1355 (25) + 1318 (12)
BEND HCC	1049 (57)
BEND HCH	1684 (15) + 1463 (28) + 1458 (15) + 1438 (10)
BEND HCC	1053 (52)
BEND HCH	1685(16) + 1466(20)+1463(15)+1458(13)+1437(10)
BEND HCH	1532 (47) + 1522 (34)
BEND HCC	1304 (22) + 1212 (17) + 1123 (12)
BEND HCH	1532 (37) + 1522 (43)
BEND HCC	1347 (11) + 1252 (12) + 1160 (11)
BEND HCH	1487 (80)
BEND HCC	1347 (10) + 1252 (12) + 1160 (11)
BEND HCH	1486 (77)
BEND CCC	553 (18) + 509 (13)
BEND CCC	553 (10) + 509 (14) + 253 (14)
BEND CCC	1034 (32) + 655 (10)
BEND CCC	1034 (18) + 655 (19)
BEND CCC	1033 (45)
BEND CCC	1033 (24) + 655 (13)
BEND CCC	1544 (13) + 1034 (12)
BEND CCC	1033 (16)
BEND CCC	342 (23)
BEND NCN	1042 (10) + 528 (13)
BEND CNC	234 (13)
BEND CCC	264 (10) + 188 (17)
BEND CCC	253 (19) + 166 (20)
BEND CNC	216 (12)
BEND NCC	48 (14)
BEND CNC	1013 (21)
BEND CCC	366 (22) + 342(12)
BEND SCN	423 (17) + 216 (22)+ 188 (10)
TORS HCNC	1123 (14)
TORS HCCC	984 (35) + 866 (16) + 847 (15) + 413 (11)
TORS HCCC	973(12) + 969 (11) + 847 (19) + 840 (10) + 832 (10)
TORS HCCC	987 (34) + 863 (10) + 849 (21) + 415 (11)
TORS HCCC	969 (13) + 863 (12) + 849 (23)+415 (15)
TORS HCCC	969 (13) + 849 (27)
TORS HCCC	987 (33) + 849 (27)
TORS HCCC	984 (30) + 866 (17) + 847 (15)
TORS HCCC	984 (10)+ 969 (10) + 847 (24)
TORS HCCC	1025 (74)
TORS HCCC	1026 (75)
TORS HCCC	930 (34)
TORS HCCC	930 (34) + 655 (11)
TORS HCNC	1304 (13)
TORS HCNC	1123 (17)
TORS HCNC	1234 (11)
TORS HCCC	1390 (12) + 1384 (16)+ 940 (11)
TORS HCCC	1390 (17) + 1384 (13)
TORS HCCC	1390 (12) + 1384 (19)
TORS HCCC	1390 (13) +1384(12) +1252 (12)
TORS CCCC	51(35) + 33 (25) + 30 (10)

TORS CCCC	48(19) + 37(32) + 19 (15)
TORS CCCC	415 (34)+ 293 (10)
TORS CCCC	415 (24) + 126 (15) + 33 (10)
TORS CCCC	984 (11) + 413 (30)
TORS CCCC	413(19) + 126 (10)
TORS CCCN	30(58)
TORS CCCC	969 (16)
TORS CCCC	973 (12)+ 969 (12)
TORS NCNC	169(14) + 102(13) + 48(11) + 16 (10)
TORS CNCC	33(15) + 11 (58)
TORS CNCN	264 (16) +169 (10) +51(15)
TORS NCCC	37(15) + 19 (59)
TORS CCNC	37 (11) + 16(44) + 11 (15)
OUT SNNC	643 (47) + 635 (24)
OUT CCCC	310 (17) +293 (14)
OUT CCCC	310 (14)+ 293 (16)
OUT CCCN	1123(11) +264 (12) + 188 (12)
OUT CCCN	1123 (10)+ 253 (13)+ 234(12)
OUT CCCC	470(16)
OUT CCCC	310 (10) + 102(10) + 48 (16)

Şekil 4.60 (1) No'lu bileşiğin teorik ¹H-NMR spektrumuÇizelge 4.2 (1) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹H-NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R ² değeri
24	7.38	8.05	
28	7.38	7.95	
18,13	7.30	7.63	
19,14	7.30	7.41	
26	7.38	7.33	
22	7.38	7.27	
40,38	6.70	6.89	
46	5.74	6.30	
32,35	4.88	6.10	
43	5.24	6.10	
42,45	5.24	5.43	
36,33	4.88	3.50	
6	3.40	3.23	
3	3.40	3.16	
5,4	3.40	3.08	

Şekil 4.61 (1) No'lu bileşiğin teorik ^{13}C -NMR spektrumuÇizelge 4.3 (1) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ^{13}C -NMR verileri ve regresyon analizi

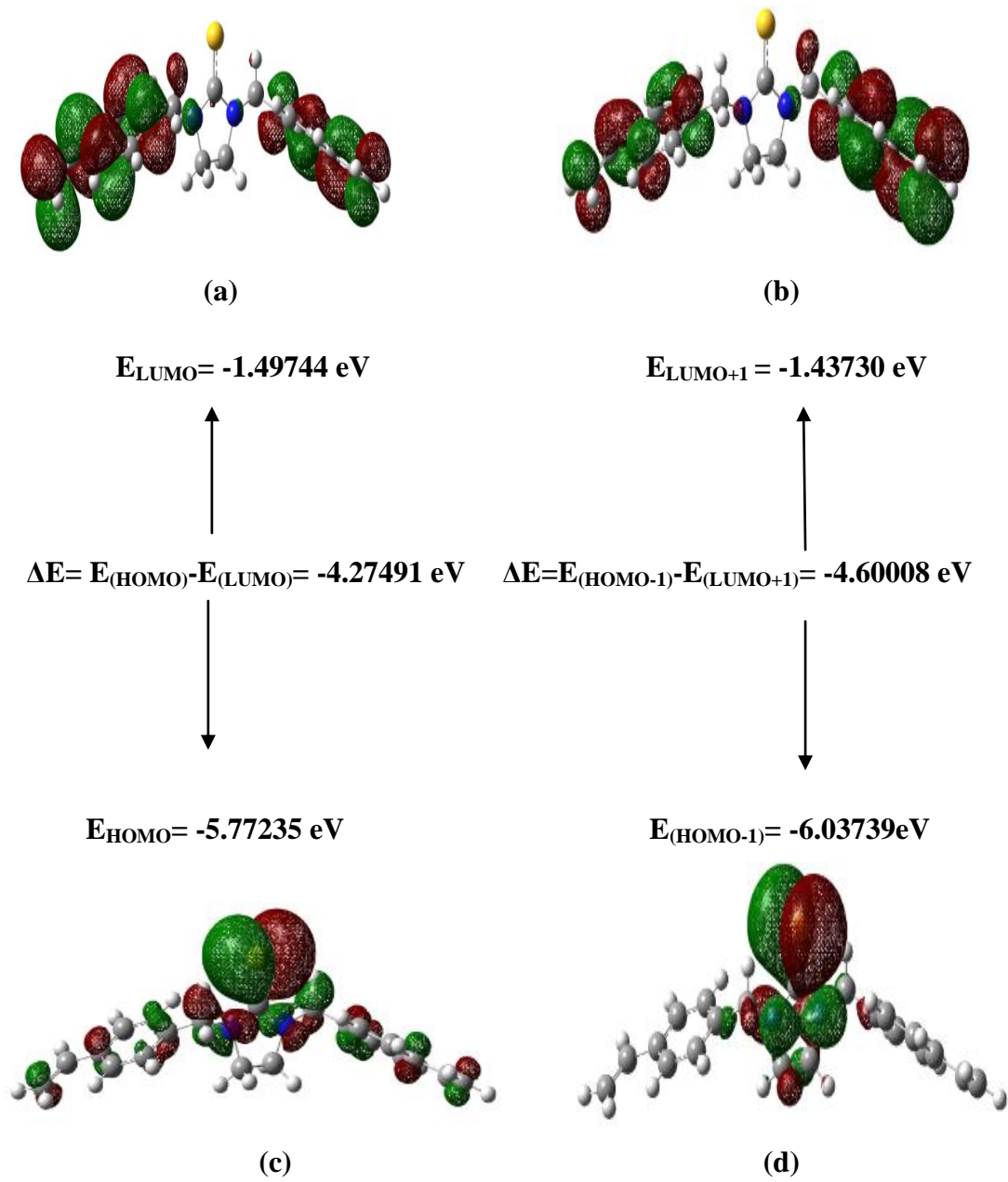
Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R^2 değeri
7	182.88	194.59	
17	137.09	146.27	
11	137.09	145.34	
39	136.02	145.27	
37	136.02	145.18	
29	136.01	141.62	
30	136.01	141.44	
25	128.09	135.64	
21	128.09	134.55	
16,12	126.24	133.60	
15	126.24	133.47	
10	126.24	133.34	
23	128.09	127.66	
27	128.09	126.75	
44	114.00	115.42	
41	114.00	114.54	
31,34	51.06	55.12	
2,1	45.43	48.31	

Çizelge 4.4 (1) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları

ATOM	Mulliken B3LYP/6-311+G(d,p)	NBO B3LYP/6-311+G(d,p)
1 C	-0.225962	-0.15866
2 C	-0.234748	-0.16874
3 H	0.174138	0.20146
4 H	0.152275	0.18116
5 H	0.160078	0.18263
6 H	0.185919	0.21264
7 C	-0.373374	0.28165
8 N	0.352813	-0.51330
9 N	0.229054	-0.50847
10 C	-0.035546	-0.18383
11 C	0.978701	-0.02681
12 C	-0.683497	-0.19213
13 H	0.166868	0.20811
14 H	0.185287	0.19939
15 C	-0.450683	-0.20888
16 C	-0.331973	-0.19815
17 C	0.892198	-0.03399
18 H	0.183357	0.21156
19 H	0.172519	0.20619
20 S	-0.606920	-0.16890
21 C	-0.449527	-0.17775
22 H	0.148856	0.20280
23 C	-1.058704	-0.17720
24 H	0.097447	0.20425
25 C	-0.193710	-0.17937
26 H	0.160169	0.20013
27 C	-1.339132	-0.18483
28 H	0.038075	0.20558
29 C	1.643978	-0.07901
30 C	1.588108	-0.07486
31 C	-0.676332	-0.17362
32 H	0.196235	0.19118
33 H	0.168851	0.20758
34 C	-0.621638	-0.19057
35 H	0.154107	0.25160
36 H	0.185422	0.19415
37 C	-0.586398	-0.17139
38 H	0.153599	0.19609
39 C	-0.517265	-0.17332
40 H	0.134991	0.19465
41 C	-0.354889	-0.36689
42 H	0.136675	0.19197
43 H	0.108386	0.18198
44 C	-0.286110	-0.36291
45 H	0.158745	0.19060
46 H	0.119555	0.17623

Çizelge 4.5 (1) No'lu bileşiğin NBO analizi

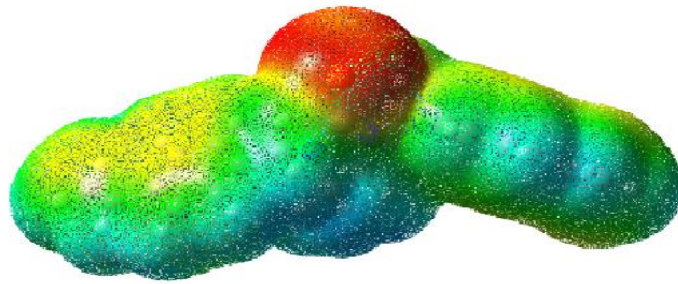
Donor NBO	Acceptor NBO	E (2) kcal/mol
BD (1) C ₃₉ - C ₄₄	RY*(6) H ₄₆	99.88
BD (1) C ₃₉ - C ₄₄	BD*(1) C ₄₄ - H ₄₅	35.43
BD (1) C ₄₄ - H ₄₅	RY*(6) H ₄₆	66.51
BD (1) C ₄₄ - H ₄₅	BD*(1) C ₄₄ - H ₄₅	22.68
BD (1) C ₄₄ - H ₄₆	RY*(6) H ₄₆	201.22
BD (1) C ₄₄ - H ₄₆	BD*(2) C ₂₁ - C ₂₉	20.04
BD (1) C ₄₄ - H ₄₆	BD*(1) C ₂₉ - C ₃₇	28.71
BD (1) C ₄₄ - H ₄₆	BD*(1) C ₄₄ - H ₄₅	67.30
BD (1) C ₄₄ - H ₄₆	BD*(1) C ₄₄ - H ₄₆	23.64
CR (1) C ₄₄	RY*(9) C ₄₄	46.50
CR (1) C ₄₄	RY*(16) C ₄₄	51.01
CR (1) C ₄₄	RY*(2) H ₄₆	28.65
CR (1) C ₄₄	RY*(3) H ₄₆	31.73
CR (1) C ₄₄	RY*(4) H ₄₆	82.71
CR (1) C ₄₄	RY*(6) H ₄₆	589.03
CR (1) C ₄₄	BD*(2) C ₂₁ - C ₂₉	27.86
CR (1) C ₄₄	BD*(1) C ₂₇ - C ₃₀	49.58
CR (1) C ₄₄	BD*(1) C ₂₉ - C ₃₇	69.18
CR (1) C ₄₄	BD*(1) C ₄₄ - H ₄₅	446.41
CR (1) C ₄₄	BD*(1) C ₄₄ - H ₄₆	107.40
LP (1) N ₈	BD*(1) C ₇ - S ₂₀	60.33
LP (1) N ₉	BD*(1) C ₇ - S ₂₀	57.33
BD*(2) C ₂₁ - C ₂₉	BD*(1) C ₂₉ - C ₃₇	36.22
BD*(2) C ₂₁ - C ₂₉	BD*(1) C ₄₄ - H ₄₅	40.68



Şekil 4.62 (1) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı

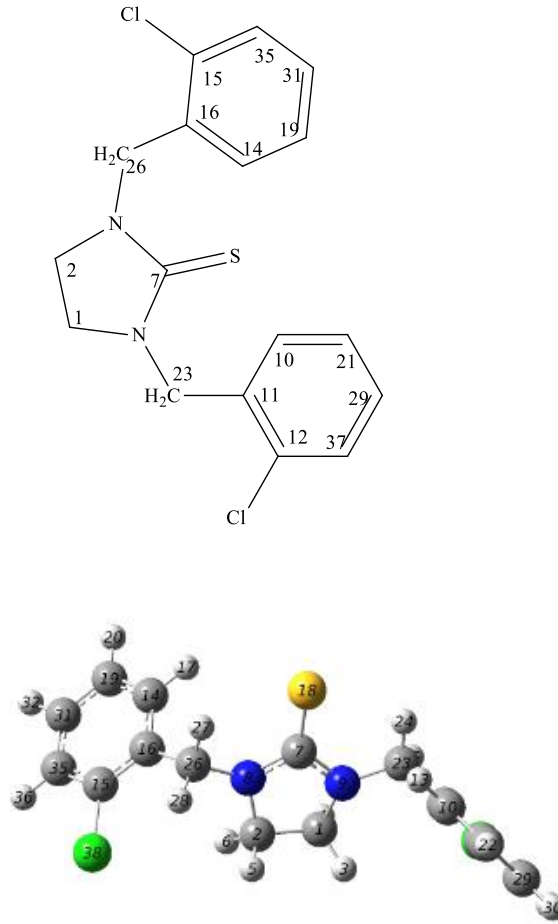
Çizelge 4.6 (1) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri

HOMO	-0.23405
LUMO	-0.07077
HOMO-1	-0.2539
LUMO+1	-0.00486
$\Delta E_{(HOMO-LUMO)}$	-0.16328
$\Delta E_{(HOMO-1-LUMO+1)}$	-0.24904
Elektronegatiflik (χ)	0.15241
Kimyasal Sertlik	0.08164
Kimyasal Yumuşaklık	12,2489
Elektronik Kimyasal Potansiyel (Pi)	-0.15241
Global Elektrofillik (ω)	0.000948
Global Yumuşaklık (S)	0.04082
Elektronik Yük (ΔN_{max})	1.866854

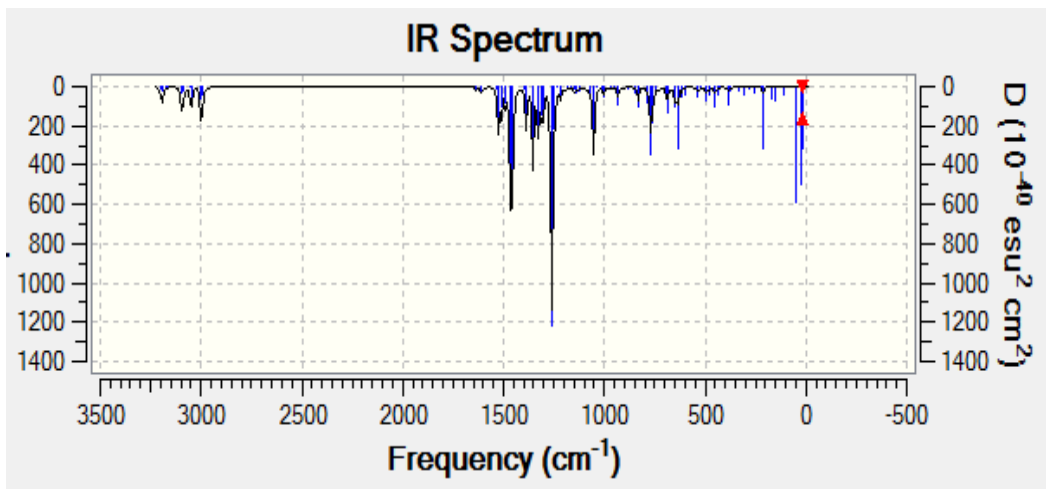


Şekil 4.63 (1) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu

4.2.2. 1,3-Bis-(2-klorobenzil)imidazolidin-2-tiyon (2) Analizi



Şekil 4.64 (2) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü

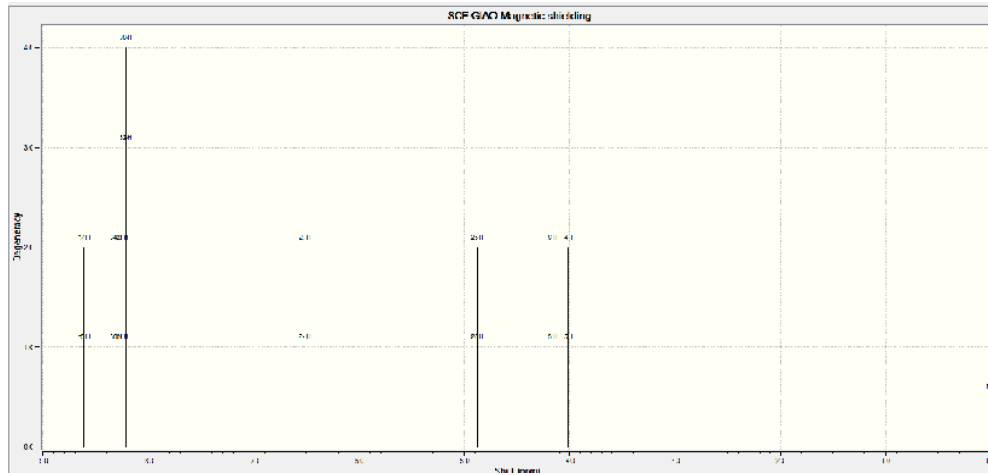


Şekil 4.65 (2) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu

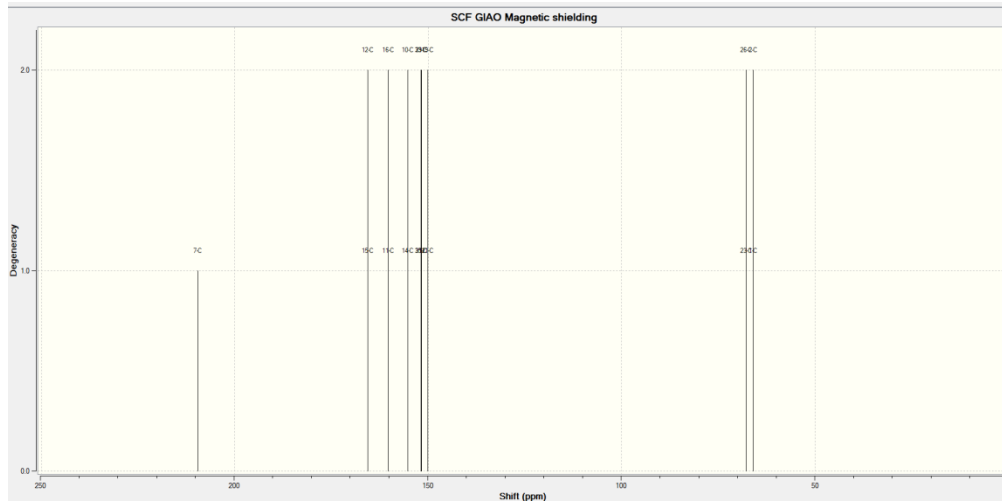
Çizelge 4.7 (2) No'lu bileşiğin teorik IR analizi

TED	B3LYP/6-311+ (d,p)
Titreşim Türü	
STRE CH	3092(46)+ 3085(49)
STRE CH	3177 (33)+ 3168(48)
STRE CH	3190 (28)+ 3190 (33)+ 3168(25)
STRE CH	3202(11)+ 3177(55)+ 3168 (12)
STRE CH	3202 (55)+ 3202 (24)
STRE CH	3002 (46) + 2994(49)
STRE CH	3092(46)+ 3085(49)
STRE CH	3099 (35)+ 3098 (35)+ 3049(14)+ 3049(15)
STRE CH	3099 (14)+ 3098(15)+ 3049 (35)+ 3049(35)
STRE CH	3099(36)+ 3098 (34)+ 3049(14) +3049 (15)
STRE CH	3099 (15)+ 3098(15)+ 3049 (35)
STRE CC	1635 (19)+ 1635(16)
STRE CC	1608 (12)+ 1608(13)
STRE CC	1315 (11)
STRE CC	1217 (10) +1214 (11)
STRE CC	1067 (13)+ 1067(10)+ 1050(10)
STRE CC	1067(10)+ 1067 (12)+ 1050(10)
STRE NC	1464 (12)+ 1455(10)
STRE NC	1464 (12)
STRE NC	1304 (13)+ 1000(10)
STRE NC	1162(12) +1037 (14)
STRE NC	1162 (12)+ 1037(16)
STRE CC	1217(12)+ 1214(12)+ 832(10)
STRE CC	1217 (12)+1214 (12)+ 832 (11)
STRE SC	1037 (13)+ 536 (37)+ 497 (14)
STRE CIC	689(11) +438 (12)+ 431 (11)+ 388(11)
BEND CCC	689 (12)
BEND CNC	1011 (23)+ 650 (15)
BEND CCN	48 (13)
BEND HCN	1233 (18)+ 1219(36)+ 1120 (14)
BEND HCC	1307 (16)+ 1305(15)
BEND HCC	1509 (10)+ 1307(16) +1305(15)
BEND HCC	1470 (10) + 1185 (14)+ 1185(13)
BEND HCC	1470 (11)+ 1470(13)+1185(16)+1185(17)
BEND HCC	1470 (10)+ 1470(13)+ 1185(16)+1185(16)
BEND HCH	1532(41)+ 1523(35)
BEND HCH	1233(23)+1219(22) +1120 (13)
BEND HCC	1351 (13)
BEND HCH	1490(30)+ 1489(30)
BEND HCC	1351 (13)
BEND HCH	1490 (31)+ 1489 (29)
BEND CCC	691 (10) +689 (14)
BEND CCC	594 (11)
BEND CCC	438 (16)+ 431 (10)+ 166(11)
BEND CCC	832 (15)+ 832 (17)
BEND CCC	832 (14)+ 832 (18)
BEND NCN	1037 (10)+497 (11)
BEND CNC	330 (11)+ 166(10)+ 136 (16)
BEND CNC	330(10)+ 136 (14)
BEND NCC	48 (13)
BEND CNC	1011(27)+ 650 (19)

BEND CCC	438 (11)+379 (12)
BEND SCN	481 (15)+ 310 (25)+ 166 (27)
BEND CICC	379 (12)+ 330 (18)+310 (26)+166 (10)
TORS HCNC	1120(13)+ 851(14)
TORS HCCC	972 (14)+ 971 (14)+ 884 (12)+ 884 (12)
TORS HCCC	972 (14)+971 (14) +884 (11) +884 (12)
TORS HCCC	1002 (16)+ 1001(19)+ 884 (10)+ 769(13)
TORS HCCC	1002 (16)+1001 (19)+884 (10)+884 (10)+769 (13)
TORS HCCC	1002 (10)+ 1001(13)+ 972(12)+971(12)+769(17)+ 759 (12)
TORS HCCC	972(11)+ 971(12)+ 884(18)+769(10)
TORS HCCC	972 (12)+971 (12)+884 (18)+884 (19)+769(10)
TORS HCNC	1355(11)+ 1304(13)
TORS HCNC	1120 (19)
TORS HCCC	1394 (16)+1387(20) +931(11)
TORS HCCC	1394 (22)+1387 (18)
TORS HCCC	1394 (19)+1387 (23)
TORS HCCC	1394 (19)+1387 (16)
TORS CCCC	519 (11)+ 497 (10)
TORS CCCC	519 (10)+497 (12)
TORS CCCC	747 (10)+450 (11)
TORS CCCC	151 (13)+129 (15)
TORS CCCN	23 (23)+17 (36)
TORS CCCC	452 (13)+450 (17)
TORS CCCC	452 (11)+ 450(10)
TORS CCCC	105 (19) +48(12)
TORS NCNC	105(11)+ 48 (12)+ 4(14)+13 (13)
TORS CNCC	23 (20) +13(18)+11(38)
TORS CNCN	220 (10) + 48 (12) + 46 (14) +13 (12)
TORS NCCC	23 (23)+17 (36)+13(10)
TORS CCNC	23 (20)+ 13 (19)+11 (36)
OUT SNNC	637 (57)+613 (19)
OUT CICCC	497 (11)+151 (11)
OUT CCCN	220 (10)+209 (15)+155 (16)+151 (10)
OUT CCCN	209 (19)+155 (12)+151(11)
OUT CCCC	105 (13)+48(12)

Şekil 4.66 (2) No'lu bileşiğin teorik ¹H-NMR spektrumuÇizelge 4.8 (2) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹H-NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R ² değeri
13,17	7.47	7.89	
36,34	7.38	7.59	
20,22,32,30	7.25	7.52	
24,27	5.02	5.80	
28,25	5.02	4.16	
3,6	3.47	3.44	
5,4	3.47	3.30	

Şekil 4.67 (2) No'lu bileşiğin teorik ^{13}C -NMR spektrumuÇizelge 4.9 (2) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ^{13}C -NMR verileri ve regresyon analizi

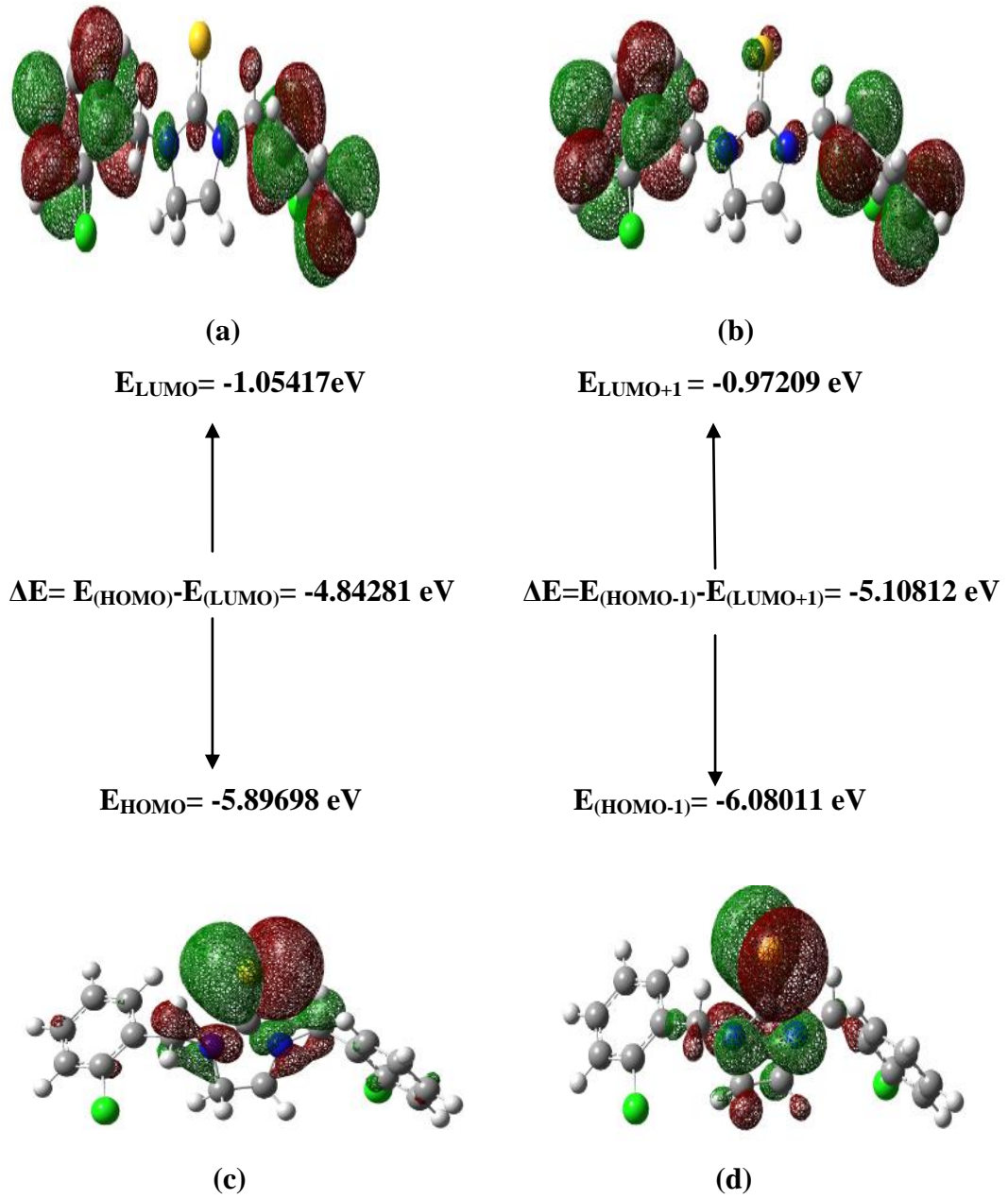
Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R^2 değeri
7	183.55	192.11	
15,12	133.92	148.08	
11,16	133.68	142.82	
14,10	129.85	137.81	
35,33	129.57	134.35	
31,29	128.92	134.25	
21,19	127.23	132.61	
23,26	48.73	50.19	
1,2	45.73	48.50	

Çizelge 4.10 (2) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları

ATOM	Mulliken B3LYP/6-311+G(d,p)	NBO B3LYP/6-311+G(d,p)
1 C	-0.267683	-0.15860
2 C	-0.201173	-0.16492
3 H	0.178349	0.20865
4 H	0.156339	0.18844
5 H	0.158231	0.18844
6 H	0.182284	0.20865
7 C	-0.339897	0.32587
8 N	0.333248	-0.50164
9 N	0.193200	-0.50165
10 C	-0.076400	-0.17040
11 C	0.376438	-0.07442
12 C	0.448356	-0.02887
13 H	0.179209	0.22287
14 C	-0.180732	-0.17040
15 C	0.017420	-0.02887
16 C	0.670157	-0.07443
17 H	0.180915	0.22287
18 S	-0.583465	-0.26099
19 C	-0.323409	-0.19858
20 H	0.184734	0.20984
21 C	-0.338851	-0.19858
22 H	0.176691	0.20984
23 C	-1.442774	-0.19529
24 H	0.166402	0.25241
25 H	0.162021	0.21000
26 C	-1.336826	-0.19529
27 H	0.129788	0.25242
28 H	0.168792	0.21000
29 C	-0.420425	-0.18641
30 H	0.155763	0.20978
31 C	-0.390374	-0.18641
32 H	0.158458	0.20978
33 C	0.025260	-0.22245
34 H	0.190107	0.22116
35 C	-0.074461	-0.22245
36 H	0.195208	0.22116
37 Cl	0.583387	-0.01261
38 Cl	0.605713	-0.01261

Çizelge 4.11 (2) No'lu bileşiğin NBO analizi

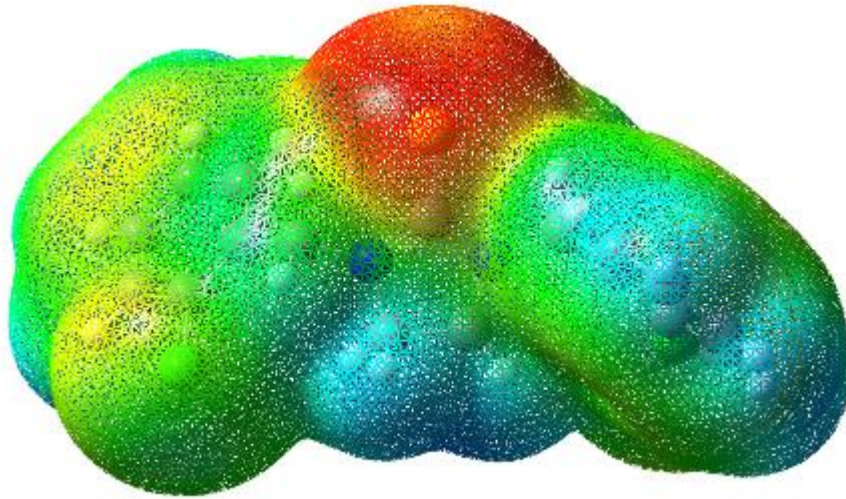
Donor NBO	Acceptor NBO	E (2) kcal/mol
BD (2) C ₁₀ - C ₂₁	BD*(2) C ₁₁ - C ₁₂	22.93
BD (2) C ₁₀ - C ₂₁	BD*(2) C ₂₉ - C ₃₃	19.70
BD (2) C ₁₁ - C ₁₂	BD*(2) C ₂₉ - C ₃₃	21.17
BD (2) C ₁₄ - C ₁₆	BD*(2) C ₁₅ - C ₃₅	19.30
BD (2) C ₁₄ - C ₁₆	BD*(2) C ₁₉ - C ₃₁	21.52
BD (2) C ₁₅ - C ₃₅	BD*(2) C ₁₄ - C ₁₆	20.70
BD (2) C ₁₉ - C ₃₁	BD*(2) C ₁₄ - C ₁₆	19.91
BD (2) C ₁₉ - C ₃₁	BD*(2) C ₁₅ - C ₃₅	22.53
BD (2) C ₂₉ - C ₃₃	BD*(2) C ₁₀ - C ₂₁	19.64
LP (1) N ₈	BD*(1) C ₇ - S ₁₈	60.18
LP (1) N ₉	BD*(1) C ₇ - S ₁₈	57.48
BD*(2) C ₁₁ - C ₁₂	BD*(2) C ₁₀ - C ₂₁	205.31
BD*(2) C ₁₅ - C ₃₅	BD*(2) C ₁₄ - C ₁₆	217.06
BD*(2) C ₁₅ - C ₃₅	BD*(2) C ₁₉ - C ₃₁	248.59



Şekil 4.68 (2) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı

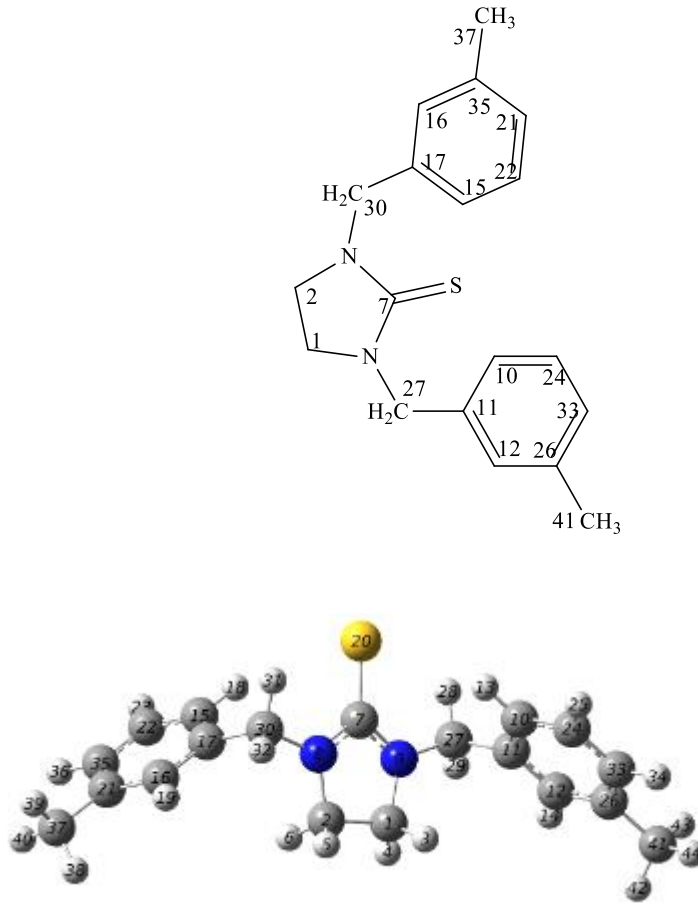
Çizelge 4.12 (2) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri

HOMO	-0.21213
LUMO	-0.05503
HOMO-1	-0.22187
LUMO+1	-0.05282
$\Delta E_{(HOMO-LUMO)}$	-0.1571
$\Delta E_{(HOMO-1-LUMO+1)}$	-0.16905
Elektronegatiflik (χ)	0.13358
Kimyasal Sertlik	0.07855
Kimyasal Yumuşaklık	12.2489
Elektronik Kimyasal Potansiyel (Pi)	-0.13358
Global Elektrofillik (ω)	0.000701
Global Yumuşaklık (S)	0.039275
Elektronik Yük (ΔN_{max})	1.700573

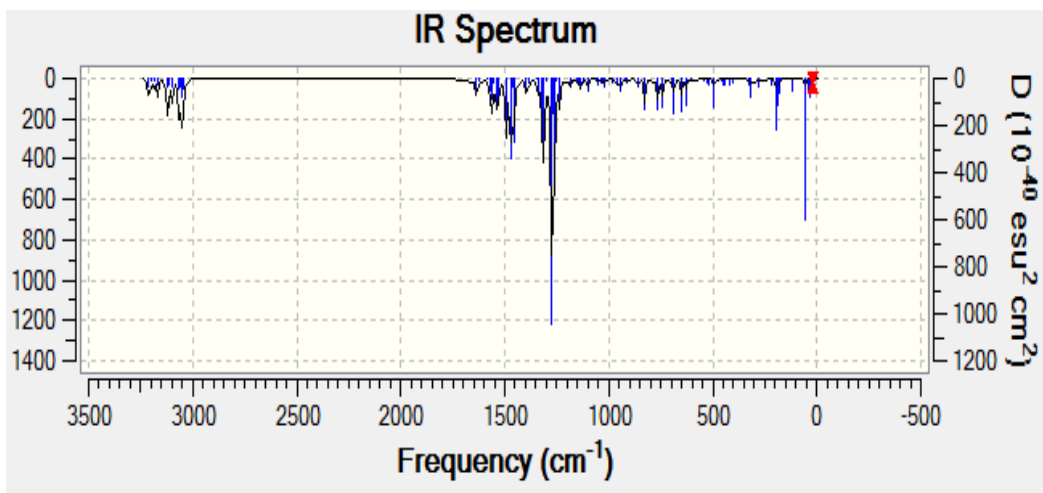


Şekil 4.69 (2) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu

4.2.3. 1,3-Bis-(3-metilbenzil)imidazolidin-2-tiyon (3) Analizi



Şekil 4.70 (3) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü

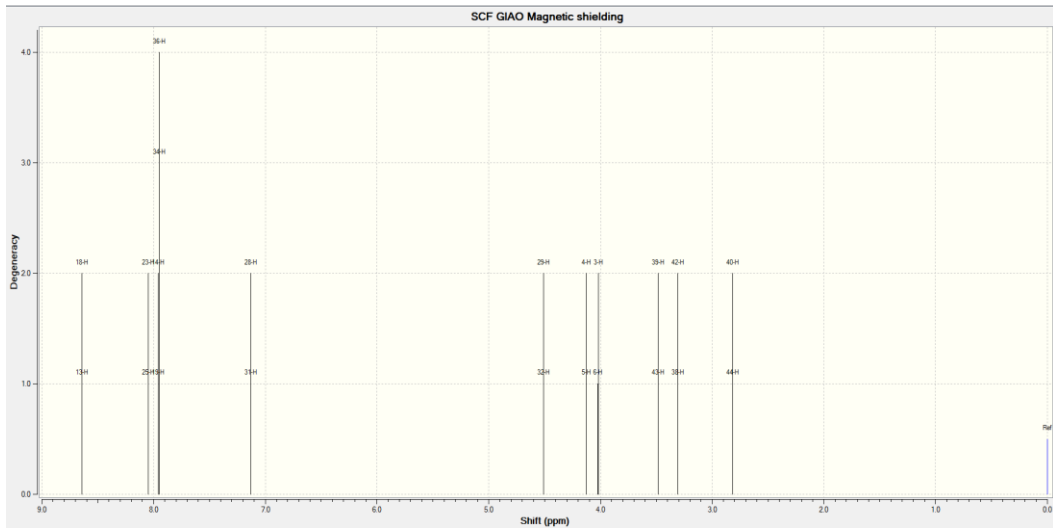


Şekil 4.71 (3) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu

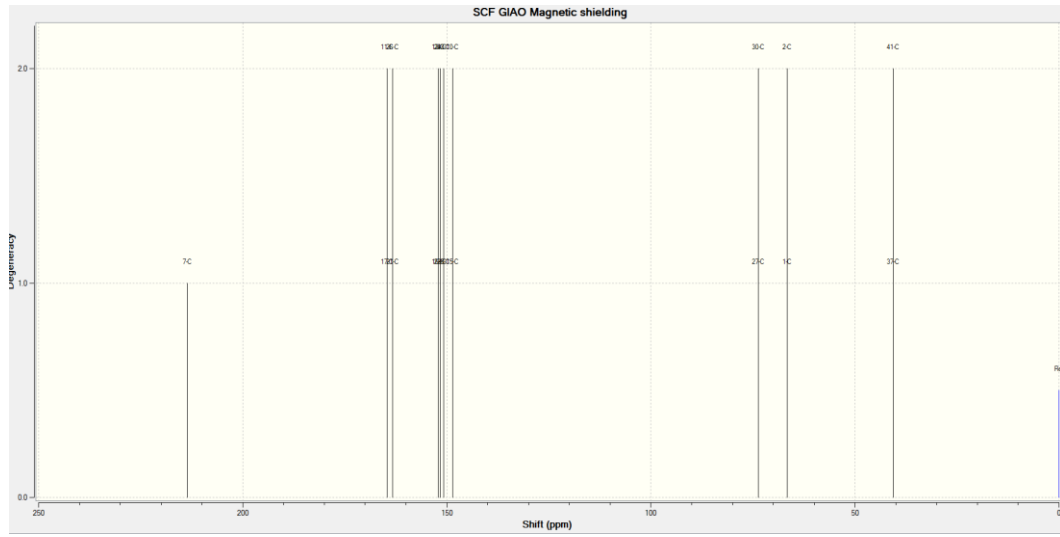
Çizelge 4.13 (3) No'lu bileşiğin teorik IR analizi

TED	B3LYP/6-311+ (d,p)
Titreşim Türü	
STRE CH	3211(29)+ 3211(28)+ 3186(33)
STRE CH	3211 (28)+3211 (29)+3186 (33)
STRE CH	3120 (18)+ 3068(41)+ 3063(31)
STRE CH	3120 (32)+3101 (42) +3063 (18)
STRE CH	3211 (14)+ 3211 (14)+ 3197(32)+3197 (30)
STRE CH	3168 (39)+3168 (60)
STRE CH	3113(38)+ 3113 (37)+ 3055 (12)+ 3054 (11)
STRE CH	3197 (16)+3197 (15) +3186 (47)
STRE CH	3113 (12) + 3113 (12)+ 3055 (39)+ 3054 (35)
STRE CH	3113 (38)+3113 (38) +3055 (11) +3054 (13)
STRE CH	3123 (16)+ 3096 (16)+ 3096 (35)+ 3046 (23)
STRE CH	3096 (14)+3096 (31) +3046 (37)+3046 (14)
STRE CH	3123(69)+ 3046 (13)
STRE CH	3123 (16) +3096 (35)+3096 (16) +3046 (22)
STRE CC	1636(10) + 1636 (10)
STRE CC	1636 (13) +1636 (14)
STRE CC	1636 (12)+ 1636 (11)
STRE CC	1636 (11) +1636 (10)
STRE CC	1623 (14)+ 1623 (13)
STRE CC	1141 (11)
STRE CC	1623 (13) + 1623 (13)
STRE CC	1141 (13)
STRE CC	1039 (10)
STRE NC	1473 (10) + 1457 (11) + 1260 (11)
STRE NC	1473 (10) + 1457 (11)
STRE NC	1302 (12)
STRE CC	542 (13)+ 542 (12)
STRE CC	542 (13)+542 (12)
STRE NC	1151 (12) + 979 (18)
STRE NC	1151 (12)+979 (17)
STRE SC	525 (17) + 493 (42)
BEND CCC	1039 (16)
BEND CCC	542 (11) + 542 (12)
BEND CNC	1302 (11) + 979 (10)
BEND HCC	1542 (11) + 1541 (12) + 1239 (16) + 1239 (16)
BEND HCN	1302 (13) + 1236 (42) + 1124 (18)
BEND HCH	1583 (43) + 1571 (41)
BEND HCC	1302 (12) + 1253 (22) + 1236 (23) + 1124 (13)
BEND HCC	1386 (14) + 1384 (16) + 1184 (13) +1183 (13)
BEND HCC	1239 (10) + 1239 (10)
BEND HCC	1386 (10)
BEND HCH	1542 (14) + 1541 (11) + 1530 (21) + 1529 (25)
BEND HCH	1542 (14) + 1541 (11) + 1530 (22) + 1529 (24)
BEND HCH	1558 (45) + 1464 (12) + 1464 (12)
BEND HCH	1562 (18) + 1562 (20) + 1464 (20) + 1464 (19)
BEND HCH	1558 (30) + 1464 (14) + 1464 (15)
BEND HCH	1558 (46) + 1464 (11) + 1464 (12)
BEND HCH	1562 (20) + 1562 (18) + 1464 (20) + 1464 (19)
BEND HCH	1558 (30) +1464 (14) + 1464 (15)
BEND CCC	1039 (12) + 608 (10)
BEND CCC	1039 (18)

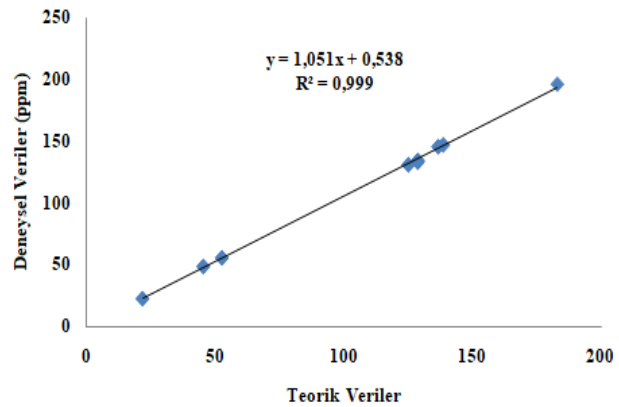
BEND CCC	1039 (10)
BEND CCC	542 (13)
BEND CCC	1039 (14) + 608 (11)
BEND CCC	418 (13) + 403 (11) + 184 (14) + 169 (18)
BEND NCN	979 (21) + 493 (10)
BEND CNC	445 (11) + 329 (12) + 184 (10) + 169 (16)
BEND CNC	445 (11) + 329 (12) + 184 (10) + 169 (15)
BEND NCC	283 (11) + 53 (11)
BEND CCN	283 (10) + 281 (10) + 53 (11)
BEND CCC	418 (16) + 403 (14) + 184 (14) + 169 (18)
BEND CCC	418(14) + 403 (18) + 329 (15) + 320 (21)
BEND CCC	418 (15) + 403(20) + 329 (14) + 320 (20)
BEND CNC	979 (12) + 686 (10) + 651 (12)
BEND SCN	458 (12) + 445 (11) + 320 (14) + 283 (16) + 184(27)
TORS HCCC	1033 (18) + 1029 (11) + 828 (18) + 825 (19)
TORS HCNC	11248 (10) + 858 (14) + 115 (10)
TORS HCNC	1253 (20) + 858 (16)
TORS HCNC	1124 (18) + 858 (16) + 115 (11)
TORS HCNC	1302 (11)
TORS HCCC	1036 (11) + 1033 (18) + 959 (13) + 957 (14)
TORS HCCC	920 (31) + 917 (34)
TORS HCCC	1033 (13) + 959 (11) + 957 (14)
TORS HCCC	920(30) + 917 (33)
TORS HCCC	1400 (18) + 1398 (17)
TORS HCCC	959 (14) + 957 (16) + 828 (11) + 825 (11)
TORS HCCC	959 (14) + 957 (17)
TORS HCCC	1400 (13) + 1398 (12)
TORS HCCC	1400 (18) + 1398 (17)
TORS HCCC	1102 (14) + 1101 (14) + 42(20)
TORS HCCC	42 (22)
TORS HCCC	1558 (14) + 1102 (11) + 1101(11) + 42(22)
TORS HCCC	41 (25)
TORS HCCC	41 (26)
TORS HCCC	1558 (11) + 1102 (24) + 1101 (25) + 41 (16)
TORS CCCC	176 (10)
TORS CCCC	195 (10) + 176 (19) + 120 (10)
TORS CCCC	740 (11)
TORS CCCC	448 (14) + 222 (12) + 221 (11)
TORS CCCC	448 (18) + 222 (12) + 221 (11)
TORS CCN	29 (32) + 26 (20)
TORS NCNC	120 (12) + 53 (14) + 19 (16)
TORS CNCC	57 (26) + 26 (20) + 23 (19) + 19 (19)
TORS CNCN	281 (10) + 53 (14) + 19 (15)
TORS NCCC	29 (32) + 26 (20)
TORS CCNC	57 (26) + 26 (20) + 23 (19) + 19 (19)
OUT SNNC	651 (56) + 629 (12) + 120 (10)
OUT CCCC	522 (12) + 222 (12) + 221 (12)
OUT CCCC	222 (13) + 221 (11)
OUT CCN	195(14) + 115 (38)
OUT CCN	195 (15) + 115 (26)
OUT CCCC	448 (10) + 176 (10)

