

**4-BENZİLPIPERİDİN MOLEKÜLÜNÜN TİTREŞİMLERİNİN
TEORİK YÖNTEMLERLE İNCELENMESİ**

Ercan ERDOĞDU

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**HAZİRAN 2007
ANKARA**

Ercan ERDOĐDU tarafından hazırlanan 4-BENZİLPİPERİDİN MOLEKÜLÜNÜN
TİTREŞİMLERİNİN TEORİK YÖNTEMLERLE İNCELENMESİ adlı bu tezin
Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Yrd. Doç. Dr. T. Raci SERTBAKAN

Tez Yöneticisi

Bu çalışma, jürimiz tarafından oy birliği ile Fizik Anabilim Dalında Yüksek Lisans
tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan : Prof. Dr. Ergün KASAP

Üye : Yrd. Doç. Dr. T. Raci SERTBAKAN

Üye : Yrd. Doç. Dr. Semran SAĞLAM

Tarih : 29/06/2007

Bu tez, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kurallarına uygundur.

TEZ BİLDİRİMİ

Tez içindeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edilerek sunulduğunu, ayrıca tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada orijinal olmayan her türlü kaynağa eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

Ercan ERDOĞDU

4-BENZİLPİPERİDİN MOLEKÜLÜNÜN TİTREŞİMLERİNİN TEORİK YÖNTEMLERLE İNCELENMESİ

(Yüksek Lisans Tezi)

Ercan ERDOĞDU

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

Haziran 2007

ÖZET

Bu çalışmada, 4-Benzilpiperidin molekülünün konfigürasyonu çizildi ve bu konfigürasyonun minimum enerji değeri değişik metot ve baz setleri için hesaplandı. Bu konfigürasyonun geometrik parametreleri ve titreşim frekansları teorik olarak hesaplandı. Bu titreşim frekanslarının işaretlemeleri yapılarak frekanslara ait İnfrared ve Raman şiddetleri belirlendi. Teorik olarak hesaplanan frekanslarla deneysel frekanslar birbirleriyle karşılaştırılarak korelasyon grafikleri çizildi. Bu grafikler yardımı ile hesaplama metotları arasında karşılaştırma yapıldı. BLYP metodu ile yapılan frekans hesaplamalarının HF ve B3LYP metodu ile yapılan hesaplamalardan daha iyi sonuç verdiği gözlemlendi.

Bilim Kodu : 202. 1. 008
Anahtar Kelimeler : 4-benzilpiperidin, İnfrared, Raman, BLYP,B3LYP,HF.
Sayfa Adedi : 86
Tez Yöneticisi : Yrd.Doç.Dr. T. Raci SERTBAKAN

**THE STUDY OF VIBRATIONS OF 4-BENZYLPIPERIDINE MOLECULE
THROUGH THEORETICAL METHODS**

(M.Sc.Thesis)

Ercan ERDOĞDU

**GAZI UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY**

June 2007

ABSTRACT

In this study, configuration of 4-Benzylpiperidine molecule was determined and the optimized energy value of this configuration was calculated for different method and basis set. The geometrical parameters and vibrational frequencies of this configuration were theoretically calculated. Through the assignment of these frequencies, the Infraed and Raman intensity was determined. The correlation graphs were drawn by comparing the theoretically calculated frequencies with the experimental ones. Comparisions among the calculation methods were made by means of these graphs. It was observed that the frequency calculations made by the BLYP method gave better results with compared to those made by the HF and B3LYP methods.

Science Code	: 202. 1. 008
Key Words	: 4-Benzylpiperidine, Infrared, Raman, BLYP,B3LYP,HF.
Page Number	: 86
Adviser	: Assist.Prof.Dr. T. Raci SERTBAKAN

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım boyunca değerli yardım ve katkılarıyla beni yönlendiren Danışmanım Yrd. Doç. Dr. T.Raci SERTBAKAN, değerli arkadaşlarım Araştırma Görevlisi Abdullah YILDIZ, Araştırma Görevlisi Halit ALTUNTAŞ, Araştırma Görevlisi Yusuf ERDOĞDU ve Hacı ÖZİŞİK' a teşekkürü bir borç bilirim. Ve anlayışından dolayı eşime...

Bu çalışmada kullanılan Gaussian 98W ve GausView 03W programları Gazi Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri 05/2001-39 ve 05/2002-50 nolu proje kapsamında alınmıştır. Desteklerinden dolayı Gazi Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projelerine ayrıca teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET	iv
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR	ivi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ	ix
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	xi
SİMGELER VE KISALTMALAR	xii
1. GİRİŞ	1
2. MOLEKÜLER TİTREŞİM SPEKTROSKOPİSİ	2
2.1. Molekül Titreşimleri	2
2.1.1. Harmonik osilatör	6
2.1.2. Anharmonik osilatör	8
2.2. Molekül Titreşim Türleri	10
2.3. İnfrared Spektroskopisi	12
2.4. Raman Spektroskopisi	13
3. BİLGİSAYAR HESAPLAMALI MOLEKÜLER SPEKTROSKOPİSİ	14
3.1. Moleküler Mekanik Metotlar	14
3.2. Elektronik Yapı Metotları	16
3.2.1. Yarı deneysel metotlar	17
3.2.2. Ab initio metotları	17
3.3. Kuantum Mekaniksel Enerji İfadeleri ve Yoğunluk Fonksiyon Teorisi	18
3.4. Karma Yoğunluk Fonksiyon Teorisi	20

Sayfa

3.4.1. B3LYP karma yoğunluk fonksiyon teorisi	20
3.5. Temel Setler	21
3.6. Geometrik Optimizasyon	22
3.6.1. Minimizasyon yöntemleri	22
3.6.2. Steepest Descent yöntemi	23
3.6.3. Gradyent yöntemi	23
3.6.4. Powel yöntemi	23
3.6.5. Newton- Raphson yöntemi.....	24
3.6.6. Gradyent metodu (Kuvvet metodu)	24
3.7. Hesaplama Metodu: Yoğunluk Fonksiyonu Teorisinde Öz Uyumlu Alan Yöntemi (DFT SCF)	27
3.8. Normal Koordinat Analizi	30
3.8.1. Wilson GF metodu.....	31
3.8.2. Toplam enerji dağılımı(TED).....	35
3.9. SQM Metodu	36
4. SONUÇ	40
4.1. 4-Benzilpiperidin Molekülünün Teorik Hesaplama Sonuçları	41
4.2. 4-Benzilpiperidin Molekülünün Geometrik Parametreleri.....	43
4.3. Hesaplama Sonuçları	81
KAYNAKLAR.....	83
ÖZGEÇMİŞ.....	86

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 2.1. Elektromanyetik spektrum bölgeleri	3
Çizelge 2.2. Anharmonik osilatör için potansiyel enerjinin uzaklığı bağıllığı.....	9
Çizelge 3.1. Enerji türevlerinden fiziksel büyüklüklerin hesaplanması.....	18
Çizelge 4.1. C ₁ nokta grubu karakter tablosu.....	42
Çizelge 4.2. 4-benzilpiperidin molekülünün değişik yöntem ve baz setlerinde hesaplanan enerji değerleri.....	43
Çizelge 4.3. Piperidin molekülünün taban seviyesindeki deneysel geometrik parametreleri.....	44
Çizelge 4.4. Ölçekleme faktörleri.....	45
Çizelge 4.5. Taban enerji seviyesinde 4-benzilpiperidin molekülünün teorik, piperidin molekülünün deneysel bağ uzunlukları.....	45
Çizelge 4.6. Taban enerji seviyesinde 4-benzilpiperidin molekülünün teorik, piperidin molekülünün deneysel bağ açıları.....	47
Çizelge 4.7. Taban enerji seviyesinde 4-benzilpiperidin molekülünün teorik dihedral bağ açıları.....	50
Çizelge 4.8. 4-benzilpiperidin molekülünün HF/6-31G baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması.....	60
Çizelge 4.9. 4-benzilpiperidin molekülünün HF/6-31G(d) baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması.....	61
Çizelge 4.10. 4-benzilpiperidin molekülünün HF/6-31G(d,p) baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması.....	62
Çizelge 4.11. 4-benzilpiperidin molekülünün HF/3-21G baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması.....	63
Çizelge 4.12. 4-benzilpiperidin molekülünün HF/3-21G(d) baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması.....	64
Çizelge 4.13. 4-benzilpiperidin molekülünün HF/6-311G baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması.....	65

Çizelge	Sayfa
Çizelge 4.14. 4-benzilpiperidin molekülünün HF/6-311G(d) baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması.....	66
Çizelge 4.15. 4-benzilpiperidin molekülünün HF/6-311G(d,p) baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması.....	67
Çizelge 4.16. 4-benzilpiperidin molekülünün B3LYP/6-31G(d) baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması.....	68
Çizelge 4.17. 4-benzilpiperidin mol.nün B3LYP/6-31G(d,p) baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması.....	69
Çizelge 4.18. 4-benzilpiperidin molekülünün B3LYP/6-311G baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması.....	70
Çizelge 4.19. 4-benzilpiperidin mol.nün B3LYP/6-311G(d) baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması.....	71
Çizelge 4.20. 4-benzilpiperidin molekülünün BLYP/3-21G baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması.....	72
Çizelge 4.21. 4-benzilpiperidin molekülünün BLYP/6-31G baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması.....	73
Çizelge 4.22. 4-benzilpiperidin molekülünün BLYP/6-31G(d) baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması.....	74
Çizelge 4.23. 4-benzilpiperidin mol.nün BLYP/6-31G(d,p) baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması.....	75
Çizelge 4.24. 4-benzilpiperidin molekülünün BLYP/6-311G baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması.....	76
Çizelge 4.25. 4-benzilpiperidin molekülünün BLYP/6-311G(d) baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması.....	77
Çizelge 4.26. 4-benzilpiperidin Molekülünün BLYP 6-311G hesaplama metodu için yaklaşık Ped Hesaplamaları.....	78

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. Elektromanyetik spektrum bölgeleri.....	3
Şekil 2.2. İki atomlu bir molekül için elektronik, titreşim ve dönü geçişleri.....	6
Şekil 2.3. Harmonik osilatörün potansiyel enerji değişimi.....	8
Şekil 2.4. Anharmonik osilatör için potansiyel enerjinin uzaklığa bağlılığı.....	9
Şekil 2.5. Moleküler titreşim türleri.....	11
Şekil 3.1. İki atomlu bir molekülde elektronik enerji grafiği.....	25
Şekil 3.2. İki boyutta potansiyel enerji yüzeyi.....	26
Şekil 3.3. SCF yönteminde enerjinin yakınsaması.....	30
Şekil 4.1. 4-benzilpiperidin molekülü ve atomlarının numaralandırılması.....	41
Şekil 4.2. 4-benzilpiperidin molekülünün deneysel infrared spektrumu	42
Şekil 4.3. Piperidin molekülünün deneysel bağ uzunluklarının 4-benzilpiperidin molekülünün değişik yöntem ve baz setlerinde hesaplanan teorik bağ uzunlukları ile korelasyon grafikleri.....	54
Şekil 4.4. 4-benzilpiperidin molekülünün deneysel titreşim modlarının değişik yöntem ve baz setlerinde hesaplanan teorik titreşim modları ile korelasyon grafikleri.....	57

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılmış bazı simge ve kısaltmalar, açıklamaları ile birlikte aşağıda sunulmuştur.

Simgeler	Açıklama
B	Dönüşüm Matrisi
B3LYP	LYP korelasyon enerjili 3 parametrelili Becke karma metodu
C_{μi}	Moleküler açılım katsayısı
ε_i	Tek elektron orbital enerjisi
E	Molekülün toplam enerjisi
E^C	Korelasyon enerjisi
E_{B3LYP}	B3LYP enerjisi
E_e	Molekülün elektronik enerjisi
E^{XC}_{B3LYP}	B3LYP değiş tokuş ve korelasyon enerjisi
E^C_{LYP}	LYP korelasyon enerjisi
E^C_{VWN}	Vosko, Wilk, Nussair korelasyonu
E^J	Coulomb enerjisi
E₀	Sıfır nokta enerjisi
E^T	Kinetik enerji
F_{ij}	Kuvvet sabiti
g	Gaussian fonksiyonlar, gradyent vektörü
G	Kuvvet sabiti, Hessian
$\hat{H}$	Moleküler hamiltoniyen
I	Titreşim bantlarının şiddeti
K	Kuvvet sabiti
P_{μν}	Yoğunluk matrisi
q	Kütle ağırlıklı kartezyen koordinat
Q	Genelleştirilmiş koordinat

Simgeler**Açıklama**

R	İç koordinat matrisi
V	Potansiyel enerji
X	Kartezyen koordinat matrisi
A	Kutuplanabilirlik katsayısı
ρ	Elektron yoğunluğu
ρ_α	α spinli elektron yoğunluğu
ρ_β	β spinli elektron yoğunluğu
μ	Dipol moment
$\bar{\nu}$	Titreşim dalgasayısı
$\mathbf{v}^{\text{XC}}$	Değiş tokuş ve korelasyon operatörü
ϕ_μ	Atomik orbital
ψ	Moleküler orbital, dalga fonksiyonu
ν	Gerilme
β	Bükülme
δ	Düzlem içi bükülme
γ	Düzlem dışı bükülme
τ	Burulma

Kısaltmalar**Açıklama**

DFT(YFT)	Yoğunluk fonksiyon teorisi
GAUSSIAN98	GAUSSIAN98 paket programı
HF	Hartree-Fock metodu
PED	Potansiyel enerji dağılımı
SQM	Ölçekleme metodu (Ayarlı kuantum mekanik)
TED	Toplam enerji dağılımı
SCF	Öz uyumlu alan

1. GİRİŞ

Bu çalışmada 4-benzilpiperidin molekülünün infrared spektrumu $4000-400\text{ cm}^{-1}$ bölgesinde Gazi Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Kimya laboratuvarında bulunan Mattson 1000 FT-IR Spektrometresi kullanılarak sıvı fazda kaydedildi. Spektrum incelenerek, bileşiğin olabilecek mümkün yapıları tartışıldı. Elde edilen titreşim frekansları deneysel değerlerle karşılaştırıldı.

4-benzilpiperidin molekülünün üç boyuttaki yaklaşık geometrisi GaussView programında çizilerek GAUSSIAN98 paket programında giriş verileri olarak kullanıldı. Bu programın yardımıyla molekülün kararlı haldeki (enerji optimizasyonu yapılmış haldeki) bağ uzunlukları, bağ açıları ve infrared titreşim dalga sayıları; Yoğunluk Fonksiyon teorisi ve Ab-initio Hartree-Fock teorisi kullanılarak gaz fazında hesaplandı. Bu hesaplamalarda değişik fonksiyoneller ve baz setleri kullanıldı. Teorik bağ uzunlukları, bağ açıları molekülle ilgili X-ışınlarından elde edilen deneysel verilerle karşılaştırılamadı. Çünkü literatürde bu verilere rastlanmadı. Bunun yerine piperidin molekülünün parametreleri kullanılarak karşılaştırma yapıldı.

2. MOLEKÜLER TİTREŞİM SPEKTROSKOPİSİ

2.1. Molekül Titreşimleri

Moleküler titreşim spektroskopisi, madde ile elektromanyetik dalganın karşılıklı etkileşimini inceler[1]. Elektromanyetik dalgaların madde ile etkileşimi sonucu titreşim hareketinde değişme meydana gelir. Moleküllerin titreşim hareketleri İnfrared ve Raman spektroskopisi yöntemleri ile incelenebilir. Bu yöntemlerle molekülün yapısal özellikleri olan moleküldeki bağların uzunluğu, bağlar arasındaki açılar ve molekül simetisi ile ilgili bilgiler elde edilebilir. Ayrıca İnfrared ve Raman spektroskopisi yöntemleri ile moleküllerin kimyasal ve fiziksel özellikleri olan bağ kuvvetleri, molekül içi ve moleküller arası kuvvetler, molekülün elektronik dağılımı ile ilgili bilgiler de elde edilebilir[2].