Şekil 4.72 (3) No'lu bileşiğin teorik ^1H -NMR spektrumuÇizelge 4.14 (3) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ^1H -NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R^2 değeri
13,18	7.21	7.92	
23, 25	7.21	7.33	
14, 19	7.15	7.24	
34, 36	7.09	7.23	
28, 31	4.85	6.41	
29, 32	4.85	3.79	
4, 5	3.39	3.41	
3, 6	3.39	3.30	
43	2.33	2.77	
39	2.33	2.76	
38, 42	2.33	2.59	
40, 44	2.33	2.10	

Şekil 4.73 (3) No'lu bileşiğin teorik ^{13}C -NMR spektrumuÇizelge 4.15 (3) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ^{13}C -NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R^2 değeri
7	182.88	196.08	
17	138.49	147.15	
11	138.49	147.15	
21	136.53	145.75	
26	136.53	145.75	
16	128.57	134.62	
12	128.57	134.62	
22	128.57	134.02	
24	128.57	134.02	
35	128.57	133.30	
33	128.57	133.30	
15	124.89	131.12	
10	124.89	131.12	
27	52.44	56.12	
30	52.44	56.12	
1	45.13	49.06	
2	45.13	49.06	
37	21.54	23.10	
41	21.54	23.09	

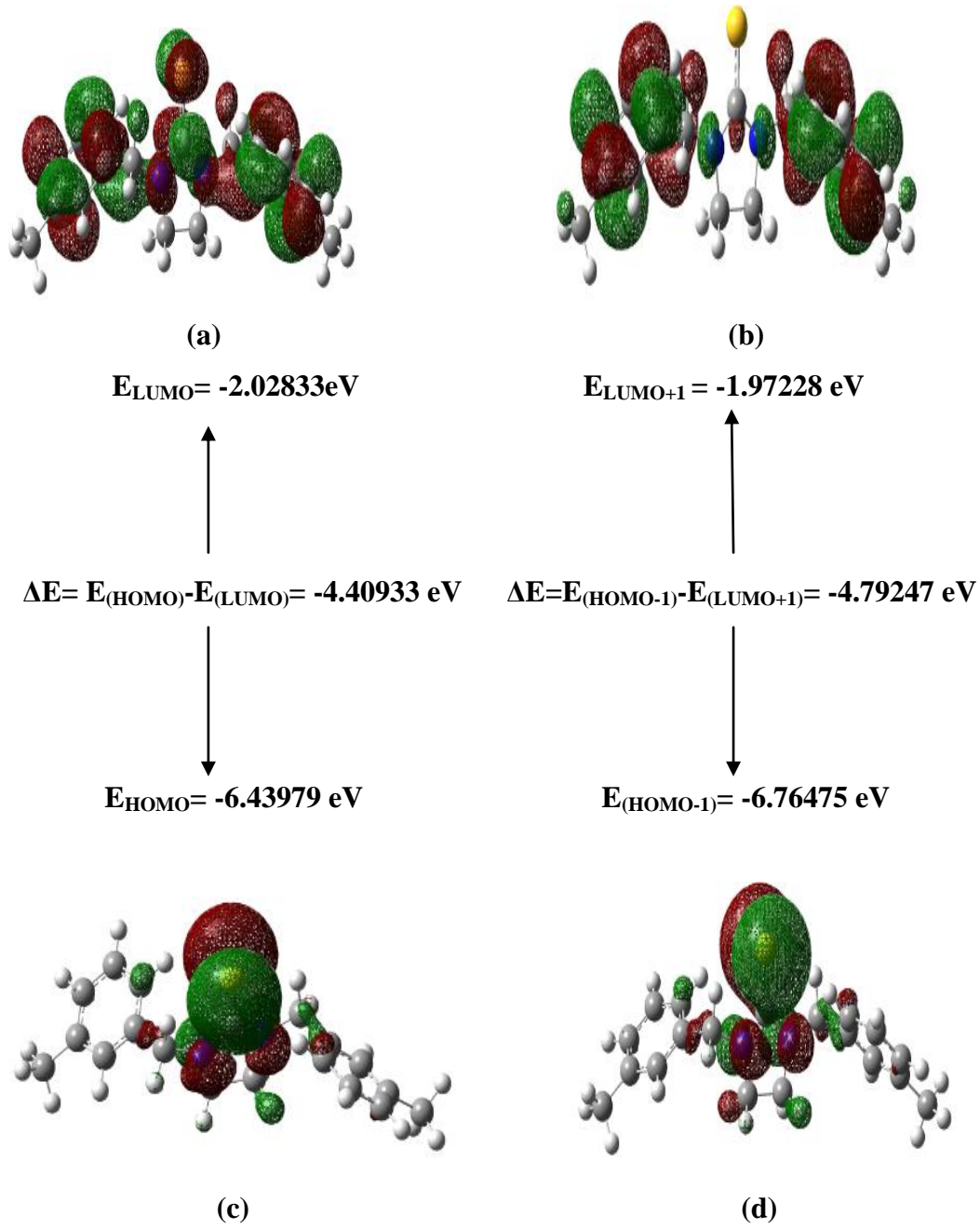


Çizelge 4.16 (3) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları

ATOM	Mulliken B3LYP/6-311+G(d,p)	NBO B3LYP/6-311+G(d,p)
1 C	-0.205330	-0.26398
2 C	-0.195062	-0.26838
3 H	0.216447	0.24524
4 H	0.213202	0.22987
5 H	0.206529	0.22848
6 H	0.234279	0.25546
7 C	0.170995	0.21777
8 N	-0.633314	-0.46059
9 N	-0.638531	-0.46107
10 C	-0.171575	-0.22826
11 C	0.031472	-0.03687
12 C	-0.198074	-0.23257
13 H	0.182094	0.24304
14 H	0.167562	0.23196
15 C	-0.198337	-0.25625
16 C	-0.196832	-0.23440
17 C	-0.007610	-0.04684
18 H	0.190603	0.24698
19 H	0.176798	0.23721
20 S	0.048825	-0.18036
21 C	0.023791	-0.02545
22 C	-0.174186	-0.22431
23 H	0.184407	0.24046
24 C	-0.172669	-0.22587
25 H	0.179607	0.23797
26 C	0.025953	-0.02863
27 C	-0.197391	-0.25361
28 H	0.224135	0.23817
29 H	0.230931	0.25094
30 C	-0.210225	-0.26649
31 H	0.285662	0.28941
32 H	0.216257	0.23947
33 C	-0.201002	-0.24126
34 H	0.176963	0.23647
35 C	-0.201189	-0.24235
36 H	0.181582	0.23896
37 C	-0.609151	-0.68253
38 H	0.212400	0.24133
39 H	0.215940	0.24331
40 H	0.201662	0.23485
41 C	-0.609493	-0.68152
42 H	0.204371	0.23677
43 H	0.218040	0.24377
44 H	0.199460	0.23369

Çizelge 4.17 (3) No'lu bileşiğin NBO analizi

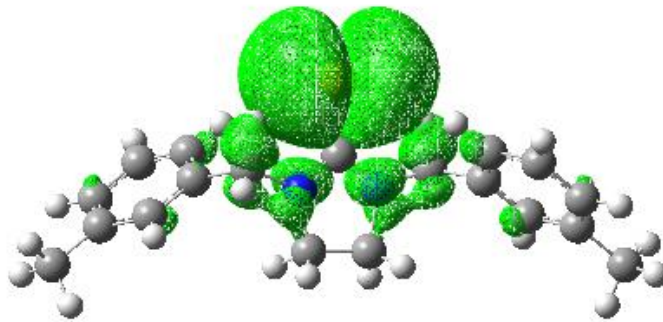
Donor NBO	Acceptor NBO	E (2) kcal/mol
BD (1) C ₇ - S ₂₀	BD*(1) C ₇ - S ₂₀	8.66
BD (2) C ₁₀ - C ₂₄	BD*(2) C ₁₁ - C ₁₂	21.61
BD (2) C ₁₀ - C ₂₄	BD*(2) C ₂₆ - C ₃₃	18.02
BD (2) C ₁₁ - C ₁₂	BD*(2) C ₁₀ - C ₂₄	18.52
BD (2) C ₁₅ - C ₁₇	BD*(2) C ₁₆ - C ₂₁	17.96
BD (2) C ₁₅ - C ₁₇	BD*(2) C ₂₂ - C ₃₅	22.52
BD (2) C ₁₆ - C ₂₁	BD*(2) C ₁₅ - C ₁₇	22.48
BD (2) C ₁₆ - C ₂₁	BD*(2) C ₂₂ - C ₃₅	17.82
BD (2) C ₂₂ - C ₃₅	BD*(2) C ₁₅ - C ₁₇	19.07
BD (2) C ₂₂ - C ₃₅	BD*(2) C ₁₆ - C ₂₁	22.28
BD (2) C ₂₆ - C ₃₃	BD*(2) C ₁₀ - C ₂₄	21.44
BD (2) C ₂₆ - C ₃₃	BD*(2) C ₁₁ - C ₁₂	19.40.
BD (1) C ₃₀ - H ₃₁	BD*(2) C ₁₅ - C ₁₇	5.73
LP (1) N ₈	BD*(1) C ₂ - H ₅	5.76
LP (1) N ₉	BD*(1) C ₇ - S ₂₀	61.01
LP (1) N ₉	BD*(1) C ₁ - H ₄	6.28
LP (1) N ₉	BD*(1) C ₂₇ - H ₂₈	6.17
LP (2) S ₂₀	BD*(1) C ₇ - N ₈	14.33
LP (2) S ₂₀	BD*(1) C ₇ - N ₉	15.10
BD*(1) C ₇ - S ₂₀	BD*(2) C ₇ - S ₂₀	8.38



Şekil 4.74 (3) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı

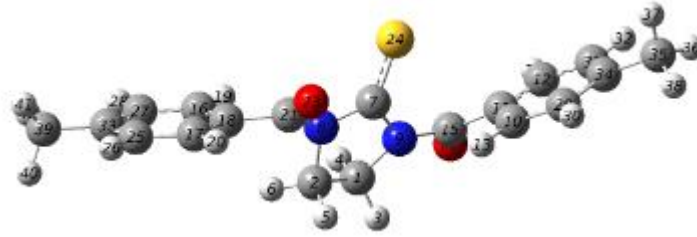
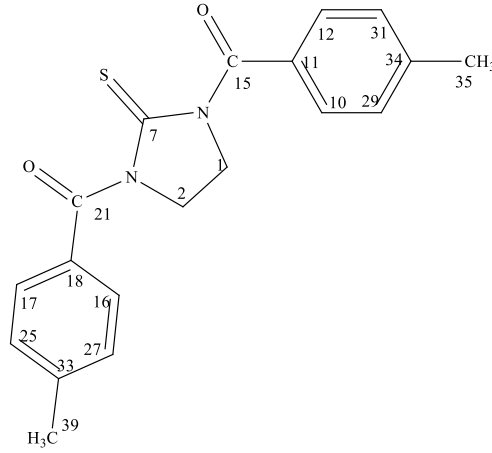
Çizelge 4.18 (3) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri

HOMO	-0.24315
LUMO	-0.13428
HOMO-1	-0.26734
LUMO+1	-0.12051
$\Delta E_{(HOMO-LUMO)}$	-0.10887
$\Delta E_{(HOMO-1-LUMO+1)}$	-0.14683
Elektronegatiflik (χ)	0.188715
Kimyasal Sertlik	0.054435
Kimyasal Yumuşaklık	18.37053
Elektronik Kimyasal Potansiyel (Pi)	-0.18872
Global Elektrofillik (ω)	0.000969
Global Yumuşaklık (S)	0.027218
Elektronik Yük (ΔN_{max})	3.466795

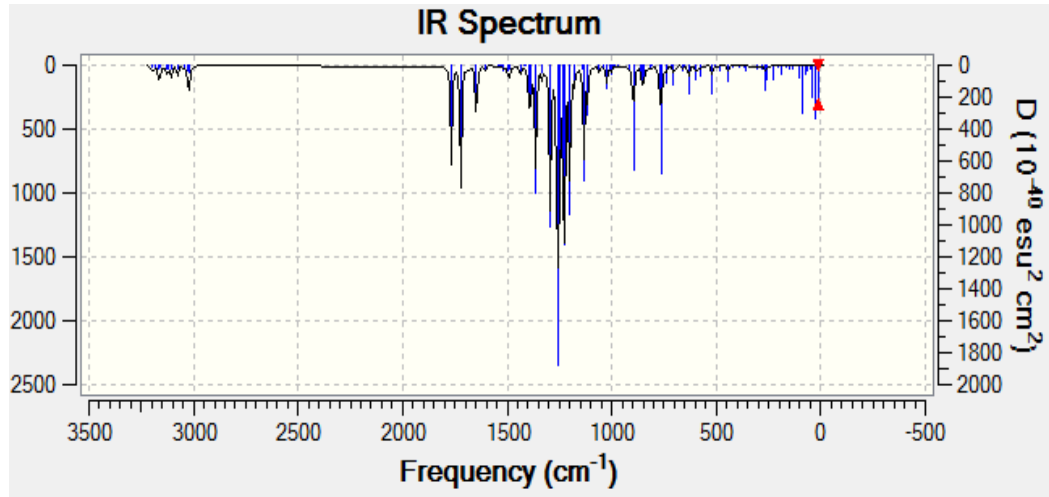


Şekil 4.75 (3) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu

4.2.4. 1,3-Bis-(4-metilbenzoil)imidazolidin-2-tiyon (4) Analizi



Şekil 4.76 (4) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü



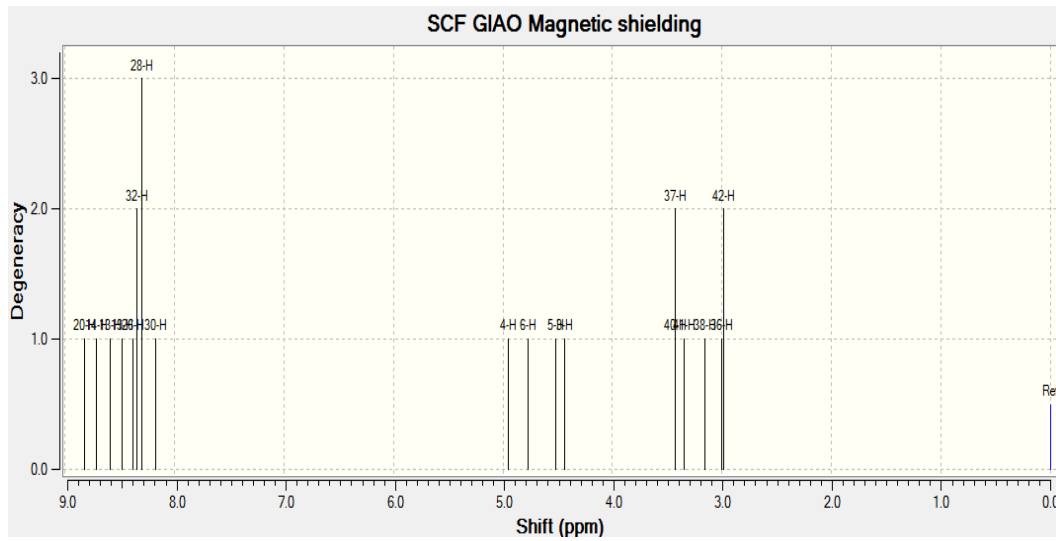
Şekil 4.77 (4) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu

Çizelge 4.19 (4) No'lu bileşiğin teorik IR analizi

TED	B3LYP/6-311+ (d,p)
Titreşim Türü	
STRE CH	3131(52) + 3124 (40)
STRE CH	3197 (11)+ 3196(82)
STRE CH	3195(93)
STRE CH	3047 (89)
STRE CH	3186 (83) + 3165 (17)
STRE CH	3163 (93)
STRE CH	3186(16) + 3165(82)
STRE CH	3164 (44)+ 3163(49)
STRE CH	3020(93)
STRE CH	3131(38) + 3124 (57)
STRE CH	3104(61) +3077 (21) + 3023 (18)
STRE CH	3077 (38) + 3023 (61)
STRE CH	3104 (38) + 3077 (41) + 3023(20)
STRE CH	3077 (43) + 3027 (52)
STRE CH	3108 (17) + 3077 (53) + 3027 (30)
STRE CH	3108 (79)+3027 (18)
STRE OC	1767 (89)
STRE OC	1722 (87)
STRE CC	1647 (31) + 1435 (20) + 1140 (10)
STRE CC	1435 (19)+ 1229 (15)+1140 (16)
STRE CC	1649(29) + 1436(20) + 1143(14)
STRE CC	1649 (10) + 1436 (21) + 1231 (11)+ 1143 (12)
STRE CC	1332 (21)
STRE CC	1606 (30)
STRE CC	1647 (10) +1605(28)
STRE CC	1333 (18)
STRE CC	1605(24)+1336 (17) + 1333 (11)
STRE CC	1606(21) + 1332 (17)
STRE NC	1294 (11)
STRE NC	1226 (17)
STRE NC	1363 (17)
STRE CC	1259 (17) + 304 (13)
STRE CC	1259 (10) + 1251(10) + 629 (10)
STRE CC	1231(34) + 806 (14) + 598 (10)
STRE CC	1229 (29)+ 818 (10)+ 629 (12)
STRE NC	1133 (13) + 1065 (19)
STRE NC	1133 (20)+ 1065 (27)
STRE SC	1363 (10) + 1065 (17) + 572 (17) + 520 (15)
BEND CCC	653 (17)+ 598 (10)+ 355 (11)
BEND HCC	1251 (10) +1226 (29)
BEND HCC	1541 (17) + 1337 (23) + 1204 (13) +1143 (10)
BEND HCC	1539 (17) +1336 (16)+ 1200 (13)+ 1140 (17)
BEND HCH	1528 (23) +1516 (59)
BEND HCC	1539 (15) + 1336 (18) + 1200 (17) + 1140 (12)
BEND HCC	1539 (14)+1435 (10)+1336(11)+1200(13)+1140(14)
BEND HCC	1541(15) +1436 (10)+1337(16)+1204(15)+1143(15)
BEND HCC	1541 (15)+1337 (17)+1204 (11)+1143 (14)
BEND HCN	1294 (22) +1232 (25)+ 1229 (10) + 1115(21)
BEND HCH	1528 (60)+1516 (24)
BEND HCH	1493(12) +1489 (52) + 1414 (16) +1059(16)
BEND HCH	1493 (19)+1489(25) +1414 (36)

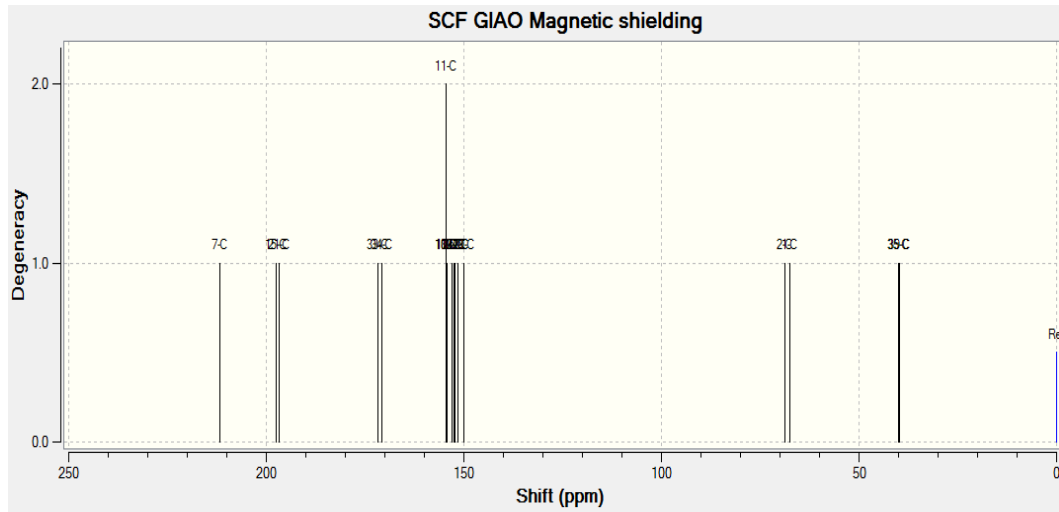
BEND HCH	1493(41) +1414 (40)
BEND HCH	1494 (13) + 1487 (39) +1415 (27)
BEND HCH	1494 (36)+ 1415(46)
BEND HCH	1494 (23) +1487 (38) +1415 (19) +1061(13)
BEND OCC	629 (12)+ 393 (11)+352 (10)
BEND OCC	919 (10) +444 (11)
BEND CCC	1040 (11) +1037(26) + 652 (15)
BEND CCC	1037 (13)+652 (22)
BEND CCC	1040 (16) +1037 (18) +653 (16)
BEND CCC	1037 (10)+653 (26)
BEND CCC	1541 (10) +806 (22)
BEND CCC	224 (23) +61 (12)
BEND CCC	1539 (10) +1037 (10) +818 (19) +806 (10)
BEND NCN	919 (12)
BEND CNC	149 (14) + 47 (10)
BEND NCC	47 (12)
BEND CNC	188 (14) + 23 (13)
BEND CCC	200 (15)+149 (10)
BEND CCN	520 (10) +61 (15)
BEND CCC	367 (10)+355 (37)
BEND CCC	355 (17) +352 (35)
BEND CNC	1363 (10)
BEND SCN	367 (10) +188 (28)
TORS HCNC	1115 (14)
TORS HCCC	987 (13) +972 (23) +845 (26) + 415 (12)
TORS HCCC	987(29)+972 (13)+ 850 (25)+415(11)
TORS HCCC	997 (27) +983(10)+860(28)+769(10) +421(12)
TORS HCNC	1396 (26)+1386 (12)+897 (10)
TORS HCCC	997 (15) +983(24)+860 (12) +853(15)+421(14)
TORS HCCC	997 (26) +860 (40)
TORS HCCC	997 (15)+983 (13)+860 (11)+853(33)
TORS HCCC	987 (14) +972 (14)+845 (44)+415(10)
TORS HCCC	987 (27) + 850 (41)
TORS HCNC	1396(15)+1386 (21)+1115 (11)+897 (13)
TORS HCNC	1386 (20)
TORS HCCC	1489 (15)+1059 (18)
TORS HCCC	1493(11)+1009(27)+44 (16)
TORS HCCC	1059 (36) +44 (11)
TORS HCCC	1061 (11)+1008 (20)+41 (18)+39 (11)
TORS HCCC	1061(23)+1008 (14)+41(15)+39(12)
TORS HCCC	1487 (15)+1061 (22)+41 (15)
TORS CCCC	705(14)+421(30)
TORS CCCC	983 (11)+ 482 (11)+421 (22)
TORS CCCC	972 (13) +711 (15)+415 (30)
TORS CCCC	504 (11) +415 (20) +132 (14)
TORS CCCN	86 (10)+73(19)+61 (13)+44 (17)
TORS CCCC	983(20) +705 (19)
TORS CCCC	987(13)+972(12)+711 (23)
TORS NCNC	104(13)+13(23)
TORS CNCC	104 (10)+73 (11)+44 (22)+23 (11)
TORS NCCC	86(10) +73 (10)+47 (19)+41(15)+39 (23)
TORS CNCN	166(10) +47(10)+23 (26)
TORS CCNC	61 (10)+13 (58)
OUT ONCC	845(10)+764(33)
OUT ONCC	769(22) +705 (17)

OUT SNNC	662(27) +652 (16) +572 (12)
OUT CCCC	705(10)+482(27) +266 (11)
OUT CCCC	504(17)+444 (18)+281 (13)
OUT CCCN	224 (12)+200 (11)+149 (19)
OUT CCCN	256(19)+104(10)
OUT CCCC	266(16) +104 (10)+86(13)
OUT CCCC	86 (12)+73(19)

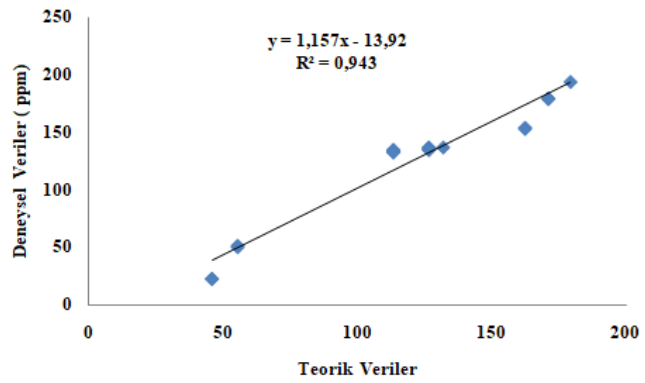
Şekil 4.78 (4) No'lu bileşiğin teorik ¹H-NMR spektrumu

Çizelge 4.20 (4) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹H-NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R ² değeri
20	7.70	8.10	
14	7.70	8.00	
13	7.70	7.86	
19	7.70	7.76	
26,32,28	6.95	7.62	
30	6.95	7.45	
4	4.15	4.23	
6	4.15	4.05	
5	4.15	3.80	
3	4.15	3.71	
40,37	3.81	2.71	
41	3.81	2.62	
38	3.81	2.43	
36,42	3.81	2.27	

Şekil 4.79 (4) No'lu bileşiğin teorik ^{13}C -NMR spektrumuÇizelge 4.21 (4) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ^{13}C -NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R^2 değeri
7	179.07	194.19	
15	170.81	179.91	
21	170.81	179.28	
33	162.17	154.25	
34	162.17	153.23	
18,11	131.79	137.06	
10	126.42	136.94	
17	126.42	136.64	
16	126.42	135.47	
25	113.26	135.07	
12	126.42	134.78	
27	113.26	133.99	
31	113.26	133.94	
29	113.26	132.60	
2	55.42	51.32	
1	55.42	50.07	
35	45.90	22.40	
39	45.90	22.34	

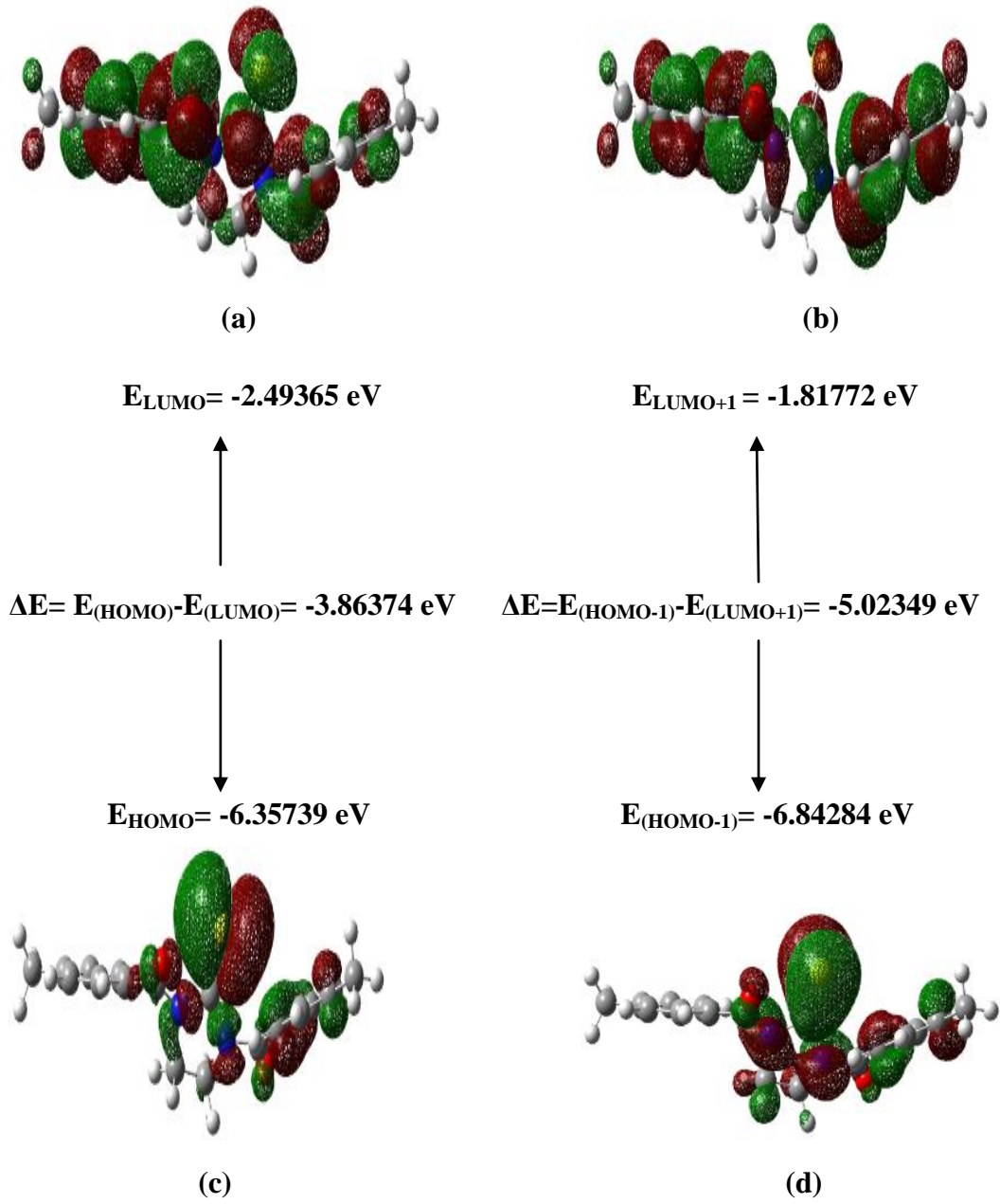


Çizelge 4.22 (4) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları

ATOM	Mulliken B3LYP/6-311+G(d,p)	NBO B3LYP/6-311+G(d,p)
1 C	-0.185479	-0.17180
2 C	-0.287045	-0.17283
3 H	0.185465	0.22325
4 H	0.185379	0.20609
5 H	0.171512	0.19593
6 H	0.197974	0.21929
7 C	-0.510076	0.26973
8 N	0.284832	-0.55469
9 N	0.108866	-0.53694
10 C	-0.363060	-0.14727
11 C	1.030107	-0.14499
12 C	0.392575	-0.13956
13 H	0.124156	0.20988
14 H	0.134047	0.22023
15 C	-0.501368	0.71518
16 C	-0.254766	-0.16898
17 C	0.246841	-0.14187
18 C	0.835985	-0.16060
19 H	0.144196	0.21418
20 H	0.142321	0.22490
21 C	-0.585140	0.70926
22 O	-0.228761	-0.57365
23 O	-0.163183	-0.52083
24 S	-0.322679	-0.04968
25 C	-0.416772	-0.21162
26 H	0.128484	0.21153
27 C	-0.842313	-0.21488
28 H	0.124176	0.21105
29 C	-0.873102	-0.21509
30 H	0.115901	0.20890
31 C	-0.378314	-0.21401
32 H	0.124096	0.20866
33 C	0.602677	0.00664
34 C	0.492949	0.00571
35 C	-0.408266	-0.58169
36 H	0.159440	0.20854
37 H	0.156922	0.20963
38 H	0.134187	0.20072
39 C	-0.361747	-0.58182
40 H	0.171604	0.21206
41 H	0.148312	0.20802
42 H	0.139068	0.20343

Çizelge 4.23 (4) No'lu bileşiğin NBO analizi

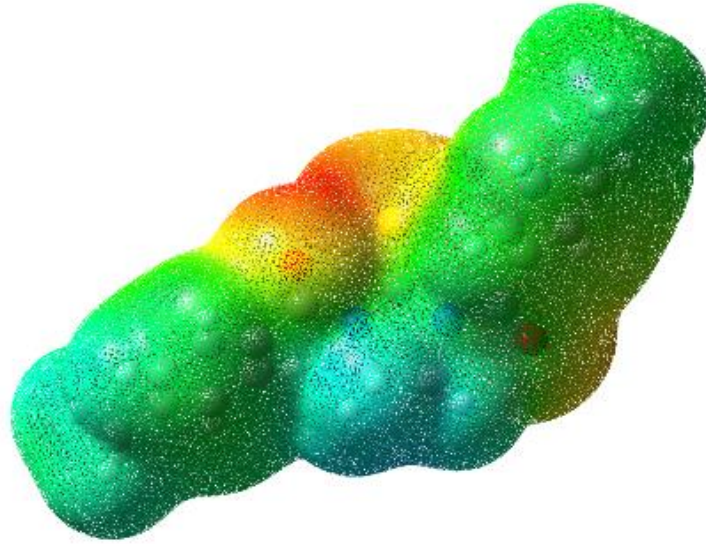
Donor NBO	Acceptor NBO	E (2) kcal/mol
BD (2) C ₁₀ - C ₁₁	BD*(2) C ₁₂ - C ₃₁	20.99
BD (2) C ₁₀ - C ₁₁	BD* (2) C ₁₅ - O ₂₂	15.91
BD (2) C ₁₀ - C ₁₁	BD*(2) C ₂₉ - C ₃₄	16.91
BD (2) C ₁₂ - C ₃₁	BD*(2) C ₁₀ - C ₁₁	18.64
BD (2) C ₁₂ - C ₃₁	BD*(2) C ₂₉ - C ₃₄	24.54
BD (2) C ₁₆ - C ₁₈	BD*(2) C ₁₇ - C ₂₅	20.61
BD (2) C ₁₆ - C ₁₈	BD*(2) C ₂₁ - O ₂	14.5
BD (2) C ₁₆ - C ₁₈	BD*(2) C ₂₇ - C ₃₃	16.83
BD (2) C ₂₇ - C ₃₃	BD*(2) C ₁₆ - C ₁₈	24.09
BD (2) C ₂₇ - C ₃₃	BD*(2) C ₁₇ - C ₂₅	16.96
BD (2) C ₂₉ - C ₃₄	BD*(2) C ₁₀ - C ₁₁	24.16
LP (1) N ₉	BD*(2) C ₇ - S ₂₄	53.51
LP (1) N ₉	BD*(2) C ₁₅ - O ₂₂	27.52
LP (1) O ₂₂	RY*(1) C ₁₅	15.46
LP (2) O ₂₂	BD*(1) N ₉ - C ₁₅	27.51
LP (2) O ₂₂	BD*(1) C ₁₁ - C ₁₅	17.17
LP (1) O ₂₃	RY*(1) C ₂₁	16.29
LP (2) O ₂₃	BD*(1) N ₈ - C ₂₁	30.49
LP (2) O ₂₃	BD*(1) C ₁₈ - C ₂₁	18.73
LP (2) S ₂₄	BD*(1) C ₇ - N ₈	15.41
LP (2) S ₂₄	BD*(1) C ₇ - N ₉	15.18



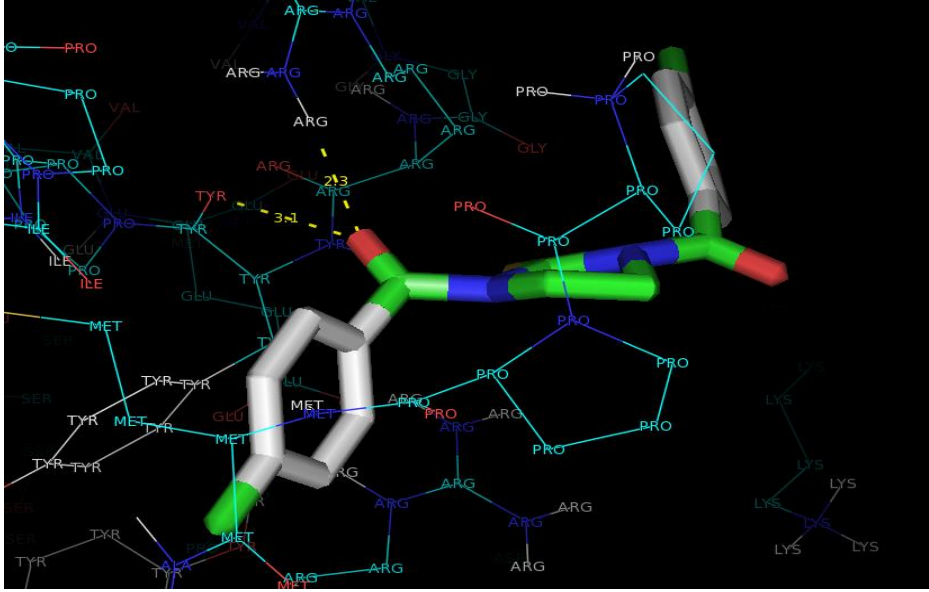
Şekil 4.80 (4) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı

Çizelge 4.24 (4) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri

HOMO	-0.23363
LUMO	-0.09164
HOMO-1	-0.25147
LUMO+1	-0.06686
$\Delta E_{(HOMO-LUMO)}$	-0.14199
$\Delta E_{(HOMO-1-LUMO+1)}$	0.15983
Elektronegatiflik (χ)	0.162635
Kimyasal Sertlik	0.070995
Kimyasal Yumuşaklık	14.0855
Elektronik Kimyasal Potansiyel (Pi)	-0.16264
Global Elektrofillik (ω)	0.000939
Global Yumuşaklık (S)	0.035498
Elektronik Yük (ΔN_{max})	2.290795

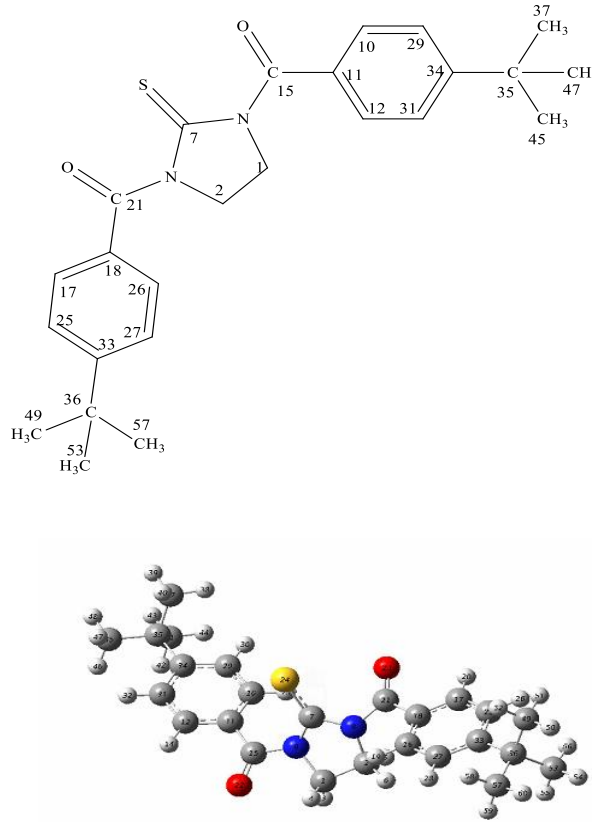


Şekil 4.81 (4) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu

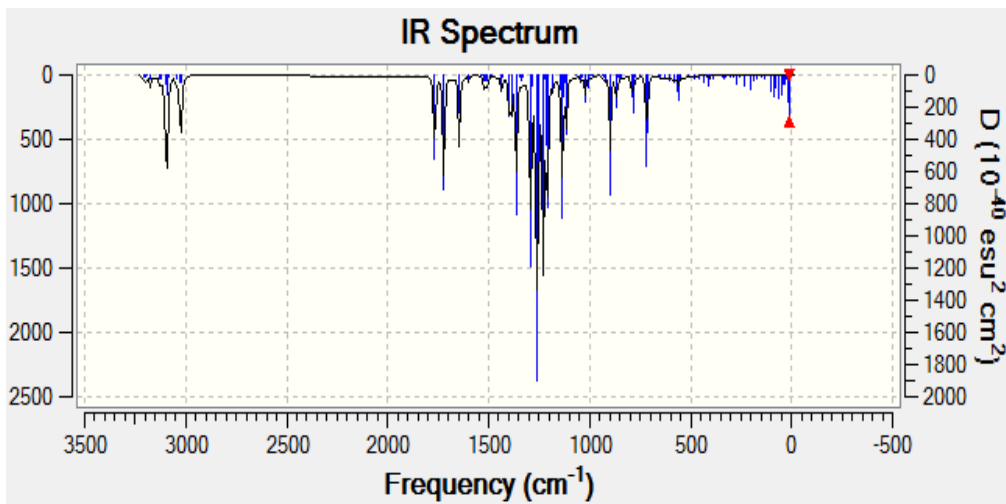


Şekil 4.82 (4) No'lu bileşiğin doking bağlanması

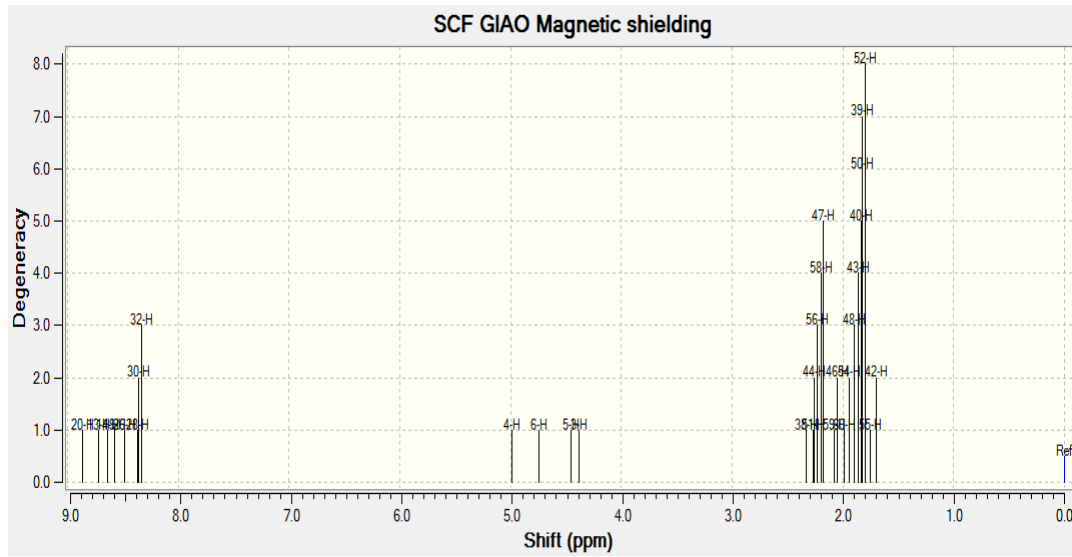
4.2.5. 1,3-Bis-(4-tertiyerbütüilbenzoil)imidazolidin-2-tiyon (5) Analizi



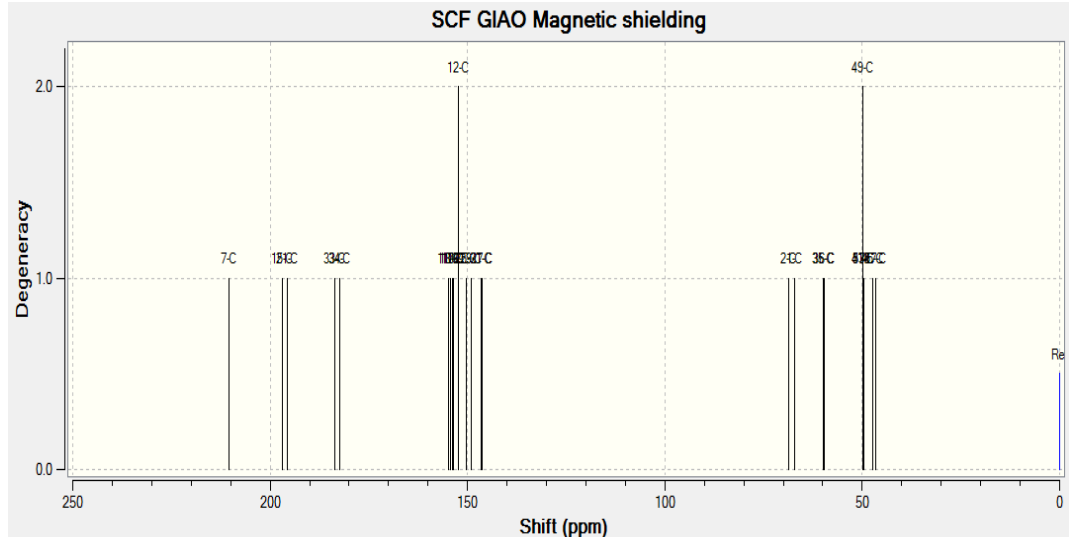
Şekil 4.83 (5) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü



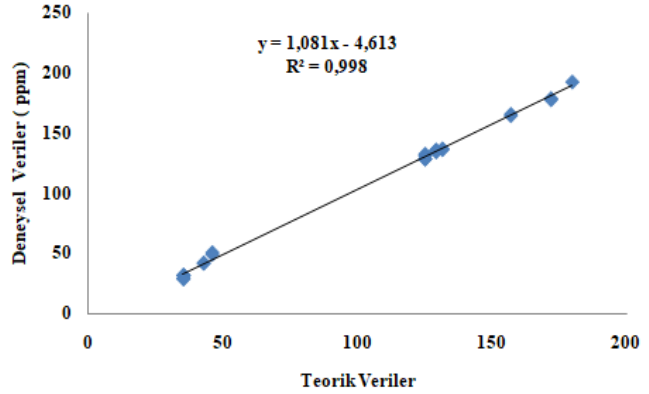
Şekil 4.84 (5) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu

Şekil 4.85 (5) No'lu bileşiğin teorik ^1H -NMR spektrumuÇizelge 4.25 (5) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ^1H -NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R^2 değeri
20	7.58	8.15	
13	7.58	8.00	
14	7.58	7.92	
19	7.58	7.85	
26	7.37	7.77	
28,30,32	7.37	7.63	
4	4.19	4.26	
6	4.19	4.03	
5	4.19	3.73	
3	4.19	3.66	
38	1.29	1.61	
51,44,56, 58,47	1.29	1.51	
59,46	1.29	1.34	
60,54,48,43, 40,50,39,52	1.29	1.15	
55,42	1.29	1.00	

Şekil 4.86 (5) No'lu bileşiğin teorik ^{13}C -NMR spektrumuÇizelge 4.26 (5) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ^{13}C -NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R^2 değeri
7	179.86	192.94	
15	171.93	179.33	
21	171.93	178.09	
33	156.96	166.09	
34	156.96	164.92	
11	131.49	137.35	
18	131.49	136.67	
17	129.13	136.37	
10	129.13	135.97	
16,12	129.13	134.74	
25	125.06	132.90	
29	125.06	131.44	
31	125.06	129.06	
27	125.06	128.74	
2	45.79	51.027	
1	45.79	49.56	
35	42.60	42.44	
36	42.60	42.17	
41,49	35.07	32.22	
37	35.07	32.08	
53	35.07	31.96	
45	35.07	29.71	
57	35.07	28.96	



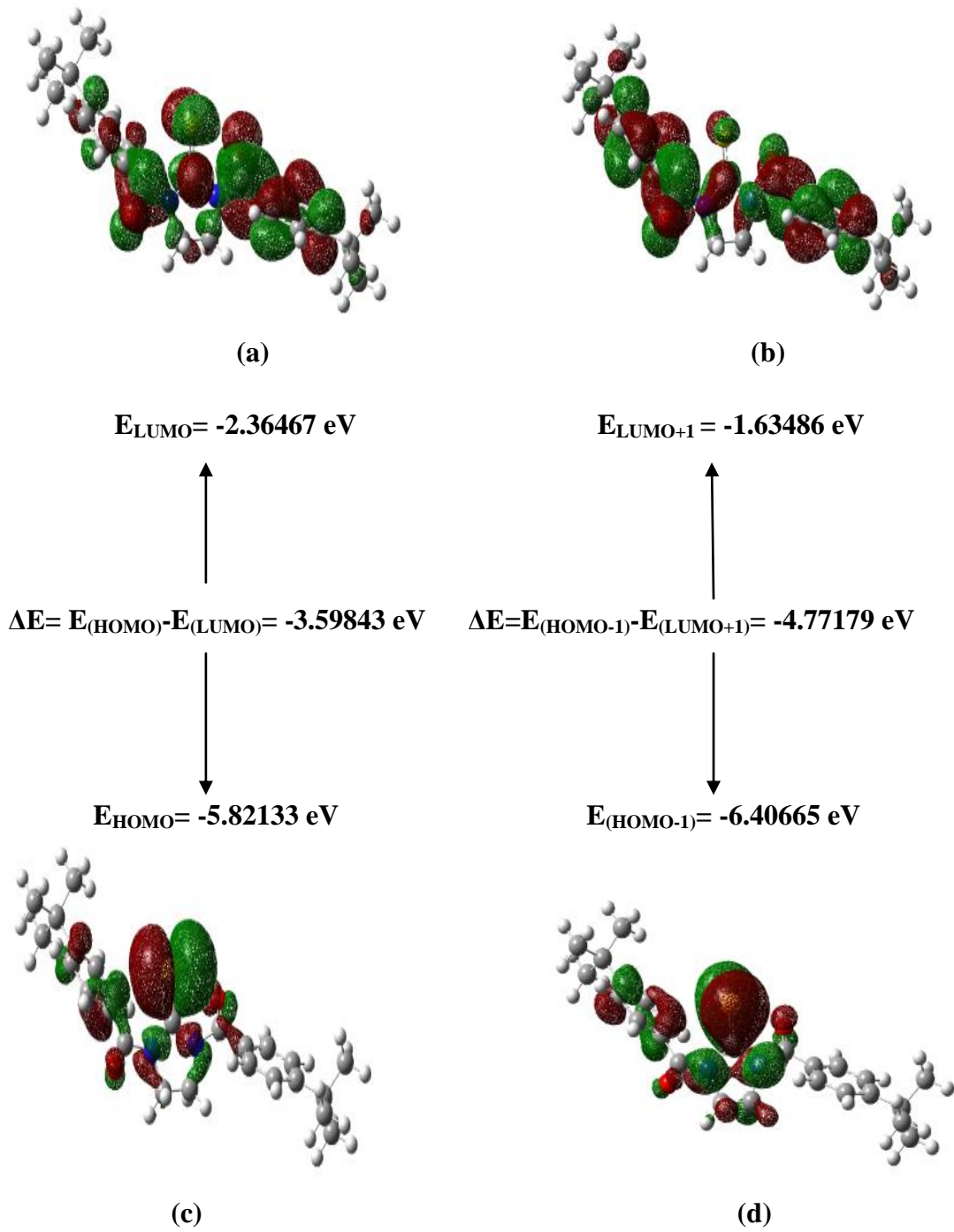
Çizelge 4.27 (5) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları

ATOM	Mulliken B3LYP/6-311+G(d,p)	NBO B3LYP/6-311+G(d,p)
1 C	-0.283705	-0.16853
2 C	-0.226302	-0.16956
3 H	0.213306	0.22024
4 H	0.215232	0.20462
5 H	0.184258	0.19282
6 H	0.186727	0.21634
7 C	-0.583511	0.27634
8 N	0.340628	-0.56052
9 N	0.206711	-0.54064
10 C	-0.310873	-0.14300
11 C	0.853950	-0.15239
12 C	-0.247607	-0.14111
13 H	0.213938	0.21211
14 H	0.234132	0.22120
15 C	-0.414910	0.71614
16 C	-0.551334	-0.16865
17 C	0.050325	-0.14869
18 C	0.896932	-0.16214
19 H	0.201466	0.21366
20 H	0.235944	0.22730
21 C	-0.453496	0.71307
22 O	-0.207012	-0.57293
23 O	-0.137467	-0.51968
24 S	-0.432733	-0.07106
25 C	-0.454803	-0.19041
26 H	0.147704	0.20896
27 C	-0.467723	-0.20261
28 H	0.186787	0.21662
29 C	-0.482455	-0.20700
30 H	0.146628	0.20921
31 C	-0.488443	-0.20123
32 H	0.134346	0.21158
33 C	0.412923	0.00013
34 C	0.690262	0.00548
35 C	0.294180	-0.09047
36 C	0.333128	-0.09036
37 C	-0.668024	-0.54818
38 H	0.150137	0.19772
39 H	0.141609	0.19535
40 H	0.152473	0.20116
41 C	-0.525486	-0.55915
42 H	0.144210	0.20190
43 H	0.149935	0.19929
44 H	0.121850	0.19344
45 C	-0.415749	-0.56107
46 H	0.142551	0.20153
47 H	0.130680	0.19429
48 H	0.150003	0.19929

49 C	-0.573438	-0.55508
50 H	0.148250	0.19965

Çizelge 4.28 (5) No'lu bileşiğin NBO analizi

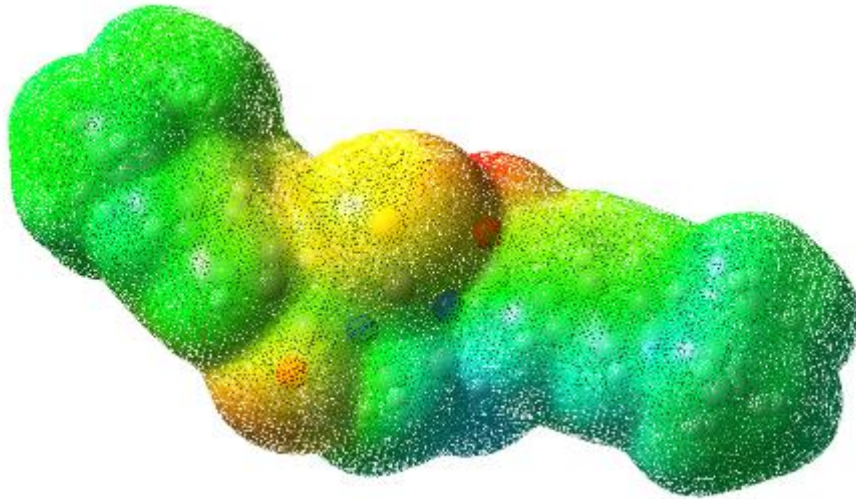
Donor NBO	Acceptor NBO	E (2) kcal/mol
BD (1) C ₃₃ - C ₃₆	RY*(9) C ₅₇	4171.81
BD (1) C ₅₇ - H ₅₈	RY*(1) H ₅₅	21037.64
BD (1) C ₅₇ - H ₅₈	BD*(1) C ₁₇ - C ₂₅	9451.03
BD (1) C ₅₇ - H ₅₉	RY*(4) C ₄₉	4442.18
BD (1) C ₅₇ - H ₅₉	BD*(1) C ₇ - S ₂₄	5230.16
CR (1) C ₅₇	RY*(7) C ₁₅	4841.65
CR (1) C ₅₇	RY*(4) C ₁₇	3948.08
CR (1) C ₅₇	RY*(14) C ₅₇	5361.83
CR (1) C ₅₇	BD*(1) C ₅₇ - H ₅₈	10890.99
BD*(2) C ₇ - S ₂₄	RY*(9) C ₁₆	6529.01
BD*(2) C ₇ - S ₂₄	RY*(11) C ₁₆	8514.30
BD*(2) C ₇ - S ₂₄	RY*(5) H ₅₈	3621.58
BD*(2) C ₂₁ - O ₂₃	RY*(7) C ₁₅	5845.12
BD*(2) C ₂₁ - O ₂₃	RY*(4) C ₁₇	6042.14
BD*(2) C ₂₁ - O ₂₃	RY*(14) C ₅₇	8729.80
BD*(2) C ₂₁ - O ₂₃	BD*(1) C ₅₇ - H ₅₈	3685.02



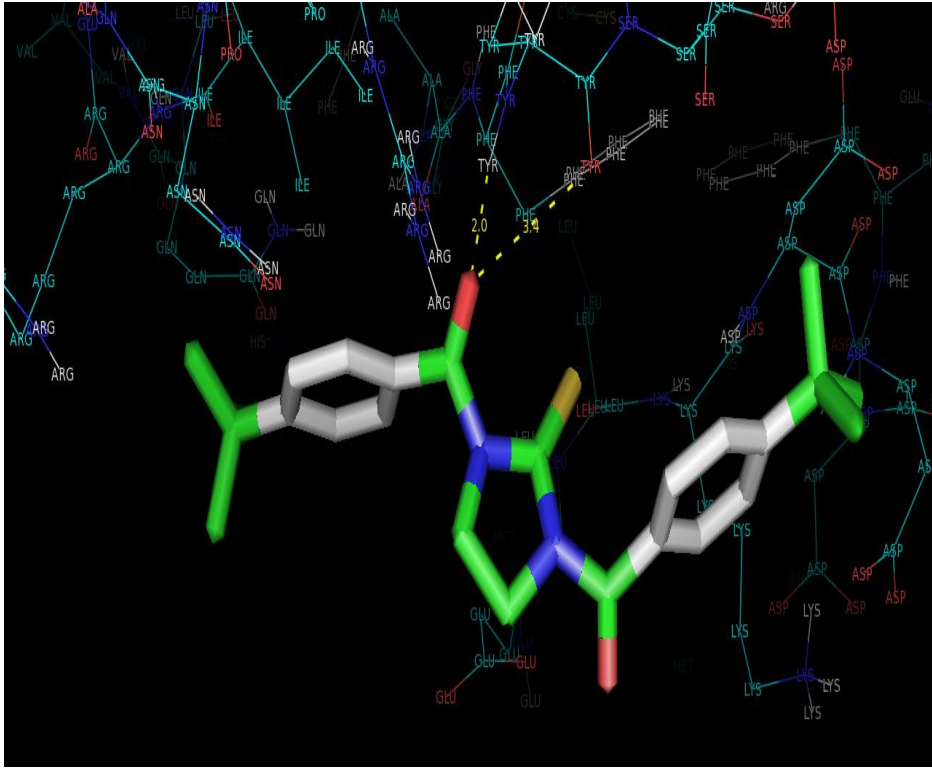
Şekil 4.87 (5) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı

Çizelge 4.29 (5) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri

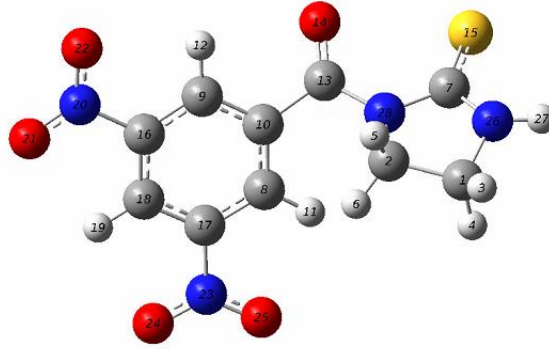
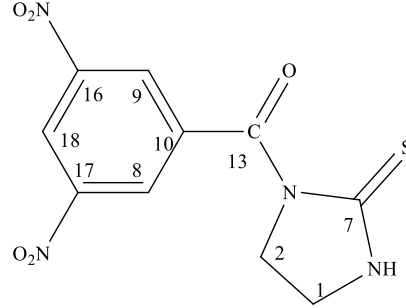
HOMO	-0.21393
LUMO	-0.08169
HOMO-1	-0.23544
LUMO+1	-0.06008
$\Delta E_{(HOMO-LUMO)}$	-0.13224
$\Delta E_{(HOMO-1-LUMO+1)}$	-0.17536
Elektronegatiflik (χ)	0.14781
Kimyasal Sertlik	0.06612
Kimyasal Yumuşaklık	15.12402
Elektronik Kimyasal Potansiyel (Pi)	-0.14781
Global Elektrofillik (ω)	0.000722
Global Yumuşaklık (S)	0.03306
Elektronik Yük (ΔN_{max})	2.235481



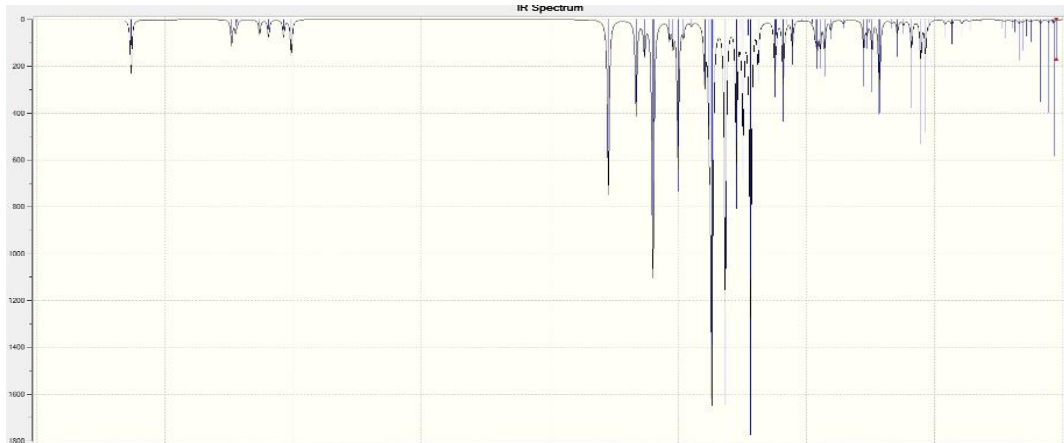
Şekil 4.88 (5) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu



Şekil 4.89 (5) No'lu bileşiğin doking bağlanması

4.2.6. 3-(3,5-dinitrobenzoyl)-1*H*-imidazolidin-2-tiyon (6) Analizi

Şekil 4.90 (6) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü

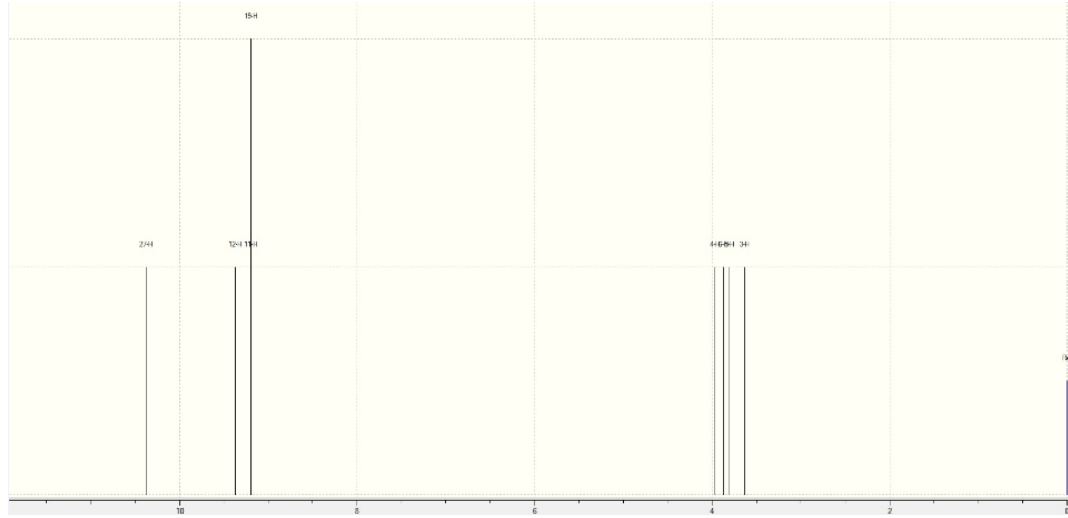


Şekil 4.91 (6) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu

Çizelge 4.30 (6) No'lu bileşiğin teorik IR analizi

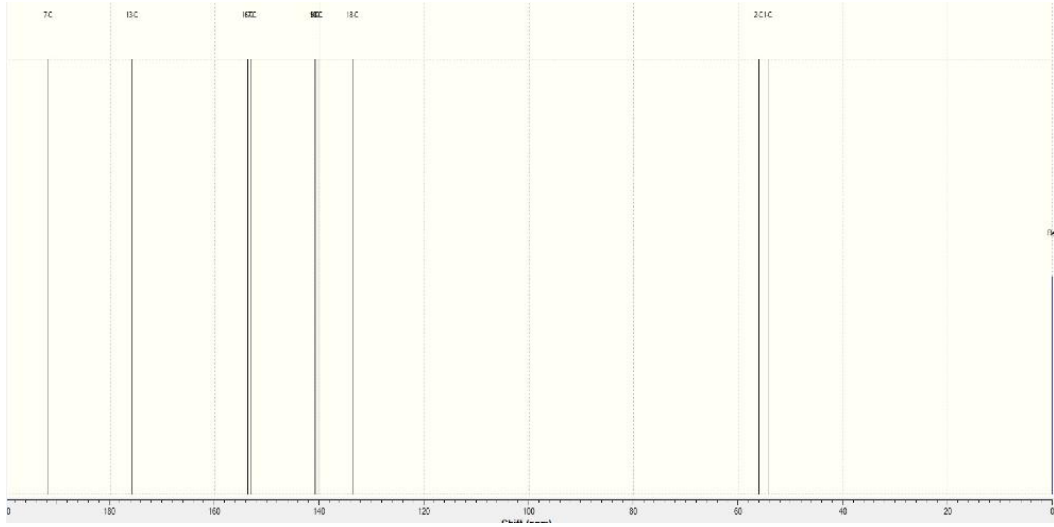
TED	B3LYP/6-311+ (d,p)
Titreşim Türü	
STRE NH	3632 (100)
STRE CH	3096 (93)
STRE CH	3219 (100)
STRE CH	3225 (100)
STRE CH	3240 (100)
STRE CH	3007 (93)
STRE CH	3037 (91)
STRE CH	3131 (92)
STRE OC	1771 (89)
STRE ON	1599 (30) +1378 (21) +1368 (20)
STRE ON	1599 (29) +1378 (22) +1368 (17)
STRE ON	1596 (25) +1378 (17)+1368 (22)
STRE ON	1596 (27) + 1378 (20) +1368 (22)
STRE CC	1663 (10)+1447 (13)+1362(13) +1090 (10)
STRE CC	1663 (22) +1447(13)+1362 (14)+1090 (10)
STRE CC	1479 (11) +1362 (18)+1017 (12)
STRE CC	1663 (10) +1631(21) +1596 (11)+1017(10)
STRE CC	1631(12) +1362 (28)
STRE NC	1500 (15) +1273(29)
STRE NC	1316 (25) +1188 (15) +433(14)
STRE NC	1217 (23)+905 (16)
STRE NC	1078 (34)+1055 (21) + 979(10)
STRE NC	929(14) +362 (17)
STRE NC	929 (22)+343(29)
STRE NC	1217 (10)+1078(23)
STRE SC	1217 (14)+1078 (13) +536 (15)
BEND CCC	362 (10)
BEND CNC	1316 (10)+ 979 (28)
BEND HNC	1500 (35)+1273(21)
BEND HCH	1533(71) + 1519 (14)
BEND HCC	1479 (17) + 1256 (27) + 1122 (20)
BEND HCC	1479 (15)+1256 (30) +1122 (17)
BEND HCC	1447 (18) +1256 (25) +1090 (38)
BEND HCN	1227 (43)+1116 (20)
BEND HCN	1316 (22) +1227 (18) +1116 (21)
BEND HCH	1533(11)+1519 (69)
BEND OCC	433(12) +362 (15) +320 (10)
BEND ONC	554 (17)+536 (13) +521 (19)+320 (18)
BEND ONO	929 (10)+855 (28) +744 (27)
BEND ONC	590 (10) + 521(39)+ 362 (10)+ 320 (13)
BEND ONO	929 (17) +855 (21)+764 (17) +744 (17)
BEND CCC	1017 (17) +394 (12)
BEND CCC	1017 (31)
BEND CCC	1479(11) +1017 (16)
BEND NCN	979 (11)+458 (13)+433 (12)
BEND NCC	240 (15) +56 (14)
BEND CNC	225 (12) +186 (16) +157 (10) +56 (11)
BEND CCC	320 (10) +123 (22) +56 (13)+33 (11)
BEND CNC	1217(10)+1055(15) +905(10)
BEND NCC	320(13) +140 (36)
BEND NCC	320(14) +186 (12) +140 (25)

BEND SCN	394 (35) +186 (19)
TORS HNCN	590(24) +554 (32) +536 (18)
TORS HCNC	1500(12) +1370 (11) +1227 (14)+905 (10)
TORS HCCC	975(48)+965 (12)+946 (19)
TORS HCCC	975 (45) +965 (12) +946 (19)
TORS HCCN	965 (40)+957 (40)
TORS HCNC	1500(11) +1370 (22) +905 (12) +170 (11)
TORS HCNC	1396 (32)+1116(11)+905 (20)
TORS HCNC	1396(23)+1246 (23)
TORS ONCC	37(84)
TORS ONCC	42(88)
TORS CCCC	458(14) +198 (17)
TORS CCCC	645(14) +470 (17)
TORS CCCC	946 (11)+ 667 (11) + 645 (17) +198 (10)
TORS NCNC	86 (26)+56 (23)
TORS NCCC	24 (68)
TORS CNCC	123(12) +33 (48) +24(13)
TORS CNCN	170 (47)
OUT OCON	753(29) +717 (40) +470 (10)
OUT OCON	753 (44)+717 (27)
OUT ONCC	776 (49)
OUT SNNC	667 (11) + 645 (24) +621 (28) +170 (13)
OUT NCCC	753 (10) +470 (18) +198 (17)+157 (11)
OUT NCCC	470 (24) +157 (17) +123 (11)
OUT CCCN	225 (39) +86 (12)
OUT CCCC	776 (15) +667 (10) +86 (13)

Şekil 4.92 (6) No'lu bileşiğin teorik ¹H-NMR spektrumu

Çizelge 4.31 (6) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹H-NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R ² değeri
27	10.07	10.37	
12	8.90	9.37	
11	8.74	9.19	
19	8.74	9.19	
4	4.20	3.96	
6	3.65	3.86	
5	3.65	3.80	
3	4.20	3.63	

Şekil 4.93 (6) No'lu bileşiğin teorik ^{13}C -NMR spektrumuÇizelge 4.32 (6) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ^{13}C -NMR verileri ve regresyon analizi

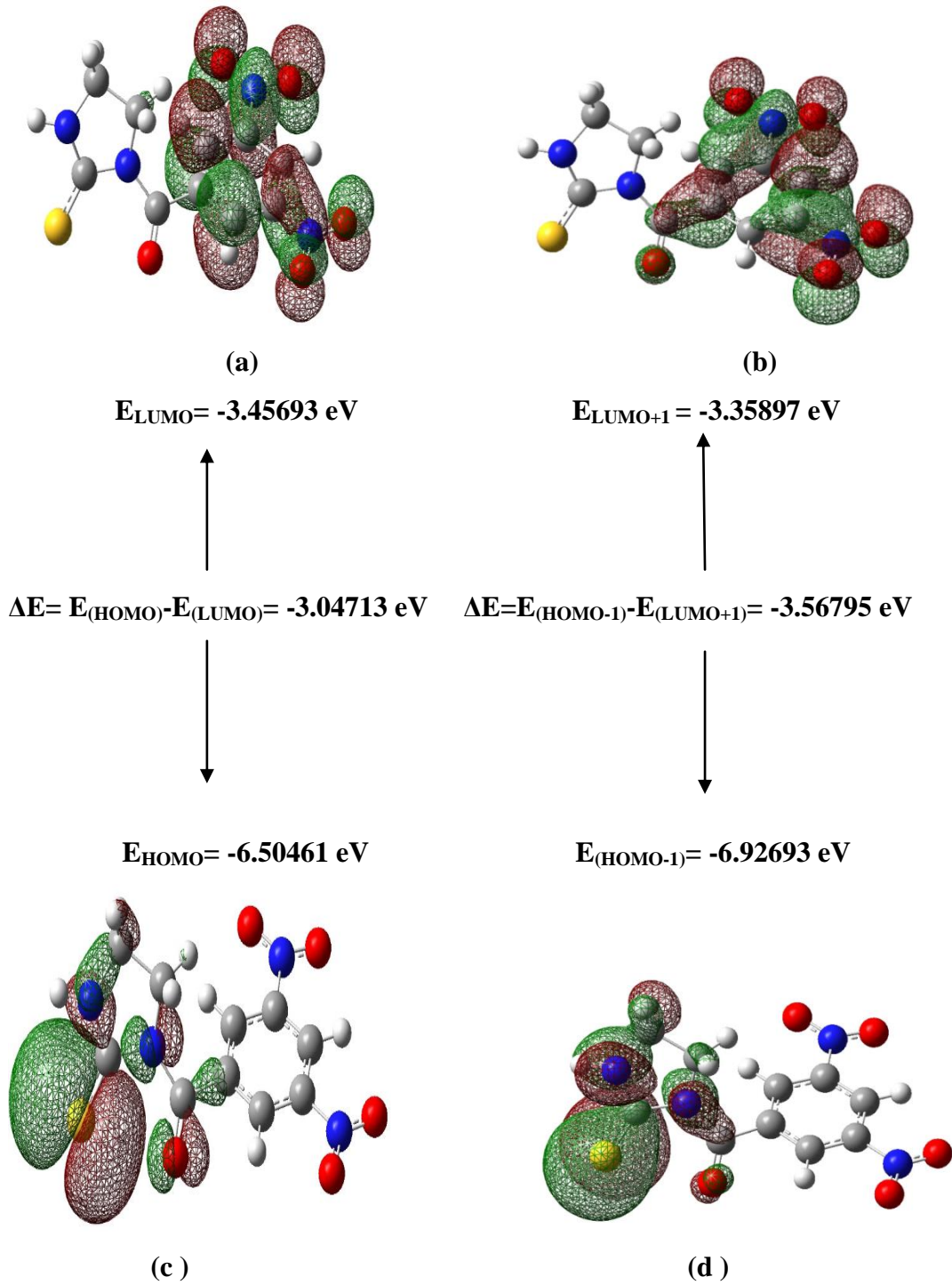
Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R^2 değeri
7	178.70	191.87	
13	165.78	175.80	
16	146.93	153.75	
17	146.93	153.18	
9	138.96	140.82	
10	138.96	140.70	
8	128.07	140.26	
18	119.81	133.65	
2	47.26	56.03	
1	41.25	54.28	

Çizelge 4.33 (6) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları

ATOM	Mulliken B3LYP/6-311+G(d,p)	NBO B3LYP/6-311+G(d,p)
1 C	-0.518414	-0.17711
2 C	-0.148436	-0.17735
3 H	0.170011	0.19185
4 H	0.193535	0.19331
5 H	0.192747	0.19509
6 H	0.177912	0.20945
7 C	-0.198150	0.25761
8 C	-0.643868	-0.13374
9 C	-0.820846	-0.10898
10 C	1.242570	-0.13233
11 H	0.303980	0.25765
12 H	0.299058	0.26806
13 C	-0.491947	0.70715
14 O	-0.156896	-0.49120
15 S	-0.218622	-0.04477
16 C	-0.180889	0.06725
17 C	0.261056	0.06500
18 C	-0.012637	-0.13840
19 H	0.308380	0.27374
20 N	-0.207917	0.49624
21 O	0.030300	-0.36133
22 O	0.024968	-0.35984
23 N	-0.148885	0.49717
24 O	0.035986	-0.35842
25 O	-0.012172	-0.36704
26 N	0.024813	-0.71887
27 H	0.309236	0.46232
28 N	0.185128	-0.57253

Çizelge 4.34 (6) No'lu bileşiğin NBO analizi

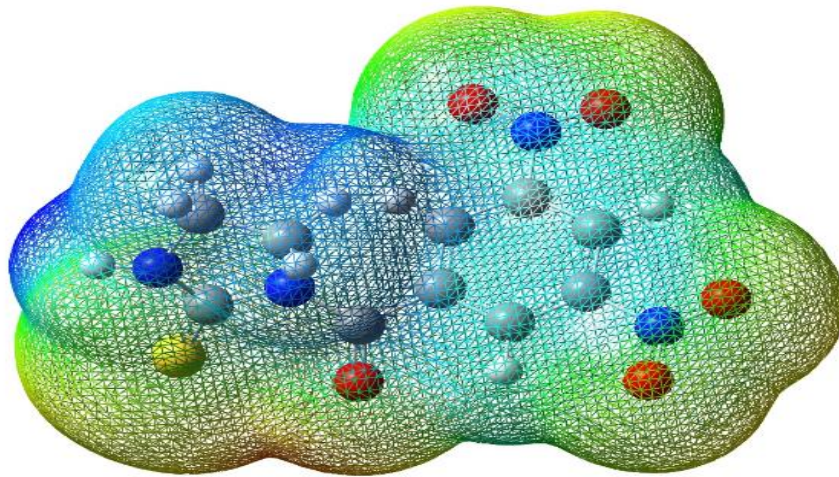
Donor NBO	Acceptor NBO	E (2) kcal/mol
BD (2) C ₁₀ - C ₂₇	BD*(2) C ₂₈ - C ₃₁	24.26
BD (2) C ₁₀ - C ₂₇	BD*(2) N ₃₆ - O ₃₇	26.08
BD (2) C ₁₁ - C ₁₂	BD*(2) C ₁₀ - C ₂₇	25.64
BD (2) C ₁₆ - C ₁₈	BD*(2) C ₁₇ - C ₂₅	23.94
BD (2) C ₁₇ - C ₂₅	BD*(2) C ₂₆ - C ₂₉	24.45
BD (2) C ₁₇ - C ₂₅	BD*(2) N ₃₃ - O ₃₄	25.53
BD (2) C ₂₆ - C ₂₉	BD*(2) C ₁₆ - C ₁₈	24.34
BD (2) C ₂₆ - C ₂₉	BD*(2) N ₄₂ - O ₄₃	22.69
BD (2) C ₂₈ - C ₃₁	BD*(2) C ₁₁ - C ₁₂	24.35
BD (2) C ₂₈ - C ₃₁	BD*(2) N ₃₉ - O ₄₀	22.86
LP (1) N ₉	BD*(2) C ₇ - S ₂₄	53.91
LP (1) N ₉	BD*(2) C ₁₅ - O ₂₂	24.91
LP (2) O ₂₂	BD*(1) N ₉ - C ₁₅	27.45
LP (2) O ₂₃	BD*(1) N ₈ - C ₂₁	30.43
LP (2) O ₃₆	BD*(2) N ₃₄ - O ₃₅	174.48
LP (3) O ₃₅	BD*(2) N ₃₃ - O ₃₄	175.04
LP (3) O ₃₈	BD*(2) N ₃₆ - O ₃₇	172.69
LP (3) O ₄₁	BD*(2) N ₃₉ - O ₄₀	173.97
LP (3) O ₄₄	BD*(2) N ₄₂ - O ₄₃	171.94
BD*(2) C ₁₆ - C ₁₈	BD*(2) C ₂₁ - O ₂₃	76.96
BD*(2) C ₂₉ - C ₃₂	BD*(2) C ₁₁ - C ₁₂	193.45



Şekil 4.94 (6) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı

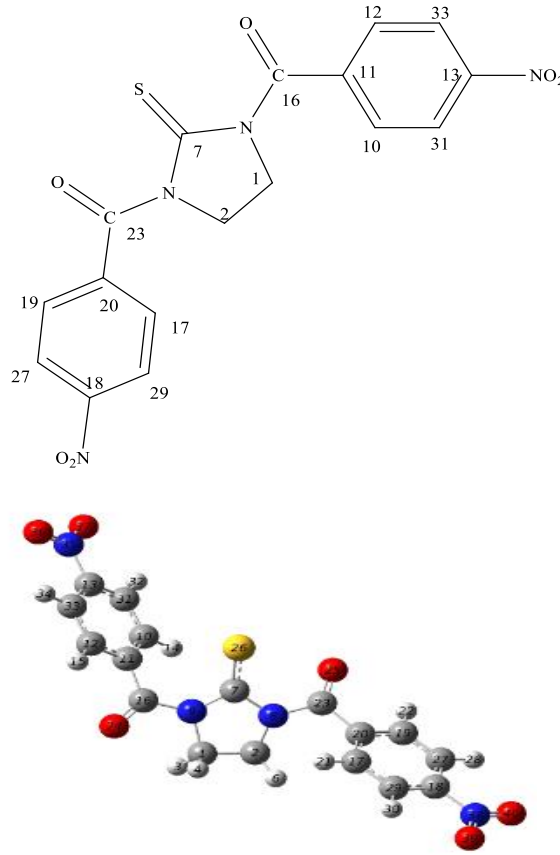
Çizelge 4.35 (6) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri

HOMO	-0.22653
LUMO	-0.07879
HOMO-1	-0.26192
LUMO+1	-0.0376
$\Delta E_{(HOMO-LUMO)}$	-0.14774
$\Delta E_{(HOMO-1-LUMO+1)}$	-0.22432
Elektronegatiflik (χ)	0.15266
Kimyasal Sertlik	0.07387
Kimyasal Yumuşaklık	13.5373
Elektronik Kimyasal Potansiyel (Pi)	-0.15266
Global Elektrofillik (ω)	0.000861
Global Yumuşaklık (S)	0.036935
Elektronik Yük (ΔN_{max})	2.066603

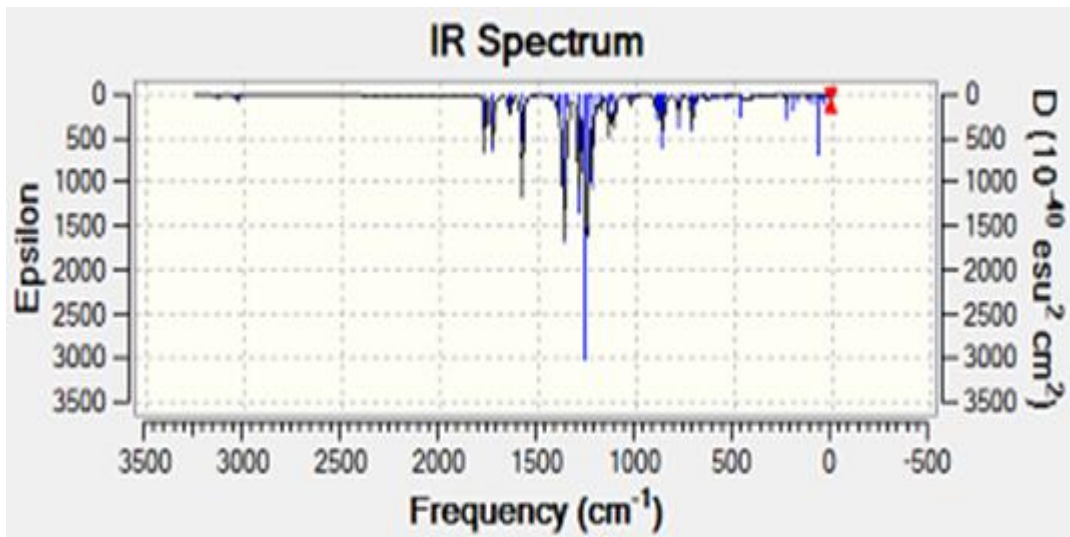


Şekil 4.95 (6) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu

4.2.7. 1,3-Bis-(4-nitrobenzoil)imidazolidin-2-tiyon (7) Analizi



Şekil 4.97 (7) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü



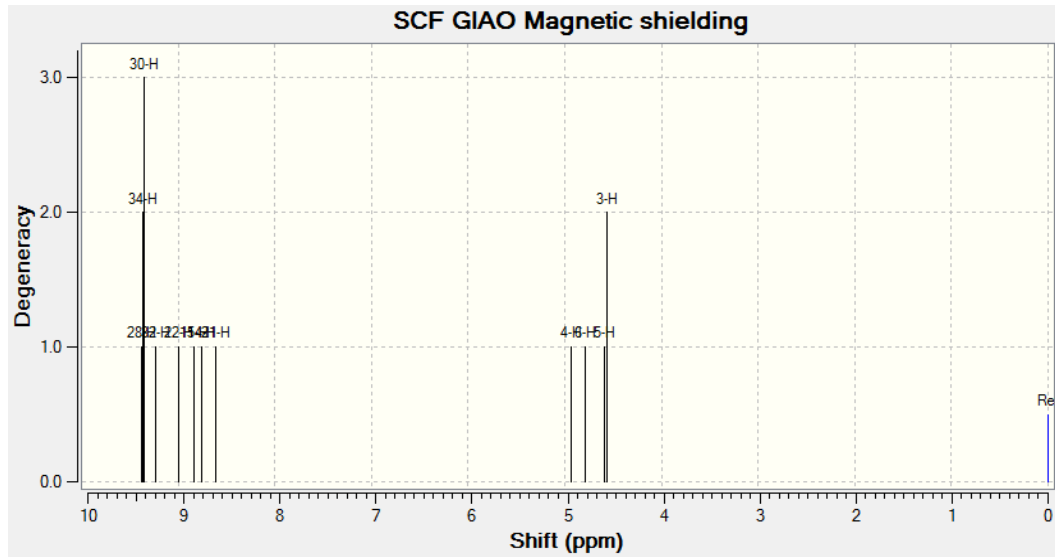
Şekil 4.98 (7) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu

Çizelge 4.36 (7) No'lu bileşiğin teorik IR analizi

TED	B3LYP/6-311+ (d,p)
Titreşim Türü	
STRE CH	3136(59)+3129 (33)
STRE CH	3199 (94)
STRE CH	3205 (92)
STRE CH	3202 (93)
STRE CH	3225(87)
STRE CH	3224 (91)
STRE CH	3227 (90)
STRE CH	3226 (88)
STRE CH	3052 (87)
STRE CH	3189 (97)
STRE CH	3031 (91)
STRE CH	3136(31)+3129(64)
STRE OC	1773 (89)
STRE OC	1732 (89)
STRE ON	1581(35)+1375 (19)+1366 (23)
STRE ON	1581 (35)+1375(18)+1366 (24)
STRE ON	1644(10) +1584 (34)+1372 (40)
STRE CC	1637(31)+1435(13)+1353(12)+1200(11)+1131(12)
STRE CC	1644 (26)+1637 (10)+1116(18)
STRE CC	1636(31)+1432 (16)+1352(12)+1196(10)+1127(13)
STRE CC	1644 (22)+1636(13)+1584 (10) +1115(12)
STRE CC	1636 (10)+1432 (17)+1352(13)+1127 (11)
STRE CC	1644 (11)+1352(19)+1115(13)
STRE CC	1644(10)+1353(19)+1116 (19)
STRE CC	1637(11)+1435(16)+ 1353(13)+1131(13)
STRE CC	1644 (12)+1353(18)
STRE CC	1644 (14)+1432(10)+1352(18)+1321(10)
STRE NC	1180 (11)
STRE NC	1297(11)+1224(13)
STRE NC	1375(11)+1260(11)
STRE NC	1139 (11)
STRE CC	1260 (14)
STRE NC	1139(14)+1067(18)
STRE NC	1224 (10)+1139(18) +1067(25)
STRE NC	1116 (21)+469(13)
STRE NC	1115 (15)+464 (21)
STRE SC	1067 (19)+545(21)
BEND CCC	1035 (15)+1032(18)
BEND CCC	1032 (25)+640(12)
BEND CNC	1004 (12)
BEND HCN	1246(13)+1232 (22)+1224 (25)
BEND HCC	1520(15)+1325(19)+1200 (23)+1131(12)
BEND HCC	1520 (14)+1325(19)+1200 (22)+1131(13)
BEND HCC	1517 (14)+1321(20) +1196 (23)+1127(13)
BEND HCC	1517(15)+1321(20)+1196(13)+1127(17)+1115(10)
BEND HCC	1517 (15)+1321(20)+1196 (13)+1127(19)
BEND HCC	1520(16)+1325(18)+1200(14)+1131(17)+1116(10)
BEND HCC	1520 (16)+1325(20)+1200 (11)+1131 (21)
BEND HCH	1528(24)+1515 (48)
BEND HCC	1517(14)+1321(19)+1196 (24)+1127(11)
BEND HCH	1528 (59)+1515(26)

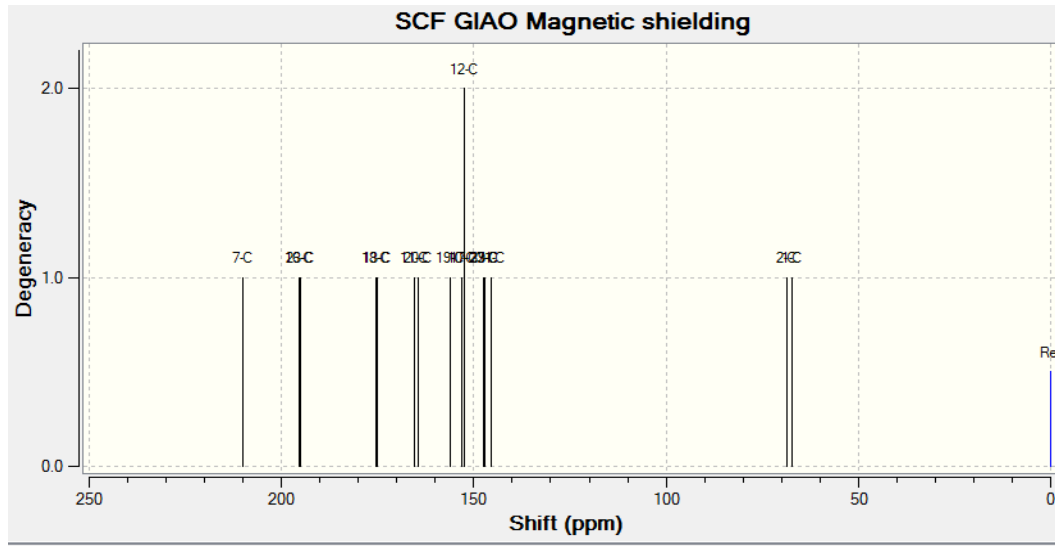
BEND HCC	1297 (20)+1246(13)+1232(15)
BEND OCC	520 (10)+348(10)
BEND ONC	538(28)+520(28)+298 (10)
BEND ONO	864 (44)
BEND ONC	524(50)+289(14)
BEND ONO	1372(10)+868(47)
BEND CCC	1035(11)+1032(11)+643(14)+640(13)
BEND CCC	1032 (15)+643(11)+640(18)
BEND CCC	640(10)
BEND CCC	1032 (11)
BEND CCC	739(14)
BEND CCC	289(18)+167 (14)
BEND NCN	922(11)+348(12)
BEND CNC	138(17)
BEND NCC	622(14)+46 (16)
BEND CNC	182(14)+18 (10)
BEND CCC	298(16)+138(14)
BEND CCN	594 (11)
BEND CNC	1025(11)+1004(10)
BEND NCC	298 (16)+257 (10)+167 (10)
BEND NCC	289 (28)+201(12)+167 (11)
BEND SCN	360(21)+239 (12)+182 (28)
TORS HCNC	1397 (12) + 1385 (12)
TORS HCCC	1001 (14) +990 (15) +879 (12) + 850 (30)+417 (13)
TORS HCCC	1001 (22) +990 (10) + 879 (17) +850 (21) + 417(11)
TORS HCCC	1008 (22) +997(14) +887 (16) +860 (22)
TORS HCCC	1008 (21) +997 (17)+ 887 (18) + 860 (23)
TORS HCCN	1008 (22)+997 (22)+887 (18) +860 (26)
TORS HCCC	1001(16) + 990 (22) +879 (10) +850 (27) +417 (11)
TORS HCCN	1001 (28) +990 (20)+879 (19)+850 (20)
TORS HCNC	1397 (24)
TORS HCCC	1008(20) +997(16) +887 (15) +860 (25)
TORS HCNC	1397 (19)+1385(27)
TORS HCNC	1385(11) +1113(16)
TORS ONCC	70(12) +56 (19)+43(15) +33 (45)
TORS ONCC	56(18) +4(31) +30 (37)
TORS CCCC	686 (15) +417 (28)
TORS CCCC	686 (33)
TORS CCCC	687 (19) +421(25)
TORS CCCC	687 (24)+421(20)
TORS CCCC	74 (23)
TORS CCCC	687(13) +459(16) +421(23)
TORS CCCC	686 (11)+417 (25)
TORS CCCN	74 (15) +70 (22) +30 (28)
TORS NCNC	152 (15)+97(14) +12 (25)
TORS CNCC	97(19) + 43(16) +30 (10) +18 (11)
TORS NCCC	74 (13)+70 (22)+33 (33)
TORS CNCN	152 (12) +56 (12) +18 (21)
TORS CCNC	12 (56)
OUT OCON	718 (54)
OUT ONCC	781 (41)
OUT OCON	781 (10)+719 (44) +686 (10)
OUT ONCC	788 (24)+687 (10)
OUT SNNC	651(38)+594 (14)
OUT NCCC	459 (10)

OUT NCCC	239(13) + 117 (12)
OUT CCCN	201(15)+152 (11) +138 (10)
OUT CCCN	201(11) +97 (10)
OUT CCCC	239 (10)+18(10)

Şekil 4.99 (7) No'lu bileşiğin teorik ^1H -NMR spektrumu

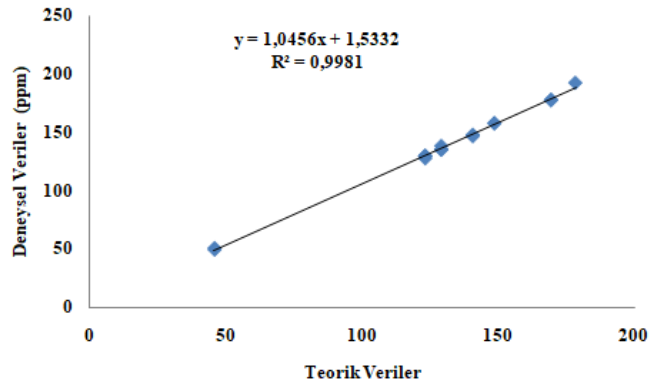
Çizelge 4.37 (7) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ^1H -NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R^2 değeri
28,34,30	8.24	8.64	
32	8.24	8.51	
22	7.87	8.27	
15	7.87	8.11	
14	7.87	8.03	
21	7.87	7.89	
4	4.25	4.22	
6	4.25	4.06	
5,3	4.25	3.85	

Şekil 4.100 (7) No'lu bileşiğin teorik ^{13}C -NMR spektrumu

Çizelge 4.38 (7) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ^{13}C -NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R^2 değeri
7	178.40	192.46	
16	169.46	178.04	
23	169.46	177.48	
18	148.58	157.96	
13	148.58	157.73	
11	140.62	148.02	
20	140.62	146.77	
19	129.05	138.44	
10	129.05	135.65	
17,12	129.05	135.03	
27	123.12	130.01	
29	123.12	129.69	
33	123.12	129.63	
31	123.12	127.90	
2	45.60	50.89	
1	45.60	49.60	

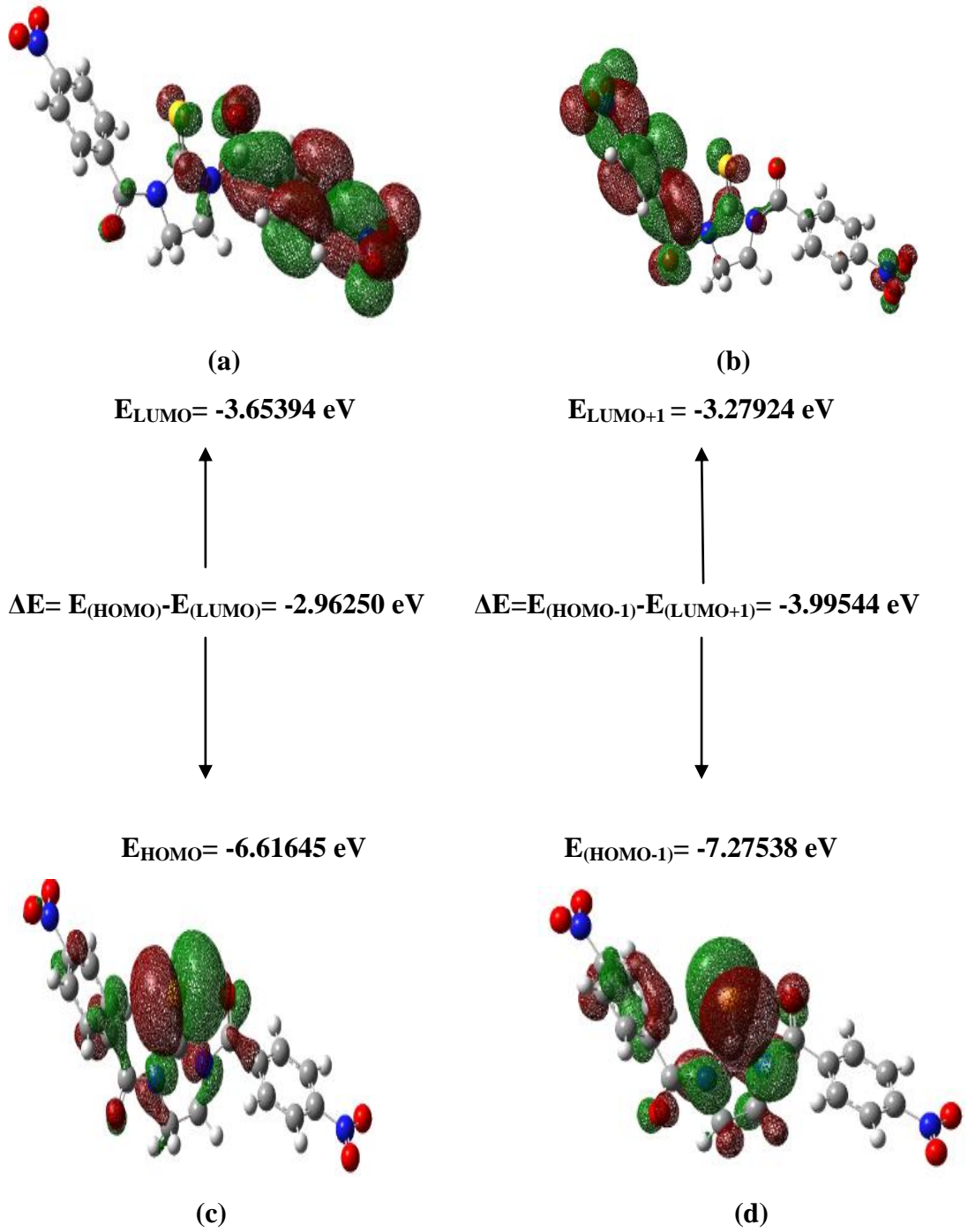


Çizelge 4.39 (7) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları

ATOM	Mulliken B3LYP/6-311+G(d,p)	NBO B3LYP/6-311+G(d,p)
1 C	-0.507399	-0.17019
2 C	-0.247732	-0.14584
3 H	0.190199	0.20776
4 H	0.196799	0.19860
5 H	0.201157	0.19711
6 H	0.188595	0.17120
7 C	0.181997	0.17022
8 N	0.280731	-0.54040
9 N	0.524511	-0.59625
10 C	-0.142907	-0.16503
11 C	1.614161	-0.11156
12 C	-0.458522	-0.14694
13 C	-0.216702	0.09151
14 H	0.153542	0.22616
15 H	0.168181	0.24246
16 C	-1.056757	0.72173
17 C	0.044443	-0.15063
18 C	0.185962	0.08936
19 C	-0.322865	-0.14912
20 C	1.120172	-0.10913
21 H	0.146446	0.17712
22 H	0.171113	0.24474
23 C	-0.899875	0.69127
24 O	-0.148565	-0.52639
25 O	-0.159630	-0.53784
26 S	-0.129623	0.16387
27 C	-0.316820	-0.16774
28 H	0.175837	0.24627
29 C	-0.227930	-0.16844
30 H	0.162053	0.24073
31 C	-0.406194	-0.17271
32 H	0.170539	0.24380
33 C	-0.302912	-0.17043
34 H	0.175188	0.24600
35 N	-0.300271	0.46742
36 O	0.027096	-0.36725
37 O	0.020278	-0.36973
38 N	-0.298160	0.46772
39 O	0.020310	-0.37177
40 O	0.023551	-0.36764

Çizelge 4.40 (7) No'lu bileşiğin NBO analizi

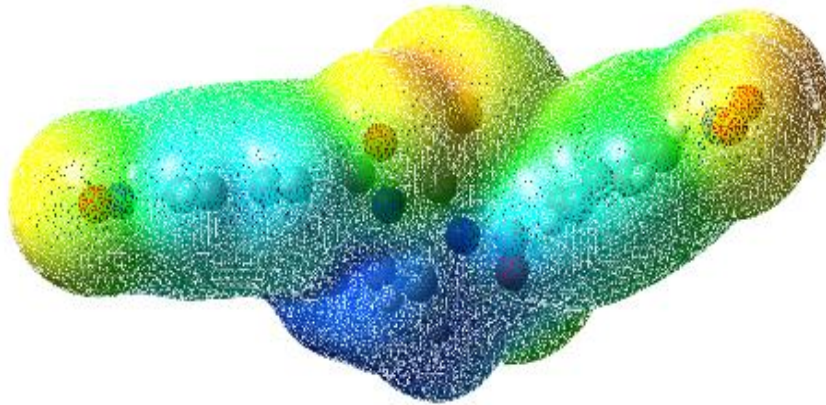
Donor NBO	Acceptor NBO	E (2) kcal/mol
BD (2) C ₁₀ - C ₃₁	BD*(2) C ₁₁ - C ₁₂	20.79
BD (2) C ₁₀ - C ₃₁	BD*(2) C ₁₃ - C ₃₃	20.36
BD (2) C ₁₁ - C ₁₂	BD*(2) C ₁₀ - C ₃	19.39
BD (2) C ₁₁ - C ₁₂	BD*(2) C ₁₃ - C ₃₃	21.58
BD (2) C ₁₃ - C ₃₃	BD*(2) C ₁₀ - C ₃₁	19.85
BD (2) C ₁₃ - C ₃₃	BD*(2) C ₁₁ - C ₁₂	18.26
BD (2) C ₁₃ - C ₃₃	BD*(2) N ₃₅ - O ₃₆	25.25
BD (2) C ₁₇ - C ₂₀	BD*(2) C ₁₈ - C ₂₉	21.62
BD (2) C ₁₈ - C ₂₉	BD*(2) C ₁₉ - C ₂₇	19.10
BD (2) C ₁₈ - C ₂₉	BD*(2) N ₃₈ - O ₄₀	27.98
LP (1) N ₈	BD*(2) C ₇ - S ₂₆	19.02
LP (1) N ₈	BD*(2) C ₂₃ - O ₂₅	22.13
LP (1) N ₉	BD*(2) C ₇ - S ₂₆	20.70
LP (2) O ₂₄	BD*(1) N ₉ - C ₁₆	25.03
LP (2) O ₂₅	BD*(1) N ₈ - C ₂₃	25.33
LP (2) S ₂₆	BD*(1) C ₇ - N ₈	22.35
LP (2) S ₂₆	BD*(1) C ₇ - N ₉	20.64
LP (3) O ₃₇	BD*(2) N ₃₅ - O ₃₆	160.36
LP (3) O ₃₉	BD*(2) N ₃₈ - O ₄₀	159.83
BD*(2) C ₁₃ - C ₃₃	BD*(2) C ₁₁ - C ₁₂	295.73
BD*(2) C ₁₆ - O ₂₄	BD*(2) C ₁₁ - C ₁₂	51.60
BD*(2) C ₁₈ - C ₂₉	BD*(2) C ₁₉ - C ₂₇	192.55
BD*(2) C ₂₃ - O ₂₅	BD*(2) C ₁₇ - C ₂₀	91.30
BD*(2) N ₃₅ - O ₃₆	BD*(2) C ₁₃ - C ₃₃	18.28



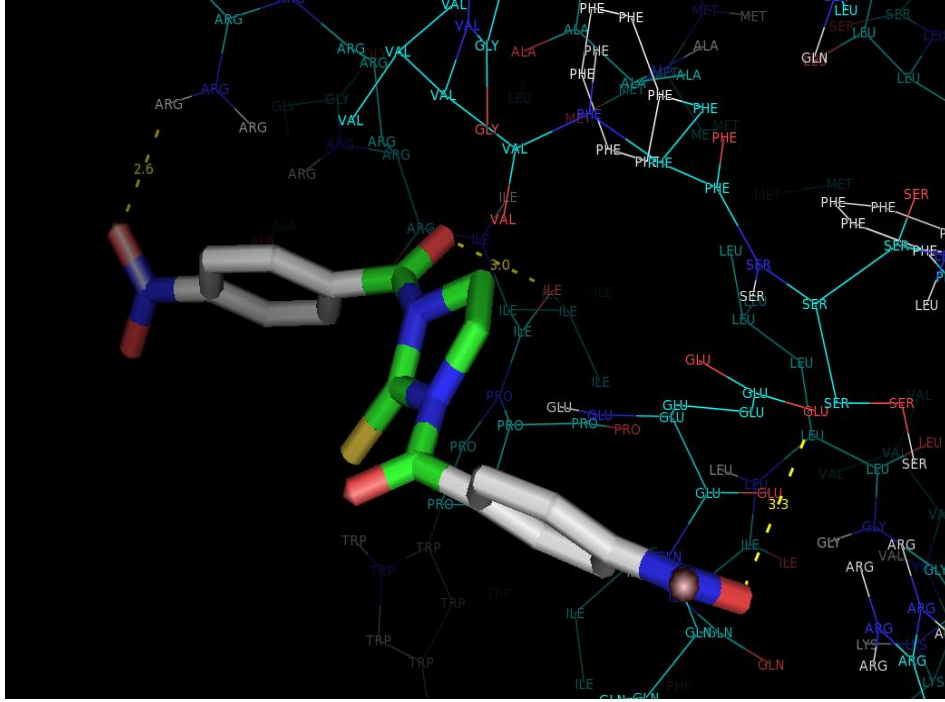
Şekil 4.101 (7) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı

Çizelge 4.41 (7) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri

HOMO	-0.23547
LUMO	-0.07159
HOMO-1	-0.25522
LUMO+1	-0,0049
$\Delta E_{(HOMO-LUMO)}$	-0.16388
$\Delta E_{(HOMO-1-LUMO+1)}$	-0.25032
Elektronegatiflik (χ)	0.15353
Kimyasal Sertlik	0.08194
Kimyasal Yumuşaklık	12.20405
Elektronik Kimyasal Potansiyel (Pi)	-0.15353
Global Elektrofillik (ω)	0.000966
Global Yumuşaklık (S)	0.04097
Elektronik Yük (ΔN_{max})	1.873688

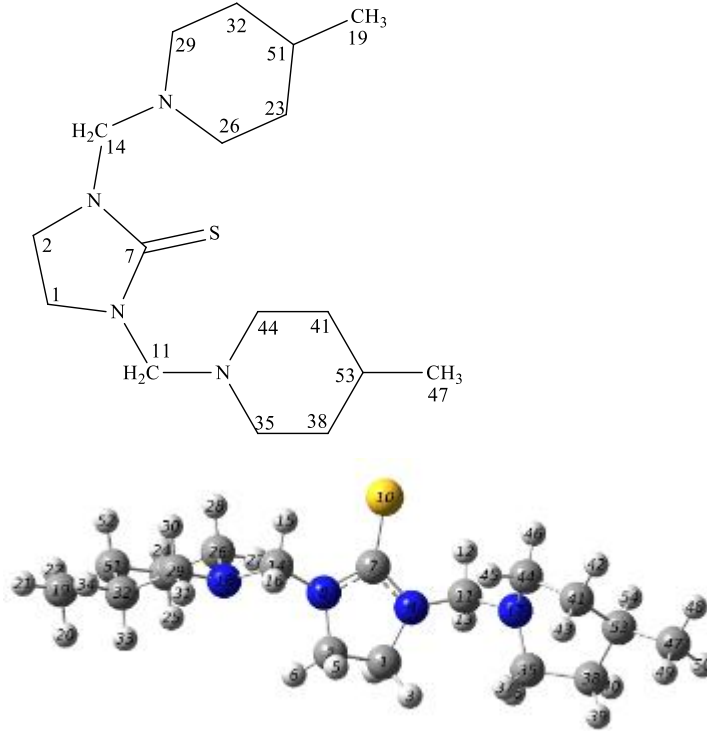


Şekil 4.102 (7) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu

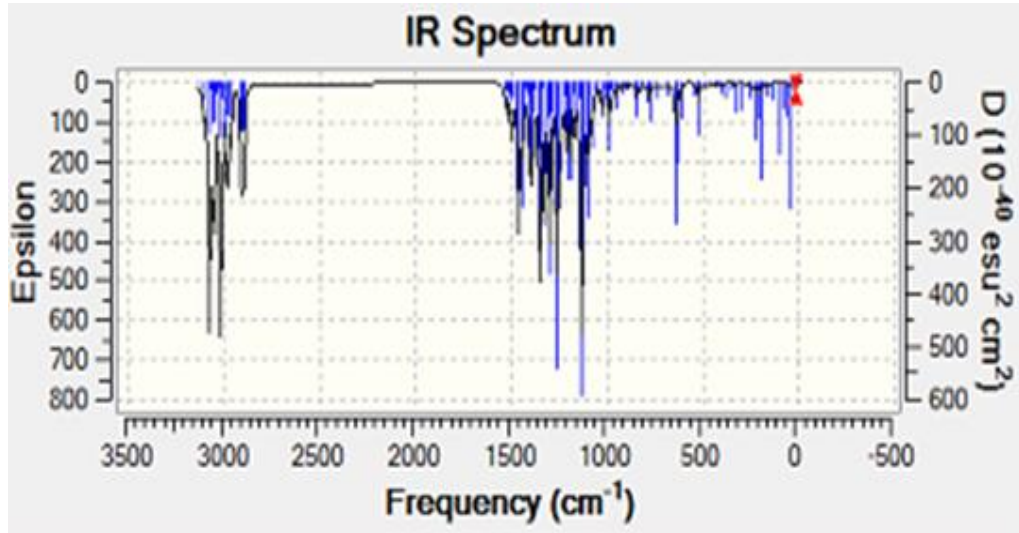


Şekil 4.103 (7) No'lu bileşiğin doking bağlanması

4.2.8. 1,3-Bis-(4-metilpiperidin-1-il-metil)-imidazolidin-2-tiyon (8) Analizi



Şekil 4.104 (8) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü



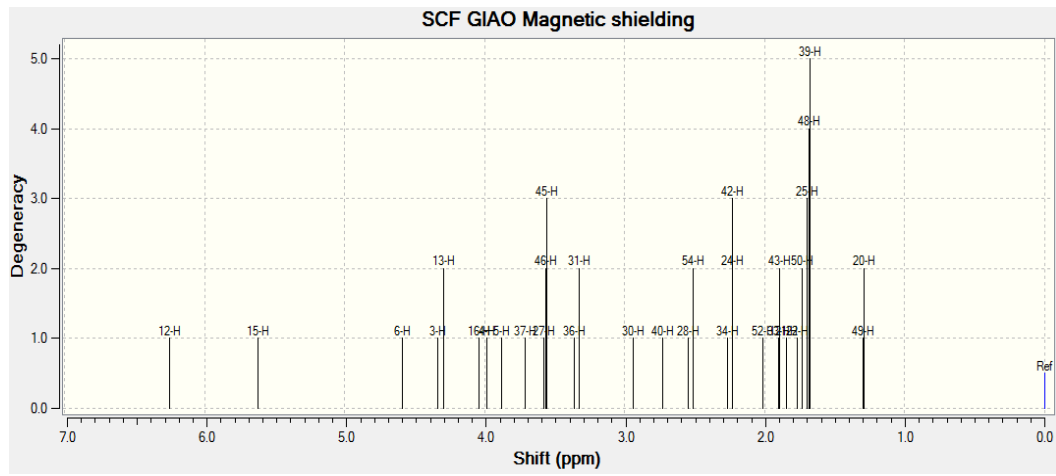
Şekil 4.105 (8) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu

Çizelge 4.42 (8) No'lu bileşiğin teorik IR analizi

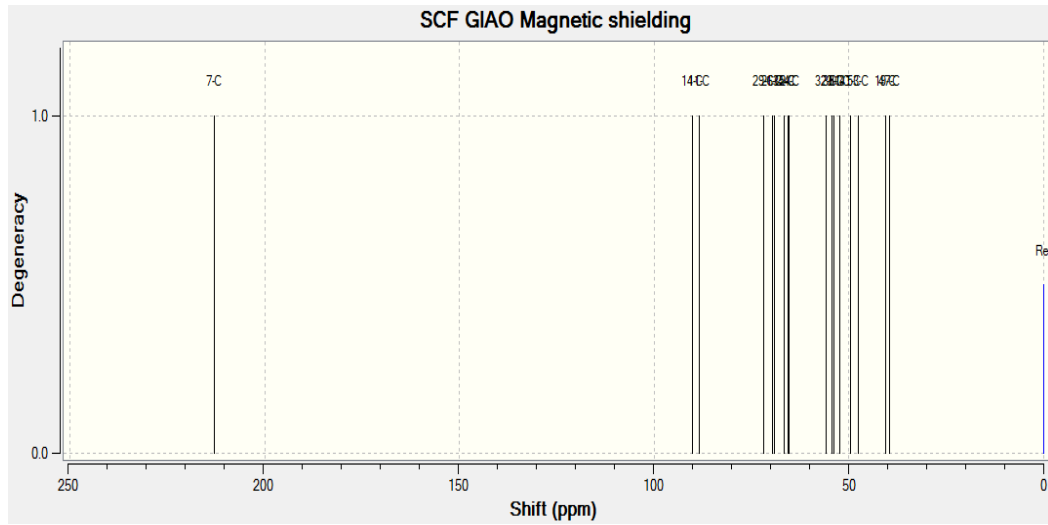
TED	B3LYP/6-311+ (d,p)
Titreşim Türü	
STRE NH	3107 (12) +3099 (84)
STRE CH	2984 (57)+2974(35)
STRE CH	2984 (35) +2974 (62)
STRE CH	3107 (84)+3099 (13)
STRE CH	3101 (88) +3019 (10)
STRE CH	3101 (11)+3019(87)
STRE CH	3026 (64)+ 2983(34)
STRE CH	3026 (35) +2983 (60)
STRE CH	3075 (54) +3017(18)+3010 (23)
STRE CH	3079 (41)+3075(27)+3017 (15)+3010 (14)
STRE CH	3079 (57) +3075(13) +3017 (15) +3010 (14)
STRE CH	3054 (36)+3050 (33)+3008 (14)
STRE CH	3054 (16)+3050 (11)+3017(16)+3010(14)+3008(38)
STRE CH	3079 (82)+3079 (15)
STRE CH	3047 (92)
STRE CH	3054 (25) +3050(34) +3010(10)+3008(14)
STRE CH	3063 (11)+3060 (19)+3046 (64)
STRE CH	3063(13)+3060(32)+3046(17)+3021(13)+3013(11)
STRE CH	3063 (34)+3060(26)+3040(23)
STRE CH	3063(11) +3040(73)
STRE CH	3079 (10) +3079(57)+3010 (18)
STRE CH	3073 (34) +3063 (11) +3010 (37)
STRE CH	3079 (15)+3073(46)+3010 (22)
STRE CH	3021 (39)+3013 (14)+ 3005(31)
STRE CH	2910 (95)
STRE CH	3054(15)+3050 (19)+3017 (15)+3010(16)+3008(32)
STRE CH	3046 (12)+3013(56)+3010 (13)
STRE CH	3021(23) +3005 (57)
STRE CH	2890 (95)
STRE CH	2900 (98)
STRE CH	2961 (95)
STRE CH	2979 (93)
STRE NC	1461(22)
STRE NC	1446 (11)
STRE NC	1212 (10)+1135(13)
STRE NC	1295 (11)
STRE NC	1029 (13)
STRE NC	920(11)+773 (20)
STRE NC	1178 (10)+1142 (16)
STRE NC	1029 (10) +952(16)
STRE NC	1140 (11)+779 (11)
STRE NC	773 (28)
STRE NC	816 (13)+779 (22)
STRE CC	1029 (19) +1022 (12) +904 (12)
STRE CC	1091 (32)
STRE CC	1022(11) + 904 (16)
STRE CC	1104(37)
STRE CC	1140 (13) +904 (13)+816 (11)+779 (10)
STRE CC	1184 (11) +1135 (10)+894 (11) +856 (11)
STRE CC	1024(12)+894 (13)
STRE CC	1053 (10) +1024 (10)+1022 (13)+894(12)

STRE SC	1072(10) +524 (47)
BEND CNC	1012 (12)+633 (11)
BEND CCC	490(20)
BEND HCH	1534(34) +1524 (34)+1522 (14)
BEND HCC	1295 (13) +1235 (25) +1121 (10)
BEND HCN	1295(10)+1206 (21)+1205 (10)+1128 (11)
BEND HCH	1534 (50)+1524 (28)
BEND HCN	1473 (14)+1425 (13)+1400 (24)
BEND HCH	1473 (47) +1446 (26)
BEND HCN	1327 (21)
BEND HCH	1514 (17)+1502 (26)+ 1494 (25)
BEND HCH	1500 (29)+1498(16) +1412 (26)
BEND HCH	1502 (10)+1500 (36)+ 1412 (26)
BEND HCH	1498 (49) +1412(26)
BEND HCC	1299 (10) +1176 (10)
BEND HCH	1487 (33)+1475(48)
BEND HCN	1353 (10) +1347(10)
BEND HCH	1514 (31)+1494 (44)
BEND HCH	1487 (43) +1475 (37)
BEND HCC	1343 (15)
BEND HCH	1488 (75)
BEND HCC	1266 (18)
BEND HCH	1522 (24) +1508 (46)
BEND HCH	1501 (11)+1499 (38)+1413(27)
BEND HCH	1501 (41)+1495 (11) +1413 (26)
BEND HCH	1499 (33)+1413 (27)
BEND HCC	1393 (15) +1332 (41)
BEND HCH	1514 (27) +1502 (34)+1494 (12)
BEND HCC	1376 (15) +1287 (22)
BEND HCC	1271 (21)
BEND HCH	1522 (15) + 1501 (11) +1495(50)
BEND HCC	1353 (15)+1347 (11)
BEND HCH	1522 (22) +1508 (33)
BEND HCN	1343 (19)+1266 (30)+1184 (15)
BEND HCC	1381(18) +1376 (17) +1338 (15)
BEND NCN	1029 (10) +524 (13)
BEND NCN	732 (22)
BEND CNC	355 (12) +38 (12)
BEND CNC	327 (15)
BEND CNC	1012 (11)+633 (11)
BEND CNC	490(10)+377(17) + 258 (15)
BEND CNC	614 (12)
BEND CNC	199 (24)
BEND CCC	1091 (11)+826 (11)
BEND CCC	327 (10) +297 (27)
BEND CCN	490 (14)
BEND CCC	307 (45)
BEND CCN	920 (13)+ 516 (19)
BEND CCN	920 (13)+894 (10)+516 (19)
BEND SCN	539 (10) +398 (16) +204 (27)
TORS HCNC	841(12)
TORS HCNC	1121 (15)
TORS HCNC	1461 (11)
TORS HCNC	1461 (13)+841 (17)
TORS HCNC	1425 (12) +1391 (12)

TORS HCNC	1473 (11)+1391(12)+1355(18)
TORS HCNC	1434 (18) +1406 (16)
TORS HCNC	1461 (10) +1434 (11)
TORS HCCC	1500 (11)+229 (25)
TORS HCCC	1498 (10)+224 (12)
TORS HCCC	1498 (10)+1178 (12)+229 (17)
TORS HCCC	1287 (10)+816 (15)
TORS HCCC	1397 (13)
TORS HCNC	1406 (11)
TORS HCNC	1434 (11)+1381 (11)
TORS HCCC	1332 (23)
TORS HCCC	417 (11)
TORS HCNC	1425 (13)+1266 (10)
TORS HCCC	249 (28)
TORS HCCC	249 (31)
TORS HCCC	1499 (12) +249 (27)
TORS HCCH	1393 (17)+1371 (31)+1343 (15)
TORS HCNC	1406 (20)+ 1376 (11)
TORS HCCC	1397 (11)+1338 (16)
TORS HCCC	789 (24)
TORS HCCC	1393 (17) +1310 (19)
TORS HCNC	985 (12)
TORS HCNC	1400 (15) + 1391 (11) + 1355 (10)
TORS HCNC	1425 (20)+978 (12)
TORS HCCC	1397(14) +1381 (11) +1347 (11) +1312 (15)
TORS NCNC	46(15)+41(16) +16 (32)
TORS CNCN	167 (16) + 138 (10)
TORS NCNC	41(10) +16 (26)+11(24)
TORS CNCN	1121 (11)
TORS CNCN	57 (30) + 41(11) + 38 (13)
TORS CNCN	46 (29)+38 (34)
TORS CCNC	103 (16)
TORS CCNC	355 (11) +263 (13) +103 (11)
TORS CCCN	258 (10)
TORS CCCN	184 (29) + 76 (14) +41(10)
TORS CCNC	167 (13)+138 (11)
TORS CCNC	184 (14) +76 (18) + 41 (16)
OUT SNNC	644 (56)+633 (10)
OUT CCCC	417 (29) + 184 (10)
OUT CCCC	454 (13) + 442 (21) + 377 (19)
OUT CCCN	252 (16)+16 (11)
OUT CCCN	826 (10) +377 (14)
OUT CCCN	11 (34)

Şekil 4.106 (8) No'lu bileşiğin teorik ¹H-NMR spektrumuÇizelge 4.43 (8) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹H-NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R ² değeri
12	4.32	5.53	
15	4.32	4.90	
6	3.63	3.86	
13	4.32	3.59	
3	3.63	3.59	
16	4.32	3.32	
4	3.63	3.26	
5	3.63	3.16	
37	2.85	2.99	
27,46,45	2.85	2.84	
36,31	2.85	2.62	
30	2.85	2.22	
40	2.19	2.01	
28,54	2.19	1.81	
34,24,42	2.19	1.52	
52	2.19	1.29	
33,43	2.19	1.18	
21	2.19	1.12	
22,50,25,48,39	0.99	0.99	
49,20	0.91	0.57	

Şekil 4.107 (8) No'lu bileşiğin teorik ^{13}C -NMR spektrumuÇizelge 4.44 (8) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ^{13}C -NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R^2 değeri
7	183.18	195.35	
14	69.61	72.76	
11	69.61	70.88	
29	51.06	54.33	
26	51.06	52.06	
1	45.73	51.66	
35	51.06	49.12	
2	45.73	48.02	
44	51.06	47.74	
32	34.16	38.23	
23	34.16	36.87	
38	34.16	36.46	
51	29.50	34.95	
41	34.16	32.12	
53	29.50	30.14	
19	21.54	22.96	
47	21.54	22.09	

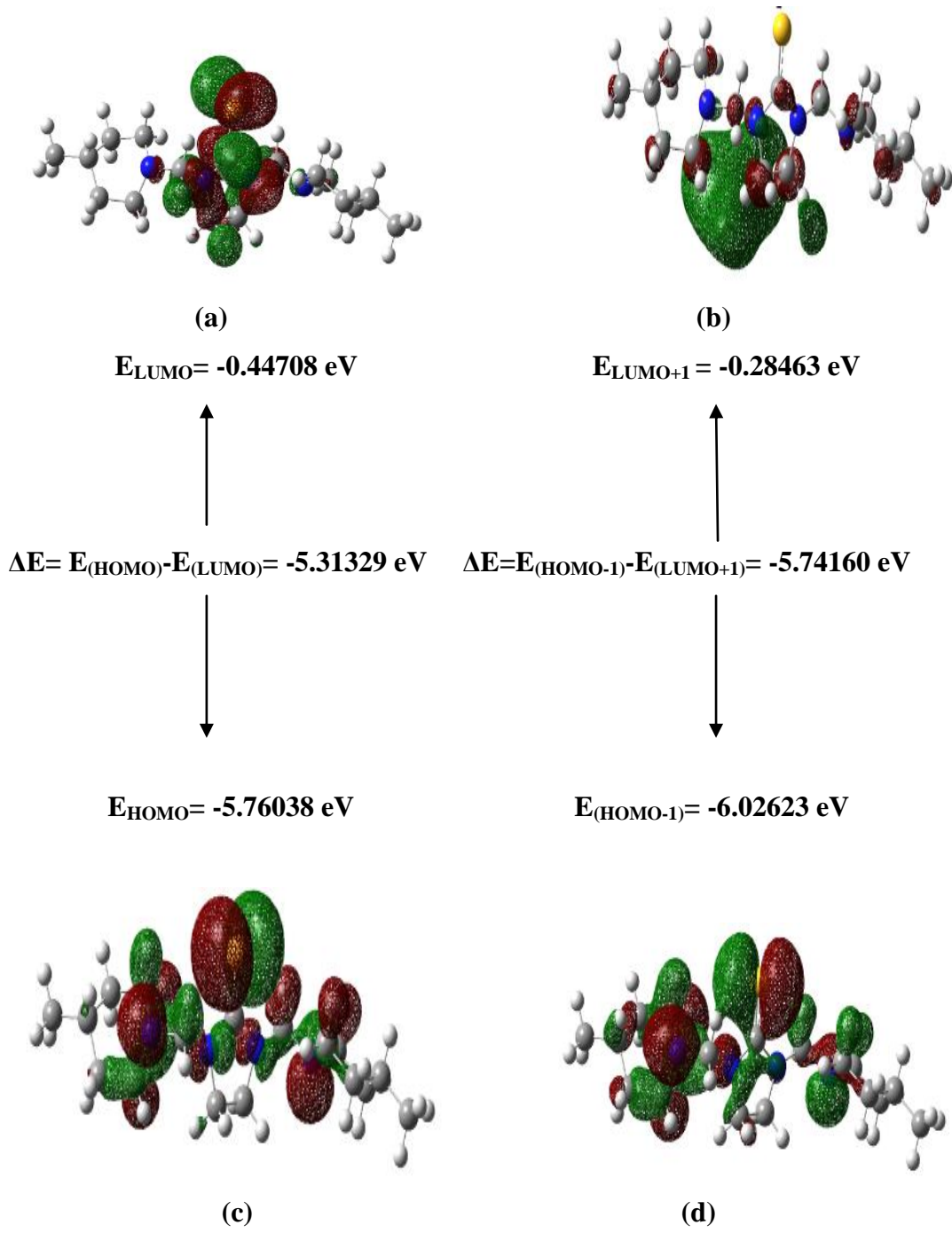
Çizelge 4.45 (8) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları

ATOM	Mulliken B3LYP/6-311+G(d,p)	NBO B3LYP/6-311+G(d,p)
1 C	-0.250768	-0.16275
2 C	-0.118154	-0.16353
3 H	0.163387	0.20502
4 H	0.172697	0.18288
5 H	0.160299	0.18542
6 H	0.177740	0.20375
7 C	-0.328546	0.28648
8 N	0.218131	-0.52640
9 N	0.137837	-0.52301
10 S	-0.572090	-0.17082
11 C	-0.344330	0.06349
12 H	0.192449	0.18381
13 H	0.137009	0.16596
14 C	-0.263246	0.05254
15 H	0.153837	0.21678
16 H	0.192481	0.18571
17 N	0.164142	-0.54130
18 N	0.060176	-0.55993
19 C	-0.569385	-0.53974
20 H	0.126949	0.18251
21 H	0.125165	0.18304
22 H	0.123733	0.19368
23 C	-1.097727	-0.39048
24 H	0.140819	0.18694
25 H	0.093996	0.16389
26 C	-0.195889	-0.09875
27 H	0.066570	0.17401
28 H	0.205800	0.19938
29 C	0.147612	-0.15982
30 H	0.121470	0.16783
31 H	0.164377	0.17346
32 C	-0.829927	-0.37858
33 H	0.080904	0.15258
34 H	0.111920	0.15985
35 C	0.281270	-0.19416
36 H	0.146667	0.17308
37 H	0.077894	0.20865
38 C	-1.557166	-0.37000
39 H	0.115061	0.14590
40 H	0.149504	0.17548
41 C	-0.850158	-0.39682
42 H	0.159847	0.16961
43 H	0.084113	0.14434
44 C	0.028849	-0.15646
45 H	0.152722	0.19087
46 H	0.116264	0.16333
47 C	-0.519024	-0.55750

48 H	0.121977	0.19632
49 H	0.155174	0.19916
50 H	0.141425	0.20187
51 C	1.140068	-0.35467
52 H	-0.035396	0.33639
53 C	1.051781	-0.28570
54 H	0.169690	0.35638

Çizelge 4.46 (8) No'lu bileşiğin NBO analizi

Donor NBO	Acceptor NBO	E (2) kcal/mol
BD (1) C ₃₈ - C ₅₃	BD*(1) C ₅₃ - H ₅₄	14.17
BD (1) C ₄₁ - C ₅₃	BD*(1) C ₅₃ - H ₅₄	28.50
BD (1) C ₅₃ - H ₅₄	BD*(1) C ₃₈ - H ₃₉	19.21
BD (1) C ₅₃ - H ₅₄	BD*(1) C ₄₁ - H ₄₃	32.99
BD (1) C ₅₃ - H ₅₄	BD*(1) C ₄₁ - C ₅₃	14.16
LP (1) N ₈	BD*(1) C ₇ - S ₁₀	58.46
LP (1) N ₉	BD*(1) C ₇ - S ₁₀	57.60
LP (2) S ₁₀	BD*(1) C ₇ - N ₈	14.19
LP (2) S ₁₀	BD*(1) C ₇ - N ₉	14.92
LP (1) N ₁₇	BD*(1) C ₃₅ - H ₃₇	11.91
LP (1) N ₁₈	BD*(1) C ₂₆ - H ₂₇	10.29
LP (1) C ₅₁	BD*(1) C ₂₃ - H ₂₄	13.68
LP (1) C ₅₁	BD*(1) C ₂₃ - H ₂₅	13.79
LP (1) C ₅₁	BD*(1) C ₃₂ - H ₃₃	10.75
LP (1) C ₅₁	BD*(1) C ₃₂ - H ₃₄	11.36
BD*(1) C ₂₃ - H ₂₅	RY*(1) H ₂₅	23.06
BD*(1) C ₂₃ - H ₂₅	BD*(1) C ₂₆ - H ₂₇	19.80



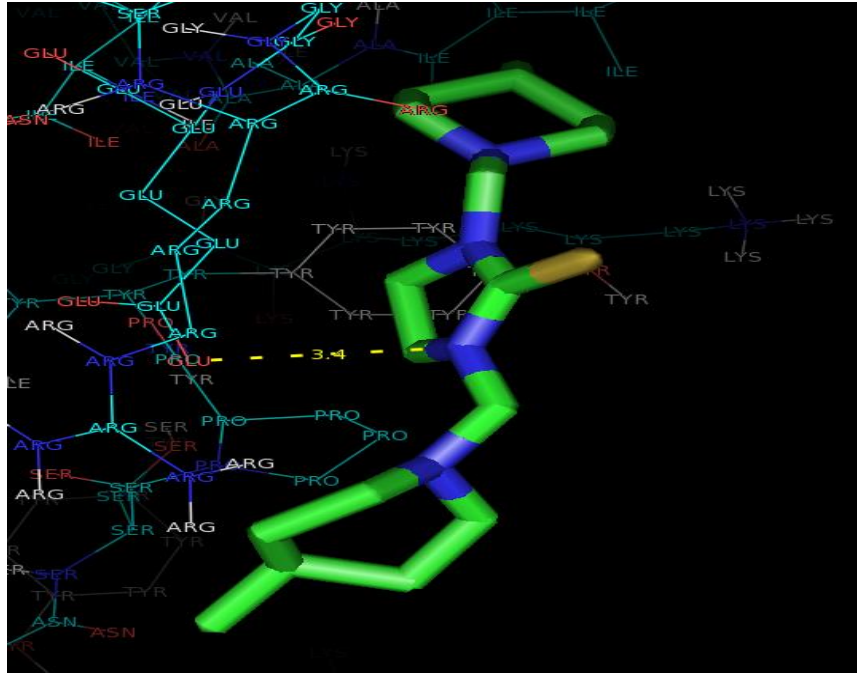
Şekil 4.108 (8) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı

Çizelge 4.47 (8) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri

HOMO	-0.24583
LUMO	-0.06783
HOMO-1	-0.26146
LUMO+1	-0.06518
$\Delta E_{(HOMO-LUMO)}$	-0.178
$\Delta E_{(HOMO-1-LUMO+1)}$	-0.19628
Elektronegatiflik (χ)	0.15683
Kimyasal Sertlik	0.089
Kimyasal Yumuşaklık	11.23596
Elektronik Kimyasal Potansiyel (Pi)	-0.15683
Global Elektrofillik (ω)	0.001095
Global Yumuşaklık (S)	0.0445
Elektronik Yük (ΔN_{max})	1.762135

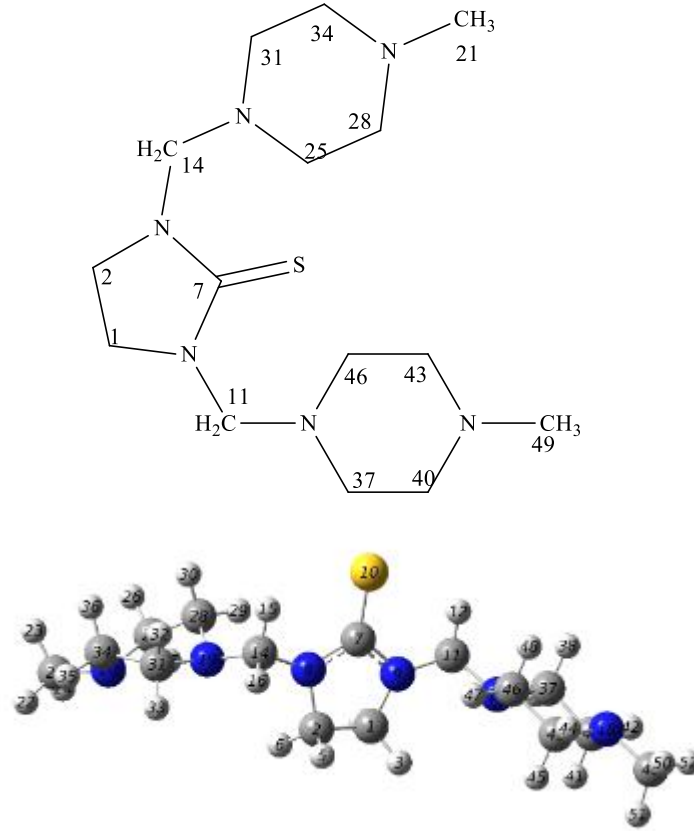


Şekil 4.109 (8) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu

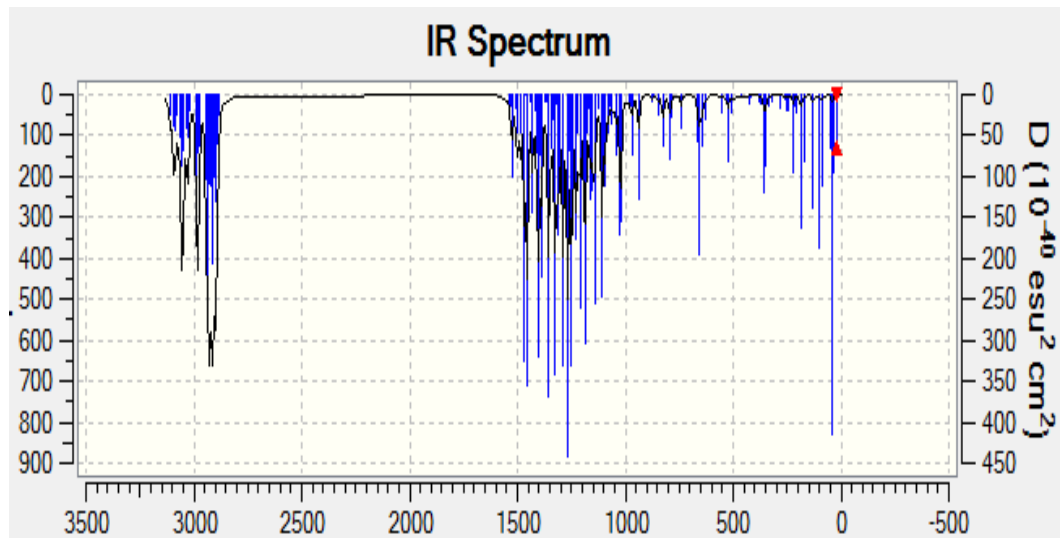


Şekil 4.110 (8) No'lu bileşiğin doking bağlanması

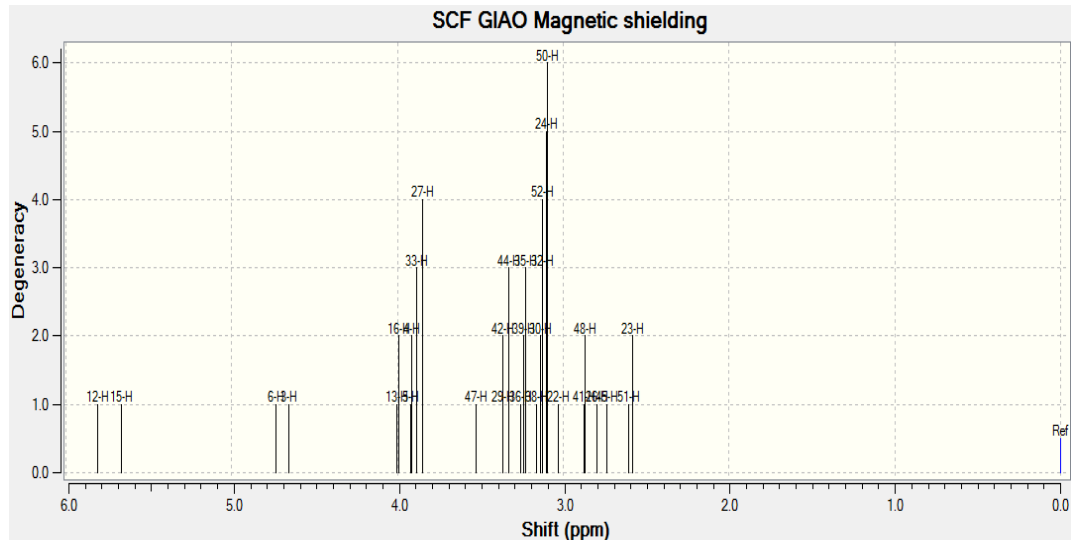
4.2.9. 1,3-Bis-(4-metilpiperazin-1-il-metil)imidazolidin-2-tiyon (9) Analizi



Şekil 4.111 (9) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü

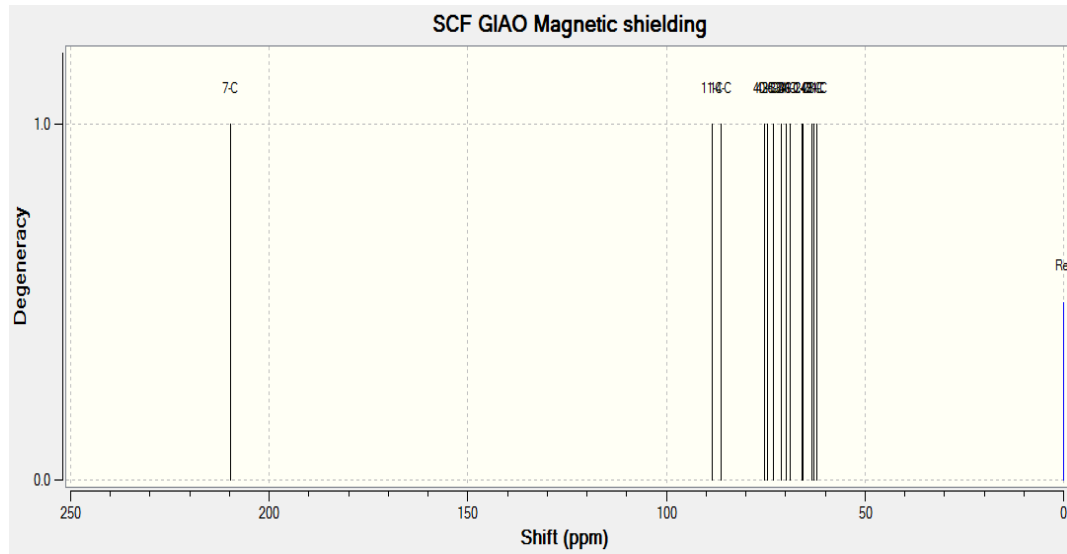


Şekil 4.112 (9) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu

Şekil 4.113 (9) No'lu bileşiğin teorik ¹H-NMR spektrumu

Çizelge 4.48 (9) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹H-NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R ² değeri
12	5.08	5.09	
15	5.08	4.95	
6	3.65	4.02	
3	3.65	3.94	
13,16	4.58	3.28	
5,4	3.65	3.17	
33,27	2.63	3.17	
47	2.63	2.81	
29,42,44	2.63	2.63	
36,39,35	2.63	2.52	
38,30,32, 52,24,50	2.42	2.40	
22	2.28	2.31	
41,48	2.28	2.15	
26	2.28	2.08	
45	2.28	2.02	
51,23	2.28	1.87	

Şekil 4.114 (9) No'lu bileşiğin teorik ^{13}C -NMR spektrumu

Çizelge 4.49 (9) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ^{13}C -NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R^2 değeri
7	183.18	192.28	
11	69.24	71.00	
14	69.24	68.63	
40	54.67	57.71	
43	54.67	56.90	
25	54.67	55.57	
37	54.67	53.52	
34	50.38	52.32	
46	50.38	51.41	
31	50.38	51.29	
1	46.47	48.27	
2	46.47	48.16	
49	46.03	45.88	
28	46.03	45.31	
21	46.03	44.62	

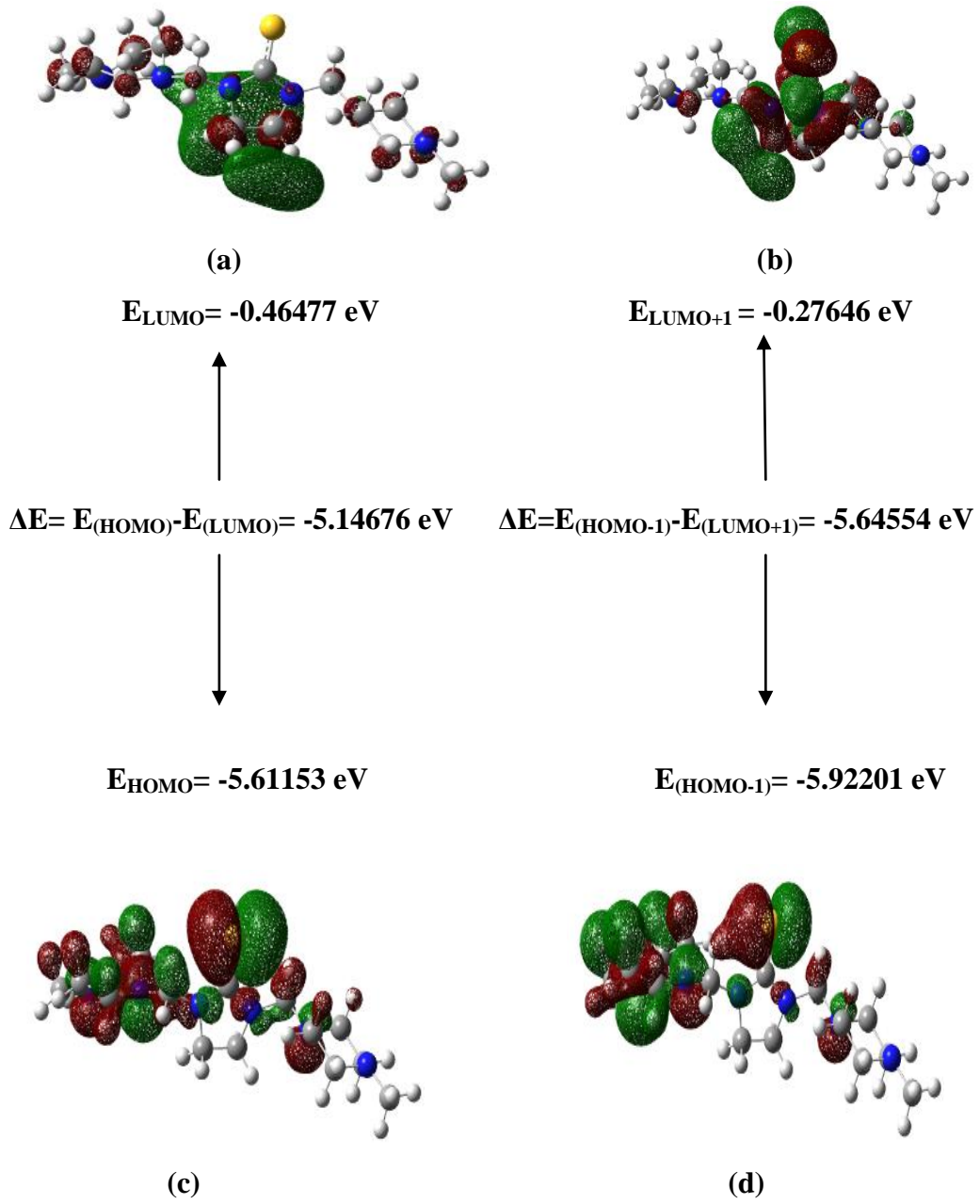
Çizelge 4.50 (9) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları

ATOM	Mulliken B3LYP/6-311+G(d,p)	NBO B3LYP/6-311+G(d,p)
1 C	-0.243859	-0.16247
2 C	-0.132071	-0.16426
3 H	0.166111	0.20307
4 H	0.162529	0.18248
5 H	0.154099	0.18213
6 H	0.173383	0.20822
7 C	-0.241798	0.28829
8 N	0.205498	-0.52214
9 N	0.119871	-0.52092
10 S	-0.596588	-0.18089
11 C	-0.431232	0.06280
12 H	0.190700	0.18228
13 H	0.143695	0.16532
14 C	-0.406362	0.05042
15 H	0.144703	0.21429
16 H	0.181578	0.17942
17 N	0.091170	-0.53115
18 N	-0.125396	-0.53469
19 N	-0.035112	-0.54488
20 N	-0.122059	-0.53447
21 C	-0.284494	-0.33392
22 H	0.140854	0.17369
23 H	0.139381	0.17626
24 H	0.127087	0.19394
25 C	-0.523064	-0.15380
26 H	0.147874	0.16985
27 H	0.150395	0.15536
28 C	0.025297	-0.16646
29 H	0.042130	0.15446
30 H	0.166964	0.18017
31 C	-0.010486	-0.15927
32 H	0.103143	0.16333
33 H	0.141217	0.16662
34 C	-0.317681	-0.15994
35 H	0.121696	0.16045
36 H	0.141813	0.16604
37 C	0.185771	-0.18833
38 H	0.133726	0.17061
39 H	0.071176	0.19255
40 C	-0.649299	-0.15414
41 H	0.156922	0.15369
42 H	0.138982	0.16984
43 C	-0.246167	-0.15718
44 H	0.127854	0.16566
45 H	0.140051	0.15924
46 C	-0.102728	-0.16036
47 H	0.120044	0.17203

48 H	0.100515	0.15970
49 C	-0.292009	0.33476
50 H	0.127151	0.17981
51 H	0.149585	0.17102
52 H	0.127444	0.19103

Çizelge 4.51 (9) No'lu bileşiğin NBO analizi

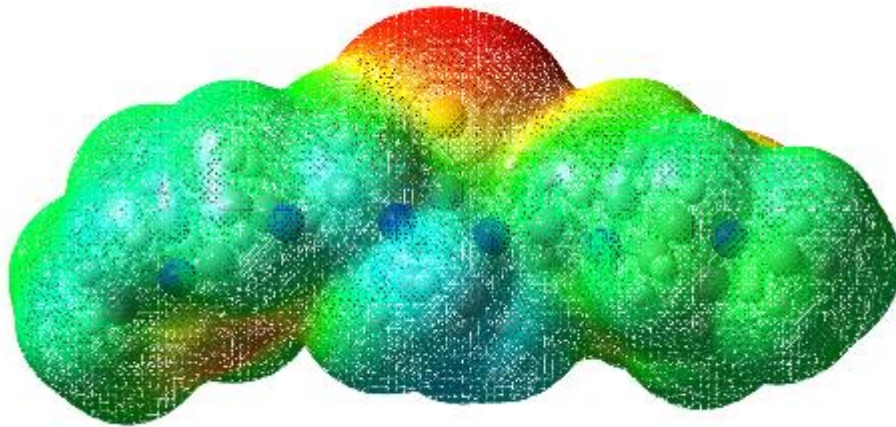
Donor NBO	Acceptor NBO	E (2) kcal/mol
LP (1) N ₈	BD*(1) C ₇ - S ₁₀	60.24
LP (1) N ₉	BD*(1) C ₇ - S ₁₀	57.68
LP (2) S ₁₀	BD*(1) C ₇ - N ₈	14.13
LP (2) S ₁₀	BD*(1) C ₇ - N ₉	14.89
LP (1) N ₁₇	BD*(1) C ₁₁ - H ₁₃	7.52
LP (1) N ₁₇	BD*(1) C ₃₇ - H ₃₉	12.10
LP (1) N ₁₇	BD*(1) C ₄₆ - H ₄₇	9.82
LP (1) N ₁₈	BD*(1) C ₄₀ - H ₄₂	8.53
LP (1) N ₁₈	BD*(1) C ₄₃ - H ₄₄	7.67
LP (1) N ₁₈	BD*(1) C ₄₃ - H ₄₅	7.65
LP (1) N ₁₈	BD*(1) C ₄₉ - H ₅₁	7.44
LP (1) N ₁₉	BD*(1) C ₂₈ - H ₂₉	10.02
LP (1) N ₁₉	BD*(1) C ₃₁ - H ₃₃	8.02
LP (1) N ₂₀	BD*(1) C ₂₅ - H ₂₆	7.68
LP (1) N ₂₀	BD*(1) C ₂₅ - H ₂₇	7.67
LP (1) N ₂₀	BD*(1) C ₃₄ - H ₃₅	7.52
LP (1) N ₂₀	BD*(1) C ₃₄ - H ₃₆	7.63



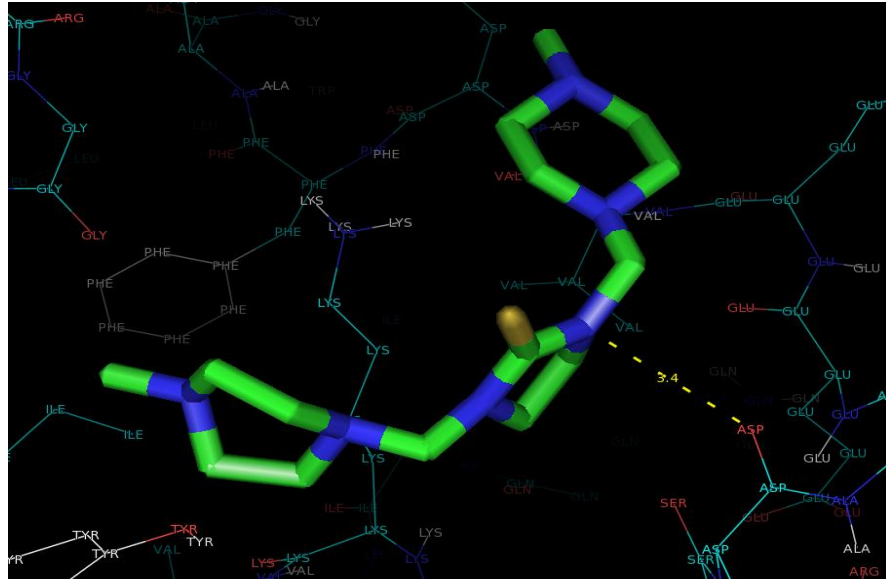
Şekil 4.115 (9) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı

Çizelge 4.52 (9) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri

HOMO	-0.23902
LUMO	-0.12704
HOMO-1	-0.25456
LUMO+1	-0.12344
$\Delta E_{(HOMO-LUMO)}$	-0.11198
$\Delta E_{(HOMO-1-LUMO+1)}$	-0.13112
Elektronegatiflik (χ)	0.18303
Kimyasal Sertlik	0.05599
Kimyasal Yumuşaklık	17.86033
Elektronik Kimyasal Potansiyel (Pi)	-0.18303
Global Elektrofillik (ω)	0.000938
Global Yumuşaklık (S)	0.027995
Elektronik Yük (ΔN_{max})	3.268977