Molekül üzerine gönderilen elektromanyetik dalga soğurulduğunda, molekül ile elektromanyetik dalga arasında bir etkileşme ve bu etkileşme sonucunda, molekülün enerji düzeyleri arasında geçişler meydana gelir. Bu geçişler, soğurulan elektromanyetik dalganın enerjisine bağlı olarak spektrum bölgelerine ayrılır. Bu spektrum bölgeleri sırasıyla aşağıda verilmiştir(Çizelge 2.1)(Şekil 2.1)[2].

$$\Delta E = E'' - E' = h\Delta\gamma \quad (2.1)$$

ΔE = iki seviye arasındaki enerji farkı

E'' = üst titreşim seviyesinin enerjisi

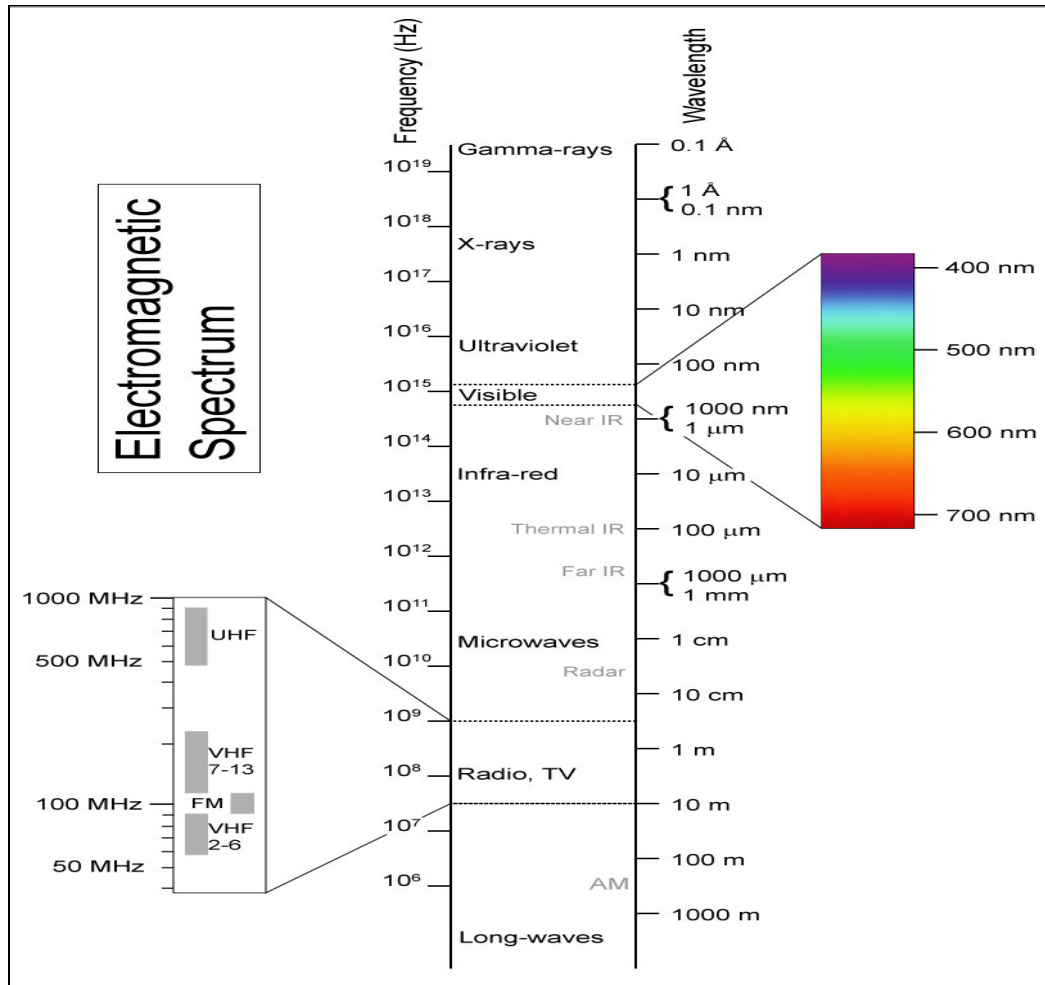
E' = alt enerji seviyesinin enerjisi

$E'' \rightarrow E'$: ışığın yayınımlı

$E' \rightarrow E''$: ışığın soğurulması

Çizelge 2.1. Elektromanyetik spektrum bölgeleri

BÖLGE	DALGA BOYU	SPEKTROSKOPİ TÜRÜ
Radyodalgaları	10m-1m	NMR ve NQR
Mikrodalga	1cm-100 μ m	ESR ve Moleküler dönme
Infrared	100 μ -1 μ m	Moleküler dönme ve titreşim
Görünür ve Morötesi	1 μ m-10nm	Elektronik geçişler
X-ışınları	10nm-100pm	Elektronik geçişler
γ -ışınları	100pm-	Nükleer geçişler



Şekil 2.1. Elektromanyetik spektrum bölgeleri

Radyodalgaları Bölgesi: Elektron veya çekirdeğin spininin işaret değiştirmesinden kaynaklanan enerji değişimlerinin spektrumu Radyodalgaları bölgesindedir. Bu bölge, Nükleer Magnetik Rezonans (NMR) ve Elektron Spin Rezonans (ESR) spektrumlarını içerir.

Mikrodalga Bölgesi: Molekülün dönmesinin incelendiği bölgedir. Dönme enerjileri arasındaki geçişlerin spektrumu, mikrodalga bölgesinde meydana gelir. Ayrıca bir sistem çiftlenmemiş elektrona sahip ise, sistemin magnetik özelliklerindeki değişimler de bu bölgede incelenir.

Infrared Bölgesi: Bir molekülün titreşim ve dönme enerji seviyeleri arasındaki geçişler bu bölgede spektrum verir. Yani molekülün titreşim frekansları infrared bölgesinde, Infrared soğurma ve Raman saçılma spektroskopisi yöntemleri ile incelenir.

Görünür-Morötesi Bölgesi: Bu bölgede, atom veya moleküle ait olan dış kabuktaki elektronların yer değiştirmesi esastır. Bundan dolayı bu bölgedeki spektroskopi türü elektron spektroskopisi adını alır. Bu spektroskopi dalı, molekül veya atomun en dış orbitalindeki elektronların çeşitli enerji düzeyleri arasında olan geçişlere dayanır.

X-ışınları Bölgesi: Bir atom veya molekülde iç kabuktaki elektronların geçişleri X-ışınları bölgesinde olur. Başka bir deyişle X-ışınları atom veya moleküllerde, iç orbitaldeki elektronların enerji seviyelerinin değişmesini sağlar. Bu bölgedeki spektroskopi türü X-ışınları spektroskopisi adını alır.

γ -ışınları Bölgesi: Çekirdeğin içindeki enerji seviyeleri arasındaki geçişler bu bölgede incelenir. Bu geçişlerde çekirdek çok kısa süre uyarılmış seviyede kaldıktan sonra temel hale döner. Bu geçişlerin enerjisi oldukça yüksektir. Bu bölgedeki spektroskopi türü, Mössbauer spektroskopisidir.

Bir molekülün toplam enerjisi; öteleme enerjisi, nükleer dönme enerjisi, dönme enerjisi, titreşim enerjisi ve elektronik enerjisi olmak üzere beş kısımdan oluşur. Bu

enerjilerden öteleme enerjisi sürekli bir enerji olması sebebiyle dikkate alınmaz. Nükleer dönme enerjisi ise diğer enerjilerin yanında çok küçük olduğundan ihmal edilebilir[3]. Geriye kalan elektronik, titreşim ve dönme enerjilerinin ise birbirinden farklı olduklarını *Born-Oppenheimer* yaklaşımı vermektedir. Bu enerjiler arasındaki etkileşmeler ihmal edilebilir olduğundan, elektronik enerji geçişleri, titreşim ve dönme geçişlerinden ayrı incelenmelidir. Bu durumda bir molekülün toplam enerjisi, elektronik, titreşim ve dönme enerjileri olmak üzere,

$$E_T = E_{elek} + E_{tit} + E_{dönü} \quad (2.2)$$

şeklinde yazılabilir[4]. Bir moleküldeki toplam enerji değişimi,

$$\Delta E_{toplam} = \Delta E_{elek} + \Delta E_{tit} + \Delta E_{dönü} \quad (2.3)$$

ifadesi ile belirlenir. Bu ifadede toplam enerjiyi oluşturan elektronik, titreşim ve dönme enerjilerinin birbirlerine göre oranları,

$$\Delta E_{elek} \cong \Delta E_{tit} \times 10^3 \cong \Delta E_{dönü} \times 10^6 \quad (2.4)$$

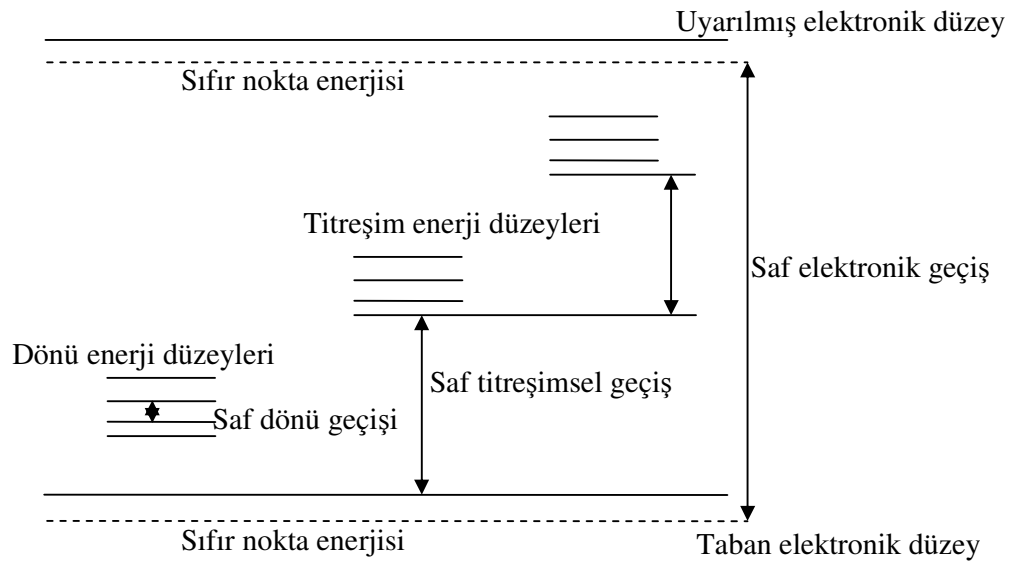
şeklinde verilir[5].

Yukarıdaki enerji ifadelerinden her biri, birbirinden farklı deneysel ve teorik metotlar ile incelenmektedir. Bu çalışmada molekülün titreşim enerjileri incelenmiştir. Molekülün dönme enerji seviyeleri birbirine çok yakın olduğu için düşük frekanslarda oluşur. Genel olarak molekülün saf dönme geçişleri, 1cm-1µm dalga boyu aralığına düşen Mikrodalga spektroskopisi ve uzak infrared spektrum bölgesinde incelenir.

Titreşim enerji seviyesi arasındaki geçişler ise 100µm-1µm dalga boyu aralığında İnfrared ve Raman spektroskopisi ile incelenir.

Gaz fazındaki örneklerin titreşim enerji geçişleri sırasında, dönme enerjisi de değişebildiğinden titreşim bandları ile üst üste binmiş dönme ince yapısı da gözlenebilir.

Görünür veya mor ötesi spektroskopisi ile moleküllerin elektronik geçişleri incelenir. İki atomlu bir molekül için elektronik, titreşim ve dönü geçişleri Şekil 2.2’de verilmiştir.



Şekil 2.2. İki atomlu bir molekül için elektronik, titreşim ve dönü geçişleri

2.1.1. Harmonik osilatör

Bir molekül bağının sıkıştırılma veya gerilme hareketi bir yay hareketine benzetilebilir. Yani herhangi bir molekülün bir bağı için; kütle-yay sistemi olarak bilinen ve Hooke kanununa uyan bir modelleme önerilebilir. Bu model, temel olarak kimyasal bağ boyunca atomların titreşim hareketinin tanımlanmasında kullanılır. Kütle-yay sisteminde yay kuvveti,

$$F = -kx \quad (2.5)$$

şeklinde yazılabilir. Burada k : kuvvet sabiti ve x : denge konumundan olan uzaklıktır.

Bu sistemin potansiyel enerjisi,

$$V = \frac{1}{2} kx^2 \quad (2.6)$$

olarak yazılabilir. Böyle bir potansiyel enerji eğrisi Şekil 2.3' de görüldüğü gibi paraboliktir. Burada kuvvet sabiti,

$$k = \frac{d^2V}{dx^2} \quad (2.7)$$

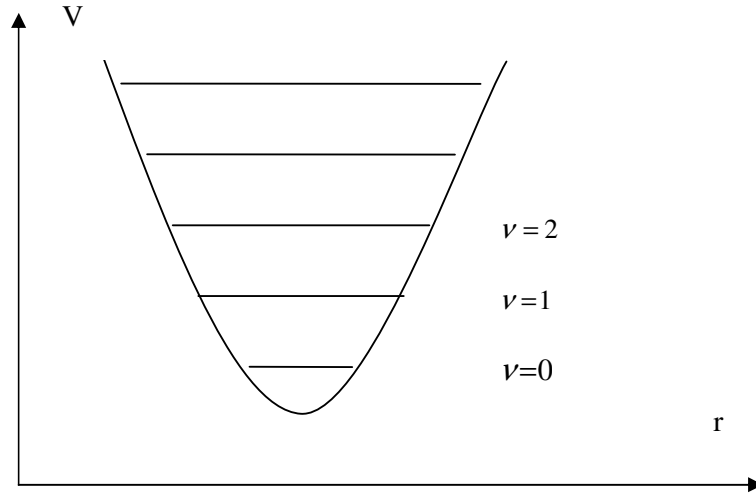
titreşim frekansı,

$$\omega_{it} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (2.8)$$

basit harmonik titreşicinin titreşim enerjileri ise

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2} \right) h\omega_{it} \quad v = 0, 1, 2, \dots \quad (2.9)$$

şeklinde belirlenir. Burada v titreşim kuantum sayısı olarak adlandırılır. Eş.2.9 ifadesinde görüldüğü gibi moleküllerin hiçbir zaman titreşim enerjisi sıfır olamaz. Bunun nedeni atomlar birbirlerine bağlı oldukları için tamamen durgun olamazlar. Moleküller mutlak sıfır sıcaklığında (0 K) dahi minimum enerji olan $\frac{1}{2}h\omega_{it}$ sıfır nokta enerjisi ile titreşecektir.



Şekil 2.3. Harmonik osilatörün potansiyel enerji uzaklık grafiği

2.1.2. Anharmonik osilatör

Gerçek bir molekülün hareketi tamamen basit harmonik hareket kurallarıyla tanımlanamaz. Çünkü gerçek molekül bağları Hooke kanununa uyacak kadar homojen değildir. Gerçek bir molekülün Şekil 2.4’de görüldüğü gibi yüksek enerji değerlerinde, titreşim enerji seviyelerinde süreklilik ortaya çıkmaktadır. Bu durum atomlar arası bağın bir enerji değerinden sonra kırılması anlamına gelir. Küçük titreşimler için basit harmonik salıncı modeli kullanılabilir. Ancak büyük sıkışma ve gerilmeler için hareket ifadeleri çok karışıktır. Bu durumda gerçek bir sistem Morse potansiyeli ile açıklanır.