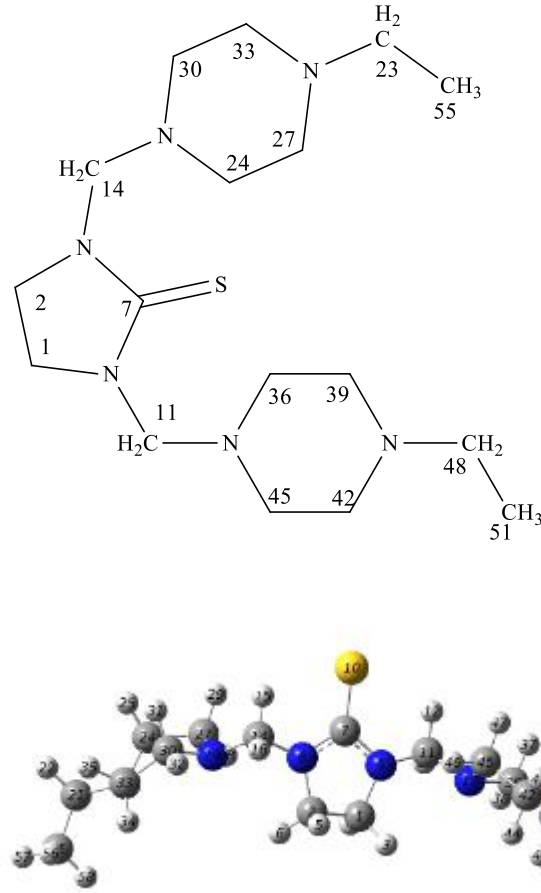


Şekil 4.116 (9) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu

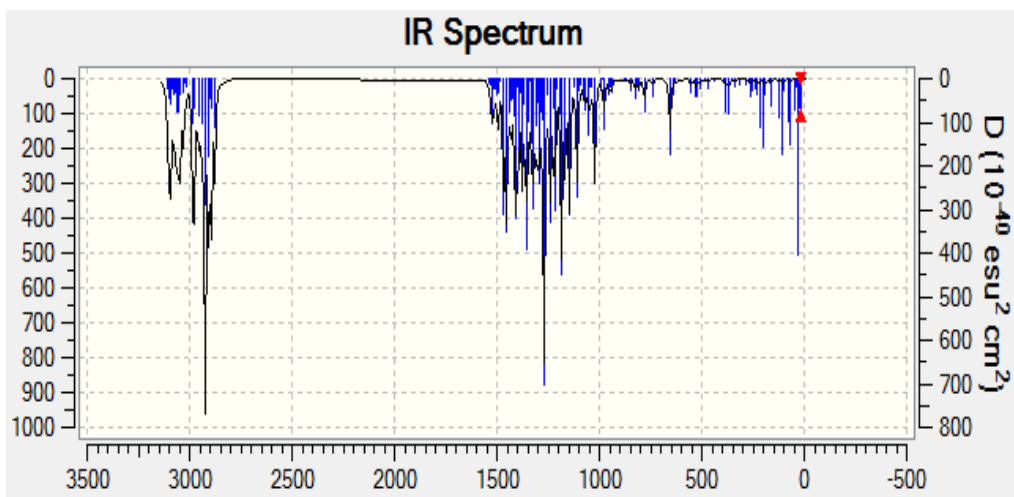


Şekil 4.117 (9) No'lu bileşiğin doking bağlanması

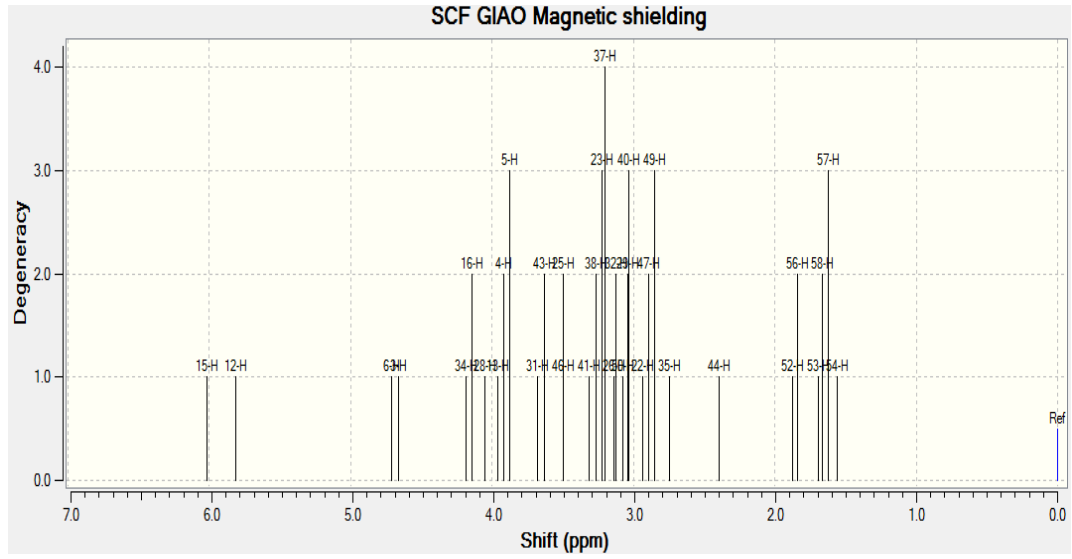
4.2.10. 1,3-Bis-(4-etilpiperazin-1-il-metil)imidazolidin-2-tiyon (10) Analizi



Şekil 4.118 (10) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü

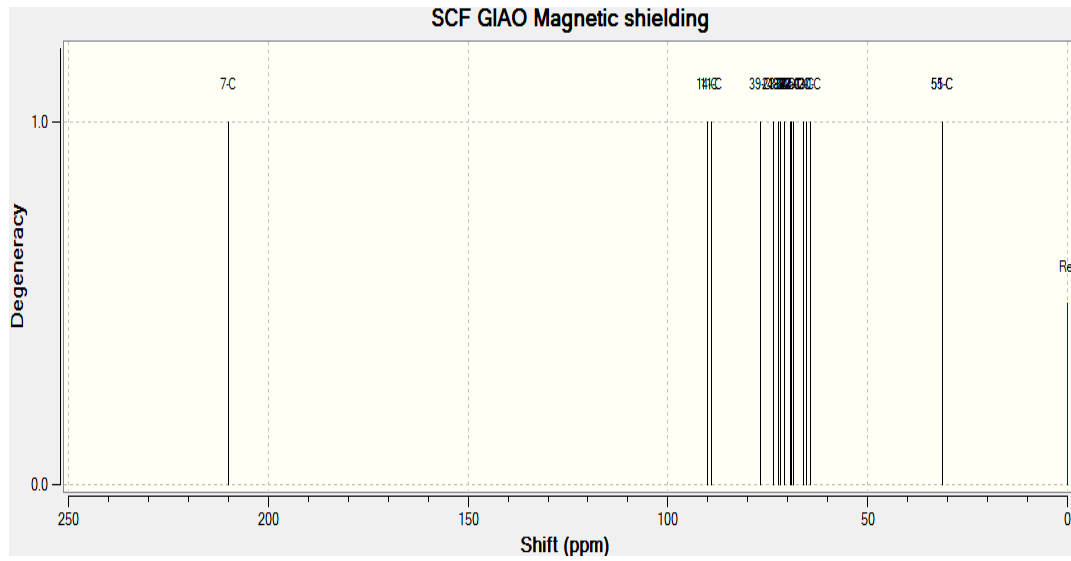


Şekil 4.119 (10) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu

Şekil 4.120 (10) No'lu bileşiğin teorik ^1H -NMR spektrumu

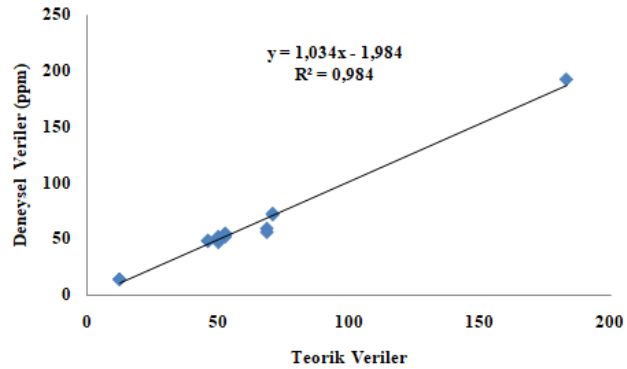
Çizelge 4.53 (10) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ^1H -NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R^2 değeri
15	5.07	5.29	
12	5.07	5.10	
6	3.65	3.99	
3	3.65	3.94	
34	2.66	3.44	
16	4.39	3.44	
13	4.39	3.20	
28	2.66	3.33	
4,5	3.65	3.20	
31,43	2.66	2.93	
46,25	2.66	2.78	
41,38,23,37	2.42	2.53	
26,32	2.42	2.41	
50,29,40	2.42	2.33	
22,47,49	2.42	2.17	
35	2.42	2.03	
44	2.42	1.67	
52,56	1.08	1.14	
53,58,57	1.08	0.94	
54	1.08	0.84	

Şekil 4.121 (10) No'lu bileşiğin teorik ^{13}C -NMR spektrumu

Çizelge 4.54 (10) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ^{13}C -NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R^2 değeri
7	183.18	192.37	
14	70.89	72.56	
11	70.89	71.59	
39	68.64	59.23	
21	68.64	55.93	
48	52.71	54.72	
33	52.71	54.31	
36	52.71	53.18	
42	52.71	51.89	
27	50.08	51.75	
24	50.08	51.51	
45	50.08	51.05	
1	46.10	48.57	
2	46.10	47.89	
30	50.08	46.86	
55	12.30	13.87	
51	12.30	13.72	



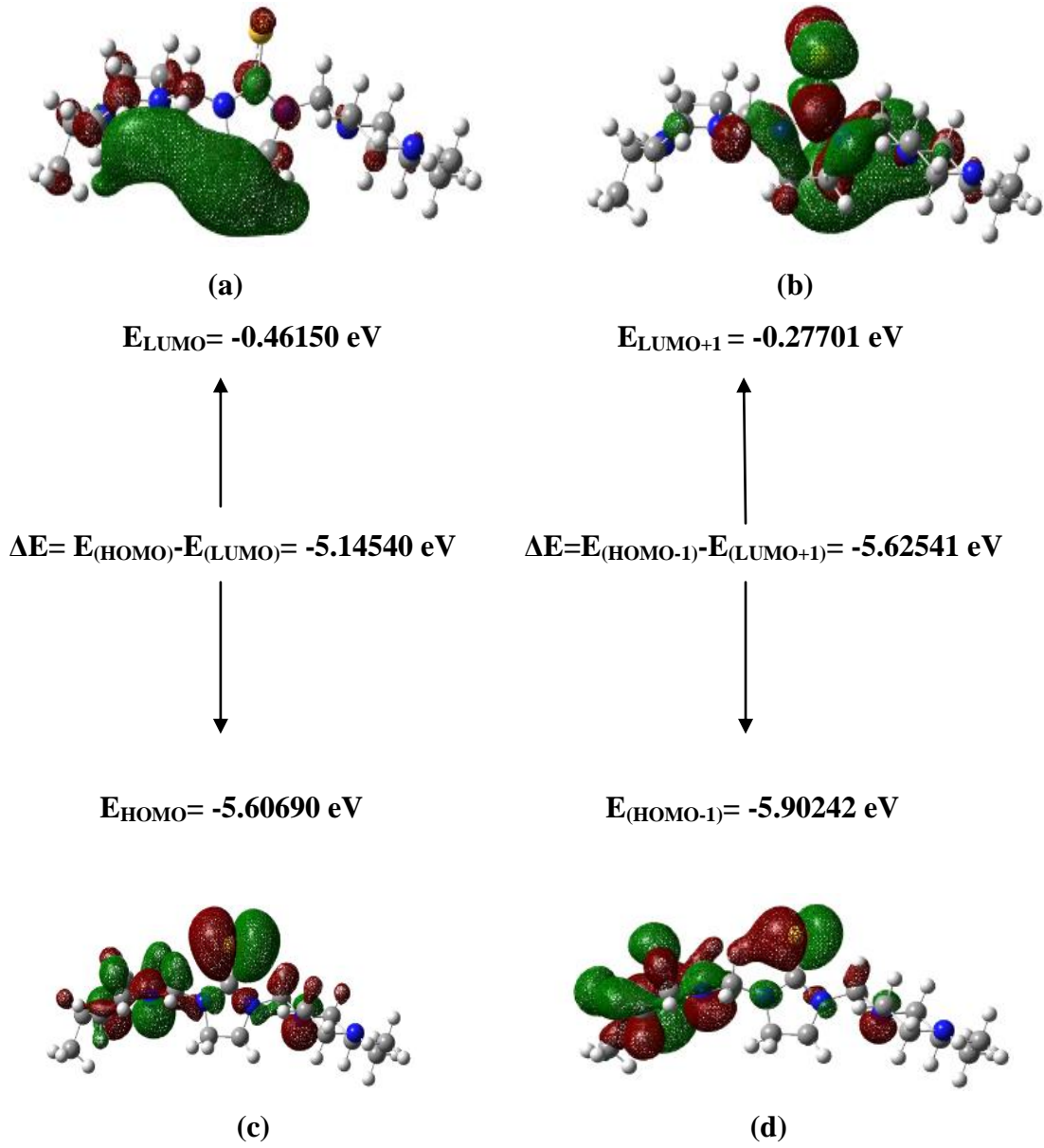
Çizelge 4.55 (10) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları

ATOM	Mulliken B3LYP/6-311+G(d,p)	NBO B3LYP/6-311+G(d,p)
1 C	-0.243859	-0.16247
2 C	-0.132071	-0.16426
3 H	0.166111	0.20307
4 H	0.162529	0.18248
5 H	0.154099	0.18213
6 H	0.173383	0.20822
7 C	-0.241798	0.28829
8 N	0.205498	-0.52214
9 N	0.119871	-0.52092
10 S	-0.596588	-0.18089
11 C	-0.431232	0.06280
12 H	0.190700	0.18228
13 H	0.143695	0.16532
14 C	-0.406362	0.05042
15 H	0.144703	0.21429
16 H	0.181578	0.17942
17 N	0.091170	-0.53115
18 N	-0.125396	-0.53469
19 N	-0.035112	-0.54488
20 N	-0.122059	-0.53447
21 C	-0.284494	-0.33392
22 H	0.140854	0.17369
23 H	0.139381	0.17626
24 H	0.127087	0.19394
25 C	-0.523064	-0.15380
26 H	0.147874	0.16985
27 H	0.150395	0.15536
28 C	0.025297	-0.16646
29 H	0.042130	0.15446
30 H	0.166964	0.18017
31 C	-0.010486	-0.15927
32 H	0.103143	0.16333
33 H	0.141217	0.16662
34 C	-0.317681	-0.15994
35 H	0.121696	0.16045
36 H	0.141813	0.16604
37 C	0.185771	-0.18833
38 H	0.133726	0.17061
39 H	0.071176	0.19255
40 C	-0.649299	-0.15414
41 H	0.156922	0.15369
42 H	0.138982	0.16984
43 C	-0.246167	-0.15718
44 H	0.127854	0.16566
45 H	0.140051	0.15924
46 C	-0.102728	-0.16036
47 H	0.120044	0.17203

48 H	0.100515	0.15970
49 C	-0.292009	-0.33476
50 H	0.127151	0.17981
51 H	0.149585	0.17102
52 H	0.127444	0.19103

Çizelge 4.56 (10) No'lu bileşiğin NBO analizi

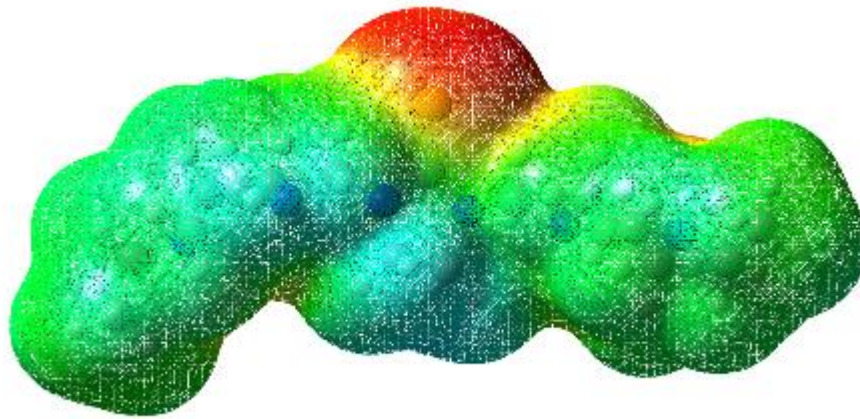
Donor NBO	Acceptor NBO	E (2) kcal/mol
LP (1) N ₉	BD*(1) C ₇ - S ₁₀	57.69
LP (2) S ₁₀	BD*(1) C ₇ - N ₈	14.13
LP (2) S ₁₀	BD*(1) C ₇ - N ₉	14.89
LP (1) N ₁₇	BD*(1) C ₁₁ - H ₁₃	7.54
LP (1) N ₁₇	BD*(1) C ₃₆ - H ₃₈	12.08
LP (1) N ₁₇	BD*(1) C ₄₅ - H ₄₆	9.81
LP (1) N ₁₈	BD*(1) C ₃₉ - H ₄₁	8.59
LP (1) N ₁₈	BD*(1) C ₄₂ - H ₄₃	7.59
LP (1) N ₁₈	BD*(1) C ₄₂ - H ₄₄	7.88
LP (1) N ₁₈	BD*(1) C ₄₈ - H ₄₉	8.20
LP (1) N ₁₉	BD*(1) C ₂₇ - H ₂₈	10.03
LP (1) N ₁₉	BD*(1) C ₃₀ - H ₃₂	8.05
LP (1) N ₂₀	BD*(1) C ₂₄ - H ₂₅	7.49
LP (1) N ₂₀	BD*(1) C ₂₄ - H ₂₆	7.83
LP (1) N ₂₀	BD*(1) C ₃₃ - H ₃₄	7.56
LP (1) N ₂₀	BD*(1) C ₃₃ - H ₃₅	7.66



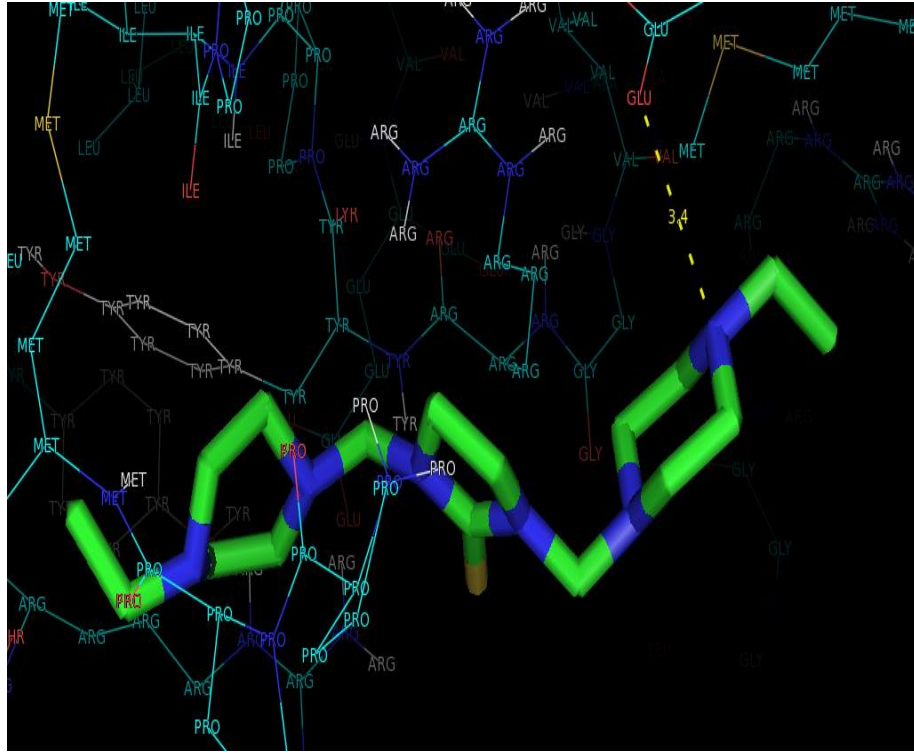
Şekil 4.122 (10) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı

Çizelge 4.57 (10) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri

HOMO	-0.23658
LUMO	-0.07454
HOMO-1	-0.2486
LUMO+1	-0.07248
$\Delta E_{(HOMO-LUMO)}$	-0.16204
$\Delta E_{(HOMO-1-LUMO+1)}$	-0.17612
Elektronegatiflik (χ)	0.15556
Kimyasal Sertlik	0.08102
Kimyasal Yumuşaklık	12.34263
Elektronik Kimyasal Potansiyel (Pi)	-0.15556
Global Elektrofillik (ω)	0.00098
Global Yumuşaklık (S)	0.04051
Elektronik Yük (ΔN_{max})	1.92002

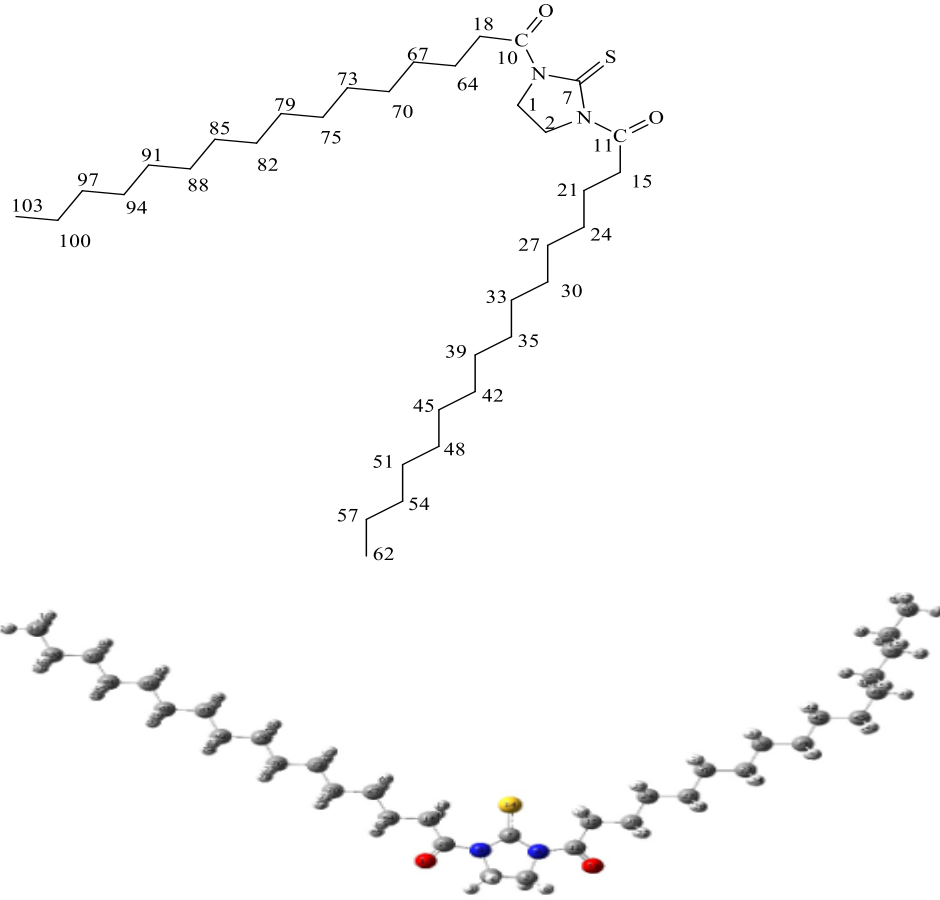


Şekil 4.123 (10) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu

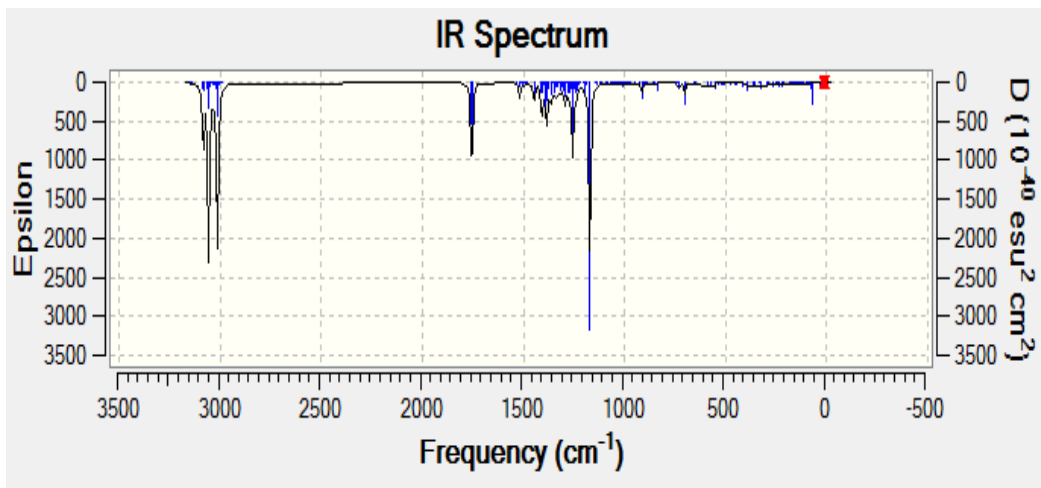


Şekil 4.124 (10) No'lu bileşiğin doking bağlanması

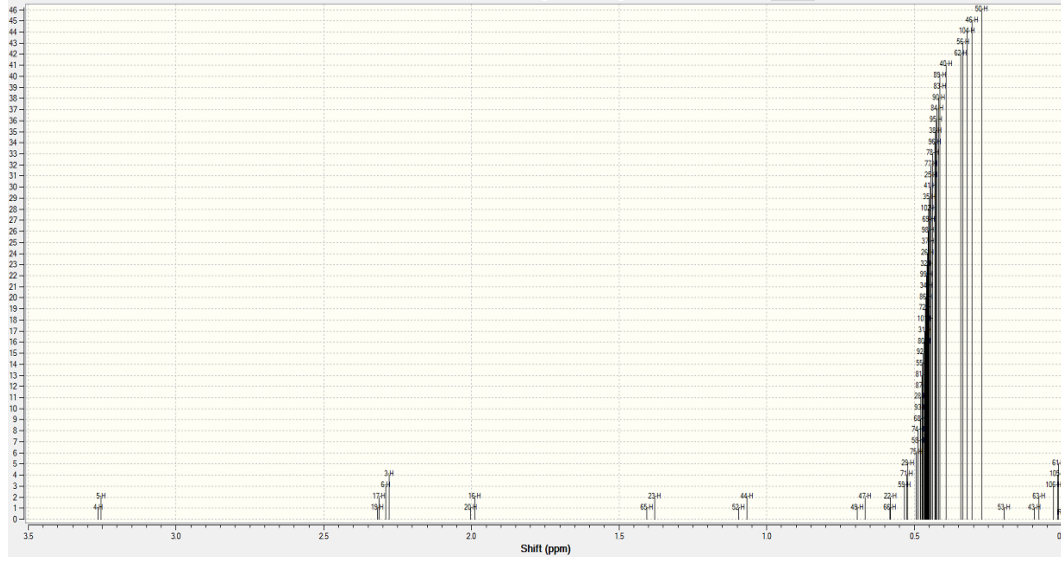
4.2.11. 1,3-Bisheksadekanoilimidazolidin-2-tiyon (11) Analizi



Şekil 4.125 (11) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü

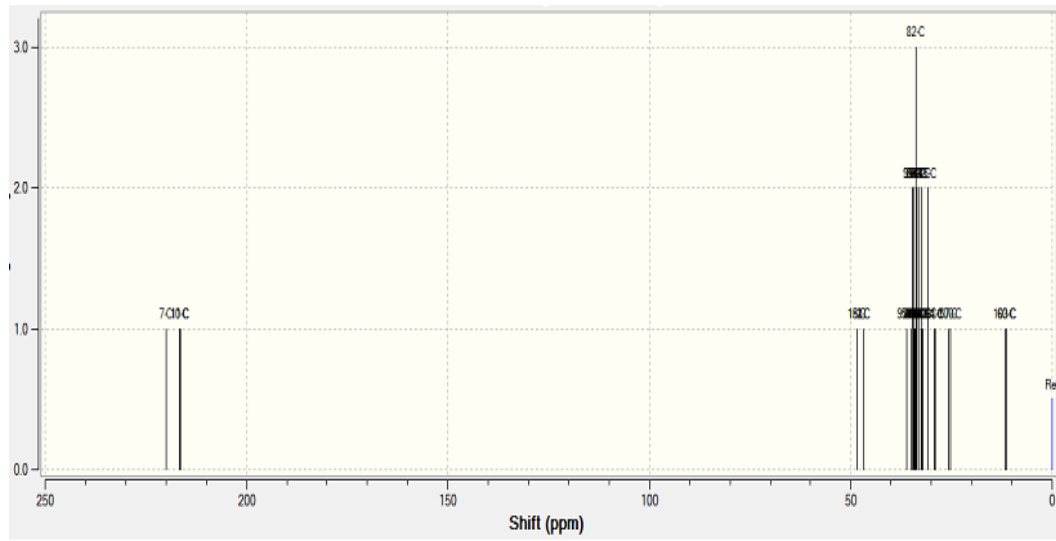


Şekil 4.126 (11) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu

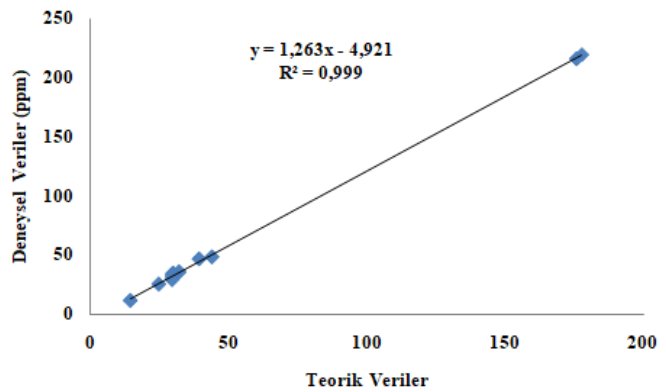
Şekil 4.127 (11) No'lu bileşiğin teorik ¹H-NMR spektrumu

Çizelge 4.58 (11) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹H-NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R ² değeri
4,5	3.96	3.25	
6,3	3.96	2.29	
19,17	3.25	2.29	
20,16	3.25	1.99	
65,23	1.65	1.39	
52,44	1.65	1.08	
49,47	1.27	0.68	
66,22	1.65	0.44	
59,71,29,75,58, 74,68,93,28,87, 81,55,92,80,31, 10,72,86,34,99, 32,26,37,98,69, 102,35,25,7,78 96,38,95,84,90, 83,89,40,62,56, 104,46,50	1.27	0.44	
53	0.84	0.19	
43,63,106,105, 61	0.84	0.04	

Şekil 4.128 (11) No'lu bileşiğin teorik ^{13}C -NMR spektrumuÇizelge 4.59 (11) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ^{13}C -NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R^2 değeri
7	177.54	219.96	
10	175.59	216.69	
11	175.59	216.35	
15	43.77	48.51	
18	43.77	48.34	
2	39.12	46.78	
1	39.12	46.70	
97	31.86	36.07	
54	31.86	35.06	
85	29.69	34.69	
79,91	29.69	34.62	
73,36	29.69	34.37	
30	29.69	34.31	
33	29.69	33.93	
39,88,82	29.62	33.77	
76,94	29.62	33.67	
27,70	29.62	33.16	
24	29.62	32.52	
67,51	29.51	32.32	
42	29.51	32.07	
48,45	29.42	30.78	
64	29.36	29.19	
21	29.36	29.07	
57	24.55	25.57	
100	24.55	25.19	
103	14.26	11.62	
60	14.26	11.26	



Çizelge 4.60 (11) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları

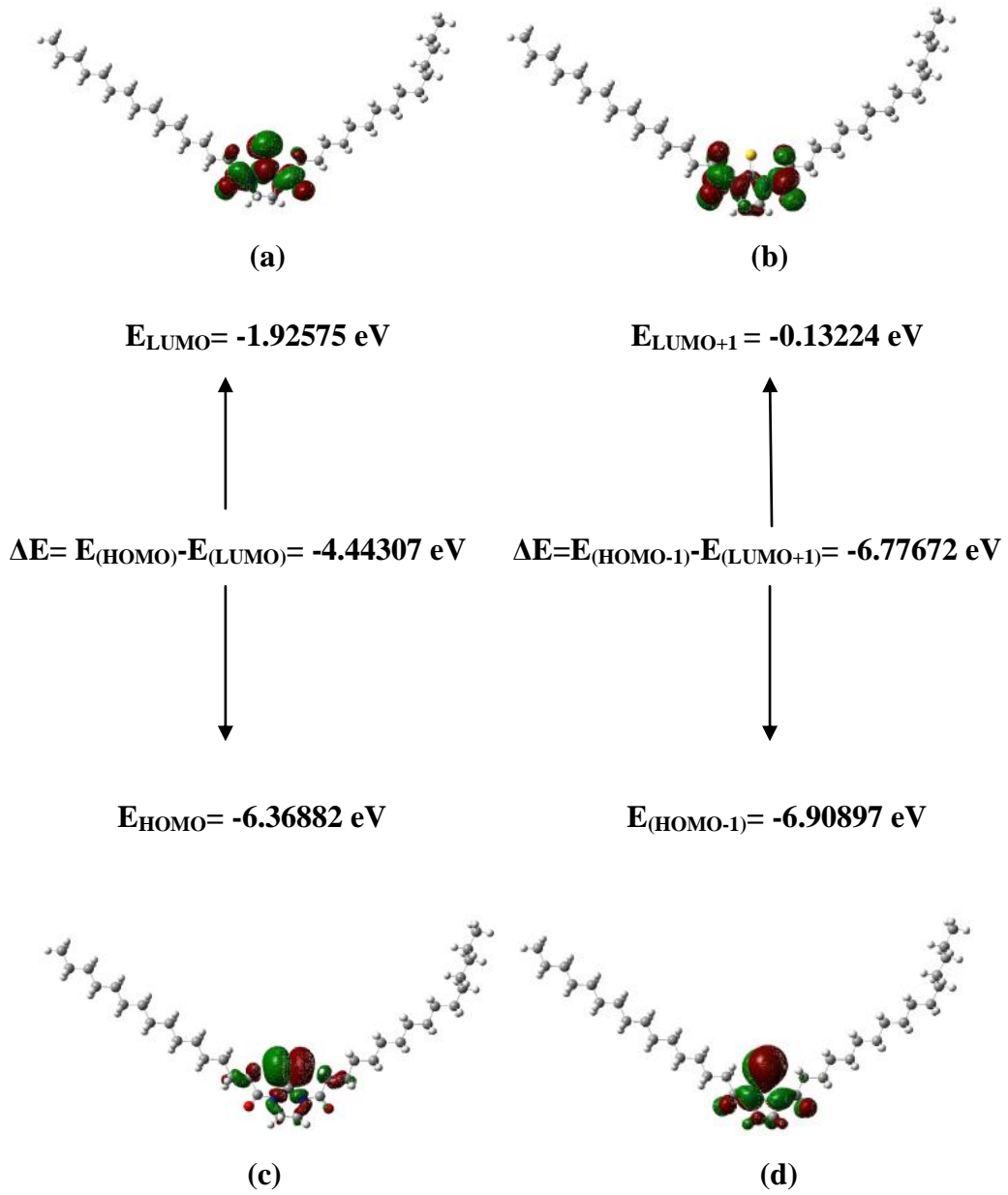
ATOM	Mulliken B3LYP/6-311+G(d,p)	NBO B3LYP/6-311+G(d,p)
1 C	-0.100916	-0.17248
2 C	-0.101759	-0.17247
3 H	0.131536	0.20211
4 H	0.155147	0.19835
5 H	0.155003	0.19810
6 H	0.131743	0.20238
7 C	0.104946	0.24706
8 N	-0.340645	-0.56049
9 N	-0.340961	-0.56089
10 C	0.308168	0.77649
11 C	0.308140	0.77659
12 O	-0.311576	-0.56137
13 O	-0.312462	-0.56148
14 S	-0.125742	-0.06467
15 C	-0.186343	-0.46273
16 H	0.133298	0.20756
17 H	0.175720	0.23879
18 C	-0.185638	-0.46233
19 H	0.175323	0.23873
20 H	0.133163	0.20765
21 C	-0.205582	-0.35261
22 H	0.109934	0.18417
23 H	0.132037	0.20056
24 C	-0.217055	-0.35908
25 H	0.105157	0.17907
26 H	0.108311	0.18098
27 C	-0.205457	-0.35606
28 H	0.105470	0.17998
29 H	0.108080	0.18105
30 C	-0.208766	-0.35674
31 H	0.104405	0.17893
32 H	0.105444	0.17934
33 C	-0.205862	-0.35671
34 H	0.103909	0.17894
35 H	0.104990	0.17931
36 C	-0.208513	-0.35681
37 H	0.103291	0.17808
38 H	0.103924	0.17864
39 C	-0.200063	-0.35568
40 H	0.102763	0.17864
41 H	0.103673	0.17851
42 C	-0.219213	-0.36556
43 H	0.103218	0.17906
44 H	0.111582	0.18061
45 C	-0.205876	-0.35645
46 H	0.103187	0.17889
47 H	0.104429	0.18354

48 C	-0.206759	-0.35660
49 H	0.104474	0.18306
50 H	0.103439	0.17855
51 C	-0.216822	-0.36632
52 H	0.111368	0.18039
53 H	0.102947	0.17888
54 C	-0.203197	-0.36053
55 H	0.103179	0.17872
56 H	0.102794	0.17901
57 C	-0.230914	-0.35023
58 H	0.105302	0.17783
59 H	0.105438	0.17824
60 C	-0.285550	-0.55463
61 H	0.100480	0.18289
62 H	0.102879	0.18773
63 H	0.100589	0.18293
64 C	-0.206639	-0.35273
65 H	0.132198	0.20067
66 H	0.110069	0.18429
67 C	-0.216089	-0.35918
68 H	0.108141	0.18095
69 H	0.105080	0.17909
70 C	-0.205953	-0.35605
71 H	0.108055	0.18100
72 H	0.105530	0.18000
73 C	-0.208472	-0.35677
74 H	0.104340	0.17900
75 H	0.105395	0.17934
76 C	-0.205571	-0.35684
77 H	0.104752	0.17919
78 H	0.103839	0.17894
79 C	-0.207910	-0.35676
80 H	0.104071	0.17868
81 H	0.103623	0.17865
82 C	-0.205203	-0.35682
83 H	0.103778	0.17869
84 H	0.103385	0.17869
85 C	-0.207669	-0.35676
86 H	0.103704	0.17847
87 H	0.103428	0.17853
88 C	-0.205509	-0.35683
89 H	0.103537	0.17856
90 H	0.103383	0.17862
91 C	-0.207392	-0.35696
92 H	0.103710	0.17812
93 H	0.103555	0.17818
94 C	-0.204421	-0.35763
95 H	0.103457	0.17841
96 H	0.103317	0.17842
97 C	-0.208758	-0.36169
98 H	0.103319	0.17894
99 H	0.103203	0.17894
100 C	-0.229856	-0.35010

101 H	0.105661	0.17841
102 H	0.105561	0.17839
103 C	-0.285434	-0.55476
104 H	0.102897	0.18772
105 H	0.100385	0.18279
106 H	0.100293	0.18276

Çizelge 4.61 (11) No'lu bileşiğin NBO analizi

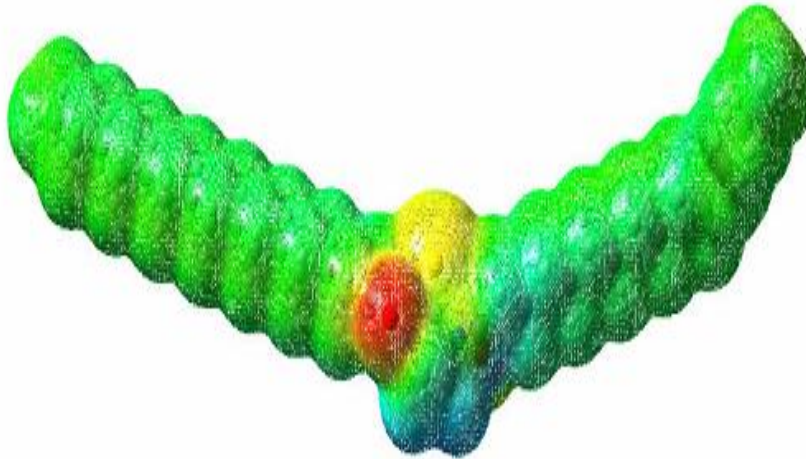
Donor NBO	Acceptor NBO	E (2) kcal/mol
BD (1) C ₁₈ - H ₁₉	BD*(2) C ₁₀ - O ₁₂	6.06
CR (1) O ₁₂	RY*(1) C ₁₀	6.41
CR (1) O ₁	RY*(1) C ₁₁	6.41
LP (1) N ₈	BD*(2) C ₇ - S ₁₄	68.24
LP (1) N ₈	BD*(2) C ₁₁ - O ₁₃	41.09
LP (1) N ₉	BD*(2) C ₇ - S ₁₄	68.73
LP (1) N ₉	BD*(2) C ₁₀ - O ₁₂	41.23
LP (1) O ₁₂	RY*(1) C ₁₀	14.61
LP (2) O ₁₂	BD*(1) N ₉ - C ₁₀	27.98
LP (2) O ₁₂	BD*(1) C ₁₀ - C ₁₈	17.43
LP (1) O ₁₃	RY*(1) C ₁₁	14.62
LP (2) O ₁₃	BD*(1) N ₈ - C ₁₁	28.00
LP (2) O ₁₃	BD*(1) C ₁₁ - C ₁₅	17.44
LP (2) S ₁₄	BD*(1) C ₇ - N ₈	13.05
LP (2) S ₁₄	BD*(1) C ₇ - N ₉	13.07



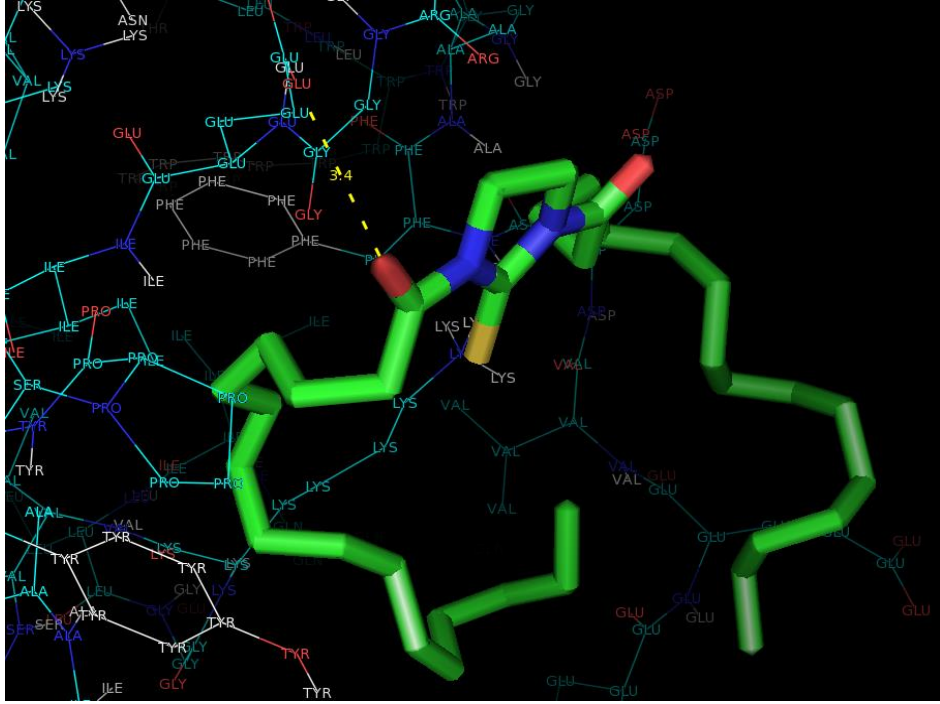
Şekil 4.129 (11) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı

Çizelge 4.62 (11) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri

HOMO	-0.21671
LUMO	-0.03874
HOMO-1	-0.22344
LUMO+1	-0.03572
$\Delta E_{(HOMO-LUMO)}$	-0.17797
$\Delta E_{(HOMO-1-LUMO+1)}$	-0.18772
Elektronegatiflik (χ)	0.127725
Kimyasal Sertlik	0.088985
Kimyasal Yumuşaklık	11.23785
Elektronik Kimyasal Potansiyel (Pi)	-0.12773
Global Elektrofillik (ω)	0.000726
Global Yumuşaklık (S)	0.044493
Elektronik Yük (ΔN_{max})	1.435354

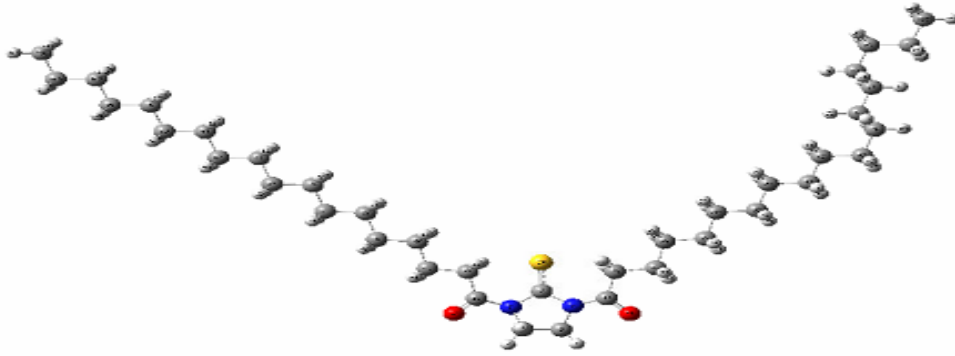
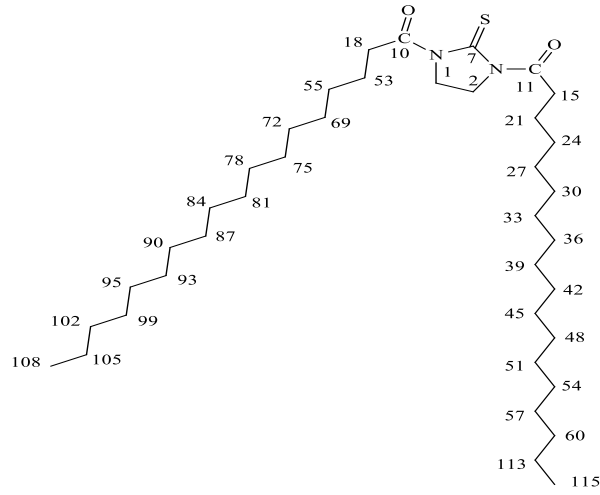


Şekil 4.130 (11) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu

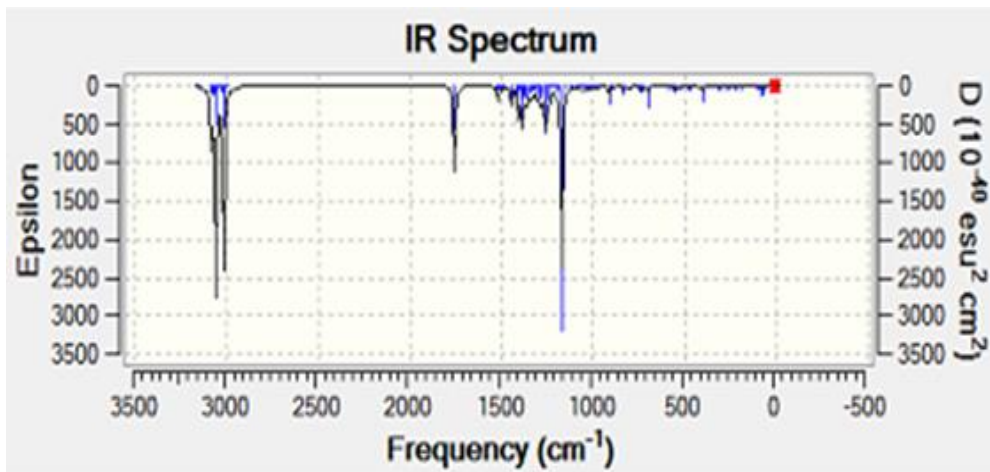


Şekil 4.131 (11) No’lu bileşiğin doking bağlanması

4.2.12. 1,3-Bisoktadekanoilimidazolidin-2-tiyon (12) Analizi



Şekil 4.132 (12) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü



Şekil 4.133 (12) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu

Çizelge 4.63 (12) No'lu bileşiğin teorik IR analizi

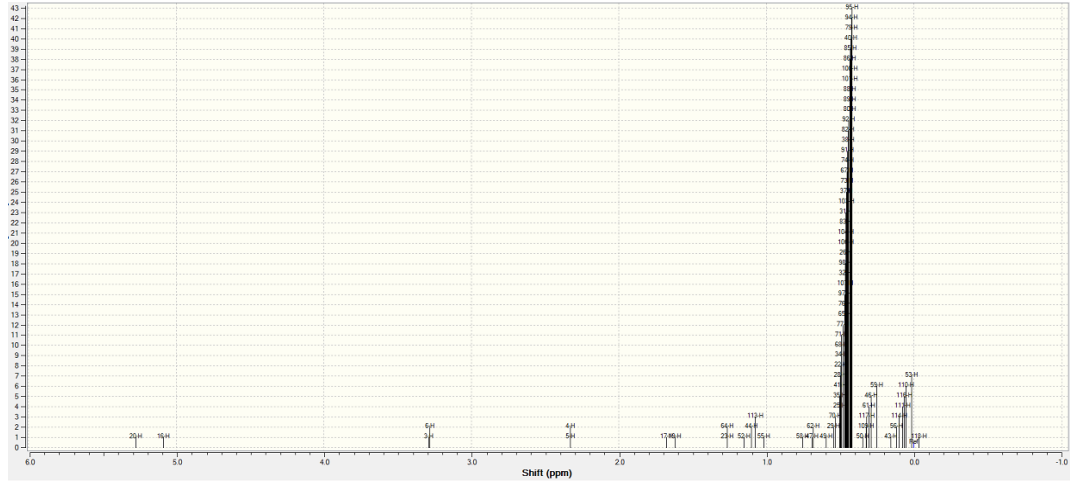
TED	B3LYP/6-311+ (d,p)
Titreşim Türü	
STRE CH	3147 (43) +3140 (51)
STRE CH	3056 (45)+3048 (48)
STRE CH	3056 (46)+3048 (47)
STRE CH	3147 (48)+3140 (46)
STRE CH	3086 (25)+ 3066 (18)+3050 (13)+ 3050 (13)
STRE CH	3086(16)+3066(10)+3050(10)+3050(19)+3050(19)
STRE CH	3085 (15) +3065(13) +3050 (34)+3050(16)
STRE CH	3085 (23)+3065(18)+3050 (23)+3050 (15)
STRE CH	3086 (10)+3033(55)
STRE CH	3086 (19)+3066 (23)+3065 (10)+3033 (23)
STRE CH	3016 (10) +3000 (11) +2995 (11)
STRE CH	3011 (10) +3000 (10)+2995 (11)
STRE CH	3010 (17) +3005 (10) +2995 (11)
STRE CH	3011 (19)+ 2995 (11)
STRE CH	3010 (21)+2994 (20)
STRE CH	3051 (10)+3011 (12)+3009 (13) +2994 (19)
STRE CH	3010 (15)+2992 (16)
STRE CH	3009 (17) +2992 (15)
STRE CH	3011 (16)+2991(18)
STRE CH	3009 (12)+2991 (17)
STRE CH	3028 (10)+3016 (11)+3011(14)+2994(17)+2992(11)
STRE CH	3010 (13)+3005(16) +2994 (15)+2991(10)
STRE CH	3005 (21)+2995 (10)+2992(13)
STRE CH	3057 (13) +3051 (12)+3022 (19)+3016 (17)
STRE CH	3000 (11)+2997 (11)
STRE CH	3028 (15)+3023 (12)+3022 (10)
STRE CH	3039 (13)+3023(26) +2998 (12)
STRE CH	2998 (29)
STRE CH	3059 (24)+3039 (11)+3018 (12)
STRE CH	3008 (18)+2997 (17)+2995(10)+2993 (15)
STRE CH	3059 (21)+3022 (10)+3018 (17)
STRE CH	3008 (18)+2997 (13)+2993(16)+2993 (11)
STRE CH	3039 (14) +3023(20) +2998 (11) +2993 (10)
STRE CH	3039 (10)+2998 (23)+2996 (12)+2993(14)
STRE CH	3049 (11)+3024 (14) +2997 (10)+2996 (30)
STRE CH	3049(14)+3024 (34)+3023 (10)
STRE CH	3085 (20)+3066(10) +3065 (22)+3034(20)
STRE CH	3085(10) + 3034 (41)+3031(19)
STRE CH	2997 (10)
STRE CH	2997 (11)+2995 (10)
STRE CH	3011 (12)+2996 (10)
STRE CH	2996 (10)
STRE CH	3010(10)+2994 (14)
STRE CH	3011 (14)+2994(13)
STRE CH	2992 (11)
STRE CH	2992 (13)
STRE CH	2992 (14)
STRE CH	3009 (10)+2991(11)
STRE CH	2994 (10)+ 2991(10)
STRE CH	2994 (10)
STRE CH	2991 (13)

STRE CH	3008 (11)+2991(14)
STRE CH	2995 (10)+2991(13)
STRE CH	3008 (10)+2995(10)+2991(12)
STRE CH	3010 (14)+ 3008(13)
STRE CH	3008 (11)
STRE CH	3085 (73)+3019 (26)
STRE CH	3085(12)+3080 (44)+3019 (36)
STRE CH	3085 (13)+3080 (44) +3019 (35)
STRE CH	3049 (41)+3024 (21)+3009 (10)
STRE CH	3049 (13)+3009(61)
STRE CH	3084 (16) +3080 (36)+3018 (27) +3018 (10)
STRE CH	3084 (72)+3018 (19)
STRE CH	3080 (46)+3018 (27)
STRE OC	1757 (28)+1754(59)
STRE OC	1757 (60)+1754 (28)
STRE NC	913(11)
STRE NC	1171 (14)+833(10)
STRE CC	913(11)
STRE NC	1256 (10)+1074 (12)
STRE NC	1256(10)
STRE CC	1059 (10)+1033 (14)
STRE CC	1071 (16)+ 995 (11)
STRE CC	1071 (25)
STRE CC	1071 (21)+990(18)
STRE CC	1071 (13)+1070 (12)
STRE CC	1070 (12)
STRE CC	1033 (16)
STRE CC	1085(19)+902 (11)
STRE CC	1088 (16)
STRE CC	1026 (10)+999 (11)+897 (18)
STRE CC	1044 (14) +1025(17)
STRE CC	1085 (25)+ 902 (10)
STRE CC	1085 (19)
STRE CC	1045 (29)
STRE CC	1085(21)+975(13)
STRE CC	1040 (15)
STRE CC	1069 (12)
STRE CC	1067 (10) +999(16)
STRE CC	1070 (11)+981(12)
STRE CC	1070(16)+1040 (11)
STRE CC	977 (16)
STRE CC	981(14)
STRE CC	1070(12)+977 (14)
STRE CC	1069 (16)+999 (13)
STRE CC	897 (30)
STRE CC	1085 (19) +844 (10)+837 (13)
STRE SC	1039 (21)+585 (10)+552 (15)
BEND CNC	1039(13)
BEND HCN	1238(28)+1123(10)
BEND HCH	1530 (38)+1518 (43)
BEND HCC	1280(13)+1238 (12)+1123 (10)
BEND HCH	1138 (32)
BEND HCH	1447 (37)+1441 (36)
BEND HCC	1138 +(31)
BEND HCH	1447 (31)+1441 (40)

BEND HCC	1325 (12)
BEND HCH	1505 (17)+1497 (20)+1491(18)
BEND HCC	1335 (15)
BEND HCH	1512 (13)+1505 (11)+1491(14)+1487 (17)
BEND HCC	1340 (10)+1335 (10)
BEND HCH	1512 (10)+1497 (13)+1490 (22)+1486 (12)
BEND HCC	1340 (24)
BEND HCH	1517(11)+ 1505 (12)+1497(12)+1490(13)+ 1486 (11)+ 1485 (21)
BEND HCH	1341 (18)
BEND HCC	1517 (11)+1505(17)+1491(21)+1485(18)+1484(10)
BEND HCH	1340 (11)+1330 (12)
BEND HCC	1517(10)+1497 (17)+1490 (12)+1486(16)+1484(17)
BEND HCH	1340 (10)+1331(15)
BEND HCC	1512(13)+1490 (23)+1486(10)+1485 (14)
BEND HCH	1335(16)
BEND HCC	1512 (11)+1505(17)+1487 (12)+1484 (12)
BEND HCH	1359 (13)
BEND HCC	1497(13)+1491(18) +1487 (10)+1484(18)
BEND HCH	1338 (10)
BEND HCC	1497(23)+1488(11)
BEND HCH	1338 (11)+1330 (18)
BEND HCC	1514 (20)+1511 (13)+1497 (10)+1488 (25)
BEND HCH	1320 (13)
BEND HCC	1514 (22)+1497 (12)+1488(20)
BEND HCH	1347 (13)
BEND HCH	1497 (14)+1497 (16)+1488(10)+1486 (17)
BEND HCC	1497 (17)+1488 (28)+1487 (12)
BEND HCH	1324 (14)
BEND HCC	1503(10)+1499(10)+1495 (11)+1491 (13)
BEND HCH	1341 (12)+1328 (10)
BEND HCC	1491 (10)+1489 (18)+1487(12)
BEND HCH	1341 (11)+1335 (11)
BEND HCC	1489 (21)+1487 (15)
BEND HCH	1324 (10)
BEND HCC	1503(10)+1489(12)+1487(10)+1487(11)
BEND HCH	1345 (13)
BEND HCC	1507(10)+1487 (19)+1485(13)
BEND HCH	1345 (11)+1327 (12)
BEND HCC	1519(10)+1511(10)+1491(14)+1487(14)+1485(16)
BEND HCH	1333 (14)
BEND HCC	1519(10)+ 1491(11)+1485 (14)
BEND HCH	1345 (12)
BEND HCC	1519(11)+1514(10)+1489 (20)+1485(22)
BEND HCH	1345 (10)+1335(11)+1326 (13)
BEND HCC	1519 (10)+1514(10)+1485 (19)
BEND HCH	1345 (10)+1341(10)+1326 (12)
BEND HCH	1491(12)+1489 (10)+1485(18)
BEND HCC	1511(10)+1491(13)+1487 (13)+1485(19)
BEND HCH	1341 (12)
BEND HCC	1495(10)+1487(12)+1485(10)
BEND HCH	1341 (11)+1333(13)
BEND HCC	1489 (16)+1487 (22)
BEND HCH	1335 (12)
BEND HCH	1489 (10)+1489 (14)+1487 (14)

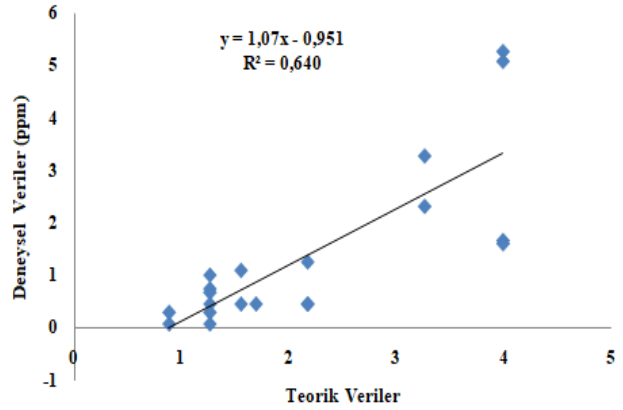
BEND HCH	1514 (13)+1511(11)+1495(12)+1491(17)+1489(14)
BEND HCH	1502 (40)+1416 (29)
BEND HCH	1502(37)+1416 (31)
BEND HCH	1507 (10)+1503 (11)+1499(10)+1416 (24)
BEND HCH	1514(12)+1512(10)+1511(21)+1488(20)+1487(10)
BEND HCH	1511 (17)+1497(18)+1497 (11)+1414 (26)
BEND HCH	1501 (34)+1414 (31)
BEND OCC	1501 (40)+1414 (31)
BEND OCC	764 (13)+703(15)
BEND CNC	764 (13)+703 (14)
BEND CNC	266 (15)
BEND CCN	256 (11)
BEND CNC	444 (11)
BEND CCC	1039 (10)
BEND CCC	502 (12)
BEND CCC	464 (16)
BEND CCC	502 (19)
BEND CCC	444 (10)
BEND CCC	502 (10)
BEND CCC	413(10)+352(13)
BEND CCC	286(10)+264 (22)
BEND CCC	321(10)
BEND CCC	544 (14)+347 (13)
BEND CCC	347 (18)
BEND CCC	347 (21)
BEND CCC	544 (11)
BEND CCC	352 (10)
BEND CCC	482 (10)
BEND CCC	476 (14)
BEND CCC	520 (11)
BEND CCC	520 (15)
BEND CCC	520 (14)
BEND CCC	520(11)+ 413 (11)
BEND CCC	520 (10) +482 (12)
BEND CCC	476(11)
BEND SCN	512 (11)+264 (26)
TORS HCNC	658(10)+ 295(12)+266 (41)
TORS HCNC	1123 (12)
TORS HCNC	1123(13)
TORS HCCC	1387 (16)
TORS HCCC	1138 (13)
TORS HCCC	732 (17)
TORS HCCC	732 (15)
TORS HCCC	736 (10)
TORS HCCC	1403(10)
TORS HCCC	732 (11)
TORS HCCC	1403(11)
TORS HCCC	732 (10)
TORS HCCC	1359 (10)
TORS HCCC	729 (15)
TORS HCCC	1400 (11)
TORS HCCC	1138 (12)
TORS HCCC	733 (10)
TORS HCCC	733 (12)
TORS HCCC	1502 (15)+247 (45)

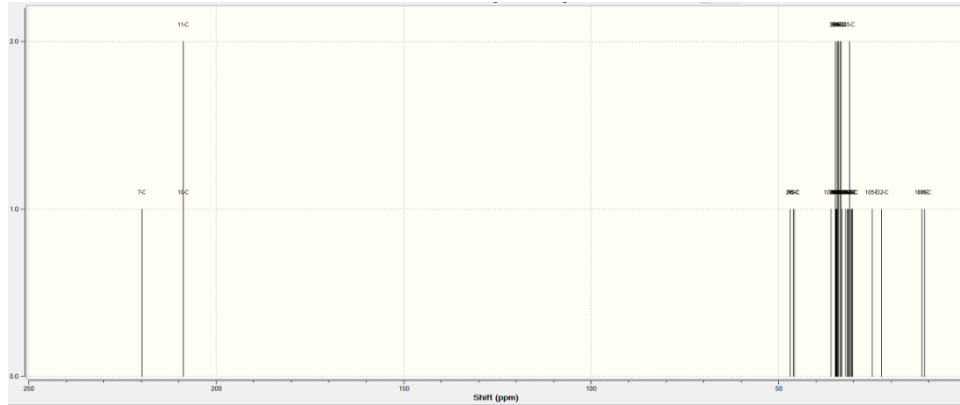
TORS HCCC	897 (14)+247 (22)
TORS HCCC	744 (11)
TORS HCCC	853 (10)
TORS HCCC	1501(15)+853 (17)+243(27)
TORS CCNC	243 (21)
TORS CCNC	220 (15)
TORS CNCN	220(15)+78 (13)
TORS CCCN	1238 (10)
TORS CCCC	9 (13)
TORS CCCC	86 (14)+45(19)
TORS CCCC	163 (20)+56 (15)
TORS CCCC	162(15)+45 (13)
TORS CCCC	163 (17) +96 (11)
TORS CCCC	162(18)+86 (12)
TORS CCCC	141(15) +56 (11)
TORS CCCN	56 (10)
TORS CCCC	18 (12)
TORS CCCC	149(10)+ 128 (11)
TORS CCCC	69 (39)
TORS CCCC	45(16)
TORS CCCC	107(18)+ 23(20)+ 20 (11)
TORS CCCC	117 (26)+61 (11)
TORS CCCC	107 (13)+ 96 (10)+ 23 (13)
TORS CCCC	136 (10)+110 (14)+ 83 (12)+59 (12)
TORS CCCC	166 (13)+149 (12)
TORS CCCC	160 (14) +136 (16)
TORS CCCC	177 (10)+ 110 (14)+ 83(10)
TORS CCCC	175 (15)+78 (10)
TORS CCCC	177 (15)+ 83 (13)
TORS CCCC	175 (16)+ 136 (10)+ 83 (10)
TORS CCCC	177 (16)
TORS CCCC	175 (12)+160 (12)+110 (15)
TORS CCCC	177 (13)+166 (10)
TORS CCCC	160(17)+136 (14)
TORS CCCC	166 (15) +149 (12)
TORS CCCC	136 (13) + 110(19) + 83(13)
OUT OCNC	67 (12) +61 (10)
OUT OCNC	585(15)+ 571 (31)+ 552 (11)
OUT SNNC	585 (20) +571 (23) +552 (11)
OUT CCCN	650 (68)
OUT CCCN	253 (19)+220 (11)

Şekil 4.134 (12) No'lu bileşiğin teorik ¹H-NMR spektrumu

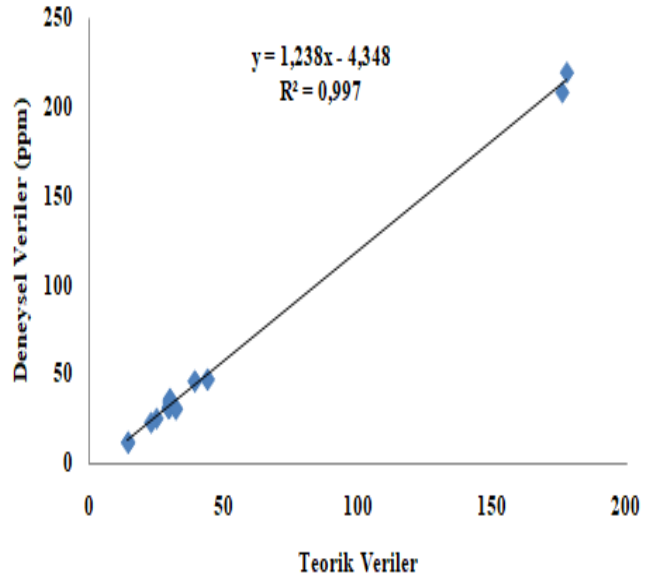
Çizelge 4.64 (12) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹H-NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R ² değeri
3,6	3.26	3.28	y = 1,07x - 0,951 R ² = 0,640
4,5	3.26	2.32	
16	3.99	5.08	
17	3.99	1.67	
19	3.99	1.61	
20	3.99	5.27	
22,65	2.17	0.46	
23,64	2.17	1.26	
25,26,67,68	2.17	0.46	
28,29,70,71	1.69	0.46	
31,32,73,74	1.55	0.46	
47,62	1.26	0.68	
49,35,41,34,77	1.26	0.46	
76,97,107,98,95			
106,104,83,103	1.26	0.08	
37,91,38,82,92			
80,89,88,101,86	1.26	0.75	
100,85,40,79,94			
50,61,46,59	1.26	0.30	
52,44,113	1.55	1.10	
55	1.26	1.01	
56,43,53,114	1.26	0.08	
58	1.26	0.75	
109,117	0.88	0.30	
110,11,116	0.88	0.08	
118	0.88	-0.03	



Şekil 4.135 (12) No'lu bileşiğin teorik ¹³C-NMR spektrumuÇizelge 4.65 (12) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹³C-NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R ² değeri
1	43.68	47	
2	43.68	47	
7	177.46	220	
10,11	175.72	209	
15	38.97	46	
18	38.97	46	
21	31.91	30	
24	29.63	32	
27	29.70	35	
30,72	29.70	33	
36,78	29.70	34	
39,87	29.70	35	
42	29.63	32	
45,48	29.43	31	
51	29.37	31	
54	29.70	32	
57	29.14	31	
60	29.70	33	
63	31.91	30	
66	29.52	31	
69	29.70	35	
75,33	29.70	35	
81	29.70	35	
84,99	29.70	34	
90,93	29.70	34	
96	29.70	34	
102	29.70	36	
105	24.74	25	
108	14.15	12	
112	22.68	23	
115	14.15	11	



Çizelge 4.66 (12) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları

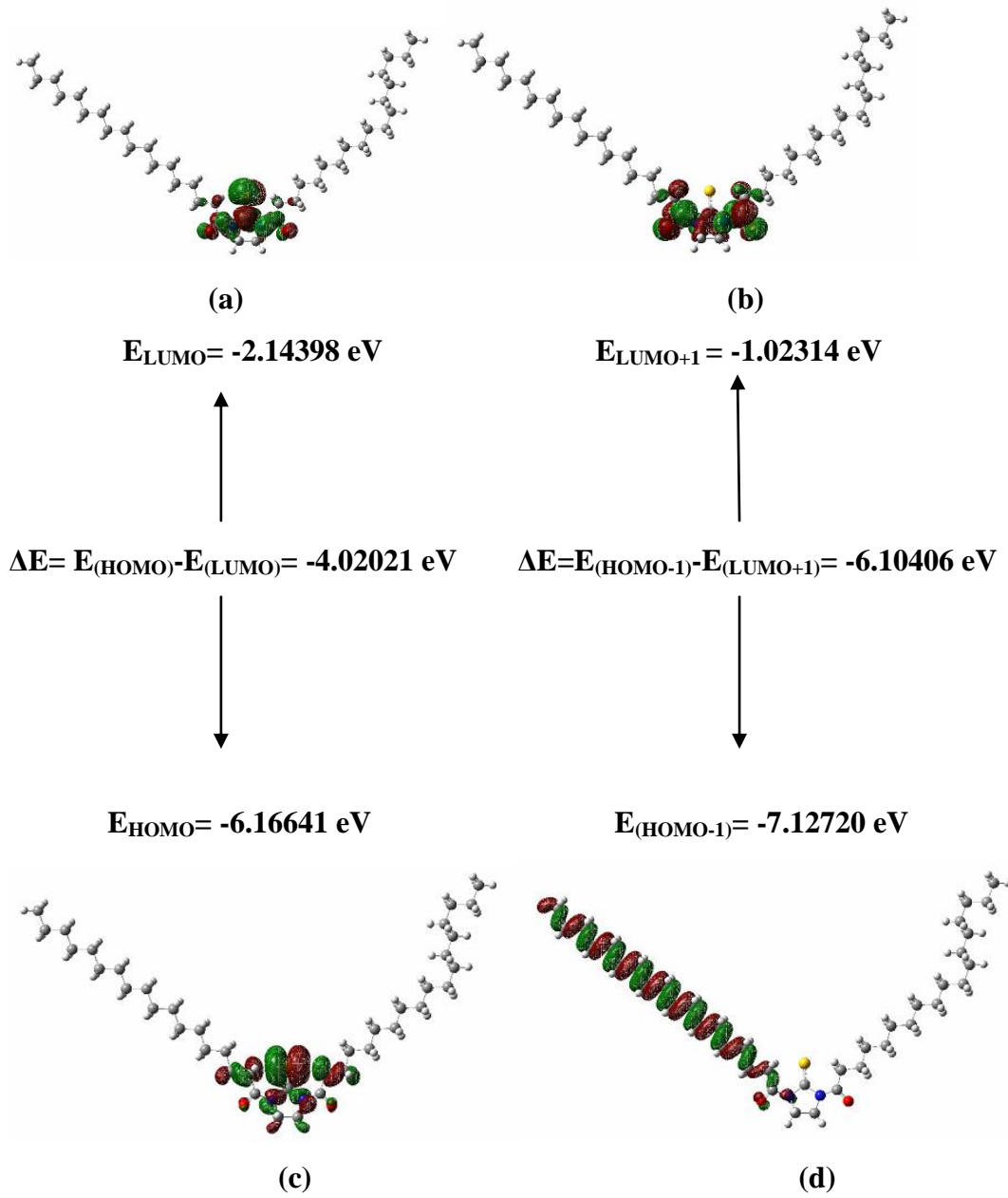
ATOM	Mulliken B3LYP/6-311+G(d,p)	NBO B3LYP/6-311+G(d,p)
1 C	-0.072569	-0.17265
2 C	-0.074504	-0.17265
3 H	0.156702	0.22279
4 H	0.146946	0.19835
5 H	0.147185	0.19837
6 H	0.156309	0.22265
7 C	0.254583	0.28342
8 N	-0.449852	-0.49120
9 N	-0.450985	-0.49076
10 C	0.421379	0.74609
11 C	0.421202	0.74634
12 O	-0.335909	-0.58779
13 O	-0.335685	-0.58742
14 S	-0.178228	-0.15356
15 C	-0.286389	-0.48226
16 H	0.161199	0.22889
17 H	0.173793	0.23959
18 C	-0.286394	-0.48228
19 H	0.172859	0.23900
20 H	0.162358	0.23002
21 C	-0.187666	-0.36671
22 H	0.111776	0.19311
23 H	0.120015	0.19994
24 C	-0.209588	-0.36593
25 H	0.102636	0.18324
26 H	0.103515	0.18385
27 C	-0.201535	-0.36419
28 H	0.102411	0.18347
29 H	0.103076	0.18397
30 C	-0.201513	-0.36481
31 H	0.101143	0.18262
32 H	0.101438	0.18267
33 C	-0.201329	-0.36459
34 H	0.101037	0.18262
35 H	0.101246	0.18267
36 C	-0.201267	-0.36472
37 H	0.100531	0.18239
38 H	0.100692	0.18233
39 C	-0.199911	-0.36404
40 H	0.100745	0.18266
41 H	0.100284	0.18151
42 C	-0.202115	-0.37193
43 H	0.099600	0.18192
44 H	0.105645	0.18410
45 C	-0.206159	-0.36386
46 H	0.100366	0.18234
47 H	0.102741	0.18781

48 C	-0.207666	-0.36370
49 H	0.102983	0.18783
50 H	0.100182	0.18206
51 C	-0.198753	-0.37162
52 H	0.105015	0.18341
53 H	0.098510	0.18202
54 C	-0.207808	-0.37262
55 H	0.108451	0.18396
56 H	0.100020	0.18210
57 C	-0.210562	-0.36713
58 H	0.101244	0.18718
59 H	0.102473	0.18110
60 C	-0.203716	-0.36732
61 H	0.104488	0.18386
62 H	0.103960	0.18641
63 C	-0.187548	-0.36696
64 H	0.119598	0.19971
65 H	0.112120	0.19349
66 C	-0.209232	-0.36594
67 H	0.103452	0.18380
68 H	0.102679	0.18332
69 C	-0.201871	-0.36417
70 H	0.103025	0.18391
71 H	0.102462	0.18349
72 C	-0.201186	-0.36483
73 H	0.101150	0.18263
74 H	0.101439	0.18271
75 C	-0.201510	-0.36461
76 H	0.101229	0.18266
77 H	0.101032	0.18257
78 C	-0.201043	-0.36463
79 H	0.100819	0.18243
80 H	0.100696	0.18240
81 C	-0.201279	-0.36460
82 H	0.100728	0.18238
83 H	0.100666	0.18236
84 C	-0.200968	-0.36460
85 H	0.100608	0.18233
86 H	0.100541	0.18231
87 C	-0.201174	-0.36460
88 H	0.100507	0.18226
89 H	0.100484	0.18226
90 C	-0.200813	-0.36454
91 H	0.100454	0.18225
92 H	0.100406	0.18222
93 C	-0.201524	-0.36504
94 H	0.100156	0.18197
95 H	0.100137	0.18196
96 C	-0.200698	-0.36405
97 H	0.100493	0.18155
98 H	0.100448	0.18151
99 C	-0.199729	-0.36856
100 H	0.100423	0.18216

101 H	0.100362	0.18214
102 C	-0.206920	-0.36785
103 H	0.100759	0.18196
104 H	0.100738	0.18192
105 C	-0.228115	-0.34861
106 H	0.106782	0.17912
107 H	0.106785	0.17913
108 C	-0.285903	-0.55477
109 H	0.104490	0.18924
110 H	0.100962	0.18334
111 H	0.100965	0.18334
112 C	-0.241436	-0.36131
113 H	0.116252	0.18292
114 H	0.109708	0.17848
115 C	-0.292351	-0.55290
116 H	0.103772	0.18296
117 H	0.102893	0.18847
118 H	0.102444	0.18398

Çizelge 4.67 (12) No'lu bileşiğin NBO analizi

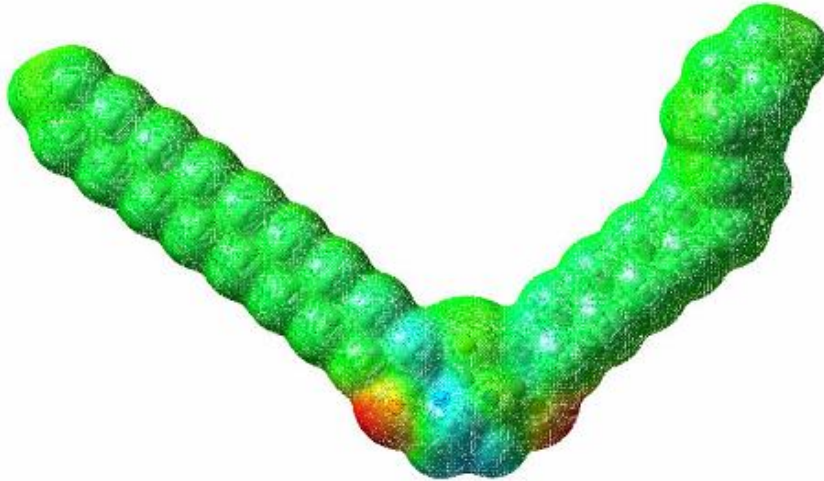
Donor NBO	Acceptor NBO	E (2) kcal/mol
LP (1) N ₈	BD*(2) C ₇ - S ₁₄	68.23
LP (1) N ₈	BD*(2) C ₁₁ - O ₁₃	41.09
LP (1) N ₉	BD*(2) C ₇ - S ₁₄	68.73
LP (1) N ₉	BD*(2) C ₁₀ - O ₁₂	41.23
LP (1) O ₁₂	RY*(1) C ₁₀	14.61
LP (2) O ₁₂	BD*(1) N ₉ - C ₁₀	27.98
LP (2) O ₁₂	BD*(1) C ₁₀ - C ₁₈	17.43
LP (1) O ₁₃	RY*(1) C ₁₁	14.62
LP (2) O ₁₃	BD*(1) N ₈ - C ₁₁	28.00
LP (2) O ₁₃	BD*(1) C ₁₁ - C ₁₅	17.44
LP (2) S ₁₄	BD*(1) C ₇ - N ₈	13.05
LP (2) S ₁₄	BD*(1) C ₇ - N ₉	13.07



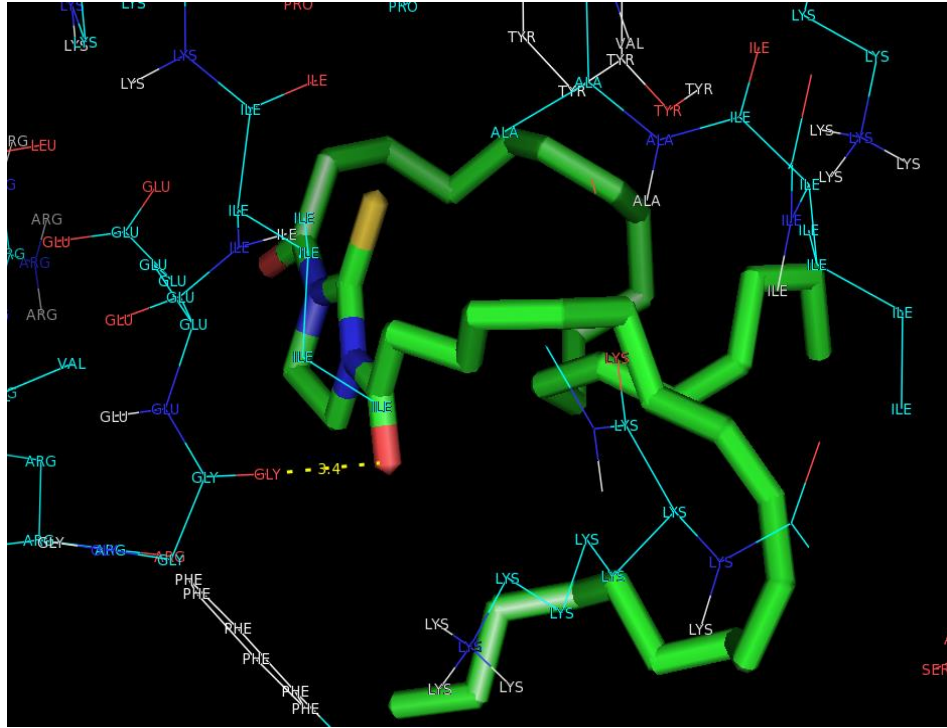
Şekil 4.136 (12) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı

Çizelge 4.68 (12) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri

HOMO	-0.21169
LUMO	-0.01643
HOMO-1	-0.22146
LUMO+1	-0.01046
$\Delta E_{(HOMO-LUMO)}$	-0.19526
$\Delta E_{(HOMO-1-LUMO+1)}$	-0.211
Elektronegatiflik (χ)	0.11406
Kimyasal Sertlik	0.09763
Kimyasal Yumuşaklık	10.24275
Elektronik Kimyasal Potansiyel (Pi)	-0.11406
Global Elektrofillik (ω)	0.000635
Global Yumuşaklık (S)	0.048815
Elektronik Yük (ΔN_{max})	1.168288

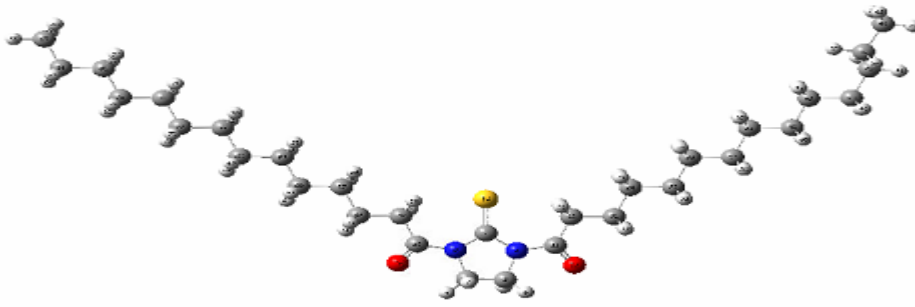
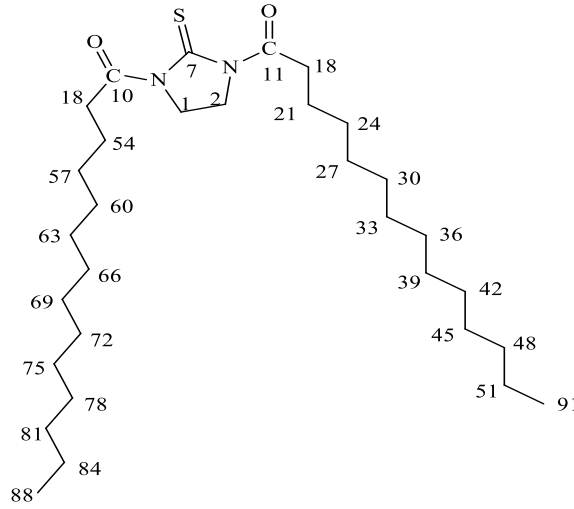


Şekil 4.137 (12) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu

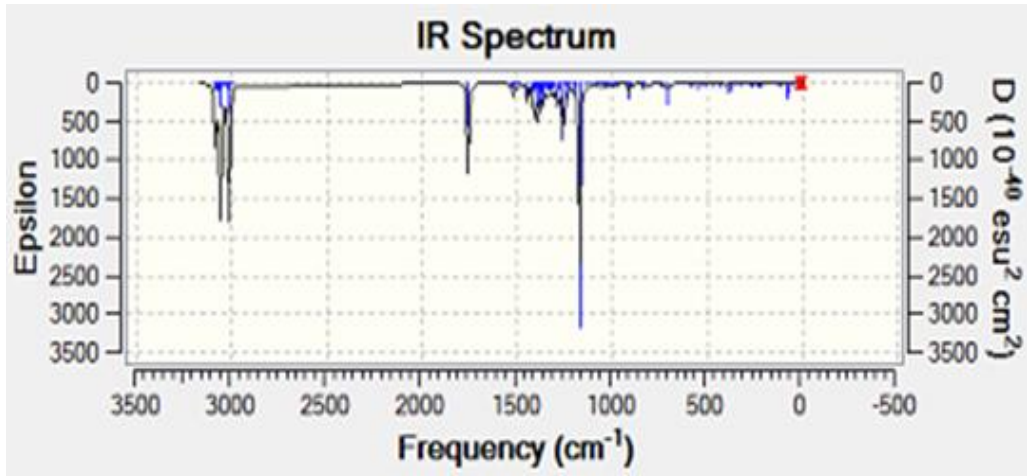


Şekil 4.138 (12) No'lu bileşiğin doking bağlanması

4.2.13. 1,3-Bistetradekanoilimidazolidin-2-tiyon (13) Analizi



Şekil 4.139 (13) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü



Şekil 4.140 (13) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu

Çizelge 4.69 (13) No'lu bileşiğin teorik IR analizi

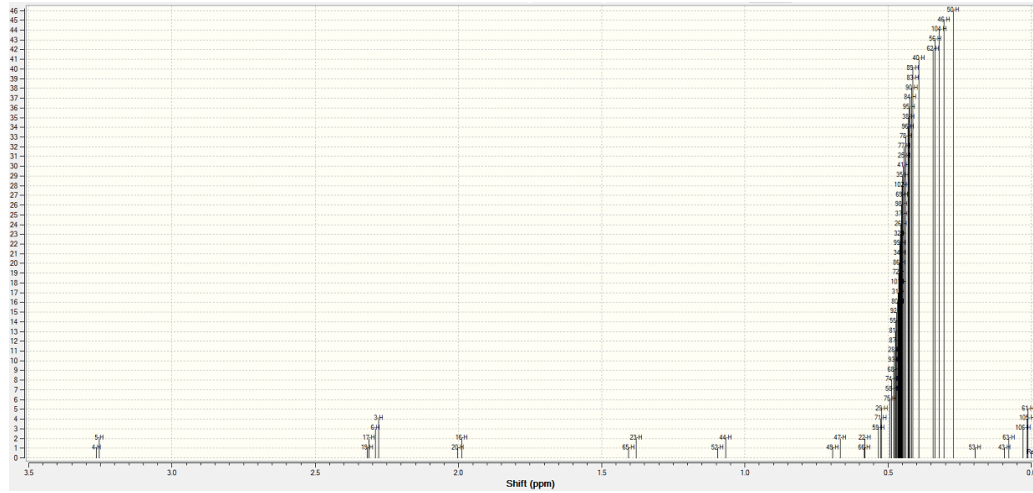
TED	B3LYP/6-311+ (d,p)
Titreşim Türü	
STRE CH	3147 (43)+3139 (51)
STRE CH	3057 (48) +3048 (45)
STRE CH	3057 (42)+3048 (50)
STRE CH	3147 (48)+3139 (46)
STRE CH	3086(30)+ 3066 (22)+3052(15)+3051 (23)
STRE CH	3086 (21)+3066 (18)+3052 (27)+3051 (22)
STRE CH	3085 (22)+3065 (22)+3050 (40)
STRE CH	3085 (27) +3065(20) +3050 (42)
STRE CH	3086 (13)+3066 (10)+3034 (56)
STRE CH	3086 (25)+3066 (31)+3034 (23)
STRE CH	3017 (14)+3000 (11)+2996 (13)
STRE CH	3017 (13)+3012 (10)+3000 (11)+2996 (13)
STRE CH	3040 (11)+3010(17) +3005 (10)+2996 (12)
STRE CH	3012 (20)+2996 (11)
STRE CH	3010 (21)+2995 (20)+2992 (12)
STRE CH	3012 (13) +3009 (11)+2995 (19)+2992 (11)
STRE CH	3010 (15)+3009(10)+2992 (19)
STRE CH	3009 (17)+2992 (20)
STRE CH	3040(11)+3012 (16)+3009 (11)+2992 (17)
STRE CH	3040 (12)+3009 (13)+2992 (16)
STRE CH	3028 (10)+3017 (15)+3012(12)+2995(17)+2992(12)
STRE CH	3058(10)+3010(12)+3005(17)+2995(14)+2992(14)
STRE CH	3005(21)+3000(11)+2997 (10)+2994(10)+2992(13)
STRE CH	3058 (23)+3022 (26)+3017 (14)
STRE CH	3022 (11)+3000 (10)+2997(20)
STRE CH	3028 (13) +3024 (17) +3022 (13)
STRE CH	3049 (13)+3024 (44)+2994 (15)
STRE CH	3049(11)+3024(15)+2997(19)+2996(20)+2994(17)
STRE CH	3081(10)+3049 (38)+3024 (22)
STRE CH	3049 (12)+3009 (59)+3009 (13)
STRE CH	3085(25)+3065 (28)+3036 (12)+3034 (17)
STRE CH	3085(14)+3065 (10)+3034 (51)
STRE CH	3020 (11)+3015 (11)+2996 (14)
STRE CH	3020 (11)+3015 (11)+3000(10)+2996 (14)
STRE CH	3011 (11)+2996 (13)+2994 (12)
STRE CH	3011 (11)+2996 (13)+2994 (11)
STRE CH	3011(10)+3009 (17)+2996 (10)+2993 (13)
STRE CH	3011(10)+3009 (15)+2996 (10)+2993 (12)
STRE CH	3009 (17)+2993(11)
STRE CH	3009 (19)+2993 (10)
STRE CH	3009 (10)+2992(17)
STRE CH	3009 (12)+2992 (19)
STRE CH	3009 (11)+2996 (17)+2991(17)
STRE CH	3009 (11)+2996 (17) +2991 (16)
STRE CH	3009 (12)+2992(14)
STRE CH	3009 (14)+2992 (16)
STRE CH	3009 (10)+2994 (13)
STRE CH	3009 (12) +2994 (13)
STRE CH	3009 (10)+2996 (13)+2993(15)+2991 (10)
STRE CH	2996(12)+ 2993(15)+2991(11)
STRE CH	3009 (15)+3005 (12)

STRE CH	3009(12)+3005(12)
STRE CH	3085 (73)+3019 (26)
STRE CH	3085 (12)+3080 (44)+3019(36)
STRE CH	3085(13)+3080 (44)+3019 (35)
STRE CH	3085(72)+3019 (25)
STRE CH	3085(17)+3081(35)+3019 (37)
STRE CH	3081 (47)+3019 (34)
STRE CH	1757 (28)+ 1754 (59)
STRE CH	1757 (59)+1754 (28)
STRE CH	1256 (11)+1199 (12)+912 (11)
STRE OC	1256 (14) +1199 (14)+912 (11)
STRE OC	1199 (10)+1171 (13)
STRE NC	1171 (14)
STRE NC	912 (12)
STRE NC	1256(11)+1077 (10)
STRE NC	1256 (13)+1077 (14)
STRE CC	1106 (14)
STRE NC	1069 (14)+1051(10)
STRE NC	1070 (12)+1069 (16)+996 (11)
STRE CC	1070 (21)+1010 (12)
STRE CC	1071 (10)+1070 (16)+991 (19)
STRE CC	1070 (14) +1069 (11)
STRE CC	1069 (16)+1051 (11)
STRE CC	1038 (12)+991(10)
STRE CC	1085(26)+962 (17)+852 (10)
STRE CC	1108 (13)
STRE CC	1045(18)+897 (18)
STRE CC	1038 (12)+1033(16)+1022 (12)
STRE CC	1085(28)+962 (10)+852 (10)
STRE CC	1085(18)+873(10)
STRE CC	1063 (20)+1045 (19)
STRE CC	1070 (16)+1031(17)
STRE CC	1070 (13)+981 (10)
STRE CC	1068 (11)+ 1063 (10)+ 991(20)
STRE CC	1068(19)+991(14)
STRE CC	1070(10)+1045(15)+981 (14)
STRE CC	1070 (12)+1031 (13) +991 (15)
STRE CC	981 (10)
STRE CC	1071 (10)
STRE CC	897 (30)
STRE SC	1039 (14)+585(10)+552 (15)
BEND HCN	1238 (27)+1122 (13)
BEND HCH	1530 (36)+1517 (36)
BEND HCC	1275(10)+1238(16)+1122 (14)
BEND HCH	1530 (46)+1517 (30)
BEND HCC	1139 (32)
BEND HCH	1448 (42)+1441 (32)
BEND HCC	1321(10)+1279 (10)+1138 (11)
BEND HCH	1448 (27) +1441 (45)
BEND HCC	1334 (15)+1325(19)
BEND HCH	1506(16)+1498 (17)+1491(17)
BEND HCC	1343 (10)+1334(10)+1331 (10)
BEND HCH	1513 (12)+1506 (11)+ 1491(12)+ 1488 (19)
BEND HCC	1341(17)+1339(10)
BEND HCH	1518(11)+1513(11)+1498(11)+1490(25)+1487(16)

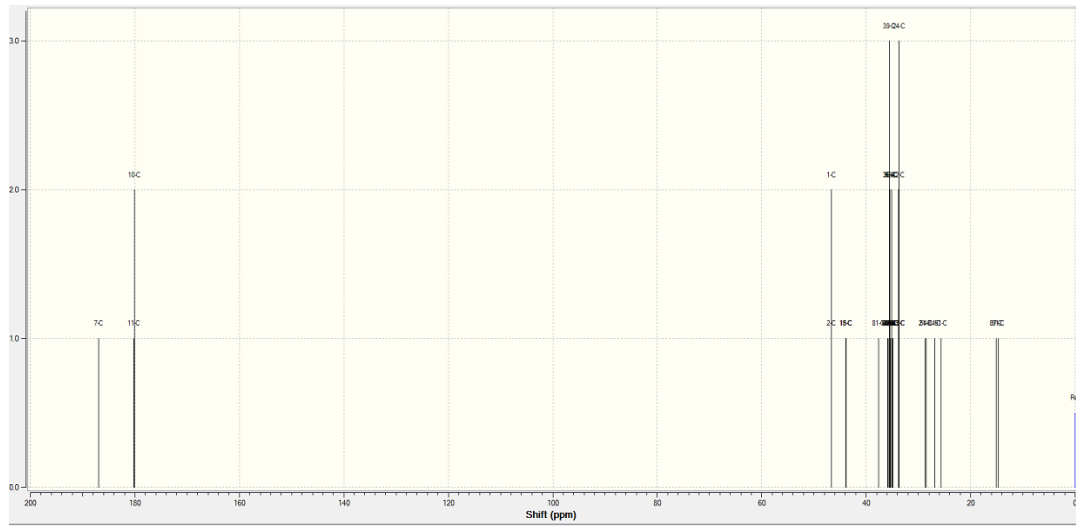
BEND HCC	1343(16)+1325 (11)
BEND HCH	1518(13)+1506(11)+1498(11)+1490(15)+1486(31)
BEND HCC	1343 (13)+1331 (12)
BEND HCH	1518 (14)+1506 (17)+1491(19)+1486(13)+1485(15)
BEND HCC	1341 (11)+1331 (20)
BEND HCH	1518(13)+1498 (16)+1490(12)+1485 (24)
BEND HCC	1343 (12)+1334 (18)
BEND HCH	1490(24)+1486 (22)
BEND HCC	1350 (13)
BEND HCH	1513 (13)+1506 (17)+1488(18)+1485(13)
BEND HCC	1350 (19)
BEND HCH	1506 (10)+1498(18)+1491(17)+1488(11)+1485(20)
BEND HCC	1339 (12)+1328 (10)
BEND HCH	1497 (14)+ 1488(12)+1487(32)
BEND HCC	1328 (21)
BEND HCH	1513(15)+1511(27)+1497(14)+1488(15)+1487(14)
BEND HCC	1330(14)+1321(12)
BEND HCH	1507(10)+1501(12)+1496(14)+1492(14)+1488(10)
BEND HCC	1338 (17)
BEND HCH	1516(10)+1512(12)+1491(13)+1488(19)
BEND HCC	1336 (14)
BEND HCH	1516(13)+1491(10)+1489 (27)+1486 (11)
BEND HCC	1344 (16)+1321 (11)
BEND HCH	1518 (10)+1516 (10)+1501(12)+1489(12)+1488(13) +1486 (16)
BEND HCC	1344 (18)+1327 (12)
BEND HCH	1518(12)+1507(12)+1491(11)+1486 (20)
BEND HCC	1344 (15)+1327 (15)
BEND HCH	1518 (13)+1512 (11)+1491(18)+1486 (31)
BEND HCC	1344 (12)
BEND HCH	1518(13)+1512(12)+1501(11)+1492(15)+ 1486 (12) +1486 (19)
BEND HCC	1344(13)+1338 (10)
BEND HCH	1518(12)+1507(10)+1496 (14)+1488 (17)+1486(21)
BEND HCC	1336 (16)+1327 (10)
BEND HCH	1518(10)+1516(10)+1507(11)+1489(19)+1486(19)
BEND HCC	1338 (13)+1330 (12)
BEND HCH	1516 (12)+1489(24)
BEND HCC	1338 (11)+1330(10)+1321(12)
BEND HCH	1516(14)+1512(15)+1496(10)+1492(22)+1488(13)
BEND HCH	1502 (36)+1416 (29)
BEND HCH	1502(40)+1416(30)
BEND HCH	1512(10)+1507(13)+1501(13)+1496(11)+1416(25)
BEND HCH	1501(38)+1416 (30)
BEND HCH	1501(38)+1416 (30)
BEND HCH	1511(18)+1497(27)+1416 (28)
BEND OCC	765 (16)+703 (15)
BEND OCC	765 (16)+703(15)+413(12)
BEND CNC	262 (12)+203 (11)
BEND CNC	276(11)+230(13)
BEND CCN	443 (10)
BEND CCC	503 (13)
BEND CCC	469 (18)
BEND CCC	503(16)+317(13)
BEND CCC	443 (11)

BEND CCC	373 (10)
BEND CCC	443(11)+393(11)
BEND CCC	537 (14)
BEND CCC	431(14)+358(11)
BEND CCC	272 (23)+262 (14)
BEND CCC	537(14)+317(14)
BEND CCC	537 (12)+272(16)
BEND CCC	337 (11)
BEND CCC	516 (10)
BEND CCC	501(11)+431(14)
BEND CCC	501(10)+337 (10)
BEND CCC	516 (15)
BEND CCC	501(20)+337 (10)
BEND CCC	516 (10)
BEND CCC	516 (11)
BEND CCC	431 (12)
BEND SCN	658 (10)+276 (24)+272(13)+262(15)
TORS HCNC	1388 (10)
TORS HCNC	1388 (10)+1122(16)
TORS HCNC	1388 (17) +1199 (11)
TORS HCCN	1138 (17)
TORS HCCN	1138 (10)
TORS HCCC	1139 (13)
TORS HCCC	732 (15)
TORS HCCC	732 (17)
TORS HCCC	1341(12)
TORS HCCC	732 (13)
TORS HCCC	735 (11)
TORS HCCC	1403 (10)+1343(10)
TORS HCCC	1403 (10)
TORS HCCC	1403 (13)
TORS HCCC	731(12)
TORS HCCC	731 (17)
TORS HCCC	1350 (10)
TORS HCCC	852 (10)
TORS HCCC	745 (15)
TORS HCCC	1138 (15)
TORS HCCC	733 (13)
TORS HCCC	1138 (10)
TORS HCCC	733 (13)
TORS HCCC	734 (10)
TORS HCCC	734 (12)
TORS HCCC	1405 (10)
TORS HCCC	734 (12)
TORS HCCC	1402 (11)
TORS HCCC	735 (11)
TORS HCCC	1502(14)+246 (44)
TORS HCCC	897 (14)+246 (22)
TORS HCCC	1501 (15)+852(15)+243(21)
TORS HCCC	1190 (10)
TORS HCCC	1143 (11)+ 243(16)
TORS CCNC	219 (16)+25 (13)
TORS CCNC	219 (16)+77 (11)
TORS CNCN	1238 (11)+1122(12)
TORS CNCN	1122 (10)

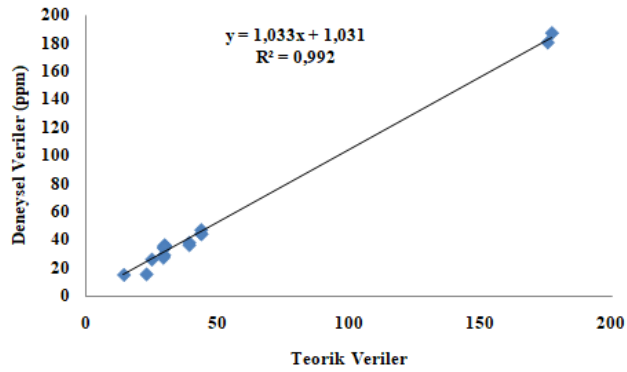
TORS CCCN	12 (25)
TORS CCCC	128(11)+89(17)+8 (12)
TORS CCCC	167 (16)+22 (10)+12(10)
TORS CCCC	163 (16)+128(13)+ 47 (11)+8 (12)
TORS CCCC	167 (18)+110 (10)+22 (11)
TORS CCCC	163 (24)+89 (16)+8 (12)
TORS CCCC	167 (13)+25(10)
TORS CCCC	163 (12)+134 (10)
TORS CCCC	148 (10)+56(15)
TORS CCCN	571(15)+8(10)
TORS CCCC	102 (13)+69 (11)
TORS CCCC	75(13)+68(17)
TORS CCCC	89 (11)+47(12)+41(10)
TORS CCCC	147 (10)+113 (18)+77(11)
TORS CCCC	158 (14)+69 (14)+41(11)
TORS CCCC	147 (17)
TORS CCCC	172 (14)+102 (11)+ 41 (11)
TORS CCCC	175 (15)+102 (10)
TORS CCCC	172 (16)
TORS CCCC	175 (18)
TORS CCCC	172 (11)+147 (16)
TORS CCCC	175 (13)+158 (17)+69 (19)
TORS CCCC	147 (11)+113(18)+77 (10)
OUT OCNC	585 (13)+571 (32)
OUT OCNC	585(22)+ 571 (20)+552 (12)
OUT SNNC	649 (67)
OUT CCCN	253(18)+128(15)+77(10)+68(13)
OUT CCCN	253(20)+219 (11)