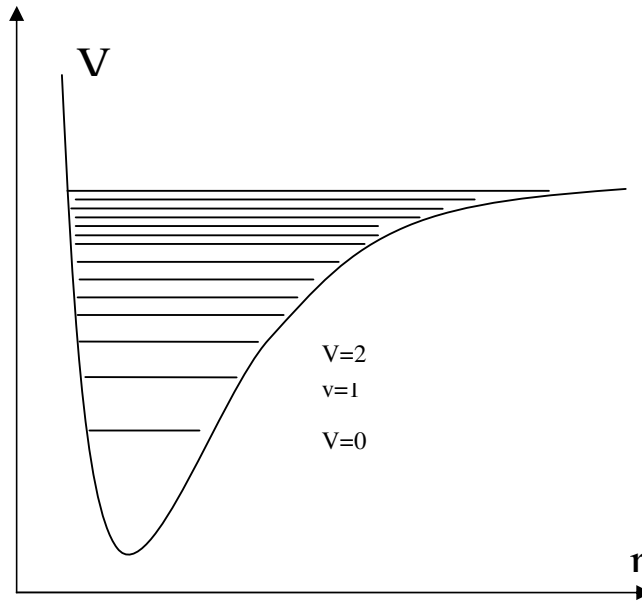
$$V(x) = hcD(1 - e^{-ax})^2 \quad (2.10)$$

Burada, h: Planck sabiti, c: ışık hızı, a: moleküller için bir sabit ve D: ayrışma enerjisini göstermektedir.

Anharmonik titreşici için kuantumlu titreşim enerjileri,

$$E_v = hcw_e \left(v + \frac{1}{2}\right) - hcw_e x_e \left(v + \frac{1}{2}\right)^2 + \dots \quad v=0,1,2,\dots \quad (2.11)$$

olarak yazılır. Bu eşitliğin sağındaki ilk ifade harmonik katkıya, ikinci ifade ise ilk anharmonik katkıya karşılık gelmektedir. Burada v : titreşimsel kuantum sayısı, w : dalga sayısı, x : anharmoniklik sabitidir. Bir molekülde $v=0$ durumu titreşimsel olarak taban enerji durumuna, $v \geq 1$ durumu ise titreşimsel olarak uyarılmış enerji durumlarına karşılık gelir. $v:0 \rightarrow 1$ geçişine temel geçiş, $v:0 \rightarrow 2,3,4,\dots$ geçişlerine ise üstton geçişleri olarak tanımlanır. İnfrared yöntemler kullanılarak bazı moleküller için elde edilmiş veriler Çizelge 2.2’de verilmiştir[5].



Şekil 2.4. Anharmonik osilatör için potansiyel enerjinin uzaklığa bağlılığı.

Çizelge 2.2. İnfrared yöntemler kullanılarak bazı moleküller için elde edilmiş veriler

Molekül	Titreşim (1/cm)	Anharmonik sabiti (X)	Kuvvet sabiti (N/m)	Atomlar arası Uzaklık (Å°)
HF	4318,5	0,0218	966	0,0927
HCl	2990,6	0,0174	516	0,1274
HBr	2649,7	0,0171	412	0,1414
HI	2309,5	0,0172	314	0,1609
CO	2169,7	0,0061	1902	0,1131
NO	1904	0,0073	1595	0,1151

2.2. Molekül Titreşim Türleri

Bir molekülün herhangi bir frekansta titreşim hareketinin belirlenmesine işaretleme adı verilir. Titreşim hareketlerinin belirlenmesi çok basit olabileceği gibi çok karmaşık da olabilir. Karmaşık olan titreşim hareketleri temel titreşimlere ayrılarak incelenir. Çok atomlu moleküllerin titreşimleri dörde ayrılır. Bir molekülün herhangi bir titreşim hareketi esnasında yapabileceği temel titreşim hareketleri Şekil 2.5'te verilmiştir[6,7]. Bir molekülün yapabileceği temel titreşim hareketleri:

A) Gerilme titreşimi(Stretching) : Bağ eksenini doğrultusunda periyodik olarak uzama kısalma hareketidir. Yer değiştirme vektörü bağ uzunluğundaki değişmeyi verir. Molekülün tüm bağlarının uzaması veya kısalması hareketi simetrik gerilme titreşimi adını alır. Molekülde bağların biri veya birkaçı uzarken diğerinin kısalması hareketine asimetrik gerilme hareketi denir. Gerilme titreşimleri ν_s, ν_{as} ile gösterilir(Şekil 2.5.a-b).

B) Açılı bükülme titreşimleri(Bending): İki bağ arasındaki açının periyodik olarak değişim hareketidir. Yer değiştirme vektörleri bağ doğrultusuna diktir. Açılı bükülme titreşimleri δ ile gösterilir(Şekil 2.5.c). Açılı bükülmesinin özel şekilleri ise;

a. Makaslama (Scissoring): İki bağ arasındaki açının bağlar tarafından kesilmesi ile periyodik olarak oluşan değişim hareketidir. Yer değiştirme vektörleri bağa dik doğrultuda aynı noktaya doğrudur. δ ile gösterilir(Şekil 2.5.d).

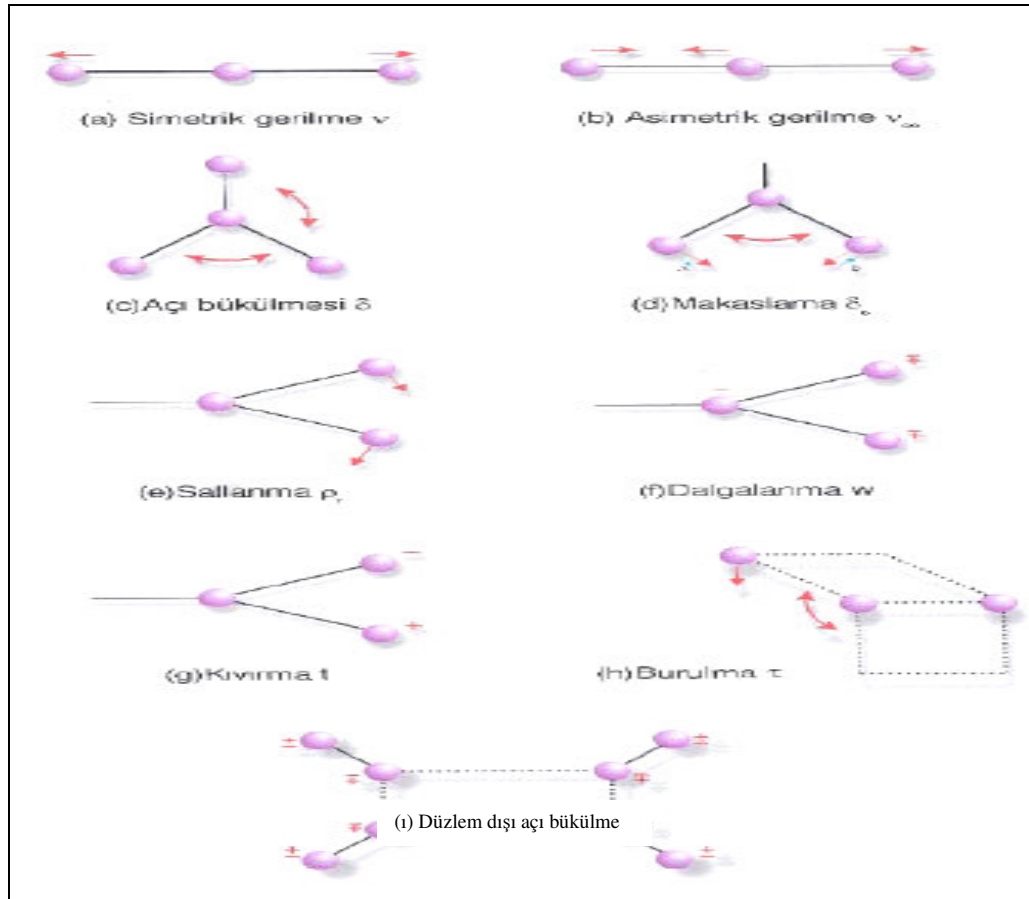
b. Sallanma (Rocking): Yer değiştirme vektörleri birbirini takip edecek yöndedir. İki bağ arasındaki veya bir bağ ile bir grup atom arasındaki açının yer değiştirmesidir. Bağ uzunluğu ve açının değeri değişmez kalır. ρ ile gösterilir(Şekil 2.5.e).

c. Dalgalanma (Wagging): Bir bağ ile iki bağ tarafından tanımlanan bir düzlem arasındaki açının değişim hareketidir. Molekülün tüm atomları denge konumunda düzlemsel iken, bir atomun bu düzleme dik hareket etmesidir. w ile gösterilir(Şekil 2.5.f).

d. Kıvrırma (Twisting): Doğrusal ve düzlemsel olmayan moleküllerde bağların atomlar tarafından bükülmesidir. Burada bağın deformasyonu söz konusu değildir. Yer değiştirme vektörü bağ doğrultusuna diktir. t ile gösterilir(Şekil 2.5.g).

C) Burulma (Torsion): İki düzlem arasındaki açının bir bağ veya açıyı deforme ederek periyodik olarak değişim hareketidir. τ ile gösterilir(Şekil 2.5.h).

D) Düzlem dışı açı bükülme(Out of plane bending): Atomların hareketi ile bir düzlemin (genellikle bir simetri düzlemi) yok edilmesi hareketidir. Genelde kapalı bir halka oluşturan moleküllerde görülür ve hareketin biçiminden dolayı şemsiye titreşimi de denir ve γ ile gösterilir(Şekil 2.5.i).



Şekil 2.5. Moleküler titreşim türleri

2.3. İnfrared Spektroskopisi

Bu spektroskopi dalında, infrared bölgede tüm frekansları içeren elektromanyetik dalga, numune üzerine gönderilerek, geçen veya soğurulan ışık incelenir. Molekül ν frekanslı bir ışın soğurduğunda, molekülün μ elektriksel dipol momenti (veya dipol momentinin bileşenlerinden en az biri) bu frekansta titreşecektir. Böyle bir titreşim spektrumun infrared bölgesine düşer. İnfrared spektroskopisi dalga boyuna, frekansa veya dalga sayısına göre yakın, orta ve uzak infrared bölge olmak üzere üç kısımda incelenir.

Yakın İnfrared: Bu bölgede molekül titreşimlerinin üst ton ve harmonikleri incelenir. 12800 ile 4000 cm^{-1} arasındadır.

Orta İnfrared: Moleküllerin hemen hemen bütün titreşimlerinin gözlendiği bölgedir. Yani infrared spektroskopisi denince akla bu bölge gelir. Dalga sayısı cinsinden 4000-200 cm^{-1} arasındadır.

Uzak İnfrared: Moleküllerin saf dönü hareketiyle ve ağır atom içeren moleküllerin titreşimlerinin incelendiği bölgedir. Mikrodalga bölgesine yakın olduğu için moleküllerin dönme hareketleri de incelenebilir. Bu bölge 200-10 cm^{-1} arasındadır. Kimyasal spektroskopide nadiren kullanılır. Kristal örgü titreşimlerinin incelendiği bölgedir.

Moleküllerin titreşimleri ile ilgili olan, infrared soğurma, iki kısımda incelenebilir. Klasik elektrodinamiğe göre, bir sistemin elektrik dipol momentinde bir değişme oluyorsa, o sistem radyasyon yayınlar. Değişen bu dipol titreşimlerinin frekansı ile yayınlanan radyasyonun frekansı birbirine eşittir. Soğurma ise yayınlamanın tam tersi olarak düşünülebilir. Yani bir sistem yayınlayabildiği frekansa eşdeğer frekanslı bir ışın soğurabilir. Kuantum mekaniğine göre $\psi^{(n)}$ ve $\psi^{(m)}$ dalga fonksiyonları ile belirlenen n ve m gibi iki titreşim enerji düzeyi arasında geçiş olabilmesi için, ışının soğurulma şiddetinin bir ölçüsü olan μ_{nm} geçiş dipol momentinin veya bileşenlerinden en az birinin sıfırdan farklı olması gerekir[4].

2.4. Raman Spektroskopisi

Raman spektroskopisi, infrared spektroskopisine çok benzer ve çoğu kez onu tamamlar. Bir kap içinde bulunan madde (gaz veya çözelti) üzerine monokromatik bir ışın demeti gönderildiği zaman, kabın çevresinde gönderilen ışıdan başka oldukça sınırlı sayıda başka ışınlar da rastlanır. Kabın çevresinde rastlanan gelen ışıdan farklı olan bu ışınlar Raman ışınları, gelen ışının frekansıya bu ışınların frekansları arasındaki $\pm \Delta \nu$ frekans farklarına ise Raman kaymaları denir. Diğer bir deyimle Raman spektroskopisinde önemli olan kullanılan ışının frekansı değil, bu frekansla Raman frekansları arasındaki farklardır. Bu farklar bir madde için karakteristiktir veya parmak izi gibidir. İşte bu özellikten yararlanarak yapılan spektroskopiye Raman spektroskopisi denir ve daha çok yapı analizinde kullanılır.

Bilindiği gibi fotonların moleküller ile etkileşmesi sonucu enerji düzeyleri arasında geçiş olur. Raman spektroskopisinde ise parçacık teorisi düşünülerek fotonun molekül sisteminden saçıldığını söyleriz. Fotonların çoğunluğu elastik olarak saçılır. Raman spektroskopisi, Raman etkisi dediğimiz fotonların moleküllerden elastik olmayan saçılması temeline dayanır. Raman etkisi, saçılan fotonların 10^7 de biri gibi çok küçük bir oranda oluşur. Raman saçılmasında gelen ve saçılan fotonlar farklı enerjilere sahiptir.

3. BİLGİSAYAR HESAPLAMALI MOLEKÜLER SPEKTROSKOPİSİ

Bilgisayar hesaplamalı moleküler spektroskopisi, moleküler yapıyı, kimyasal reaksiyonları ve spektroskopik büyüklükleri hesaplar. Bu hesaplamalarda kullanılan yöntemler Moleküler Mekanik ve Elektronik Yapı Teorisi olmak üzere iki ana gruba ayrılır. Her iki yöntem de benzer hesaplamalar yapar. Bu hesaplamalar, moleküler yapının enerjisinin hesaplanması, geometrik optimizasyon ve titreşim frekanslarının hesaplanması olarak verilir.

3.1. Moleküler Mekanik Metotlar

Moleküler mekanik hesaplamalar, moleküler sistemdeki elektronları açık bir şekilde göz önüne almaz. Bir molekül, yaylarla birbirine bağlanmış kütlelerden oluşan bir sisteme benzer tarzda, harmonik kuvvetlerle etkileşen kütleler topluluğu olarak ele alınır. Burada kütleler, elektronların etrafında küresel olarak dağıldığı atom çekirdeklerini, yaylar ise atomlar arası kimyasal bağları temsil eder[8].

Atomlar arası etkileşimler iki kısma ayrılır[9];

1. Kimyasal bağlarla bağlanmış atomlar arası etkileşimler
 - a. Gerilme
 - b. Açık bükülme
 - c. Burulma
 - d. Düzlem dışı açı bükülme
2. Kimyasal bağlarla birbirine bağlanmamış atomlar arası etkileşimler
 - a. Van der Waals etkileşimleri
 - b. Elektrostatik etkileşimler

Gerilme etkileşimleri,

$$E_{str} = \frac{1}{2}k(b - b_o)^2 \quad (3.1)$$

şeklinde verilmektedir. Burada k :kuvvet sabiti, b_0 : denge durumundaki bağ uzunluğu, b :gerçek bağ uzunluğudur.

Açı bükülme etkileşimleri,

$$E_{bend} = \frac{1}{2} k_o (\Theta - \Theta_o)^2 \quad (3.2)$$

şeklindedir. Burada, k_0 :açı bükülme kuvvet sabiti, Θ_0 :denge durumundaki açı değeri, Θ : açının gerçek değeridir.