Şekil 4.141 (13) No'lu bileşiğin teorik ¹H-NMR spektrumuÇizelge 4.70 (13) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ¹H-NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R ² değeri
3,6	3.98	4.03	
4,5	3.98	3.53	
17,19	3.25	3.14	
20,16	3.25	2.88	
22,56	1.26	1.22	
23,55	1.26	1.58	
44,47,49	1.26	1.43	
52	1.26	1.58	
53,43	1.26	1.02	
59,58,29, 63,65,26,61 , 25,77,71, 76,70,28,62 ,32,31,50, 83,37,82,38 ,35,34,86, 85,46,68,67 ,41,74,73, 80,40,79	1.26	1.22	
88,92	0.88	1.02	
89,90	0.88	0.82	
93,94	0.88	0.73	

Şekil 4.142 (13) No'lu bileşiğin teorik ^{13}C -NMR spektrumuÇizelge 4.71 (13) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ^{13}C -NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R^2 değeri
1,2	43.60	47	
7	177.24	187	
10,11	175.59	180	
15	43.60	44	
18	43.60	44	
21	29.36	29	
24,42,57	29.43	34	
27	29.66	35	
30,48	29.67	35	
33	29.67	35	
36,39,63	29.69	36	
51	24.77	26	
54	29.36	29	
60,66	26.62	35	
69	29.69	36	
72	29.51	35	
75	39.02	36	
78	29.51	35	
81	39.02	38	
84	29.14	27	
87	22.72	15	
91	14.14	14	



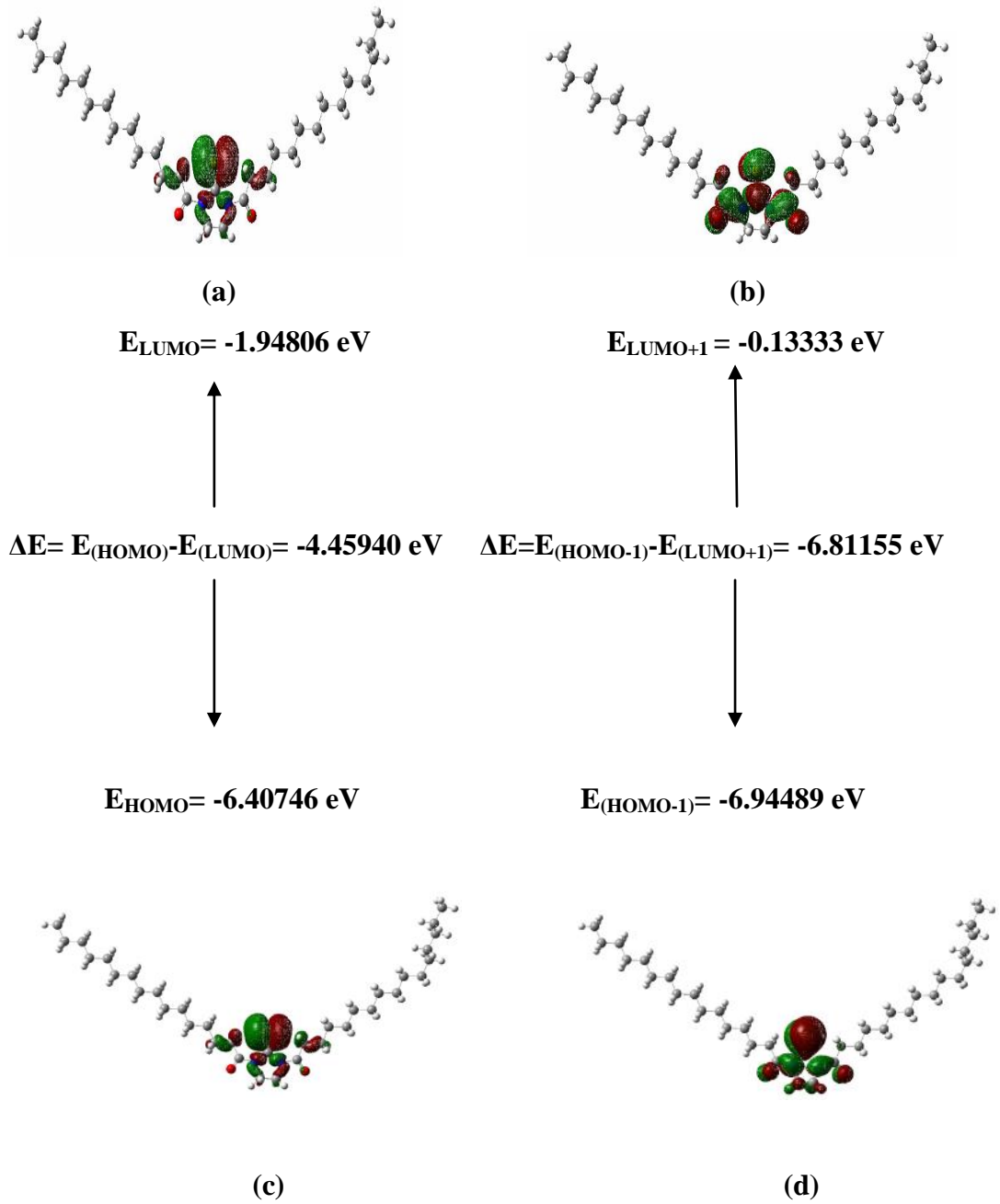
Çizelge 4.72 (13) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları

ATOM	Mulliken B3LYP/6-311+G(d,p)	NBO B3LYP/6-311+G(d,p)
1 C	-0.072714	-0.17268
2 C	-0.074503	-0.17266
3 H	0.156727	0.22281
4 H	0.146994	0.19837
5 H	0.147219	0.19838
6 H	0.156304	0.22265
7 C	0.254816	0.28345
8 N	-0.449869	-0.49117
9 N	-0.450965	-0.49075
10 C	0.421332	0.74608
11 C	0.421137	0.74633
12 O	-0.335878	-0.58779
13 O	-0.335665	-0.58742
14 S	-0.178358	-0.15360
15 C	-0.286340	-0.48225
16 H	0.161167	0.22889
17 H	0.173801	0.23959
18 C	-0.286499	-0.48230
19 H	0.172892	0.23901
20 H	0.162385	0.23003
21 C	-0.187650	-0.36671
22 H	0.111782	0.19312
23 H	0.120026	0.19994
24 C	-0.209583	-0.36593
25 H	0.102620	0.18323
26 H	0.103522	0.18386
27 C	-0.201530	-0.36419
28 H	0.102418	0.18348
29 H	0.103085	0.18397
30 C	-0.201519	-0.36481
31 H	0.101121	0.18261
32 H	0.101454	0.18268
33 C	-0.201337	-0.36459
34 H	0.101051	0.18263
35 H	0.101265	0.18268
36 C	-0.201268	-0.36473
37 H	0.100497	0.18234
38 H	0.100715	0.18234
39 C	-0.200190	-0.36406
40 H	0.100826	0.18268
41 H	0.100310	0.18152
42 C	-0.202066	-0.37214
43 H	0.099774	0.18190
44 H	0.105038	0.18352
45 C	-0.206974	-0.36489
46 H	0.100429	0.18193
47 H	0.102925	0.18776

48 C	-0.205112	-0.37048
49 H	0.101902	0.18662
50 H	0.099212	0.18085
51 C	-0.232236	-0.36369
52 H	0.106553	0.18220
53 H	0.101376	0.18048
54 C	-0.187521	-0.36696
55 H	0.119602	0.19971
56 H	0.112133	0.19350
57 C	-0.209240	-0.36594
58 H	0.103455	0.18380
59 H	0.102679	0.18332
60 C	-0.201857	-0.36417
61 H	0.103024	0.18391
62 H	0.102472	0.18349
63 C	-0.201183	-0.36483
64 H	0.101150	0.18264
65 H	0.101442	0.18271
66 C	-0.201518	-0.36460
67 H	0.101240	0.18267
68 H	0.101052	0.18258
69 C	-0.201061	-0.36463
70 H	0.100831	0.18243
71 H	0.100704	0.18240
72 C	-0.201395	-0.36463
73 H	0.100767	0.18239
74 H	0.100714	0.18237
75 C	-0.201007	-0.36474
76 H	0.100600	0.18231
77 H	0.100530	0.18229
78 C	-0.200100	-0.36555
79 H	0.100248	0.18191
80 H	0.100231	0.18190
81 C	-0.200995	-0.37120
82 H	0.099409	0.18113
83 H	0.099354	0.18110
84 C	-0.231523	-0.35675
85 H	0.101879	0.18066
86 H	0.101875	0.18065
87 C	-0.281259	-0.55428
88 H	0.106557	0.19131
89 H	0.102409	0.18479
90 H	0.102390	0.18478
91 C	-0.281184	-0.55368
92 H	0.106140	0.19112
93 H	0.102118	0.18405
94 H	0.102418	0.18496

Çizelge 4.73 (13) No'lu bileşiğin NBO analizi

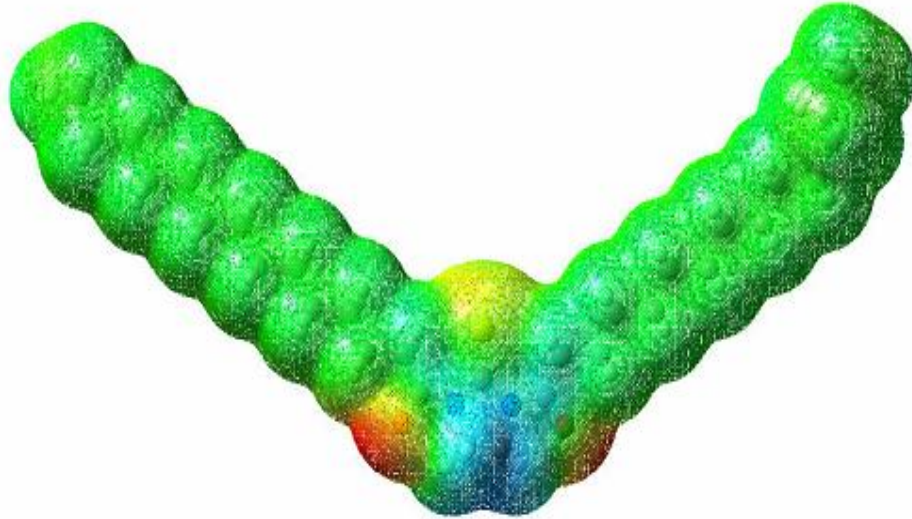
Donor NBO	Acceptor NBO	E (2) kcal/mol
BD (1) C ₁₅ - H ₁₇	BD*(2) C ₁₁ - O ₁₃	6.20
BD (1) C ₁₈ - H ₁₉	BD*(2) C ₁₀ - O ₁₂	6.06
CR (1) O ₁₂	RY*(1) C ₁₀	6.41
CR (1) O ₁₃	RY*(1) C ₁₁	6.41
LP (1) N ₈	BD*(2) C ₇ - S ₁₄	68.24
LP (1) N ₈	BD*(2) C ₁₁ - O ₁₃	41.09
LP (1) N ₉	BD*(2) C ₇ - S ₁₄	68.73
LP (1) N ₉	BD*(2) C ₁₀ - O ₁₂	41.23
LP (1) O ₁₂	RY*(1) C ₁₀	14.61
LP (2) O ₁₂	BD*(1) N ₉ - C ₁₀	27.98
LP (2) O ₁₂	BD*(1) C ₁₀ - C ₁₈	17.43
LP (1) O ₁₃	RY*(1) C ₁₁	14.62
LP (2) O ₁₃	BD*(1) N ₈ - C ₁₁	28.00
LP (2) O ₁₃	BD*(1) C ₁₁ - C ₁₃	17.44
LP (2) S ₁₄	BD*(1) C ₇ - N ₈	13.05
LP (2) S ₁₄	BD*(1) C ₇ - N ₉	13.07



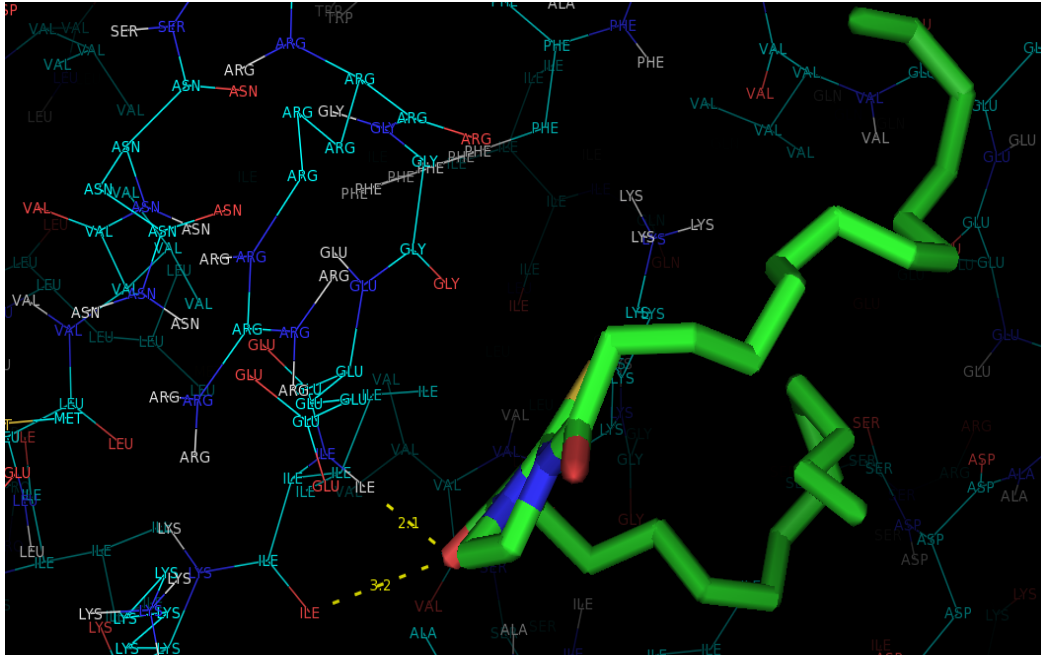
Şekil 4.143 (13) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı

Çizelge 4.74 (13) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri

HOMO	-0.20622
LUMO	-0.01708
HOMO-1	-0.21763
LUMO+1	-0.01016
$\Delta E_{(HOMO-LUMO)}$	-0.18914
$\Delta E_{(HOMO-1-LUMO+1)}$	-0.20747
Elektronegatiflik (χ)	0.11165
Kimyasal Sertlik	0.09457
Kimyasal Yumuşaklık	10.57418
Elektronik Kimyasal Potansiyel (Pi)	-0.11165
Global Elektrofillik (ω)	0.000589
Global Yumuşaklık (S)	0.047285
Elektronik Yük (ΔN_{max})	1.180607

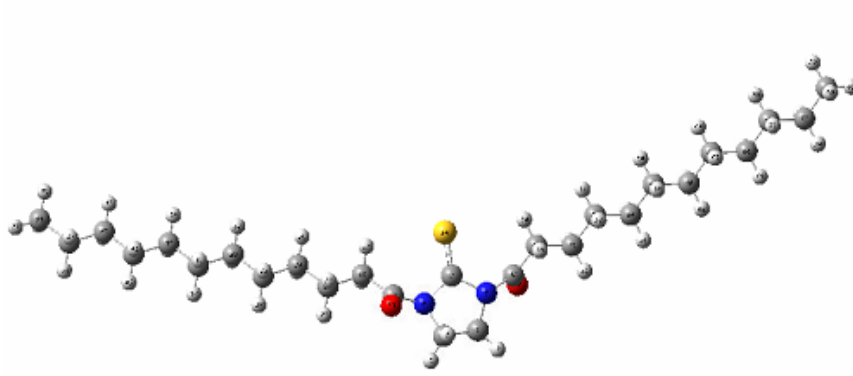
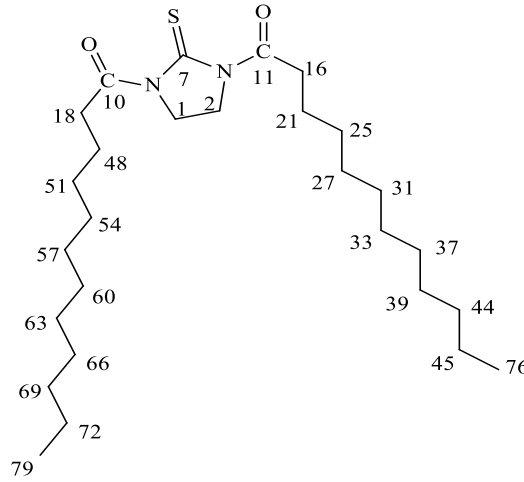


Şekil 4.144 (13) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu

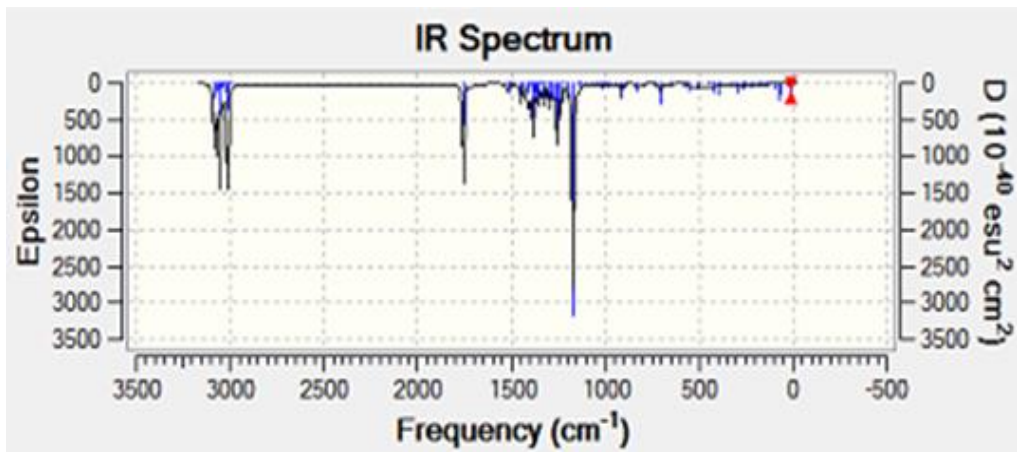


Şekil 4.145 (13) No'lu bileşiğin doking bağlanması

4.2.14. 1,3-Bisdodekanoilimidazolidin-2-tiyon (14) Analizi



Şekil 4.146 (14) No'lu bileşiğin Gauss View ile üç boyutlu görünümü



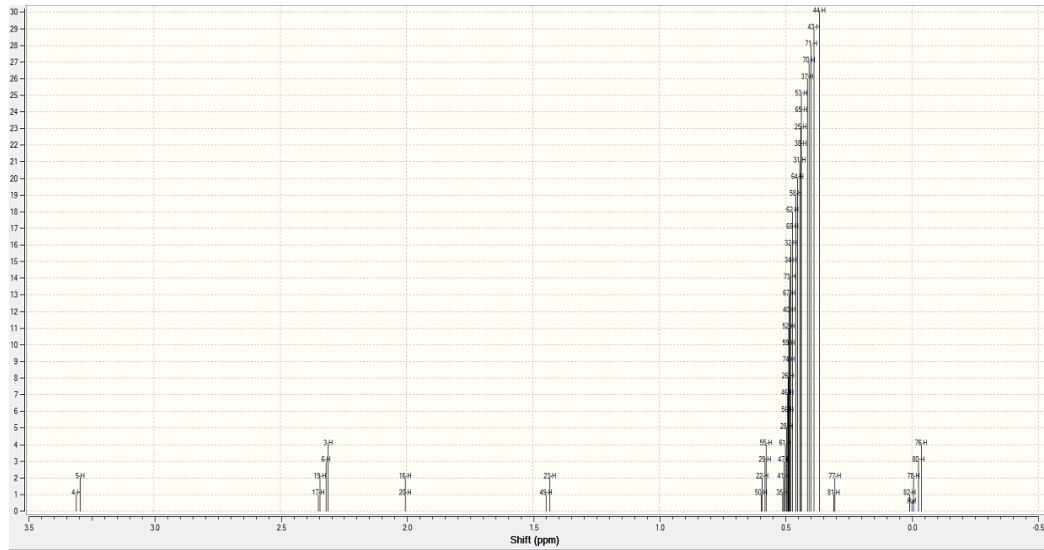
Şekil 4.147 (14) No'lu bileşiğin teorik IR spektrumu

Çizelge 4.75 (14) No'lu bileşiğin teorik IR analizi

TED	B3LYP/6-311+ (d,p)
Titreşim Türü	
STRE CH	3146 (45) +3139 (49)
STRE CH	3056 (45) +3048 (47)
STRE CH	3056 (45) +3048 (49)
STRE CH	3086 (14)+3085 (13)+3051 (25) +3050 (23)
STRE CH	3086(14)+3085(13)+3065(13)+3065(13)+3051(21) +3050 (20)
STRE CH	3086 (13)+3085(13)+3065(12)+3065(14)+3051(19) +3050 (21)
STRE CH	3086 (14)+3085 (14) +3051 (23) +3050 (25)
STRE CH	3034 (29)+3034 (26)
STRE CH	3086(13)+3085(13) +3065(16)+3065(15)+3034(14) +3034(12)
STRE CH	3020 (11) +2997(12)
STRE CH	2996 (10)
STRE CH	2992(14)
STRE CH	3010 (10)+ 2992 (13)
STRE CH	2992 (15)
STRE CH	2992 (22)
STRE CH	2992 (10)
STRE CH	2992 (16)
STRE CH	3008 (11)+3008(11)
STRE CH	3086(13)+3085(14)+3065(15)+306(15)+3034(12) +3034 (14)
STRE CH	3034 (26)+3034 (29)
STRE CH	3020 (11)+2997(11)
STRE CH	3020 (11)+2997 (1)
STRE CH	2996 (10)
STRE CH	2992 (20)
STRE CH	3008(11)+3008(11)
STRE CH	3080 (22) +3080 (21)+3019 (18)+3019(16)
STRE CH	3085 (35)+ 3085(38)+3019(14)+3019 (12)
STRE CH	3080 (23)+3080(21)+3019 (19)+3019 (17)
STRE CH	3080 (21)+3080 (22)+3019 (16)+3019 (18)
STRE CH	3085(38)+3085(35)+ 3019 (12)+ 3019 (14)
STRE CH	3080 (21)+3080 (23)+3019 (17)+3019 (19)
STRE OC	1757 (44)+ 1755 (44)
STRE OC	1757 (44)+1755 (43)
STRE NC	1256(12)+1199 (14)+913(11)
STRE NC	1256 (13)+1199 (12)+913 (11)
STRE NC	1171 (14)
STRE CC	969 (12)+913 (11)
STRE NC	1256 (14)+1073 (11)+1012 (10)
STRE NC	1256 (14) +1073 (11)
STRE CC	1067 (12)
STRE CC	1069(13) +987 (11)
STRE CC	1069 (17)+1002(11)
STRE CC	1069 (13)+1049 (10)
STRE CC	1070 (10)
STRE CC	897 (15)+ 897 (15)
STRE CC	1067 (12)
STRE CC	1067 (10)

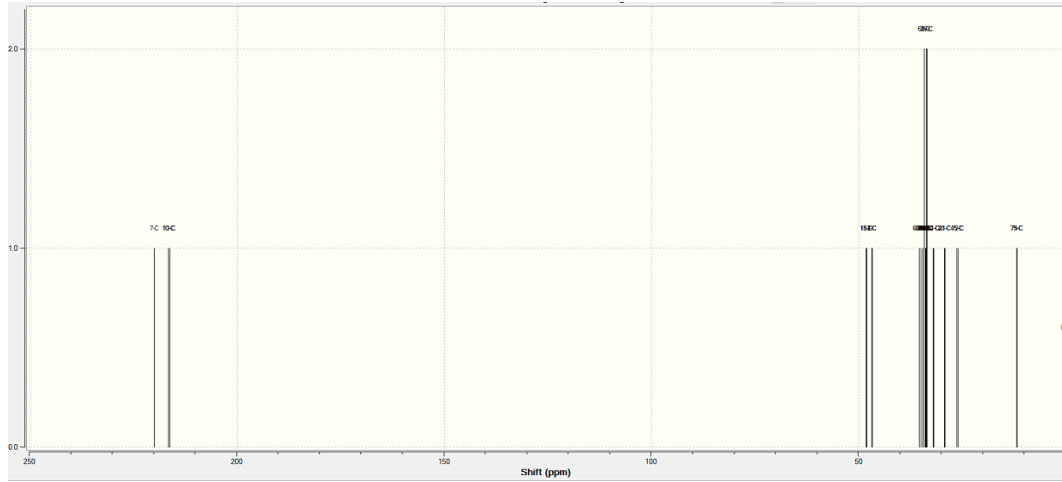
STRE CC	1069 (14)+ 987 (11)
STRE CC	1069 (10)+1069 (15)+1002 (11)
STRE CC	1049 (10)
STRE CC	1026 (12)+1024(12)
STRE SC	1039 (20)+585(10)+553 (15)
BEND HCC	1039 (11)
BEND HCH	1529 (41)+1517 (40)
BEND HCC	1281 (21)+1238 (16)+1121 (13)
BEND HCN	1281 (16) +1238 (27)+1121 (16)
BEND HCH	1529 (42)+1517 (39)
BEND HCH	1448 (34)+1441 (38)
BEND HCH	1448 (34)+1441 (39)
BEND HCC	1333 (11)
BEND HCH	1503 (10)+1497 (11)+1492 (10)
BEND HCH	1489 (10)+1488(19)+1486 (12)
BEND HCC	1336 (10)
BEND HCH	1514 (10)+1490 (10)+1490(19)+1486 (16)
BEND HCC	1343 (23)
BEND HCH	1518(11)+1503(10)+1490(12)+1486(17)+1486(11)
BEND HCH	1518 (13)+1492 (15)+1486 (28)
BEND HCH	1518 (13)+1509 (10)+1497 (11)+1486 (27)
BEND HCC	1343 (12)+1333 (10)
BEND HCH	1518 (11)+1503(10)+1490(16)+1486 (20)
BEND HCC	1336 (12)
BEND HCH	1489(10)+1488 (18)+1486 (14)
BEND HCH	1514 (13)+1492 (16)
BEND HCH	1503 (10)+1497 (11)+1492(10)
BEND HCH	1489 (19)+1488 (10)+1486 (12)
BEND HCC	1336 (10)
BEND HCH	1514 (10)+1490 (19)+1490(10)+1486 (16)
BEND HCC	1343 (23)
BEND HCH	1518 (11)+1503 (10)+1490(12)+1486 (17)+1486(11)
BEND HCH	1518 (13)+1492 (15)+1486 (28)
BEND HCH	1518 (13)+1509 (10)+1497 (11)+1486 (27)
BEND HCC	1343 (12)+1333(11)+1333 (11)
BEND HCH	1518 (11)+1503(10)+1490 (15)+1486 (20)
BEND HCC	1336 (12)
BEND HCH	1489 (19)+1488 (10)+1486 (14)
BEND HCH	1514 (13)+1492(16)
BEND HCH	1503 (11)+1416 (12)+1416 (12)
BEND HCH	1502 (27)+1502 (13)+1416 (15)+1416(14)
BEND HCH	1502 (25)+1502 (12)+1416 (15)+1416 (15)
BEND HCH	1503 (11)+1416 (12)+1416(12)
BEND HCH	1502(13)+1502 (27)+1416 (15)+1416 (15)
BEND HCH	1502 (12)+1502(25)+1416 (15)+1416(15)
BEND OCC	765(16) +703 (15)
BEND OCC	765(16)+703(15)
BEND NCN	969(19)
BEND CNC	392(10)+266 (11)+185 (10)
BEND CCN	451 (12)
BEND CNC	1039 (14)
BEND CCC	419 (10)
BEND CCC	500 (10)
BEND CCC	499 (10)
BEND CCC	419 (11)

BEND SCN	657 (10)+266 (48)
TORS HCNC	1388 (13)+1199(10)
TORS HCNC	1121(15)
TORS HCNC	1388(11)
TORS HCNC	732 (11)
TORS HCCC	733(10)
TORS HCCC	733(15)
TORS HCCC	733(10)
TORS HCCC	732(10)
TORS HCCC	247(22)
TORS HCCC	1502 (10)+247(45)
TORS HCCC	247 (22)
TORS HCCC	1502(10)+247 (45)
TORS CCNC	219 (15)+ 30 (10)+12 (10)
TORS CNCN	1121 (10)+8 (11)
TORS CNCN	1238 (10)+1121 (12) +8 (10)
TORS CCCN	571 (11)+8 (13)
TORS CCCC	95 (10)
TORS CCCC	37 (12)
TORS CCCC	113(10)+37 (10)
TORS CCCC	52 (10)
TORS CCCN	571 (11)+8 (13)
TORS CCCC	95 (10)+38 (11)
TORS CCCC	38 (10)
TORS CCCC	114 (10)
TORS CCCC	52 (10)
OUT OCNC	585 (18)+571 (25)+553(11)
OUT SNNC	649 (69)
OUT CCCN	250 (19)+132 (10)+76 (11)
OUT CCCN	250 (21)+219 (10)

Şekil 4.148 (14) No'lu bileşiğin teorik ^1H -NMR spektrumu

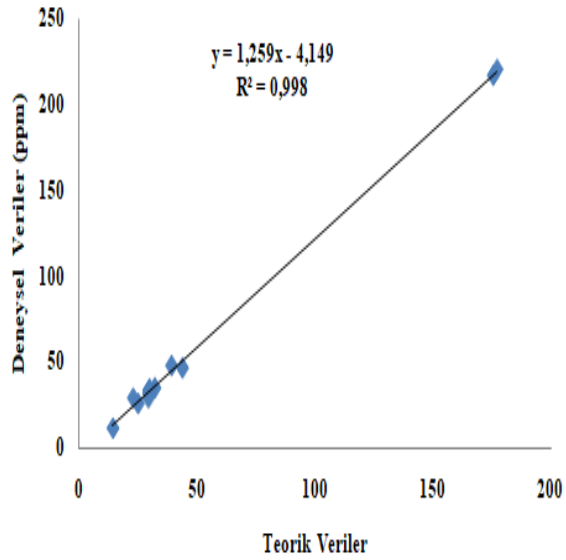
Çizelge 4.76 (14) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ^1H -NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R^2 değeri
3,6	3.97	2.32	
4,5	3.97	3.29	
16,20	3.25	2.00	
17,19	3.25	2.32	
22,50	1.69	0.58	
23,49	1.69	1.43	
29,55	1.27	0.58	
35,41,47,61,28	1.27	0.46	
56,46,26,59,74			
52,40,67,73,34			
32,68,62,58,64			
31,38,25,65,53	0.87	-0.01	
37,70,71,43,44			
76,78,80,82	0.87	-0.01	
77,81	0.87	0.30	

Şekil 4.149 (14) No'lu bileşiğin teorik ^{13}C -NMR spektrumu

Çizelge 4.77 (14) No'lu bileşiğin deneysel, teorik ^{13}C -NMR verileri ve regresyon analizi

Atom No	Deneysel	Teorik	Regresyon grafiği ve R^2 değeri
1,2	43.58	47	
7	177.24	220	
10	175.59	217	
11	175.59	216	
15	38.97	48	
18	38.97	48	
21	29.13	29	
24	29.35	32	
27	29.50	33	
30	29.42	34	
33	29.62	34	
36	29.42	34	
39	29.62	34	
42	31.87	35	
45	24.72	26	
48	22.65	29	
51	29.13	32	
54	29.35	33	
57	29.50	34	
60	29.42	34	
63	29.62	34	
66	29.62	34	
69	31.87	35	
72	24.72	26	
75	14.10	12	
79	14.10	12	



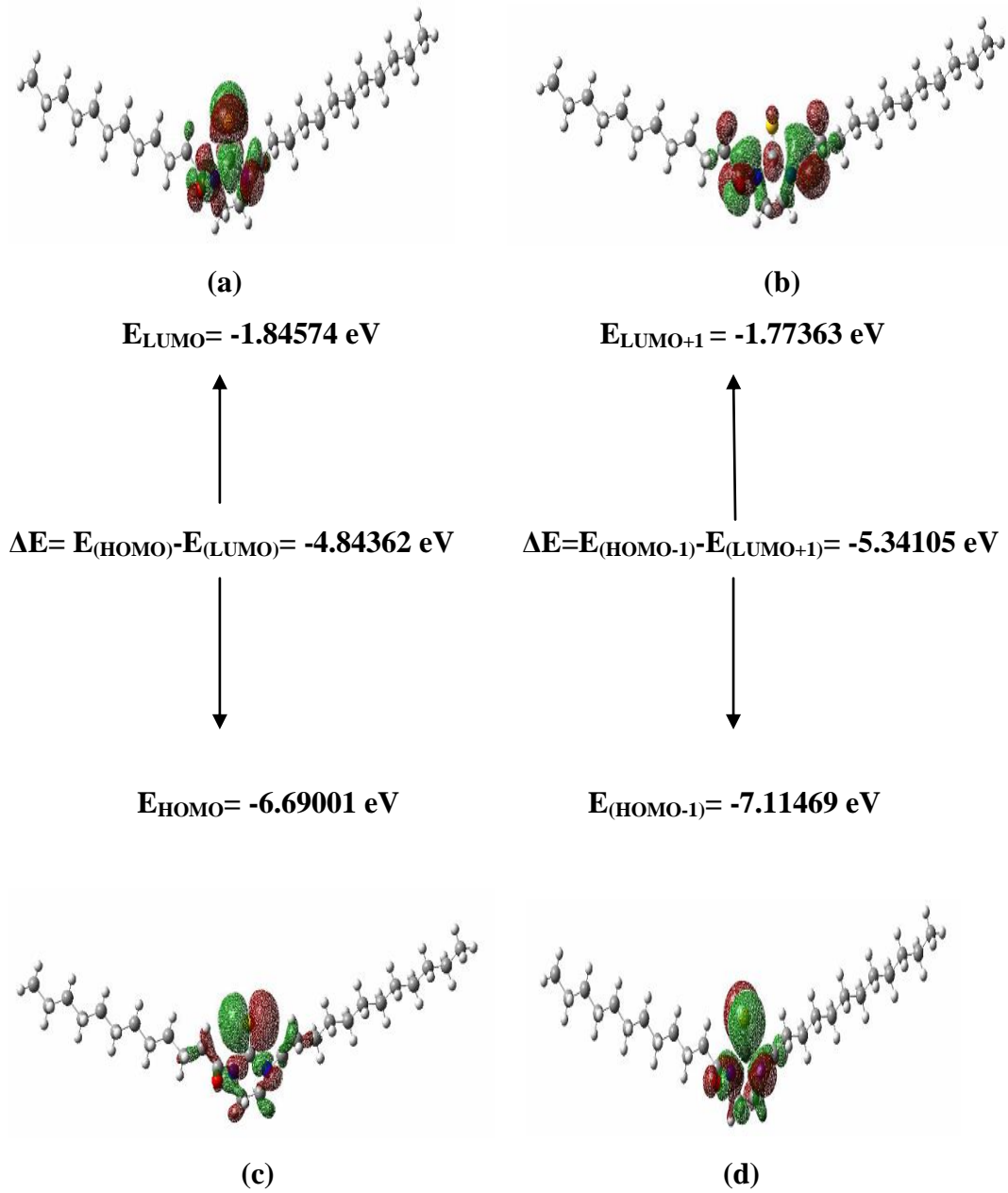
Çizelge 4.78 (14) No'lu bileşiğin Mulliken ve NBO metotları ile hesaplanan yük dağılımları

ATOM	Mulliken B3LYP/6-311+G(d,p)	NBO B3LYP/6-311+G(d,p)
1 C	-0.100863	-0.17245
2 C	-0.101576	-0.17246
3 H	0.131552	0.20211
4 H	0.155150	0.19836
5 H	0.154952	0.19810
6 H	0.131738	0.20238
7 C	0.104748	0.24705
8 N	-0.340557	-0.56045
9 N	-0.340964	-0.56091
10 C	0.308101	0.77649
11 C	0.308024	0.77655
12 O	-0.311503	-0.56134
13 O	-0.312426	-0.56145
14 S	-0.125703	-0.06471
15 C	-0.186295	-0.46273
16 H	0.133335	0.20757
17 H	0.175770	0.23880
18 C	-0.185808	-0.46236
19 H	0.175424	0.23876
20 H	0.133191	0.20767
21 C	-0.205597	-0.35262
22 H	0.109955	0.18418
23 H	0.132020	0.20055
24 C	-0.217058	-0.35908
25 H	0.105198	0.17910
26 H	0.108349	0.18101
27 C	-0.205475	-0.35607
28 H	0.105496	0.18000
29 H	0.108073	0.18104
30 C	-0.208766	-0.35676
31 H	0.104481	0.17901
32 H	0.105547	0.17939
33 C	-0.205761	-0.35684
34 H	0.104007	0.17897
35 H	0.104924	0.17927
36 C	-0.207873	-0.35697
37 H	0.103903	0.17833
38 H	0.104343	0.17844
39 C	-0.204442	-0.35762
40 H	0.103524	0.17855
41 H	0.103936	0.17864
42 C	-0.208918	-0.36172
43 H	0.103570	0.17908
44 H	0.103350	0.17902
45 C	-0.229901	-0.35013
46 H	0.105691	0.17845
47 H	0.105831	0.17852

48 C	-0.206613	-0.35273
49 H	0.132234	0.20069
50 H	0.110091	0.18431
51 C	-0.216163	-0.35919
52 H	0.108190	0.18097
53 H	0.105151	0.17912
54 C	-0.206024	-0.35607
55 H	0.108152	0.18104
56 H	0.105588	0.18004
57 C	-0.208617	-0.35681
58 H	0.104483	0.17903
59 H	0.105506	0.17937
60 C	-0.205768	-0.35686
61 H	0.104980	0.17926
62 H	0.104021	0.17901
63 C	-0.208268	-0.35697
64 H	0.104366	0.17838
65 H	0.103959	0.17836
66 C	-0.203967	-0.35766
67 H	0.103956	0.17862
68 H	0.103524	0.17862
69 C	-0.209525	-0.36168
70 H	0.103603	0.17899
71 H	0.103398	0.17902
72 C	-0.229533	-0.35017
73 H	0.105898	0.17855
74 H	0.105630	0.17851
75 C	-0.285287	-0.55471
76 H	0.100273	0.18276
77 H	0.103045	0.18784
78 H	0.100550	0.18288
79 C	-0.285548	-0.55475
80 H	0.100353	0.18279
81 H	0.103077	0.18785
82 H	0.100583	0.18290

Çizelge 4.79 (14) No'lu bileşiğin NBO analizi

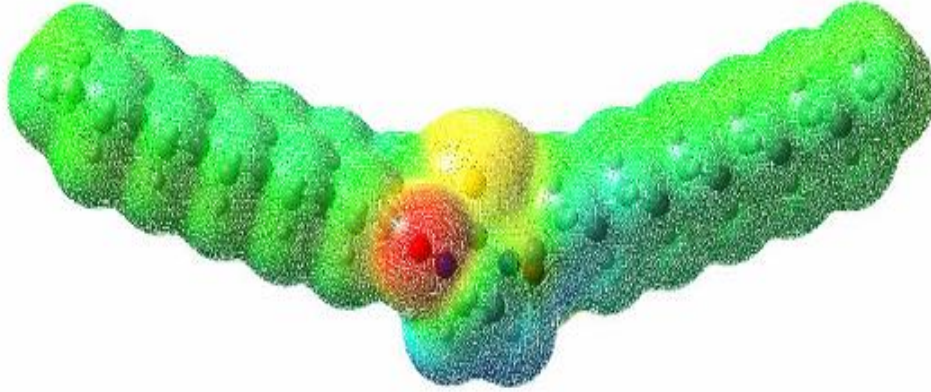
Donor NBO	Acceptor NBO	E (2) kcal/mol
BD (1) C ₁₅ - H ₁₇	BD*(2) C ₁₁ - O ₁₃	6.80
BD (1) C ₁₈ - H ₁₉	BD*(2) C ₁₀ - O ₁₂	6.82
CR (1) O ₁₂	RY*(1) C ₁₀	6.48
CR (1) O ₁₃	RY*(1) C ₁₁	6.47
CR (2) S ₁₄	RY*(2) C ₇	6.24
LP (1) N ₈	BD*(1) C ₇ - S ₁₄	25.72
LP (1) N ₈	BD*(1) C ₁₁ - O ₁₃	6.83
LP (1) N ₉	BD*(1) C ₇ - S ₁₄	25.33
LP (1) N ₉	BD*(1) C ₁₀ - O ₁₂	6.89
LP (1) O ₁₂	RY*(1) C ₁₀	14.97
LP (2) O ₁₂	BD*(1) N ₉ - C ₁₀	25.38
LP (2) O ₁₂	BD*(1) C ₁₀ - C ₁₈	14.37
LP (1) O ₁₃	RY*(1) C ₁₁	14.97
LP (2) O ₁₃	BD*(1) N ₈ - C ₁₁	25.44
LP (2) O ₁₃	BD*(1) C ₁₁ - C ₁₅	14.37
LP (1) S ₁₄	RY*(2) C ₇	10.01
LP (2) S ₁₄	BD*(1) C ₇ - N ₈	17.11
LP (2) S ₁₄	BD*(1) C ₇ - N ₉	17.11



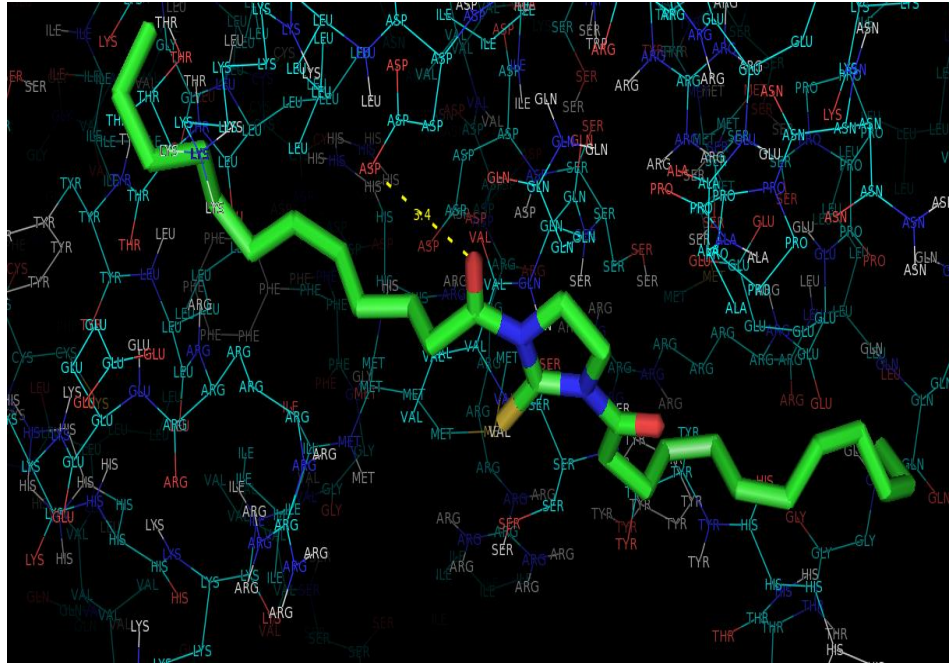
Şekil 4.150 (14) No'lu bileşiğin HOMO-LUMO enerji düzeyleri ve enerji hesabı

Çizelge 4.80 (14) No'lu bileşiğin hesaplanan moleküler parametreleri

HOMO	-0.20605
LUMO	-0.01696
HOMO-1	-0.21691
LUMO+1	-0.01018
$\Delta E_{(HOMO-LUMO)}$	-0.18909
$\Delta E_{(HOMO-1-LUMO+1)}$	-0.20673
Elektronegatiflik (χ)	0.111505
Kimyasal Sertlik	0.094545
Kimyasal Yumuşaklık	10.57697
Elektronik Kimyasal Potansiyel (Pi)	-0.11151
Global Elektrofillik (ω)	0.000588
Global Yumuşaklık (S)	0.047273
Elektronik Yük (ΔN_{max})	1.179385



Şekil 4.151 (14) No'lu bileşiğin elektron yük yoğunluğu



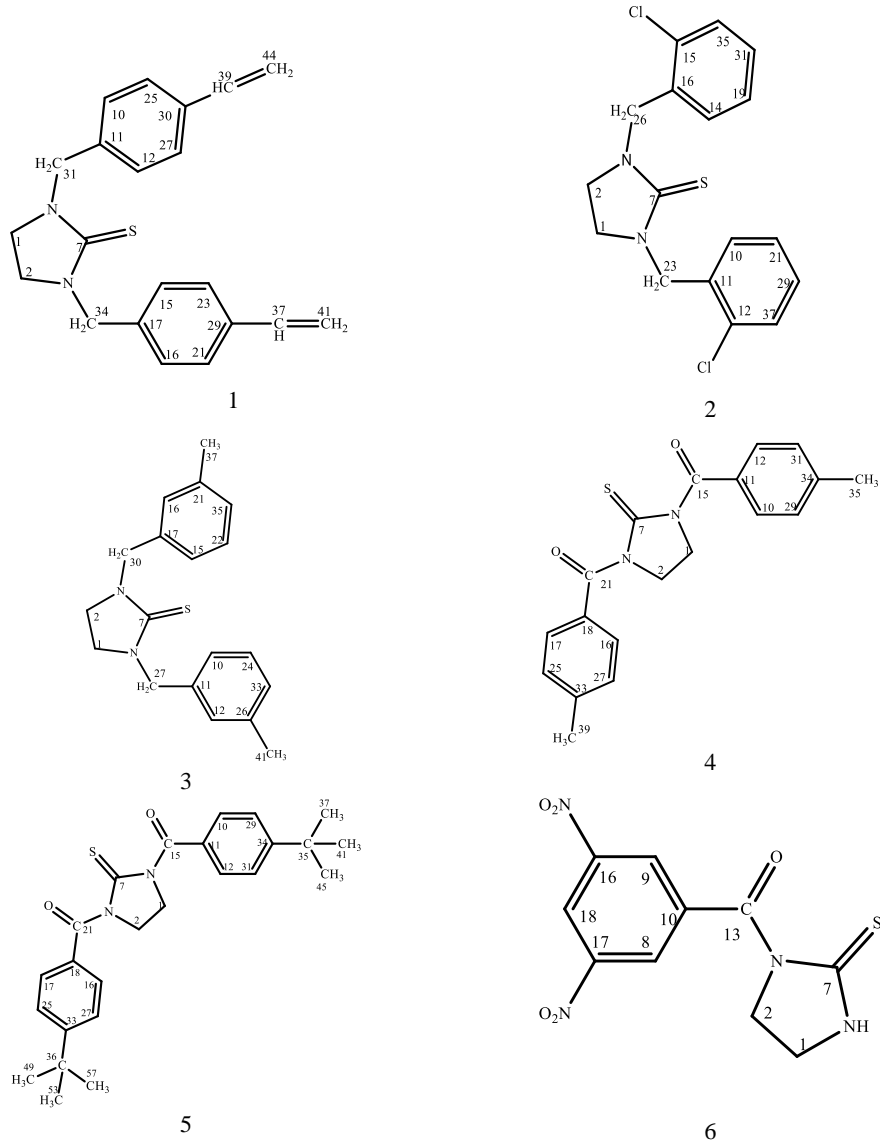
Şekil 4.152 (14) No'lu bileşiğin doking bağlanması

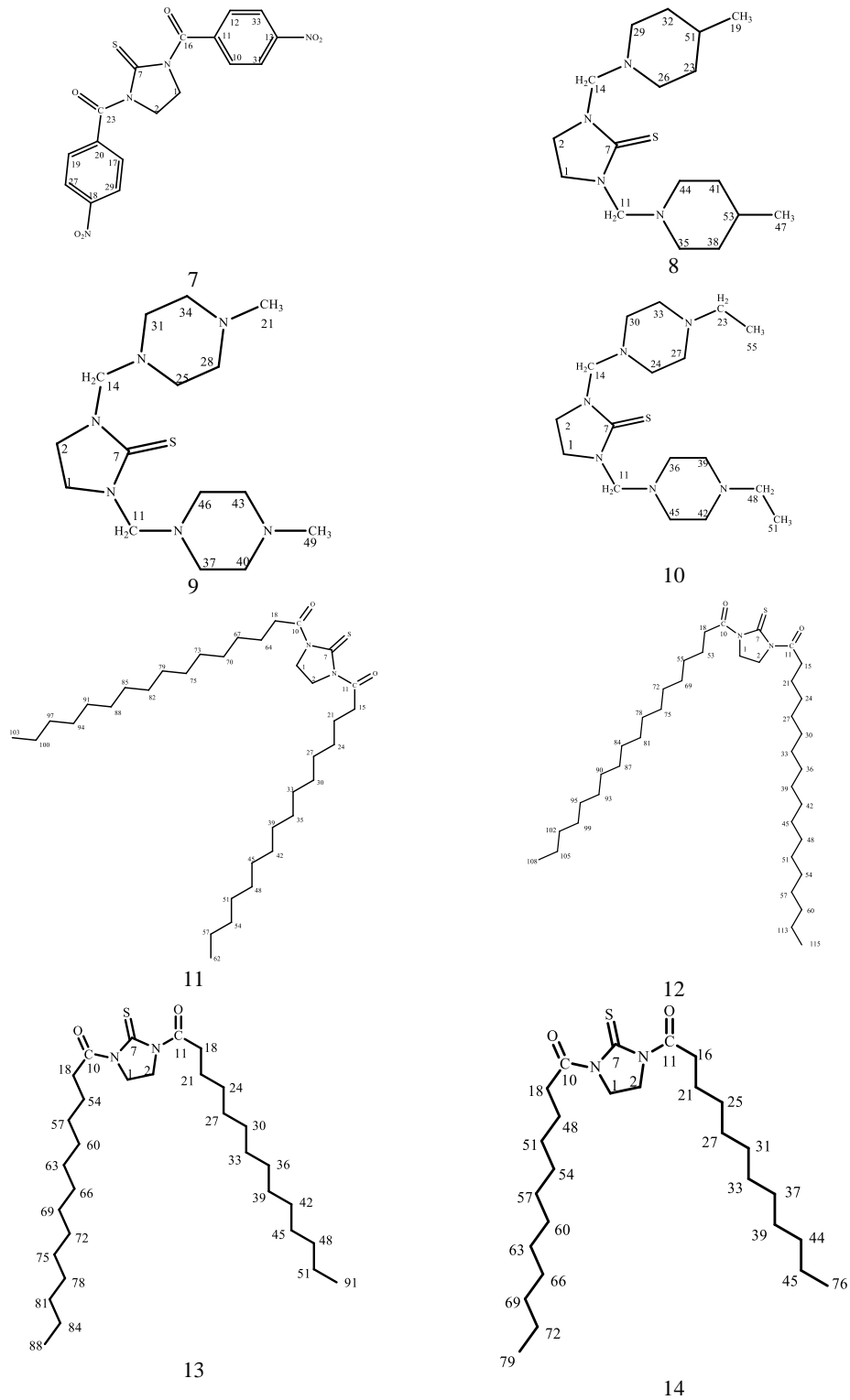
Çizelge 4.81 Bileşiklerin 1S9J proteinine doking bağlanma afinite değerleri

Bileşik	Bağlanma Afinitesi	Bağlanma Noktaları	H Bağı Sayısı
1	Doking bağlanması bulunmamaktadır.	-	-
2	Doking bağlanması bulunmamaktadır.	-	-
3	Doking bağlanması bulunmamaktadır.	-	-
4	6.5	TYR, ARG	2
5	6.7	TYR, PHE	2
6	7.1	ARG,ASN,TYR,HIS,VAL,LEU	7
7	6.5	GLU, ILE, ARG	3
8	5.0	GLU	1
9	4.9	ASP	1
10	4.6	GLU	1
11	4.8	GLU	1
12	4.6	GLY	1
13	4.5	ILE	2
14	4.3	ASP	1

4.3. Tartışma

Yapılan bu çalışmada Şekil 4.153' de verilen 1-14 nolu maddeler sentezlenerek deneysel ve teorik hesaplamaları yapılmıştır.