Burulma etkileşimleri,

$$E_{tors} = \frac{1}{2} k_\eta (1 + \cos(n\eta - \eta_0)) \quad (3.3)$$

olarak verilir. k_η :kuvvet sabit, η :burulma açısı, η_0 :denge burulma açısı, n :periyodikliktir.

Van der walls etkileşimleri ise,

$$E_{vdw} = \sum \frac{A_{ij}}{r_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{r_{ij}^6} \quad (3.4)$$

ifadesi ile tanımlanabilir. Burada A_{ij} :itici terim, B_{ij} :çekici terim ve r_{ij} :i. ve j. atomlar arasındaki uzaklıktır.

Elektrostatik etkileşme ise

$$E_{elec} = \frac{1}{\epsilon} \frac{\Theta_1 \Theta_2}{r} \quad (3.5)$$

şeklinde. Burada ϵ :dielektrik sabit, Q_1 ve Q_2 etkileşen atomların yükleri ve r :atomlar arasındaki uzaklıktır.

Moleküldeki bağlar ve açılar birbirine bağlıdır. Bundan dolayı, oluşan bir gerilme, bükülme veya burulma hareketi komşu bağları ve bağ açılarını etkiler. Bu tür çiftleşme ile oluşan etkileşimlerin enerjisi genelde saf etkileşimlere göre daha küçük gözlenir. Çiftleşme ile oluşan etkileşimler, burulma-bükülme, gerilme-bükülme gibi etkileşimler olarak verilir.

Atomlar arası etkileşimlerin her biri potansiyel enerji ile tanımlanır. Molekülün toplam potansiyel enerjisi bu etkileşimlere karşılık gelen potansiyel enerjilerin toplamıdır [8,10].

$$E_{TOPLAM} = E_{GERİLME} + E_{AÇIBÜKÜLME} + E_{BURULMA} + E_{VANDERWAALS} + E_{ELEKTROSTATİK} \quad (3.6)$$

3.2. Elektronik Yapı Metotları

Elektronik yapı metotları klasik fizik yasaları yerine kuantum mekaniksel yasaları kullanır. Kuantum mekaniksel olarak bir molekülün enerjisi ve molekül hakkındaki diğer büyüklükler,

$$H\Psi = E\Psi \quad (3.7)$$

Schrödinger denklemi ile belirlenir. Bu denklem ile sadece hidrojen atomunun belirli durumlarının tam çözümü mümkündür. Bu nedenle çok atomlu sistemler için farklı yaklaşım metotları kullanılması gerekir. Bu yaklaşımlardan biri elektronik yapı metotlarıdır. Bu metotlar değişik yaklaşık matematiksel metotlar ile karakterize edilir. Bu metotlar, yarı deneysel metotlar ve ab initio metotlar olmak üzere ikiye ayrılır.

3.2.1. Yarı deneysel metotlar

Yarı deneysel metotlar kullanılarak yapılan hesaplamalarda molekül için oldukça fazla deneysel veri kullanmaya ihtiyaç vardır. MINDO, AM1 ve PM3 hesaplama metotları yarı deneysel metotlardır. Yarı deneysel metotların moleküler mekanik metotlar ve Ab-initio metotları arasında bir durum olduğu söylenebilir. Hesaplama süresi Ab-initio hesaplamalarıyla karşılaştırılamayacak kadar kısadır. Çok küçük sistemler için kullanılabileceği gibi büyük moleküler sistemler için de kullanılabilir. Hesaplamalarda kuantum mekanik yöntemler kullanılır.

3.2.2. Ab initio metotları

Ab initio metotları, moleküler mekanik ve yarı deneysel metotların tersine hesaplanmalar için ışık hızı, Planck sabiti, elektronların kütlesi gibi temel fizik sabitlerini kullanır. Deneysel değerlere ihtiyaç duymaz[11].

1969 yılında Pulay tarafından klasik çalışma başlamıştır. Bu çalışmalar moleküllerin kuvvet alanlarının ve titreşim spektrumlarının kuantum mekaniksel ab initio yöntemler ile hesaplanmasına dayanır. Bu çalışmalar “kuvvet” veya “gradyent” metotları kullanılarak çok atomlu moleküllerin kuvvet alanlarının hesaplanmasında gerçekçi ve iyi sonuç vermiştir. Pulay’ın bu konuya getirdiği temel katkı, enerjinin nükleer koordinatlarına göre birinci türevinin (potansiyel gradyenti) ab initio metotlarda analitik olarak elde edilebileceğini göstermiş olmasıdır. Bu yöntem Hartree-Fock metodu için de geliştirilmiştir. 1970 yılından sonra birinci ve ikinci analitik türevleri kullanarak ab initio metotları ile spektroskopik büyüklükler hesaplanmıştır. Spektroskopik büyüklükler Hartree-Fock (HF), Yoğunluk Fonksiyon Teorisi (DFT), Möller-Plesset teorisi (MP2) gibi yöntemler kullanılarak hesaplanır[12,13]. Bu yöntem birinci türevlerin hesaplanması sonucunda geometrik optimizasyon yapar. İkinci türevler ise kuvvet sabitlerini hesaplar ve bu hesapları kullanarak titreşim frekansları bulunur. İnfrared ve Raman şiddetlerini bulmak için dipol momentlerin türevlerinden yararlanılır. Günümüzde kuantum mekaniksel yöntemler kullanılarak yapılan hesaplamalar GAUSSIAN, GAMES, HONDO, Q-

CHEM gibi paket programları ile yapılmaktadır. Bu programların tamamı değişik mertebeden analitik türevler kullanmaktadır. Çizelge 3.1’de enerjinin türevlerinden hangi büyüklüklerin hesaplanabileceği verilmektedir[12].

Çizelge 3.1. Enerji türevlerinden fiziksel büyüklüklerin hesaplanması

Türev	Hesaplanabilen Büyüklükler
$\frac{\partial E_e}{\partial R}$	Atomlara etki eden kuvvetler, Molekülün geometrisi, Kararlı noktalar
$\frac{\partial^2 E_e}{\partial R_i \partial R_j}$	Kuvvet sabitleri, Temel titreşim frekansları, Infrared ve Raman spektrumları, Titreşim genlikleri
$\frac{\partial^2 E_e}{\partial R_i \partial \epsilon_\alpha}$	Dipol moment türevleri, Harmonik yaklaşımda Infrared şiddeti
$\frac{\partial^3 E_e}{\partial R_i \partial \epsilon_\alpha \partial \epsilon_\beta}$	Kutuplanabilirlik türevleri ve Harmonik yaklaşımda Raman şiddetleri

E_e : Toplam enerji, R: Atomik koordinatlar, ϵ : Elektrik alan bileşeni

3.3. Kuantum Mekaniksel Enerji İfadeleri ve Yoğunluk Fonksiyon Teorisi

Moleküllerin hareketi, kuantum mekaniksel olarak incelendiğinde, çekirdeğin hareketi ve elektronların hareketi olmak üzere iki kısma ayrılır. Çekirdeğin kütesinin elektronun kütesinden çok büyük olması nedeniyle bu iki hareket ayrı ayrı düşünülerek bu ayrım yapılabilir. Bu yaklaşıma *Born-Oppenheimer* yaklaşımı denir[14]. Bir molekülün elektronik enerjisi kuantum mekaniksel olarak kapalı formda,

$$E_e = E^T + E^V + E^J + E^{XC} \quad (3.8)$$

şeklinde yazılabilir. Burada E^T elektronların hareketinden kaynaklanan kinetik enerjiyi, E^V çekirdek-elektron çekimi ve çekirdek çiftleri arasındaki itme potansiyel enerjisini, E^J elektron-elektron itme terimine (elektron yoğunluğunun Coulumb öz-etkileşim olarak da tanımlanır) ve E^{XC} ise değiş-tokuş (E^X) ve korelasyon (E^C) enerji terimlerine ($E^{XC}=E^X+E^C$) karşılık gelir ve elektron-elektron etkileşmelerinin geri kalan kısmını kapsar. Değiş-tokuş enerjisi aynı spinli elektronlar arasındaki etkileşim

enerjisidir. Kuantum mekaniksel dalga fonksiyonunun anti simetrikliğinden dolayı ortaya çıkar. Korelasyon enerjisi ise farklı spinli elektronlar arasındaki etkileşme enerjisidir. Bu enerjilerin büyüklükleri hakkında bir fikir edinmek için neon atomunun enerjilerini örnek olarak verelim. Neon atomunun hesaplanmış enerjileri: $E_e = -129,4$ $E^T = 129$ $E^V = -312$ $E^I = 66$ $E^C = -0,4$ $E^X = -12$ atomik birim Hartree dir (1 hartree $H = 27,192$ eV dir) [11,15].

Hartree-Fock (HF) modelinde enerjinin açık ifadesi moleküler dalga fonksiyonu Ψ 'ye bağlıdır. Bunun yanı sıra bu modelde korelasyon enerjileri dikkate alınmaz.

Yoğunluk Fonksiyon Teorisi (DFT) enerji ifadesi elektron yoğunluğu ρ 'ya bağlıdır. Yoğunluk fonksiyon teorisinde kullanılan üç temel kavramın tanımı aşağıda verilmiştir.

- Elektron yoğunluğu ($\rho(r)$): Herhangi bir noktadaki elektronun yoğunluğunu tanımlar.
- Homojen elektron gaz modeli: Bir bölgedeki yük dağılımının, sisteme düzgün dağılmış n tane elektron ve sistemi nötralize edecek kadar pozitif yükten oluştuğu varsayımına dayalı idealize edilmiş bir modeldir. DTF modellerinde enerji ifadeleri, elektron dağılımının V hacimli bir küp içerisinde olduğu ve elektron yoğunluğunun $\rho = n/V$ ile verildiği sistemde n ve V nin sonsuza yaklaştığı varsayımı yapılır. Burada ρ sabit kabul edilmiştir.
- Fonksiyonel: Fonksiyonel kavramı DTF'de sıkça kullanılmaktadır. Bağımsız x değişkenine bağımlı değişkene fonksiyon denir ve $f(x)$ ile gösterilir. Bir F fonksiyonu $f(x)$ 'e bağımlı ise bu bağımlılığa fonksiyonel denilir ve $F[f]$ ile gösterilir [11,15].

3.4. Karma Yoğunluk Fonksiyon Teorisi

Dalga mekaniğine dayanan HF teorisi değiş-tokuş enerjisi için iyi sonuç vermediği gibi korelasyon enerjilerini de hesaplayamaz. Fakat kinetik enerji ifadesi için uygun bir ifade verebilir. DFT modelleri ise değiş tokuş ve korelasyon enerjilerinde daha iyi sonuç verir. Fakat kinetik enerji ifadesi için iyi sonuç veremez. Bu nedenle tam enerji ifadelerinin hesabı için saf HF veya saf DFT modelleri yerine bu modellerin her ikisinin de enerji ifadeleri, toplam elektronik enerji ifadesinde kullanılarak karma (melez, hibrit) modeller üretilmiştir. Bu modeller toplam enerji, bağ uzunlukları, iyonizasyon enerjileri gibi çoğu büyüklükleri saf modellerden daha iyi hesaplamaktadır.

3.4.1. B3LYP karma yoğunluk fonksiyon teorisi

Literatürde sıkça kullanılan enerji fonksiyonlarının bir çoğu aşağıda verilmiştir.

- Kinetik enerji fonksiyonları: H28, TF27, ...
- Değiş tokuş enerji fonksiyonları: F30, D30, B88, ...
- Korelasyon enerji fonksiyonları: LYP, VWN, ...
- Bir karma model bu enerji ifadelerini birleştirerek yeni bir enerji ifadesi elde edebilir.

Becke, değiş tokuş fonksiyonu ve korelasyon enerjisi E^{XC} için aşağıdaki karma modeli önermiştir,

$$E_{karma}^{XC} = c_{HF} E_{HF}^X + c_{DFT} E_{DFT}^X \quad (3.9)$$

burada c'ler sabitlerdir. Bu karma modeller arasında en iyi sonuç verenler BLYP ve B3LYP karma yoğunluk fonksiyonlarıdır. B3LYP modelinde bir molekülün toplam elektronik enerji ifadesi;

$$E_{B3LYP} = E^T + E^V + E^J + E_{B3LYP}^{XC} \quad (3.10)$$

olarak elde edilir[16]. Bu modeller incelendiğinde deęiş-tokuş ve korelasyon enerjileri için ilgili ifadeler iyi sonuçlar vermesine rağmen sonuçlar tam deęildir. Bu enerjiler ile ilgili olarak DFT modelinde atomik ve moleküler sistemler için daha iyi sonuç verecek fonksiyon çalışmaları literatürde yoğun olarak devam etmektedir[11].

3.5. Temel Setler

Bu kısımda hesaplamalarımızda kullandığımız atomik setler ile ilgili temel bilgiler vereceğiz. Temel set, atomik orbitallerin matematiksel tanımıdır. Bir molekül aynı veya ayrı cins atomların bir araya gelmesi ile oluşur. Bu oluşan molekül orbitallerinde farklı cins atomlar moleküler yapıda benzer özellikler gösterir. Bu nedenle moleküler orbitaller atomik orbitallerin çizgisel toplamı olarak yazılabilir.

$$\Psi_i = \sum_{\mu=1}^N c_{\mu i} \Phi_{\mu} \quad (3.11)$$

Burada Ψ : moleküler orbital, $c_{\mu i}$: moleküler orbital açılım katsayıları ve Φ_{μ} :atomik orbitallerin temel fonksiyonları olarak adlandırılır. Atomik orbitaller için bir çok temel set önerilmiştir. Bunlardan bazılarını kısaca verelim.

- Minimal temel set: Herhangi bir atom için gerektięi sayıda temel fonksiyon içerir. Örneğin,

H: 1s

C: 1s, 2s, 2P_x, 2P_y, 2P_z

- Split valans temel seti: Her bir valans orbitali için farklı büyüklükte (α) iki veya daha fazla temel fonksiyon olarak tanımlanır. Örneğin,

H: 1s,1s'

C: 1s, 2s,2s',2p_x,2p_y,2p_z,2p'_x,2p'_y,2p'_z

Burada işaretli ve işaretsiz orbitallerin büyüklükleri farklıdır. 3-21G, 4-21G, 6-31G temel setler minimal setlerdir. Split valans temel setleri orbitallerin büyüklüğünü değiştirir fakat şeklini değiştirmez.

Bir atomun taban durumu ne kadar iyi tanımlanabilirse, elde edilecek hesaplamalar ile deneysel değerler o kadar iyi uyuşacaktır. Bunun için elektronların bulundukları orbitaller tanımlanırken uygun açisal momentumu orbitallere eklemek suretiyle orbitalin şekli değiştirilmelidir.

3.6. Geometrik Optimizasyon

3.6.1. Minimizasyon yöntemleri

Moleküllerde minimum enerji durumunu ve molekülün geometrisini belirlemek için iyi bir başlangıç geometrisinin elde edilmesi gerekir. Başlangıç geometrisini doğru tahmin edebilmek için dört temel metot vardır. Bunlar,

1. X-ışını veri tabanları kullanmak
2. Literatürde bulunan standart geometriler kullanmak
3. İskelet olarak adlandırılan iki boyutlu basit bir yapı çizmek
4. Bu iki boyutlu yapıyı üç boyutlu yapıya dönüştürmek

Bu şekilde oluşturulan bir başlangıç geometrisi için bir f fonksiyonu tanımlanır. Bu f fonksiyonu $x(i)$ değişkenlerine bağlıdır. Ancak bu değişkenler birbirlerinden bağımsızdır. f fonksiyonunun alabileceği minimum değer $\frac{\partial f}{\partial x_i} = 0$ veya $\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2} > 0$ şartını sağladığı noktalardır.

Minimum enerji değerlerini hesaplamak için iki temel yöntem kullanılır.

1. Steepest Descent, Gradyent ve Powel yöntemi; Bu metotlar $\frac{\partial f}{\partial x_i} = 0$ bağıntısını kullandığı için birinci türev metotları olarak bilinir.

2. Newton- Raphson yöntemi; Bu metot $\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2} > 0$ bağıntısını kullandığı için ikinci türev metodu olarak bilinir.

3.6.2. Steepest Descent yöntemi

Steepest Descent Minimizasyonu; girilen geometriye bağlı olarak koordinat sistemindeki atomların yerlerindeki küçük yer değiştirmeleri kullanarak giriş geometrisi oluşturulur. Bu işlem her defasında atomların bağlı bulunduğu koordinat sistemleri için tekrar edilir. Belirlenen enerji değerine gelinceye kadar sistem hesaplamaya devam eder.

3.6.3. Gradyent yöntemi

Gradyent metodu fonksiyonun birinci türevini kullanarak bir sonraki iterasyonda fonksiyon hakkında bilgi depolar. İlk iterasyonlarda elde edilen veriler ile daha sonraki iterasyonda elde edilen veriler karşılaştırılarak bir yaklaşım sağlanır. Bu yöntemde minimizasyon işleminde tanımlanan vektörün farklı yönlerde hesaplama yapmak için ardışık olarak birbirini izleyen her adımda minimum enerji durumuna yönelmesi sağlanır.

3.6.4. Powel yöntemi

Powel metodu gradyent metodundan daha küçük bir algoritmadır. Powel metodu birbirine yakın değerler bulmada kullanılan hızlı bir metottur. Powel algoritması kullanılırken dikkatli olunması gerekir. Çünkü burulma açılarında ve uzun mesafelerde modifiye edilmelidir. Powel metodunu kullanmadan önce konformasyonel analiz yapılması gerekmektedir. Konformasyon düşük enerji durumu ile değiştirilmelidir. Bu durumda Gradyent metodu ile aynı sonuçları verebilir.

3.6.5. Newton- Raphson yöntemi

Newton- Raphson Minimizasyon metodunda temel olarak ikinci türev kullanılır. Gradyente ek olarak potansiyel enerji fonksiyonunun bükülme yönüne bakar. Eğer bükülme yönünde ikinci türev negatif (-) ise minimuma doğru ilerliyordur. Newton-Raphson metodu diğer metotlar ile karşılaştırıldığında yüksek verimli bir metottur.

Küçük moleküllerin moleküler mekanik hesaplamalarda Newton-Raphson metodu kullanılır. Bunun nedeni küçük sistemlerde depolama ihtiyacının olması ve hesaplama süresi bakımından sorunlar ortaya çıkmasıdır. Bir çok molekülde, Moleküler Mekanik hesaplamalarında dahi, Newton-Raphson Metodu yerine Steepest Descent Metodu gibi metotlar tercih edilir. Bunun nedeni Newton-Raphson metodu, küçük moleküller için moleküler mekanik hesaplamalar kullanılabilir. Ancak elektronun kütlesini hesaba katan Elektronik Yapı Teorisi hesaplamalarında Newton-Raphson Metodu kullanılmaz.

Sonuç olarak; Newton-Raphson metodu ve Powel metodu hesaplamalar için kullanışlı değildir. Bu metotların yerine Gradyent metodu veya Steepest Descent metodu kullanılmalıdır. Gradyent metodu daha hassas hesaplama yapabilmekte ve minimum enerjideki geometrik yapıyı daha iyi tahmin edebilmektedir[8,10].

3.6.6. Gradyent metodu (Kuvvet metodu)

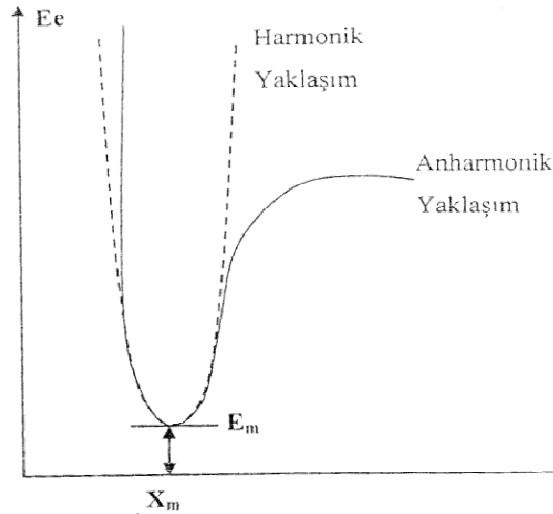
Hesaplamalar moleküle ait belirli bir geometriyi oluşturarak başlar. Bir koordinat sistemindeki atomlar arasındaki yer değiştirmeler, molekülün enerjisinde ve diğer bir çok özelliklerinde değişmelere neden olur. Molekülün yapısındaki değişiklikler sonucunda enerjinin koordinata bağımlılığı sonucuna varılır. Bu bağımlılık moleküler yapı ile molekülün enerjisi arasındaki ilişkidir. Bu ilişki “potansiyel enerji yüzeyi” olarak tanımlanır. Bir molekül için önce potansiyel enerji yüzeyi doğru tanımlanır ve bu tanımdan yararlanılarak molekülün denge geometrisine karşılık gelen minimum enerjili noktalar hesaplanır. İlk olarak gradyent vektörü g hesaplanır.

$$\langle g | = \rho = \left[\frac{\partial E}{\partial x_1}, \frac{\partial E}{\partial x_2}, \dots \right] \quad (3.12)$$

Daha sonra gradyent vektörünün sıfır olduğu noktalar hesaplanır.

$$\langle g | = [0, 0, \dots] \quad (3.13)$$

Çünkü Gradyent vektörünün sıfır olduğu noktalar minimum enerjili duruma karşılık gelir. Bu geometri, molekülün minimum enerji geometrisi olarak tanımlanır.

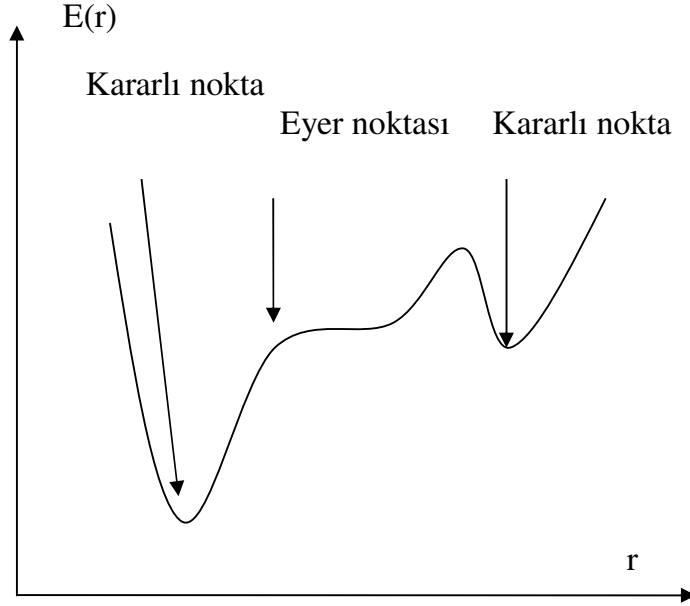


Şekil 3.1. İki atomlu bir molekülde elektronik enerji grafiği

İki atomlu bir molekülde bağ gerilmesine karşılık gelen elektronik enerji grafiği Şekil 3.1’ de verilmiştir. Burada minimum enerjili nokta E_m ve minimum enerjiye karşılık gelen koordinat x_m ile gösterilir.

Bir molekülün potansiyel enerji yüzeyi bir çok maksimum ve minimum bölgeler içerir. Potansiyel enerji yüzeyindeki minimumlar sistemin dengede olduğu yerleri gösterir. Bir molekül için birçok farklı minimumlar bulunabilir ve bu minimumlar molekülün farklı konfigürasyonları ile açıklanabilir. Bu hesaplamalar yapılırken bazen bir sırt bölgesinde bir yönde yerel minimum, diğer yönde bir maksimuma

karşılık gelir. Bu tür noktalar “eyer noktaları” olarak tanımlanır. Bu noktalar iki denge yapısı arasındaki geçişlere karşılık gelir(Şekil 3.2).



Şekil 3.2. İki boyutta potansiyel enerji yüzeyi

Genel olarak geometrik optimizasyon potansiyel enerji yüzeyindeki minimumları araştırarak moleküler sistemlerin denge yapılarını tahmin eder. Optimizasyon geometrisi hesaplanırken geçiş yapıları hesaplanabilir. Ancak bu çalışma için minimum optimizasyon geometrisi hesaplanmıştır.

Geometrik optimizasyon, tanımlanan giriş geometrisindeki moleküler yapı ile başlar ve potansiyel enerji yüzeyini dolaşarak devam eder. Dolaştığı noktalardaki enerji ve gradyenti hesap ederek hangi yöne doğru ne kadar gidileceğine karar verir. Minimumlarında ve eyer noktalarında enerjinin birinci türevi yani gradyent sıfırdır. Bu noktalarda kuvvet de sıfırdır. Potansiyel enerji yüzeyinde gradyent vektörü g 'nin sıfır olduğu noktalara “kararlı noktalar” denir.

Enerjinin atomik koordinatlarına göre ikinci türevi kuvvet sabitini verir. Optimizasyon algoritmaları genellikle Hessian matrisi kullanılarak kuvvet sabitleri ve bir noktadaki yüzeyin eğriliğini tanımlar. Böylece bir sonraki aşamanın belirlenmesini sağlar. Bir sonraki aşamada hesaplanan geometrik parametrelerin

değerleri ile hesaplanan değerler arasındaki fark ihmal edilebilir derecede ise optimizasyon tamamlanmış olur [11,12,17].

3.7. Hesaplama Metodu: Yoğunluk Fonksiyonu Teorisinde Öz Uyumlu Alan Yöntemi (DFT SCF)

Bu kısımda Yoğunluk Fonksiyon Teorisi (DFT) ile molekülün spektroskopik büyüklüklerinin nasıl hesaplanacağını inceleyeceğiz.

Bir moleküler orbital ψ_i , Eş.3.11 ile tanımlanmıştır. Toplam elektron yoğunluğu,

$$\rho = \sum_i^n |\Psi_i|^2 \quad (3.14)$$

şeklinde verilir. Eş.3.11 ve Eş.3.14 ifadelerinin kombinasyonundan elektron yoğunluğu,

$$\rho = \sum_{\mu}^N \sum_{\gamma}^N \sum_i^N c_{\mu i} c_{\gamma i} \Phi_{\mu} \Phi_{\gamma} = \sum_{\mu \gamma} P_{\mu \gamma} \Phi_{\mu} \Phi_{\gamma} \quad (3.15)$$

olarak elde edilir.

Burada

$$P_{\mu \gamma} = \sum_i c_{\mu i} c_{\gamma i} \quad (3.16)$$

yoğunluk matrisi olarak bilinir. Değiş-tokuş ve korelasyon enerjisi, elektron yoğunluğuna ve elektron yoğunluğunun gradyentine bağlı olarak,

$$E^{xc} = \int f(\rho(\vec{r}), \nabla \rho(\vec{r})) d\vec{r} \quad (3.17)$$

şeklinde kapalı formda verilmektedir. Bu enerjiye karşılık gelen değiş-tokuş ve korelasyon potansiyeli,

$$\gamma^{xc}(\vec{r}) = \frac{\delta E^{xc}(\vec{r})}{\delta \rho(\vec{r})} \quad (3.18)$$

ifadesi ile verilmektedir. Standart varyasyonel hesap,

$$\gamma^{xc} = \frac{df}{d\rho} - \frac{d}{dx} \frac{df}{d\rho^x} - \frac{d}{dx} \frac{df}{d\rho^y} - \frac{d}{dx} \frac{df}{d\rho^z} \quad (3.19)$$

ile elde edilir. Burada $\rho^x = \frac{\partial \rho}{\partial x}, \rho^y = \frac{\partial \rho}{\partial y}, \rho^z = \frac{\partial \rho}{\partial z}$

$$\hat{F}_{KS} \Psi_i = \varepsilon_{i,KS} \Psi_i \quad (3.20)$$

Kohn-Sham orbitalleri Ψ_i aşağıdaki tek elektron denklemlerinin çözümünden elde edilir. Burada Kohn-Sham operatörü $\hat{F}_{KS}$ olarak bilinir. Eş.3.8'de verilen enerji ifadesindeki her bir enerji yerine yazılıp $c_{\mu i}$ bilinmeyen katsayılarına göre minimize edilerek yeniden düzenlenirse,

$$\sum_{\gamma}^N (F_{\mu\gamma} - \varepsilon_i S_{\mu\gamma}) c_{\gamma i} = 0 \quad (3.21)$$

denklem seti elde edilir. Burada ε_i dolu orbitaller için tek elektron enerji özdeğerleri ve $S_{\mu i}$: çakışma matrisi olarak tanımlanır.

$$S_{\mu i} = \int \phi_{\mu}(\vec{r}) \phi_{\gamma}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3.22)$$

Kohn-Sham operatörü, (Fock tipi bir matris)

$$F_{\mu\gamma} = H_{\mu\gamma}^{core} + J_{\mu\gamma} + F_{\mu\gamma}^{xc} \quad (3.23)$$

ifadesi ile verilmektedir. Burada,

$$H_{\mu\gamma} = \int \phi_{\mu}(\vec{r}) \left[-\frac{1}{2} \nabla^2 - \sum_a \frac{Z_a}{|\vec{r} - \vec{R}_a|} \right] \phi_{\gamma}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3.24)$$

$J_{\mu\gamma}$ Coulomb matrisi olup,

$$J_{\mu\gamma} = \sum P_{\lambda\sigma} (\mu\gamma|\lambda\sigma) = \iint \phi_{\mu}(\vec{r}) \phi_{\gamma}(\vec{r}) \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \Phi_{\lambda}(\vec{r}) \phi_{\sigma}(\vec{r}') d\vec{r} d\vec{r}' \quad (3.25)$$

İfadesi ile verilmektedir. Kohn-Sahm operatörünün değiş-tokuş ve korelasyon kısmı,

$$F_{\mu\gamma}^{XC\alpha} = \int \left[\frac{\partial f}{\partial \rho_{\alpha}} \phi_{\mu} \phi_{\gamma} + \left(2 \frac{\partial f}{\partial \gamma_{\alpha\alpha}} \nabla \rho_{\alpha} + \frac{\partial f}{\partial \gamma_{\alpha\beta}} \nabla \rho_{\beta} \right) \nabla (\phi_{\mu} \phi_{\gamma}) \right] d\vec{r} \quad (3.26)$$

ifadesi ile verilir. Bu ifadeden hareketle $F_{\mu\gamma}^{XC\beta}$ ifadeleri aynı şekilde türetilebilir. Bu matris elemanları ile Eş.3.19 daki γ^{XC} potansiyel ifadesi özdeştir. Bu ifadeler aşağıda verilen iteratif öz uyumlu alan yöntemi ile çözülür. Sonuçta Eş.3.8 ifadesinden Kohn-Sham elektronik enerji ifadesi,

$$E = \sum P_{\mu\gamma} H_{\mu\gamma}^{core} + \frac{1}{2} P_{\mu\gamma} P_{\lambda\sigma} (\mu\gamma|\lambda\sigma) + E^{XC} \quad (3.27)$$

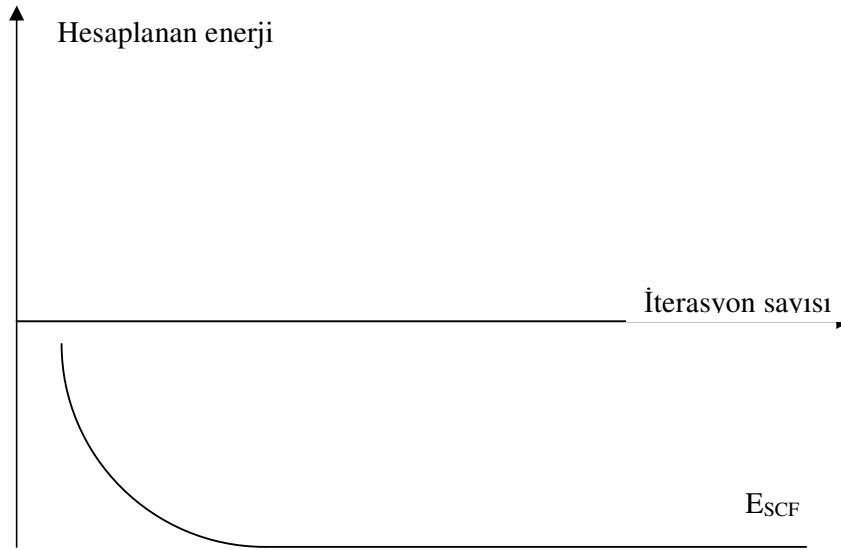
elde edilir. Bu form kullanılan E^{B3LYP} modelidir. Molekülün enerjisi ve geometrik parametreleri DFT modelinde, SCF yöntemi ile hesaplanır.