Şekil 4.153 Teorik hesaplamaları yapılan moleküller

Sentezlenen bu bileşiklerin 18. 04. 2018 tarihinde Sci Finder ile en son literatür taraması yapıldı. Bu çalışmayla birlikte 1, 2, 3, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14 nolu bileşikler literatüre kazandırılırken, 4 ve 5 nolu bileşikler ise 2009 yılın da S. Cesarini, ve grubu tarafından sentezlenmiştir. [30].

Sentezlenen bileşiklerin; FT-IR, ¹H-NMR, ¹³C-NMR analizleri yapıldı, erime noktaları tespit edildi.

Ayrıca sentezlenen maddelerin teorik hesaplamaları Gaussian 09 paket programında DFT yöntemi ve 6-311+G(d,p) baz seti kullanılarak yapılmıştır. Elde edilen veriler ve karşılaştırmalar bulgular kısmında ayrıntılı olarak verilmiştir.

Teorik FT-IR hesaplamaları yapılırken; 5, 9, 10 ve 11 nolu bileşiklerde VEDA programının hata vermesi sonucu teorik FT-IR analizi yapılamamıştır.

¹H-NMR sonuçlarına göre, İmidazolidin halka protonlarının bileşiklerde genel olarak 3,6 ile 4 ppm aralığında singlet çıkması kimyasal ve manyetik olarak eşdeğer olduklarını, imidazol halkası üzerindeki iki N grubunun da tepkimeye girdiğinin en büyük kanıtıdır.

Buna ek olarak ayrıca benzil türevlerinde;

- Benzilik CH₂ pikinin singlet olarak yaklaşık 4.8 ppm de gözlemlenmesi aromatik protonların 7 ppm civarında gözlemlenmesi

Benzoil türevlerinde;

- Aromatik piklerin 7-8 ppm aralığında çıkması

Mannich türevlerinde;

- piperidin ve piperazin halka protonlarının 2,5 ppm civarında çıkması piperidin ve piperazin halkasına bağlı alkil gruplarının 2,2 ppm de çıkması

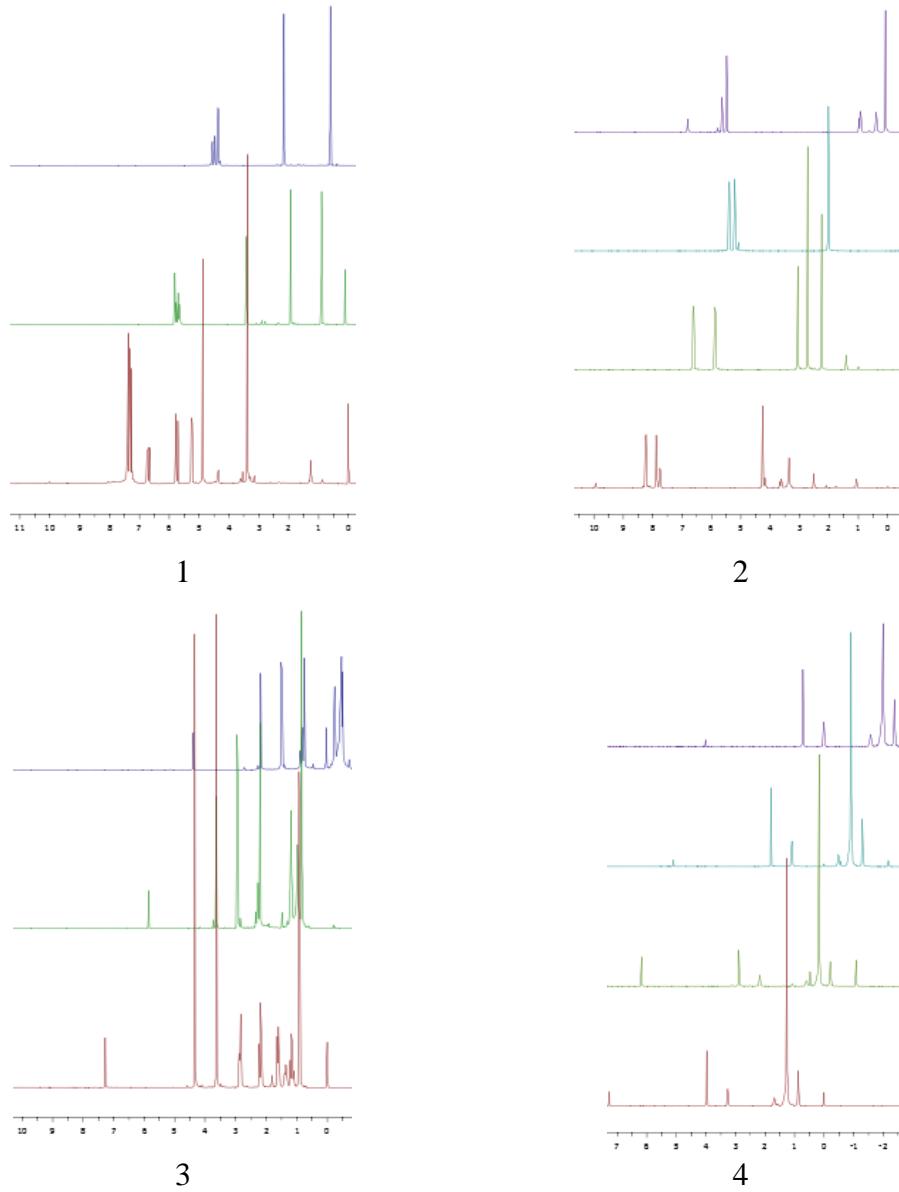
Yağ asidi türevlerinde;

- Alkil guruplarının 3-0,8 ppm aralığında çoklu pikler olarak gözlemlenmesi

NMR' da 7 ve 9 nolu bileşikler hariç N-H protonunun olmaması da yapıların olduğunu kanıtlamaktadır.

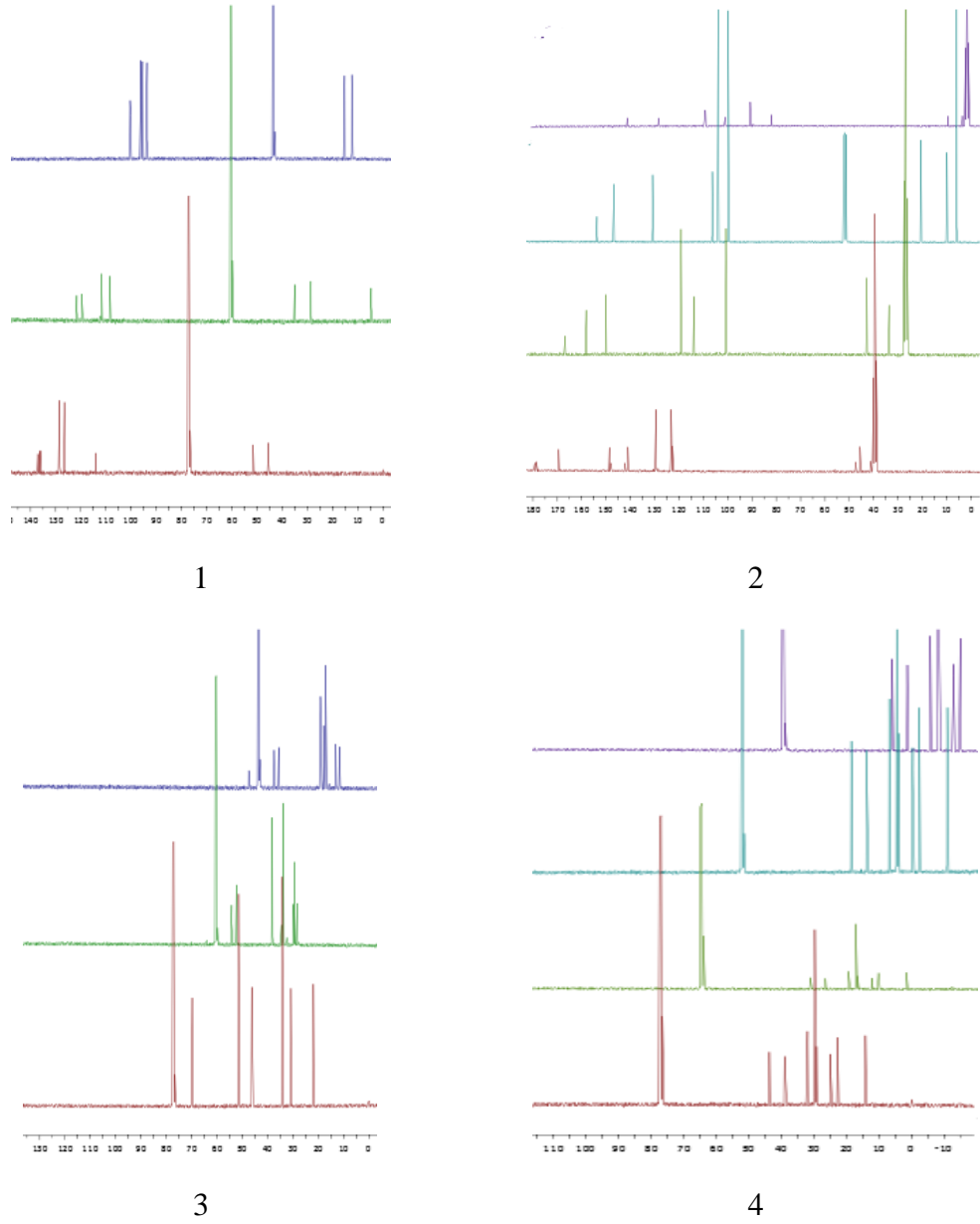
Elde edilen bileşiklerin ¹³C-NMR spektrumunda genel olarak 40 ppm civarında imidazolin karbonları ile 180 ppm'de C=S pikinin gözlenmesi; benzil türevlerinde 50 ppm de benzilik CH₂ pikinin gözlemlenmesi ve 120 ppm de aromatik piklerin gözlemlenmesi;

- benzoil türevlerinde 170 ppm de C=O, 110-160 ppm aralığında aromatik piklerin gözlemlenmesi;
- alkil türevlerinde 40-50 ppm aralığında alifatik karbonların gözlemlenmesi imidazolin halkasına bağlanmayı göstermektedir.



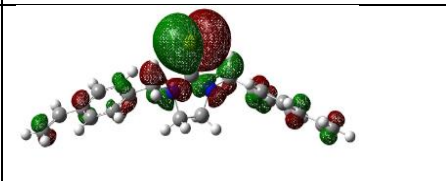
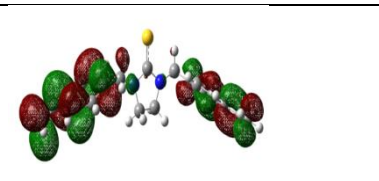
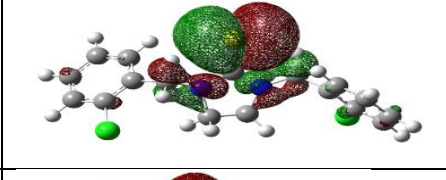
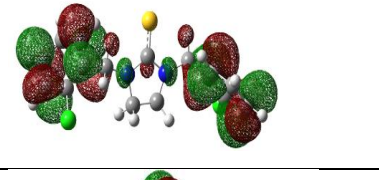
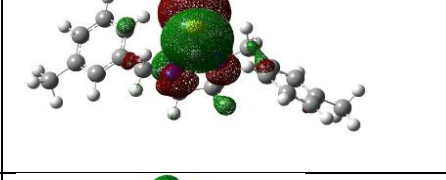
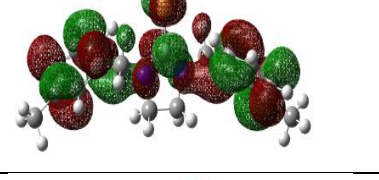
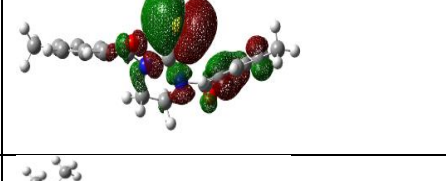
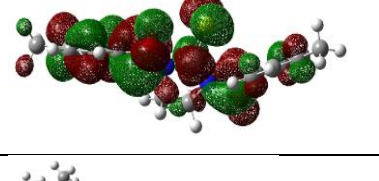
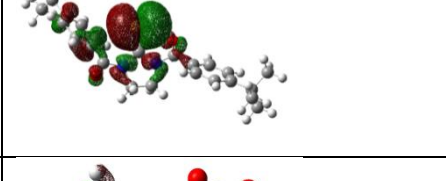
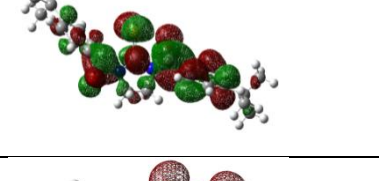
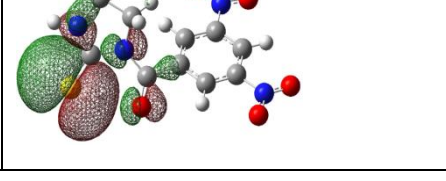
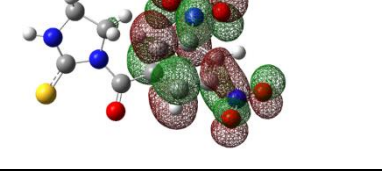
- 1- Benzil grubu ,2- Benzoil grubu, 3- Mannich grubu,
4- Yağ Asitleri grubu bileşikleri temsil etmektedir.

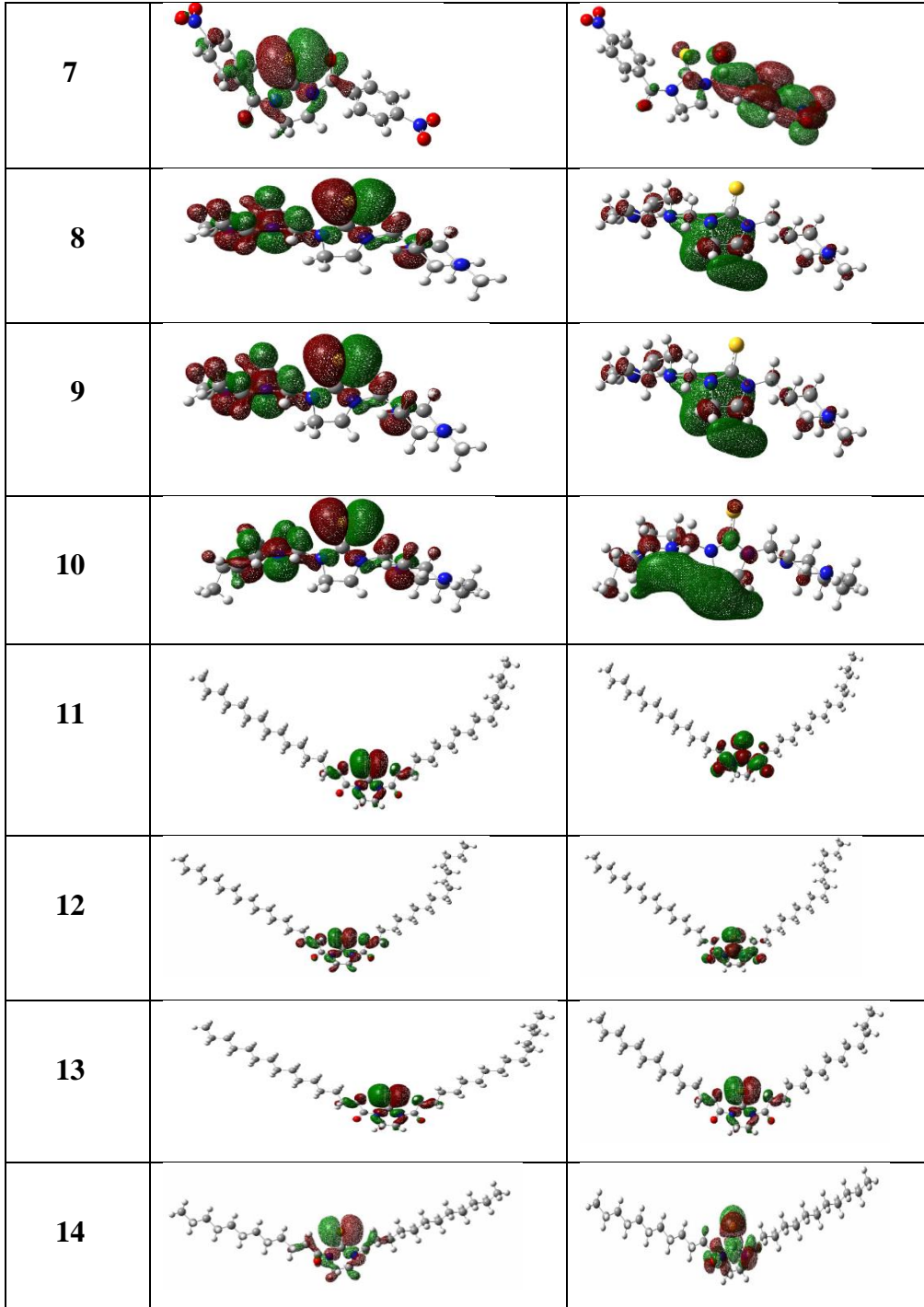
Şekil 4.154 Bileşiklerin ¹H-NMR spektrumlarının karşılaştırılması



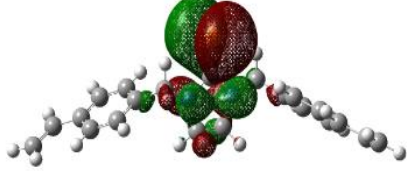
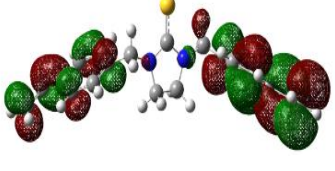
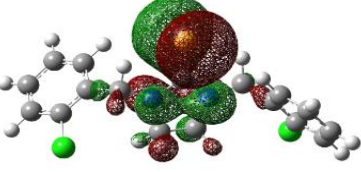
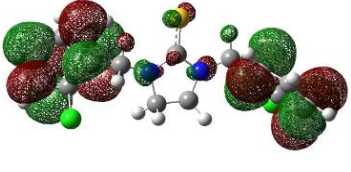
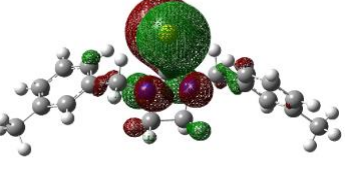
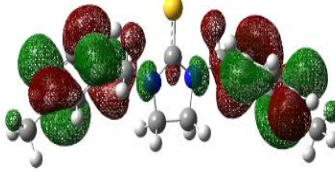
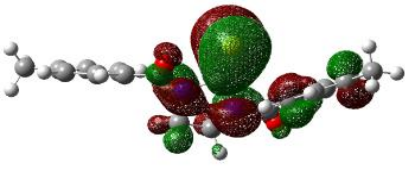
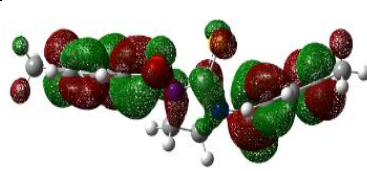
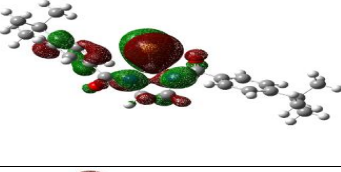
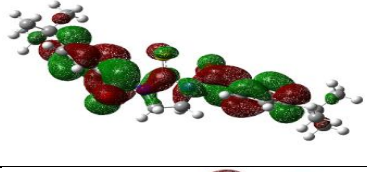
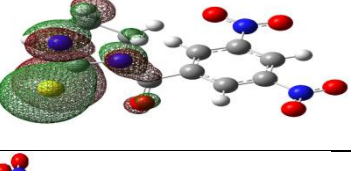
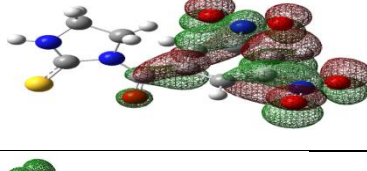
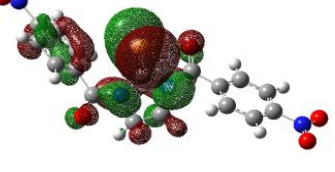
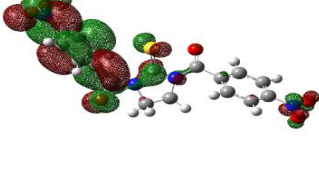
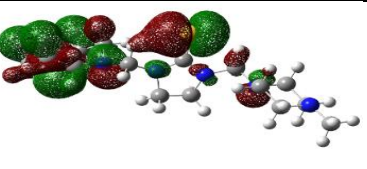
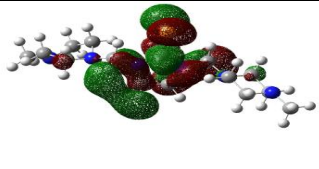
Şekil 4.155 Bileşiklerin ^{13}C -NMR spektrumlarının karşılaştırılması

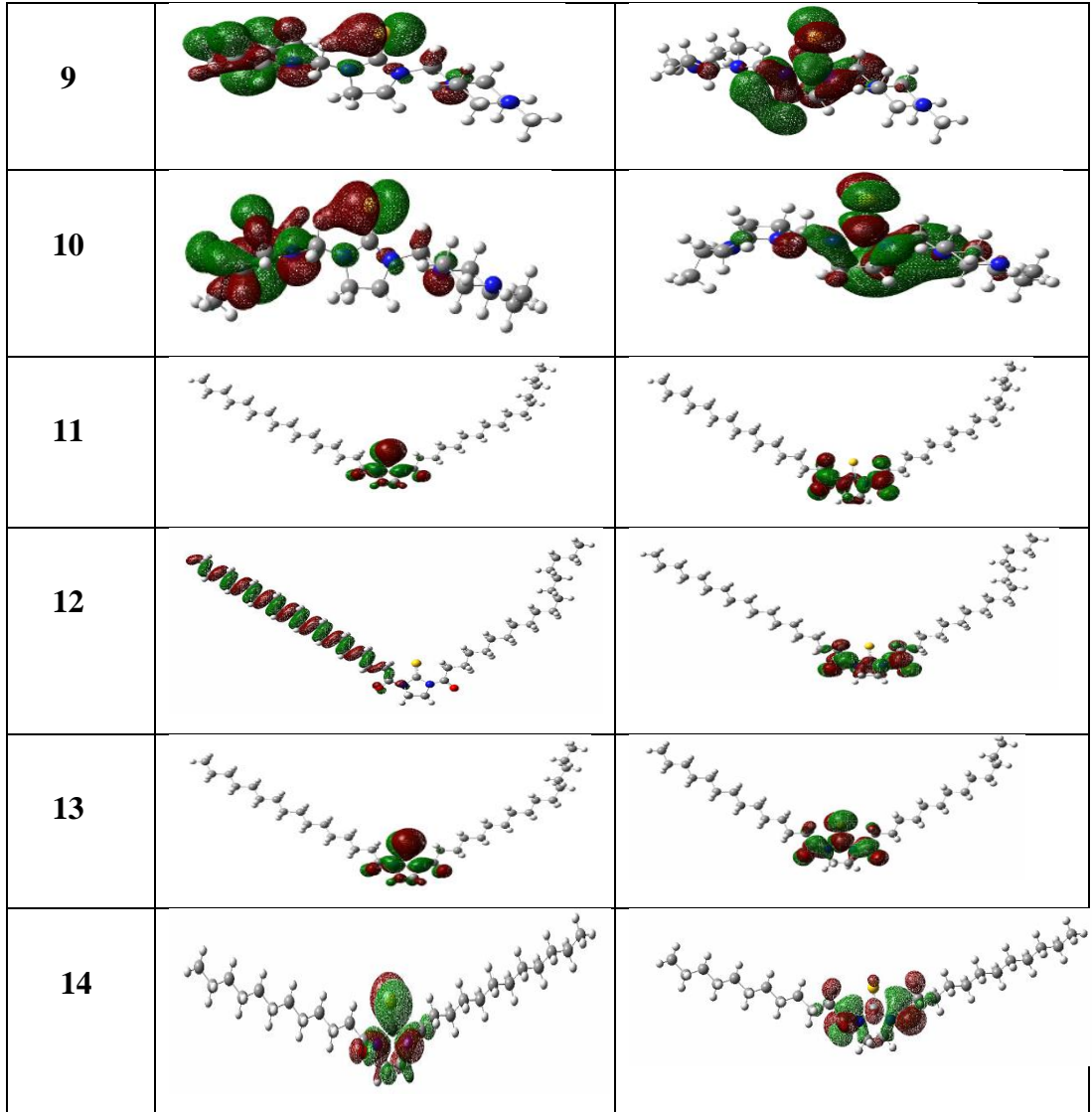
Elde edilen bileşiklerin HOMO ve LUMO enerji yüzeyleri karşılaştırıldığında (Şekil 4.156 ve Şekil 4.157); elektron yoğunluğunun HOMO orbitallerinde imidazol-2-tiyon halkası üzerine yoğunlaştığı, LUMO orbitallerinde ise imidazol-2-tiyon halkası dışında yoğunlaştığı gözlemlendi. Bu nedenle elektron akışının İmidazol-2-tiyon halkasından aromatik halkaya doğru olduğu düşünülmektedir. İmidazolidin-2-tiyon'un yağ asidi türevlerinde ise elektron yoğunluğu hem HOMO hem de LUMO orbitallerin de; imidazol-2-tiyon halkası üzerinde yoğunlaşmıştır.

Bileşik No	HOMO	LUMO
1		
2		
3		
4		
5		
6		



Şekil 4.156 Bileşiklerin HOMO-LUMO enerji yüzeylerinin karşılaştırılması

Bileşik No	HOMO-1	LUMO+1
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		



Şekil 4.157 Bileşiklerin HOMO-1 – LUMO+1 enerji yüzeylerinin karşılaştırılması

ΔE değeri molekülün kimyasal kararlılığı ve stabilitesi hakkında bilgi vermektedir. Molekülde ΔE değeri ne kadar küçük ise molekül o ölçüde karardır. Elde edilen bileşiklerinde ΔE değerinin küçük olması molekül kararlılıklarını doğrulamaktadır.

Çizelge 4.82 Bileşiklerin ΔE (eV) değerleri

Bileşik No	$\Delta E = E_{(\text{HOMO})} - E_{(\text{LUMO})}$	$\Delta E = E_{(\text{HOMO}-1)} - E_{(\text{LUMO}+1)}$
1	-4.27491	-4.60008
2	-4.84281	-5.10812
3	-4.40933	-4.79247
4	-3.86374	-5.02349
5	-3.59843	-4.77179
6	-3.04713	-3.56795
7	-2.96250	-3.99544
8	-5.31329	-5.74160
9	-5.14676	-5.64554
10	-5.14540	-5.62541
11	-4.44307	-6.77672
12	-4.02021	-6.10406
13	-4.45940	-6.81155
14	-4.84362	-5.34105

Çizelge 4.82' deki sonuçlara göre HOMO-LUMO orbitalleri arasındaki enerji farkının en fazla olduğu 13 nolu bileşik, en az farkın ise 2 nolu bileşik olduğu tespit edildi.

Regresyon analizi ise;

Deneysel ve teorik NMR sonucu elde edilen deneysel sinyaller (ppm) ve teorik sinyallerin sıralı iki serisi oluşturuldu. Bu sıralardan ilki, deneysel olan verileri yani X bağımsız değişken serisini ve ikincisi ise teorik olan veriler yani Y bağımlı değişken serisini oluşturacak şekilde belirlendi. Belirlenen sıralı ikilinin lineer regresyon analizi yapıldı. Lineer doğrudan R^2 değerleri belirlendi.

Çizelge 4.83 Bileşiklerin R^2 değerleri

Bileşik No	$^1\text{H-NMR}$ R^2	$^{13}\text{C-NMR}$ R^2
1	0.899	0.99
2	0.944	0.996
3	0.926	0.999
4	0.963	0.943
5	0.990	0.998
6	0.992	0.990
7	0.995	0.998
8	0.832	0.995
9	0.837	0.998
10	0.836	0.984
11	0.902	0.999
12	0.640	0.997
13	0.966	0.992
14	0.911	0.998


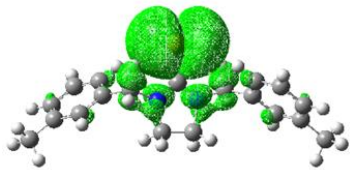
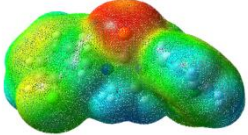
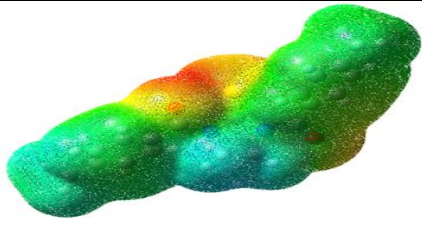
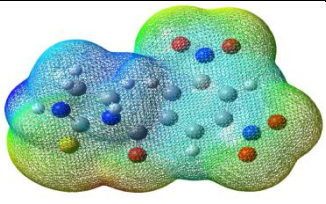
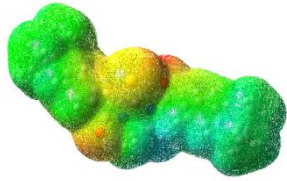
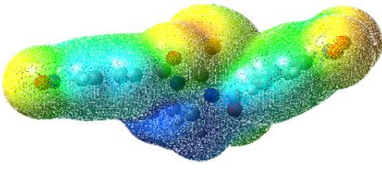
Çizelge 4.83'teki sonuçlara göre tüm değerlerin gerçek değerlerle uyumlu olduğu ancak gerçek değere en yakın bileşiğin $^1\text{H-NMR}$ de 7 nolu, $^{13}\text{C-NMR}$ de ise 3 nolu bileşik olduğu tespit edildi.

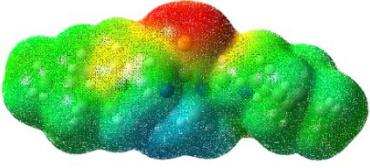
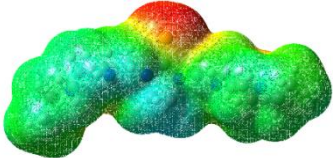
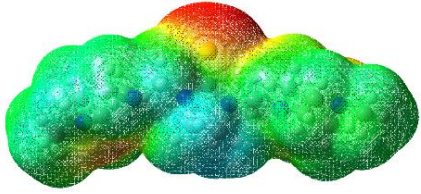
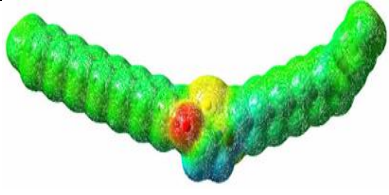
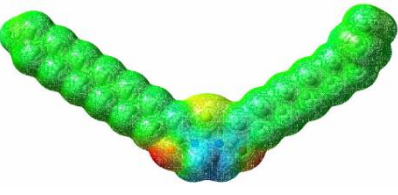
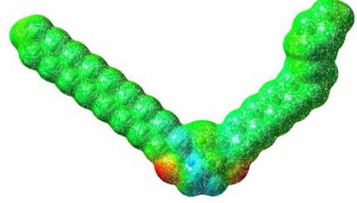
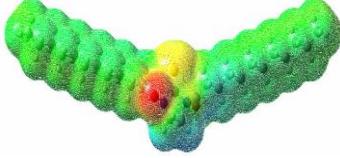
Moleküler elektrostatik potansiyel (MEP) analizi ise;

MEP analizi molekülde; toplam yük dağılımı ile net elektrostatik etki hakkında bilgi verir. Elektronegatiflik, dipol moment ve kimyasal reaksiyona yatkınlık parametreleri ile ilişkilendirilip molekül polaritesinin belirlenmesini sağlar.

Yapılan MEP analizi sonrasında Şekil 4.158'te gözlemlenen kırmızı bölgeler maksimum negatif yükü ifade eder ve sentezlenen bileşiklerde bu bölgeler S ve O'nun olduğu bölgelerdir. Mavi renkli bölgeler pozitif yükü, sarı ve yeşil renkli

bölgeler ise negatif ve orta seviyede negatif yükü temsil eder. İmidazolin protonları mavi renk aromatik halka bölgesi ise yeşil renktedir.

İmidazolidin-2-tiyon'un Benzil Türevleri			
Bileşik No		Bileşik No	
1		3	
2			
İmidazolidin-2-tiyon'un Benzoil Türevleri			
Bileşik No		Bileşik No	
4		6	
5		7	

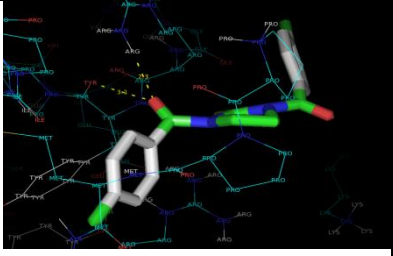
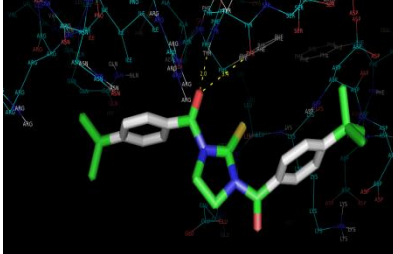
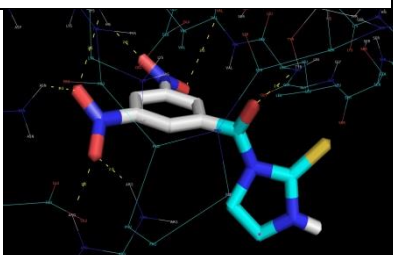
İmidazolidin-2-tiyon'un Mannich Türevleri			
Bileşik No		Bileşik No	
8		10	
9			
İmidazolidin-2-tiyon'un Yağ Asidi Türevleri			
Bileşik No		Bileşik No	
11		13	
12		14	

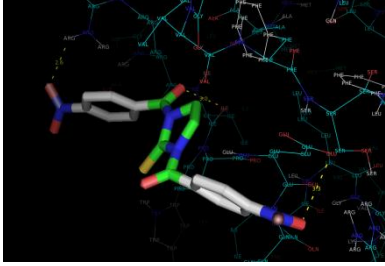
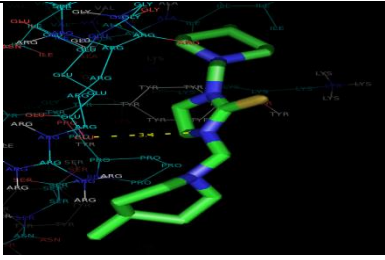

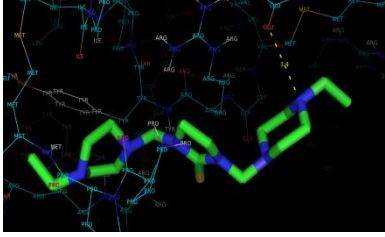
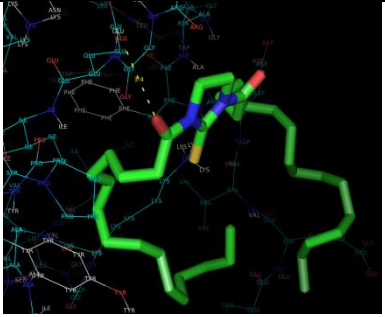
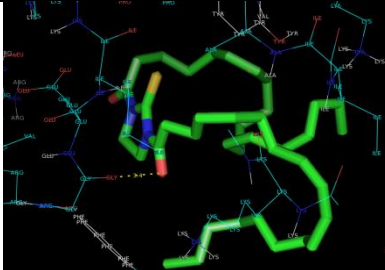
Şekil 4.158 Bileşiklerin Elektron Yük Yoğunluğu

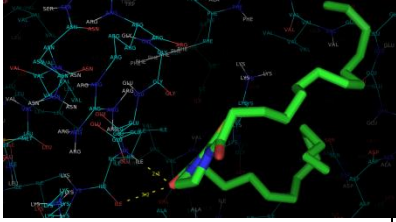
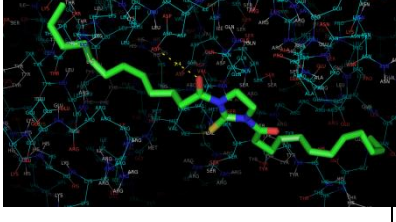
Ayrıca Autodock Vina programı ile elde edilen bütün bileşikler üzerinde doklama işlemi gerçekleştirildi. Doklama yapılırken literatür de MCF-7 kanser hücreleri üzerine etkin olduğu belirlenen [31, 32] 1S9J id kodlu gen www.rcsb.org [33] adresinden pdb formatında indirildi. Doklama sonuçları Pymol programı ile görselleştirildi. 1S9J proteinine bağlanma afiniteleri ve bağlanma yerleri çizelge 4.84' te özetlendi. Hesaplama sonucunda 1,2 ve 3 nolu bileşiklerde proteine

bağlanma tespit edilmemiştir. 4-14 nolu bileşikler de ise çeşitli sayılarda bağlanma gerçekleşmiştir. Bu bileşikler arasında 6 nolu bileşiğin 7 hidrojen bağı sayısı ile en aktif afinite değerine sahip olduğu tespit edildi.

Elde edilen sonuçlar MEP analizi ile doğru orantılıdır. Negatif yüklü Oksijen, azot ve pozitif yüklü hidrojenler üzerinden bağlanacağı doğrulanmıştır.

Bileşik No	Şekil	Bağlanma afinitesi	Bağlanma Noktaları	Hidrojen Bağı Sayısı
1	—	Doking bağlanması bulunmamaktadır.	—	—
2	—	Doking bağlanması bulunmamaktadır.	—	—
3	—	Doking bağlanması bulunmamaktadır.	—	—
4		6.5	TYR, ARG	2
5		6.7	TYR, PHE	2
6		7.1	ARG,ASN TYR,HIS, VAL,LEU	7

7		6.5	GLU, ILE, ARG	3
8		5.0	GLU	1
9		4.9	ASP	1
10		4.6	GLU	1
11		4.8	GLU	1
12		4.6	GLY	1

13		4.5	ILE	2
14		4.3	ASP	1

Çizelge 4.84 Bileşiklerin Doking Bağlanması

5. SONUÇLAR ve ÖNERİLER

İmidazolidin-2- tiyon ve türevleri literatür de farmakolojik özellikleri nedeniyle önemli bir yere sahiptir. Bu özelliklerinden dolayı bu bileşikler sentezlemek ve biyolojik özelliklerini incelemek oldukça önemlidir. Fakat bu bileşik sınıfını sentezlemek için literatür de uygulanan metotlar uzun zaman almakta ve çevre kirliliğine yol açmaktadır. Çalışmada teorik hesaplamaların yapılarak uygun metotların belirlenmesi ve çevre kirliliğinin önlenmesi amaçlanmıştır.

Tezde yapılan çalışmaları aşağıdaki şekilde sıralamak mümkündür;

- İmidazolidin-2- tiyon bileşiğinin benzil, benzoil, alkil ve açıl türevlerinin sentezi,
- Sentezlenen bileşiklerin deneysel FT-IR, ¹H-NMR, ¹³C-NMR verilerinin belirlenmesi,

Sentezi yapılan bileşiklerin Gaussian 09 paket programı ile DFT teknikleri kullanılarak teorik, FT-IR, ¹H-NMR, ¹³C-NMR verilerinin belirlenmesi, bu verilerin deneysel verilerle karşılaştırılıp gerçek değerlere yakınlıklarının araştırılması,

- Ayrıca; HOMO, LUMO orbital enerjileri, atomların Mülliken yükleri, molekülün aktivitesini belirlemek için HOMO-1 ve LUMO+1 orbital enerjileri gibi parametrelerin belirlenmesi,
- Elde edilen bileşiklerin moleküler doking çalışmaları yapılarak MCF 7 kanser hücresi üzerine etkin 1S9J proteinine bağlanma afinitesinin belirlenmesi.

Sonuç olarak; sentezlenen bileşiklerin deneysel ve teorik çalışmaları sonucunda elde edilen veriler gelecekte yapılması düşünülen biyolojik aktivite çalışmalarında yol gösterici olacaktır. Yapı-aktivite çalışmalarında deneysel ve teorik verilerin karşılaştırılmış olması kolaylık sağlayacaktır.

KAYNAKLAR

- [1] H. Hart, D.J.Hart, L.E. Craine, *Organik Kimya*, (Çev. T.Uyar), Ankara, 1998.
- [2] Ltd. CIBA, “4,5 Diarylimidazoles”, *Neth. Appl. No.6*, , pp 16-63, 1964.
- [3] J.G. Lombardino, “Pharmaceutical imidazoles”, *Ger. Offen. No. 16*, pp 65-77, 1970.
- [4] J.G. Lombardino, E.H. Wiseman, “Preparation and antiinflammatory activity of some nonacidic trisubstituted imidazoles”, *j. Med.Chem.* , 17, 1182-8, 1974
- [5] F. L.Breusch, , *Genel Kimya Organik Kısım*, (Çev. E. Ulusoy), İstanbul Üniv. Yay., İstanbul, 1960.
- [6] E.Oskay, *Organik Kimya*, (Çev.A. İkizler), Hacettepe Üniv. Yay., Ankara, 1985.
- [7] F. L.Breusch, , *Genel Kimya Organik Kısım*, (Çev. E. Ulusoy), İstanbul Üniv. Yay., İstanbul, 1960.
- [8] S. Özel, “Halkalı Tiyoüreler ve N-Substitüe Türevlerinin Sentezi” Yüksek Lisans Tezi, Fırat Üniversitesi Elazığ, 2006.
- [9] A. İkizler, “Heterohalkalı Bileşikler”, *Karadeniz Üniversitesi Genel Yayın No: 84*, Trabzon, 197-212. 1984.
- [10] A. İkizler, “Heterohalkalı Bileşikler”, *Karadeniz Üniversitesi Genel Yayın No: 84*, 197-212, 1984.
- [11] C. Tüzün, *Organik Kimya, Palme Yayın Dağıtım No: 116*, 538-543, 1996.
- [12] E. Erdik, *Denel Organik Kimya*, Ankara Üniversitesi, Fen Fakültesi, 1987.
- [13] S.Karabulut, “Bazı Düz Zincirli İmitlerin Sentezi, İmitlerin ve 1,3 Dikarbonil Bileşiklerinin Tautomer Oranlarının Deneysel ve Hesapsal Olarak İncelenmesi”, Doktora Tezi, Balıkesir Üniversitesi, 2011.
- [14] S. Karabulut, “Bazı Düz Zincirli İmitlerin Sentezi, İmitlerin ve 1,3 Dikarbonil Bileşiklerinin Tautomer Oranlarının Deneysel ve Hesapsal Olarak İncelenmesi”, Doktora Tezi, Balıkesir Üniversitesi, 2011.
- [15] P.Pulay, “Analytical Derivative Methods in Quantum Chemistry. Ab initio Methods in Quantum Chemistry”, By K. P. Lawley and 11nd ed., John Wiley & Sons Ltd, 118-143. 1987.

- [16] N.I.Sax, Hawley's Condensed Chemical Dictionary, no. 11, pp. 276, 490, 633, 635 and 732. 1987.
- [17] B.Zaleska, T.Bazanek, R.Socha, M.Karelus, J. Grochowski, P. Serda, Synthesis of zwitterionic compounds: Fully saturated pyrimidinylium and 1,3-diazepinylium derivatives via the novel rearrangement of 3-oxobutanoic acid thioanilide derivatives, *J. Org. Chem.*, 67, 4526-4529, 2002.
- [18] A. N. Acharya, J. M. Ostresh, R. A. Houghten, "Solid-phase synthesis of substituted imidazoline-tethered 2,3-diketopiperazines, cyclic ureas, and cyclic thioureas". *J. Comb. Chem.*, 3, 612-623, 2001.
- [19] V. Jullian, E. Shepherd, T. Gelbrich, M. B. Hrusthouse, J.D. Kilburn, "New macrobicyclic receptors for amino acids tetrahedron lett", *J. Comb. Chem.*, 41, 3963-3966, 2000.
- [20] J.M.Benito, M.G.Garcia, J.L.J.Blanco, C.O.Mettet, J.M.G. Fernandez, "Carbohydrate-based receptors with multiple thiourea binding sites. Multipoint hydrogen bond recognition of dicarboxylates and monosaccharides". *J. Org. Chem.*, 66, 1366-1372, 2001.
- [21] P.Y.S.Lam, P.K.Jadhav, C.J.Eyermann, C.N.Hodge, Y.Ru, L.T.Bachelor, J.L.Meek, M. J.Otto, M.M.Rayner, Y.N.Wong, C.H.Chang, P.C.Weber, D.A.Jackson, T.R.Sharpe, "Rational design of potent, bioavailable, nonpeptide cyclic ureas as HIV protease inhibitors", *Science.*, 263, 380-384, 1994.
- [22] A.Sapegin, A. Osipyan, M. Krasavin "Structurally diverse arene-fused ten-membered lactams accessed via hydrolytic imidazoline ring expansion". *RSC Adv*, 15, 2906-2909, 2017.
- [23] H. A.L. Phuong, L. Cseri, G. F.S. Whitehead, A. Garforth, P.Budd, G. Szekely. "Environmentally benign and diastereoselective synthesis of 2,4,5-trisubstituted-2-imidazolines". *RSC Adv*. 7, 53278–53289, 2017.
- [24] A.Kruithof, J. R.Mulder, M. J.Ruiz, E.Janssen, M.Mooijman, E.Ruijter, C. F.Guerra, F. M. Bickelhaupt, R. V. A. Orru "Integrative Theory/Experiment-Driven Exploration of a Multicomponent Reaction towards Imidazoline-2-(thi)ones". *Eur. J. Org. Chem.* 4, 104-112, 2018.

- [25] T.Ishakawa, M. Yoshiki, T.Taraka, Y.Ogata, Y. Yamada, T. Haromoto. “Regioselective Synthesis of Difluoromethylated Oxazolidines and 2-Imidazolines”. Department of Chemistry and Applied Chemistry, Graduate School of Science and Engineering, Saga University, 1, 840-8502, 2016.
- [26] S.Huang,Y.Shao,L. Zhong and X. Zhou. “Cycloamidation of Aminoalkenes with Nitriles: Synthesis of Substituted 2-Imidazolines and Tetrahydropyrimidines”. *Angew. Chem.* 127, 14660 –14664, 2015.
- [27] A. Kornicka, A.Wasilewska, J.Śączewski, A. L.Hudson,K. Boblewski, A.Lehmann, K.Gzella, M.Belka, F.Śączewski, M. Gdaniec, A.Rybczyńska, T. Bączek, “1-[(Imidazolidin-2-yl)imino]-1H-indoles as New Hypotensive Agents: Synthesis, In Vitro and In Vivo Biological Studies”. Department of Chemical Technology of Drugs, Medical University of Gdańsk, Al. Gen. J. Hallera 107, 80-416, 2016.
- [28] A. Martin, R.Martin, “A Review On The Antimicrobial Activity Of 1,2,4-Triazole Derivatives”, *International Journal Life Sciences Biotechnology & Pharm. Res.*, Vol. 3, No. 1. pp 2250-3137, 2014.
- [29] A.Zarrouk, H.Zarrok, R.Salghi, B.Hammouti,R. Touir, I.Warad, F.Bentiss, H.Abou El Makarim, N.Benchat, “Quantum chemical study of some triazoles as inhibitors of corrosion of copper in acid media”, *Res Chem Intermed.* No.3, pp 248, 2012.
- [30] S. Cesarini, A. Spallarossa, A. Ranise, S. Schenone, C. Rosano, P. La Colla, G. Sanna, B.Busonera, R.Loddo, “N-Acylated and N,N'-diacylated imidazolidine-2-thione derivatives and N,N'-diacylated tetrahydropyrimidine-2(1H)-thione analogues: Synthesis and antiproliferative activity”. *Eur J. Med Chem.*, 3, 1106-18, 2009.
- [31] R.Pagadala, D.R.Kommidi, S.Kankala, S.Maddila, P. Singh, B.Moodley, N. A.Koorbanally, S.B. Jonnalagadda,” Multicomponent one-pot synthesis of highly functionalized pyrrole-3- carbonitriles in aqueous medium and computational study”. *RSC, Adv*, 6, 1792-1799, 2015.

- [32] C.Dyrager, “ Design and Synthesis of Chalcone and Chromone Derivatives as Novel Anticancer Agents”. Doctorial Thesis, Departman of Chemistry University of Gothenburg, 2012.
- [33] “1S9J Id Kodlu Gen ”, Rcsb Pdb Protein Data Bank, <https://www.rcsb.org/structure/1S9J> . [Erişim Tarihi: 2-Nisan-2018].

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Özlem KESKİN
Doğum Yeri : Merkez /ADİYAMAN
Doğum Tarihi : 13/ 03/ 1973
Medeni Hali : Evli
Yabancı Dili : İngilizce
E-posta : wrestlerchemist@hotmail.com

Eğitim Durumu

Derece	Alan	Üniversite	Mezuniyet Yılı
Yüksek Lisans	Kimya Anabilim Dalı	Adıyaman Üniversitesi	2018
Lisans	Eğitim Fak. Kimya Bölümü	İnönü Üniversitesi	1997
Lise	Matematik	Adıyaman Lisesi	1990