1. Yaklaşık bir molekülün orbital ifadesi giriş değeri olarak tahmin edilir. Bu tahmin atomik orbitallerin çizgisel kombinasyonlarına dayanır. Elektron yoğunluğu bu tahmînî moleküler orbitalden hesaplanarak giriş değeri olarak girilir.

2. Bu giriş değerinden, tahmînî enerji ifadesi, $S_{\mu\gamma}, H_{\mu\gamma}^{core}, J_{\mu\gamma}, F_{\mu\gamma}^{XC}$ hesaplandıktan sonra $F_{\mu\gamma}$ hesap edilir. Daha sonra karakteristik denklemden ϵ_i ve $c_{\mu i}$ hesap edilir.

3. Bu hesaplamaların sonuçları yeni veriler olarak girilerek c_{μ} lerden ψ_i ler tekrar hesaplanır.

4. Bu başlangıç değeri kullanılıp SCF çevirimi yeniden başlatılarak, elektron yoğunluğu ρ ve $S_{\mu\gamma}, H_{\mu\gamma}^{core}, J_{\mu\gamma}, F_{\mu\gamma}^{XC}, \epsilon_i, c_{\mu}, E_e, \frac{\partial E}{\partial R}$ yeniden hesaplanır. Bu işlem hesaplanan büyüklüklerin bir önceki değerle hesaplanan değeri arasındaki fark kabul edilebilir bir seviyeye gelinceye kadar döngü devam eder. Örnek olarak enerjinin yakınsamasını göz önüne alalım. Hesaplanan enerji değerleri arasındaki fark kabul edilebilir bir değere yaklaşıncaya enerji kendini tekrar eden düz bir çizgi şeklini alır. Hesaplama bu seviyede kesilerek SCF iterasyonu durur. Enerjinin yakınsaması ile işlem sayısı arasındaki ilişki Şekil 3.3 ile verilmiştir [17,18].



Şekil 3.3. SCF yönteminde enerjinin yakınsaması.

3.8. Normal Koordinat Analizi

Normal koordinat analizini kullanarak moleküllerin titreşim hareketlerini inceleyebiliriz. Bu yöntemde;

- Molekölün nokta grubu belirlenir.
- Normal modların kaç farklı simetri türüne sahip olduğu belirlenir.

- Bu simetri türlerine ait titreşim sayıları belirlenir.
- Molekölün özelliğine göre titreşim türlerinin IR ve Raman aktiflikleri belirlenir.
- Titreşim frekansları hesaplanır. Bu hesaplama moleküllere ait kuvvet sabitlerinin bulunması ile yapılır. Bu hesaplamalar, Wilson GF metodu kullanılarak yapılacaktır.

3.8.1. Wilson GF metodu

İki atomlu bir molekülde, molekülün titreşimi iki atomu birleştiren moleküler bağ boyunca oluşur. Ancak çok atomlu bir molekül için durum oldukça karmaşıktır. Moleküllerin titreşimini incelerken her bir atomun hareketinden kaynaklanan kinetik enerjiyi ve atomlar arası etkileşmelerin sonucu oluşan potansiyel enerjiyi göz önüne almak gerekir. Lagrange hareket denkleminde kinetik enerji ve potansiyel enerji ifadelerini kullanarak karakteristik denklem elde edilmelidir.

Moleküllerin titreşimleri incelenirken bir çok koordinat sistemi kullanılır. Bu titreşim koordinatları; kartezyen koordinat, iç koordinat, doğal iç koordinatlar, normal koordinatlardan oluşur. Farklı koordinat sistemleri kullanılmasının nedenleri şunlardır;

- Kinetik enerji kartezyen koordinatlarda yazıldığında titreşim şekillerini çizmek daha kolaydır.
- Ancak potansiyel enerji kartezyen koordinatlarda ifade edildiğinde çok karmaşık etkileşim terimleri ortaya çıkar. Bu hesaplamaları kartezyen koordinatlarda yapmak neredeyse imkânsızdır. Ancak bu işlemi iç koordinatlarda yapmak oldukça kolaydır. Çünkü iç koordinatlarda molekülün öteleme ve dönme hareketlerini hesaplamaya gerek kalmaz. Bu ifadelerden kurtulmak için iç koordinatlar kullanmak gerekir. İç koordinatlar kullanılarak moleküle ait kuvvet sabitleri hesaplanır.

N atomlu molekülün kinetik enerji ifadesi kartezyen koordinatlarda,

$$T = \frac{1}{2} \sum_N m_N \left[\left(\frac{d\Delta x_N}{dt} \right)^2 + \left(\frac{d\Delta y_N}{dt} \right)^2 + \left(\frac{d\Delta z_N}{dt} \right)^2 \right] \quad (3.28)$$

olarak yazılabilir. Kütle ağırlıklı genelleştirilmiş koordinatlar

$$q_1 = \sqrt{m_1} \Delta x_1, \quad q_2 = \sqrt{m_1} \Delta y_1, \quad q_3 = \sqrt{m_1} \Delta z_1 \quad (3.29)$$

olarak verilir. Kinetik enerji ifadesi,

$$T = \frac{1}{2} \sum_i^{3N} q_i^2 \quad (3.30)$$

şeklinde yazılır. Potansiyel enerji ise,

$$V(q_1, q_2, \dots, q_{3n}) = V_0 + \sum_i^{3N} \left(\frac{\partial V}{\partial q_i} \right)_0 + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^{3N} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j} \right) q_i q_j + \dots \quad (3.31)$$

şeklinde yazılır. Moleküle ait titreşimlerin hesaplanmasında normal koordinatlar kullanılır. Bu koordinat sisteminde, yer değiştirme koordinatı (q_i), normal koordinat Q şeklinde ifade edilecektir. Yani

$$q_k = \sum_i B_{ki} Q_i \quad (3.32)$$

olarak verilir.

$$Q_i = Q_i^0 \sin(2\pi\nu_i t + \phi) \quad (3.33)$$

Burada, ν_i : normal titreşimdeki normal koordinatın zaman ile değişimi ve Φ faz farkı olarak verilir.

N atomlu bir molekülün $3N$ tane serbestlik derecesi vardır. Üç eksen boyunca öteleme ve üç eksen etrafında dönme titreşimleri serbestlik derecesinden çıkarılırsa, molekülün $3N-6$ temel titreşim modu bulunur. Normal titreşimlerden her biri diğerinden bağımsız olarak hesaplanır. Bir normal titreşimin nasıl hesaplandığını görelim. Başlangıç şartları, $Q_1^0 \neq 0$, $Q_2^0 \neq 0$, $Q_3^0 \neq 0$ şeklinde alındığında Eş.3.32 ifadesi;

$$q_k = B_{k1}Q_1 = B_{k1}Q_1^0 \sin(2\pi\gamma_1 t + \phi_1) \quad (3.34)$$

$$q_k = A_{k1} \sin(2\pi\gamma_1 t + \phi_1) \quad (3.35)$$

şeklinde yazılabilir. Bir titreşim modunda bütün atomlar aynı frekansta ve aynı fazda titreşir. Bu nedenle Eş.3.32 ifadesi bütün k 'lar için geçerlidir.

Bağ uzunluğu, bağlar arasındaki açılar ve bunlardaki değişimler ayrı bir koordinat olarak seçilebilir. Bu koordinatlar iç koordinatlar olarak tanımlanır ve R ile gösterilir.

$$R=BX \quad (3.36)$$

Burada, B : dönüşüm matrisi, R : iç koordinat matrisi, X : kartezyen koordinat matrisi olmak üzere iki koordinat arasında dönüşüm yapılabilir.

Wilson; potansiyel ve kinetik enerji ifadelerini Eş.3.29 ve Eş.3.31 ifadelerini kullanarak aşağıdaki şekilde vermiştir.

$$2V=R^tFR \quad (3.37)$$

$$2T=R_tG^{-1}R^t \quad (3.38)$$

Burada R^t : İç koordinat matrisinin transpozu, R^t : İç koordinat matrisinin türevi, G : Kinetik enerji matrisi, F : Kuvvet sabiti matrisi olarak tanımlanır.

$$F = \begin{bmatrix} F_{11} & F_{12} & F_{13} & \dots & \dots \\ F_{21} & F_{22} & \dots & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ \vdots & \vdots & & & \ddots \end{bmatrix} \quad (3.39)$$

Burada, $G=BM^{-1}B'$ dönüşümü yazılmalıdır.

M^{-1} matrisi, moleküldeki i. atomun kütlesi m_i olmak üzere, $\mu=1/m_i$ tanımlaması yapıldığında

$$M^{-1} = \begin{bmatrix} \mu_1 & & & & \\ & \mu_1 & & & 0 \\ & & \mu_1 & & \\ & & & \mu_2 & \\ 0 & & & & \ddots \\ & & & & & \mu_N \end{bmatrix} \quad (3.40)$$

olarak verilmektedir. Elde edilen bu sonuçlardan sonra Lagrange hareket denklemleri iç koordinatlarda,

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial T}{\partial R'_k} \right) + \frac{\partial V}{\partial R_k} = 0 \quad (3.41)$$

olarak yazılır. Karakteristik denklem aşağıdaki şekilde tanımlanır.

$$\begin{vmatrix} \sum G_{1r} F_{r1} - \lambda & \sum G_{1r} F_{r2} & \dots \\ \sum G_{12} F_{r1} & \sum G_{2r} F_{r2} - \lambda & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} \equiv |GF - E\lambda| = 0 \quad (3.42)$$

Bu denklemi karakteristik determinant olarak adlandırılır. Burada E: birim matris, G:kinetik enerji matrisinin tersi, F: kuvvet sabiti matrisidir. Karakteristik denklemin

köklerinden λ hesaplanır. Hesaplanan λ değerinden moleküle ait titreşim dalga sayıları $\bar{\nu}$ hesaplanır [19,20].

3.8.2. Toplam enerji dağılımı(TED)

Molekülün toplam enerji dağılımını kullanarak, hesaplanan frekansların hangi titreşim hareketine karşılık geldiği belirlenebilir[21]. Bu kısımda moleküle ait titreşim dalga sayılarının işaretlenmesinin nasıl yapıldığı incelenecektir.

İç koordinatlar (R) ile normal koordinatlar (Q) arasındaki ilişki,

$$R=LQ \quad (3.43)$$

ifadesi ile verilir. Bu ifade açık formda,

$$\begin{aligned} R_1 &= l_{11}Q_1 + l_{12}Q_2 + \dots + l_{1N}Q_N \\ R_2 &= l_{21}Q_1 + l_{22}Q_2 + \dots + l_{2N}Q_N \\ &\vdots \\ R_i &= l_{i1}Q_1 + l_{i2}Q_2 + \dots + l_{iN}Q_N \end{aligned} \quad (3.44)$$

şeklinde yazılabilir.

Burada Q_N normal koordinat değerleri ν_N frekansı ile değiştiğinde R iç koordinatlar ayrı $R_1, R_2, \dots, R_i$ frekansı ile değişecektir. Belli bir frekansa karşılık gelen R_i değerleri genlikleri oranında titreşim frekansı oluşturur. Q_N 'e karşılık gelen bir normal titreşimde, iç koordinatların genliklerinin bağıl oranları,

$$l_{1N}:l_{2N}:\dots:l_{iN} \quad (3.45)$$

ifadesi ile verilir. Genlikler birbiriyle karşılaştırıldığı zaman genliklerin oranı,

$$GFI_N = l_N \lambda_N \quad (3.46)$$

şeklindedir. Burada I_N sütun matrisidir. I_N matrisi $I_{1N}, I_{2N}, \dots, I_{iN}$ elemanlarından oluşur. i : iç koordinatların sayısıdır, G ve F matrisleri biliniyor ise dalga sayısı hesaplanabilir. L sütun matrisi her bir λ için aşağıdaki ifadeden elde edilebilir.

$$GFL=LA \quad (3.47)$$

Burada Λ : elemanları λ değerlerinin oluşturduğu bir köşegen matristir. Buradan I_{ij} 'lerin oranları elde edilir.

$$G=LL^t \quad (3.48)$$

Bu ifade normalizasyon koşulu kullanılarak hesaplanır. Çünkü genlik değerleri, gerilme ve bükülme koordinatlarında farklı olması nedeniyle deneysel değerlerle uyumsuzluk göstermektedir[19,20].

Pulay ve Török tarafından toplam enerji dağılımı(TED) şu şekilde karakterize edilmiştir[22]. Toplam enerji dağılım matrisi,

$$[TED]_i^k = L_{ik} L_{ik}^{-1} \quad (3.49)$$

olarak tanımlanır. Herhangi bir k titreşim modu için $[TED]_i^k$ değerlerinin toplamı bire eşit olmalıdır. Titreşim moduna karşılık gelen işaretleme, toplam enerjisine katkı miktarı olarak tanımlanır. Bu nedenle titreşim frekanslarının işaretlemesi toplam enerji dağılımı göz önüne alınarak yapılır. İşaretlemeler çoğu zaman potansiyel enerji dağılımı PED ile de yapılmaktadır. TED ile PED benzer sonuçlar vermesine karşın TED'in daha iyi sonuç verdiği kabul edilmektedir[22,23].

3.9. SQM Metodu

SQM metodunda kullanılan işlem sırası aşağıda verilmiştir.

- Molekülün yaklaşık geometrisi veri olarak girilir.

- Geometrik optimizasyon ve kullanılacak temel set seçilerek, seçilen model çerçevesinde enerjinin birinci analitik türevleri alınarak hesaplanabilir. Bu hesaplama sonucunda molekülün minimum enerjiye sahip geometrisi elde edilmiş olur.
- Molekülün titreşim frekanslarını hesaplamak için geometrik optimizasyon sonucunda elde edilen geometri, veri olarak girilerek hesaplama modeli seçilir. Seçilen model, enerjinin ikinci analitik türevini kullanarak kuvvet sabitlerini hesaplar. Bu kuvvet sabitleri kullanılarak titreşim frekansları harmonik yaklaşım metodu ile hesaplanır. Elde edilen titreşim frekansları deneysel değerlerle uyum sağlaması için uygun ölçekleme faktörleri kullanılarak ölçeklenir.

Çok atomlu moleküllerin kuvvet sabitlerinin ilk sistematik hesaplamaları gradyentin nümerik türevi bulunarak yapılmıştır. 1970'li yıllarda özellikle HF modeli ile yapılan hesaplamalar, kuvvet sabitleri ve titreşim frekanslar ile ilgili olarak aşağıdaki sonuçları vermiştir[24].

Hesaplanan kuvvet sabitlerini incelediğimizde,

- Teorik hesaplar, gerilme kuvvet sabitlerini sistematik olarak deneysel değerlerden %10-15 büyük hesaplar.
- Teorik hesaplar, bükülme kuvvet sabitleri sistematik olarak deneysel değerlerden % 20-30 büyük hesaplar. Program tarafından hesaplanan kuvvet sabitleri deneysel değerler ile karşılaştırıldığı zaman kuvvet sabitlerindeki hata oranı % 10-30 arasında değişebilmektedir.

Hesap edilen kuvvet sabitlerindeki hata oranı doğal olarak titreşim frekanslarını etkileyecektir. Deneysel olarak gözlenen frekans değerleri ile hesaplanan frekans değerleri arasındaki farkı gidermek amacıyla ölçekleme metodu geliştirilmiştir. Bu alanda ilk ciddi çalışma, Pulay ve Meyer tarafından etilen ve asetilen molekülleri için yaptıkları kuvvet alanı çalışmalarında kullandıkları basit ölçekleme yöntemidir[25]. Bu çalışmada hesaplanan değerler ile teorik değerler karşılaştırılarak sabit ölçekleme faktörleri bulunmuştur.

Hesaplamalar ile ilgili benzer çalışmalar da eş zamanlı olarak diğer gruplar tarafından yapılmıştır[26]. Blom ve Altona tarafından teorik kuvvet alanının daha doğru elde edilmesi için ölçekleme metodu kullanılmıştır. Bu çalışmada kuvvet sabitlerinin hesabının tümünde farklı ölçekleme metodu kullanılmıştır. Örneğin; titreşimleri kuvvet sabitleri ile hesaplanırken; C-C gerilme, C-H gerilme, bükülme, sallanma, burulma ve CH₂ dalgalanma değerlerinin her biri için farklı ölçekleme kullanılmışlardır. Köşegen dışı kuvvet sabitlerinden elde edilen titreşim hareketleri için de farklı ölçekleme metodu kullanmışlardır[27]. Bugün yapılan çalışmalarda ölçekleme için sistematik bir model geliştirilmiştir. Örneğin, Pulay ve arkadaşları HF/4-21 G ve HF/4-21 G* metotları için ölçeklemeyi sistematik hale getirmişlerdir. Bu şekilde yapılan çalışmalar eş zamanlı yapılan çalışmalar ile kıyaslandığında ölçekleme metodunda çok daha başarılı sonuçlar elde edilmiştir.

SQM yönteminde moleküler geometri doğal iç koordinatlar kullanılarak hesap edilir. Doğal iç koordinatlarda temel olarak,

- Gerilme koordinatları olarak bağ değişimlerini,
- Deformasyon koordinatları olarak burulmaları ve bağ açıları hesap edilir. Grup teorisi yardımı ile bunun dışında kalan titreşim hareketleri (bükülme ve burulmalar) çizgisel kombinasyonlarından elde edilir. Orta büyüklükteki moleküller doğal iç koordinatlarda gruplandırılarak her bir grup için ölçekleme faktörlerinin oluşturulması Pulay ve Fogarasi tarafından önerilmiştir[15,24,28]. Ölçekleme doğal koordinatlardaki kuvvet sabiti matrisinin elemanlarına aşağıdaki şekilde uygulanır. F_{ij}^{SQM} herhangi bir model ile (HF,DFT,...) hesaplanmış teorik kuvvet sabiti, F_{ij}^{SQM} ölçeklenmiş kuvvet sabiti olmak üzere aralarında ilişki aşağıda verilmiştir.

$$F_{ij}^{SQM} = (s_i s_j)^{1/2} F_{ij}^{teo} \quad (3.50)$$

Burada s_i ve s_j sırası ile i. ve j. doğal iç koordinatlara karşılık gelen ölçekleme faktörleridir. Ölçekleme yöntemi ile hesaplanan değerler ile deneysel değerler karşılaştırıldığında uyum içinde olması gerekir[28-31]. P.Pulay ve G.Rauhut

tarafından DFT/B3LYP 6-31 G* modeli için SQM metodu geliştirilmiştir. Bu çalışmada yirmi tane basit organik molekül (C,H,N,O,...içeren) için geometrik optimizasyonu DFT/B3LYP 6-31 G* metodu kullanılarak yapılmıştır. Bu moleküllere ait 347 tane temel titreşim frekansı hesaplanarak bu değerler deneysel değerler ile karşılaştırılıp ölçekleme faktörleri belirlenmiştir. Bu çalışmanın sonucunda farklı tipte on bir tane ölçekleme faktörü önermişlerdir. Daha sonra orta büyüklükteki 309 tane test molekülüne ait temel titreşim frekansları ve infrared spektrumları incelenerek test edilmiştir. Hesaplamalar DFT/B3LTP 6-31 G* düzeyindeki bir teori ile yapılan frekans hesaplarının deneysel değerlerden ortalama %5 daha büyük olarak hesaplandığını göstermiştir. Bunun temel nedeni anharmonik yaklaşım modelinin eksikliği ve molekül geometrisinden kaynaklanan hatalardır[32].

4. SONUÇ

Bir molekülde atomların uzaydaki geometrik dağılımı molekülün simetrisini oluşturur. Molekülün simetrisindeki nokta, eksen ve düzlem gibi geometrik elemanları bir grup oluşturur. Simetri elemanlarına simetri işlemi uygulanarak moleküle ait nokta grubu bulunur. Moleküle ait temel titreşim modlarının hangi simetri türüne ait olduğu ve bu titreşimlerin Infrared ve Raman spektrumlarında gözlenip gözlenemeyeceği grup teori yardımıyla karakter tabloları kullanılarak bulunabilir. Bunun için aşağıdaki yöntemi izlemek gerekir.

- 1- Molekülün ait olduğu nokta grubunun bulunması.
- 2- Moleküldeki her bir atoma yerleştirilen koordinat eksenlerinin simetri işlemine göre değişimleri incelenerek her bir simetri işlemine bağlı olan dönüşüm matrislerinin bulunması.
- 3- Aşağıda verilen indirgeme formülünden yararlanılarak indirgenmez gösterimlerin türü ve sayısının bulunması.

$$n_i = \frac{1}{h} \sum_s m_s \chi(s) \chi_i(s) \quad (4.1)$$

Burada,

n_i : i. Simetri türündeki titreşim kip sayısı

h: Grubun derecesi

m_s : Sınıftaki simetri işlemi sayısı

$\chi(s)$: İndirgenebilen gösterim

$\chi_i(s)$: i. Simetri türündeki indirgenemeyen gösterim

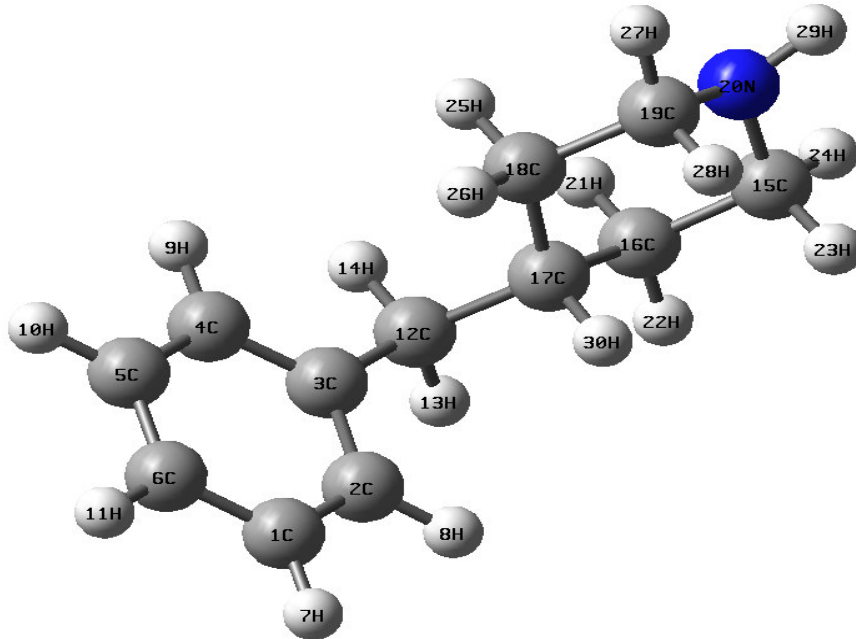
N atomlu bir molekülde her atomun konumu x,y,z yer değiştirme koordinatları ile verilir. Çok atomlu moleküllerin titreşim hareketi genel olarak oldukça karışıktır. Bir molekülün temel titreşim kipleri (normal mod), bütün atomların aynı fazda ve aynı frekansta yaptıkları titreşim hareketidir. N atomlu bir molekülün 3N tane serbestlik derecesi vardır. Lineer olmayan bir molekül için 3 eksen boyunca öteleme ve 3 eksen

boyunca dönme (doğrusal moleküllerde iki) titreşimleri, serbestlik derecesinden çıkartılırsa, $3N-6$ tane (molekül lineer ise $3N-5$) temel titreşim elde edilir. Kapalı halka oluşturmayan N atomlu bir molekülün $N-1$ bağ gerilme, $2N-5$ açı bükülme (lineer ise $2N-4$) titreşimi vardır.

4.1. 4-Benzilpiperidin Molekülünün Teorik Hesaplama Sonuçları

4-Benzilpiperidin molekülü $C_{12}H_{17}N$ genel formülüne sahip 20 atomlu bir moleküldür. Kimyasal Formülü $4-(C_6H_5CH_2)C_5H_{10}N$ olup moleküler ağırlığı 175.28 g/mol 'dür. Renksiz ve sıvı haldedir. Yanıcı bir moleküldür. 4-Benzilpiperidin molekülü daha çok eczacılık endüstrisinde kullanılmaktadır.

Bu çalışmada 4-benzilpiperidin molekülü, moleküler çizim programı olan Gauss-view yardımıyla üç boyutlu olarak çizildi. Çizilen bu yapının geometrik parametreleri Gaussian 98 paket programına giriş verileri olarak kullanıldı[33]. Daha sonra değişik yöntem ve baz setleri kullanılarak optimize edildi. Optimize edilen konfigürasyonun titreşim frekansları ölçekleme faktörleriyle çarpılarak düzeltildi. 4-benzilpiperidin molekülünün optimize edilmiş yapısı Şekil 4.1 de gösterilmiştir.



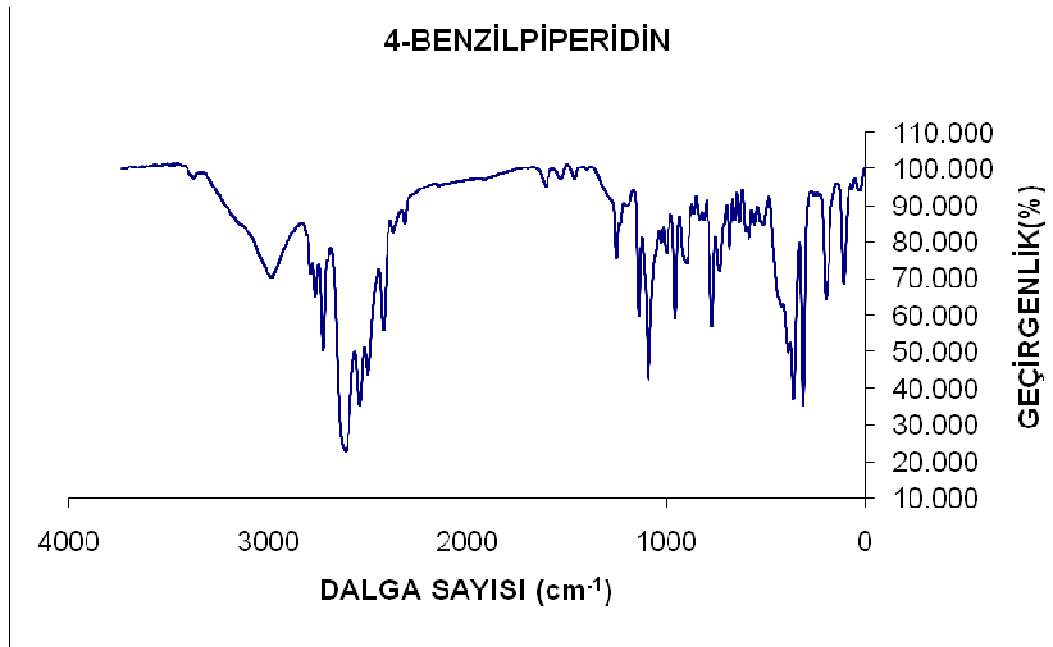
Şekil 4.1. 4-benzilpiperidin molekülü ve atomlarının numaralandırılması

4-benzilpiperidin molekülü düşük simetriye sahip bir molekül olup sadece E(özdeşlik) simetri elemanı vardır. Bu da C_1 simetri grubuna karşılık gelir. C_1 simetri grubu için karakter tablosu Çizelge 4.1.'de verilmiştir.

Çizelge 4.1. C_1 nokta grubu karakter tablosu

C_1	E
A	1
Γ_A	84A

4-benzilpiperidin molekülünün deneysel infrared spektrumu Şekil 4.2'de değişik yöntem ve baz setlerinde hesaplanan enerji değerleri Çizelge 4.2'de verilmiştir.



Şekil 4.2. 4-benzilpiperidin molekülünün deneysel infrared spektrumu

Çizelge 4.2. 4-benzilpiperidin molekülünün değişik yöntem ve baz setlerinde hesaplanan enerji değerleri

S.N.	YÖNTEM-BAZ SETİ		ENERJİ DEĞERLERİ(eV)
1	Hartree-Fock	6-31G	-518,565807539
2	Hartree-Fock	6-31G(d)	-518,768151522
3	Hartree-Fock	6-31G(d,p)	-518,797341399
4	Hartree-Fock	3-21G	-515,889585319
5	Hartree-Fock	3-21G(d)	-515,889585319
6	Hartree-Fock	6-311G	-518,657111080
7	Hartree-Fock	6-311G(d)	-518,859651007
8	Hartree-Fock	6-311G(d,p)	-518,886410372
9	B3LYP	6-31G(d)	-522,269268017
10	B3LYP	6-31G(d,p)	-522,295546574
11	B3LYP	6-311G	-522,250031152
12	B3LYP	6-311G(d)	-522,378384001
13	BLYP	3-21G	-519,129991129
14	BLYP	6-31G	-521,863389505
15	BLYP	6-31G(d)	-521,980697471
16	BLYP	6-31G(d,p)	-522,006866725
17	BLYP	6-311G	-521,988472590
18	BLYP	6-311G(d)	-522,101196398

4.2. 4-Benzilpiperidin Molekülünün Geometrik Parametreleri

4-benzilpiperidin molekülü için yaptığımız literatür taraması sonucu elektron kırınım yöntemi kullanılarak veya deneysel başka bir yöntemle 4-benzilpiperidin molekülünün geometrik parametrelerine rastlanılmadığından değişik yöntem ve baz setleri ile yaptığımız teorik çalışmayı Gundersen ve arkadaşları tarafından piperidin molekülü için hesaplanan geometrik parametrelerle karşılaştırdık. Gundersen ve arkadaşları, piperidin molekülünün gaz fazındaki geometrik parametrelerini elektron kırınım yöntemini kullanılarak deneysel olarak hesaplamışlardır (Çizelge 4.3.) [34]. Piperidin molekülünün gaz fazındaki deneysel bağ uzunlukları ile 4-benzilpiperidin molekülünün değişik yöntem ve baz setleri kullanarak hesaplanan bağ uzunlukları Çizelge 4.5’de , Piperidin molekülünün gaz fazındaki deneysel bağ açıları ile değişik yöntem ve baz setlerinde 4-benzilpiperidin molekülünün hesaplanan bağ açıları Çizelge 4.6’da ve 4-benzilpiperidin molekülünün değişik yöntem ve baz setlerinde hesaplanan dihedral açıları Çizelge 4.7’de verilmiştir. 4-benzilpiperidin molekülünün değişik yöntem ve baz setlerinde hesaplanan ve gözlenen titreşimsel modların

karşılaştırılmalı çizelgeleri de Çizelge 4.8 - Çizelge 4.25’de verilmiştir. Söz konusu çizelgelerdeki ölçeklenmiş frekanslar (cm^{-1}), hesaplanan frekansların (cm^{-1}) Çizelge 4.4’de belirtilen ölçekleme faktörleriyle çarpılmasından, titreşimin adı ise molekülün titreşimlerinin Gaussian 98 programından gözlemlenmesi sonucu elde edilmiştir.

Piperidin molekülünün deneysel bağ uzunluklarının 4-benzilpiperidin molekülünün değişik yöntem ve baz setlerinde hesaplanan teorik bağ uzunlukları ile korelasyon grafikleri Şekil 4.3’de, 4-benzilpiperidin molekülünün deneysel titreşim modlarının değişik yöntem ve baz setlerinde hesaplanan teorik titreşim modları ile korelasyon grafikleri Şekil 4.4’de verilmiştir. Değişik yöntem ve baz setlerinde korelasyon katsayıları hesaplanırken; bağ uzunlukları için hesaplanan değerlerden deneysel değerlere en yakın sonuç veren değerler, titreşim modları için ise hesaplanan değerlerden deneysel değerlere en yakın sonuç veren ilk 10 değer dikkate alınmıştır.

Ayrıca deneysel değerler ile teorik değerlerin en iyi sonuç verdiği hesaplamalardan BLYP 6-311G Hesaplama metodu için yaklaşık PED hesaplamaları Çizelge 4.26’da verilmiştir.

Çizelge 4.3. Piperidin molekülünün taban seviyesindeki deneysel geometrik parametreleri

PARAMETRELER			
BAĞ UZUNLUKLARI (Å)	DENEYSEL*	BAĞ AÇILARI (°)	DENEYSEL*
N-H	1,015	H-C-H	110,0
C-H	1,098	C-N-C	110,7
N-C	1,469	N-C-C	110,5
C-C	1,53	C-C-C	111,1

*Gundersen ve Rankin tarafından elde edilen deneysel değerler[35].

Çizelge 4.4. Ölçekleme Faktörleri[37].

Metotlar / Standart Baz Setleri		
Hartree fock	HF	3-21G
		3-21G(d)
Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi	BLYP	6-31G
		6-31G(d)
	B3LYP	6-31G(d,p)
		6-311G(d)
		6-311G(d,p)

Çizelge 4.5. Taban enerji seviyesinde 4-benzilpiperidin molekülünün teorik, piperidin molekülünün deneysel bağ uzunlukları

Optimizasyon Uzunlukları (Angstroms)													
S.N.	UZUNLUK	Hartree-Fock				B3LYP				BLYP			
		6-31G	6-31G-d	6-31G-d-p	3-21G	3-21G*	6-311G	6-311G-d	6-311 G-d-p	6-31G-d	6-31G-d-p	6-311G	6-311G-d
1	C1-C2	1,39	1,38	1,38	1,38	1,38	1,39	1,38	1,38	1,39	1,39	1,41	1,40
2	C1-C6	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,40	1,40	1,40	1,41	1,40
3	C1-H7	1,07	1,08	1,08	1,07	1,07	1,07	1,08	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
4	C2-C3	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,40	1,40	1,41	1,41	1,41
5	C2-H8	1,07	1,08	1,08	1,07	1,07	1,07	1,08	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
6	C3-C4	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	1,40	1,40	1,40	1,41	1,41
7	C3-C12	1,51	1,52	1,52	1,52	1,52	1,51	1,51	1,52	1,52	1,52	1,53	1,52
8	C4-C5	1,39	1,39	1,39	1,39	1,39	□□□ ₉	1,39	1,40	1,40	1,40	1,41	1,40
9	C4-H9	1,07	1,08	1,08	1,07	1,07	1,07	1,08	1,09	1,09	1,09	1,10	1,09
10	C5-C6	1,39	1,38	1,38	1,38	1,38	1,39	1,38	1,40	1,39	1,40	1,41	1,40
11	C5-H10	1,07	1,08	1,08	1,07	1,07	1,07	1,08	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09
12	C6-H11	1,07	1,08	1,08	1,07	1,07	1,07	1,08	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09

Çizelge 4.5. (Devam) Taban enerji seviyesinde 4-benzilpiperidin molekülünün teorik, piperidin molekülünün deneysel bağ uzunlukları

S.N.	UZUNLUK	Optimizasyon Uzunlukları (Angstroms)											
		Hartree-Fock						B3LYP			BLYP		
13	C12-H13	6-31G	6-31G-d	6-31G-d-p	3-21G	3-21G*	6-311G	6-311G-d	6-311 G-d-p	6-31G-d	6-31G-d-p	6-311G	6-311G-d
14	C12-H14	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,08	1,09	1,09	1,10	1,10	1,10	1,11
15	C12-C17	1,54	1,54	1,54	1,55	1,09	1,54	1,54	1,54	1,55	1,57	1,11	1,11
16	C15-C16 1,530*	1,53	1,53	1,53	1,54	1,54	1,53	1,53	1,53	1,54	1,56	1,56	1,56
17	C15-N20 1,469*	1,46	1,45	1,45	1,47	1,47	1,46	1,45	1,45	1,47	1,49	1,48	1,48
18	C15-H23 1,098*	1,09	1,09	1,09	1,08	1,08	1,08	1,09	1,09	1,10	1,11	1,11	1,10
19	C15-H24 1,098*	1,08	1,08	1,09	1,08	1,08	1,08	1,08	1,09	1,10	1,10	1,11	1,10
20	C16-C17 1,530*	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,54	1,53	1,53	1,54	1,56	1,55	1,55
21	C16-H21 1,098*	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10	1,11	1,11	1,11
22	C16-H22 1,098*	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,08	1,09	1,09	1,10	1,11	1,11	1,10
23	C17-C18 1,530*	1,54	1,53	1,53	1,54	1,54	1,54	1,53	1,53	1,54	1,56	1,55	1,55
24	C17-H30 1,098*	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10	1,11	1,11	1,11
25	C18-C19 1,530*	1,53	1,53	1,53	1,54	1,54	1,53	1,53	1,53	1,54	1,56	1,55	1,55
26	C18-H25 1,098*	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,09	1,10	1,11	1,11	1,11
27	C18-H26 1,098*	1,08	1,09	1,09	1,08	1,08	1,08	1,09	1,09	1,10	1,11	1,10	1,10
28	C19-N20 1,469*	1,46	1,45	1,45	1,47	1,47	1,46	1,45	1,45	1,47	1,49	1,48	1,48
29	C19-H27 1,469*	1,08	1,08	1,09	1,08	1,08	1,08	1,08	1,09	1,10	1,10	1,11	1,10
30	C19-H28 1,098*	1,09	1,09	1,09	1,08	1,08	1,08	1,09	1,09	1,10	1,11	1,11	1,10
31	N20-H29 1,098*	1,00	1,00	1,00	1,01	1,01	1,00	1,00	1,00	1,02	1,02	1,03	1,03

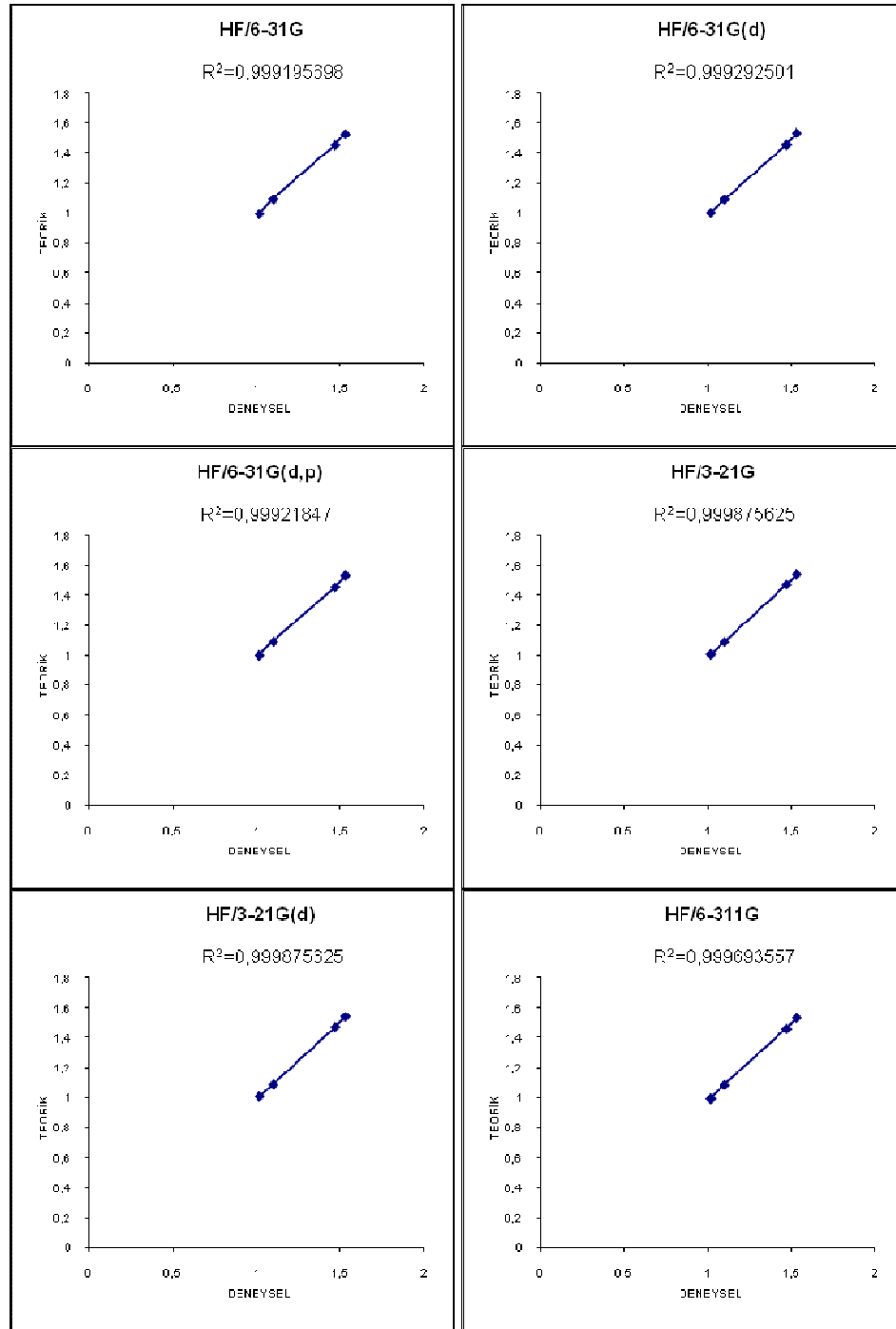
*Gundtzen ve Rankin tarafından piperidin molekülü için elde edilen deneysel değerler[35].

Çizelge 4.6. Taban enerji seviyesinde 4-benzilpiperidin molekülünün teorik, piperidin molekülünün deneysel bağ açıları

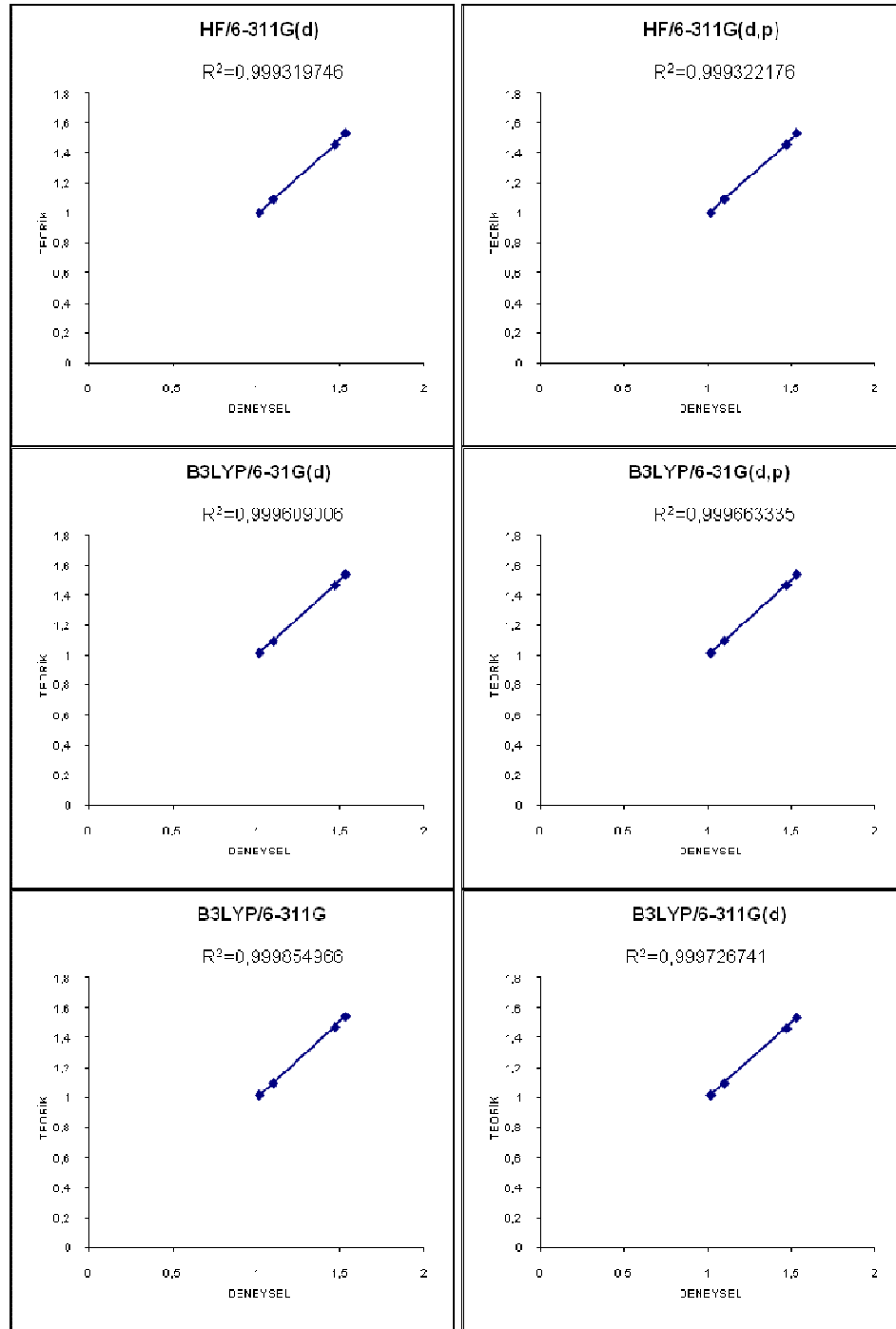
Optimizasyon Açılar (Derece)																						
S.N.	AÇILAR	Hartree-Fock						B3LYP			B1LYP											
		6-31G	6-31G-d	6-31G-d-p	3-21G	3-21G*	6-311G	6-311G-d	6-311 G-d-p	6-31G-d	6-31G-d-p	6-311G	6-311G-d	3-21G	6-31G	6-31G-d	6-31G-d-p	6-311G	6-311G-d			
1	C2-C1-C6	120,2	120,2	120,2	120,2	120,2	120,2	120,2	120,2	120,2	120,2	120,2	120,1	120,1	120,2	120,2	120,1	120,2	120,2	120,2	120,2	120,2
2	C2-C1-H7	119,8	119,8	119,8	119,8	119,8	119,8	119,8	119,8	119,8	119,8	119,8	119,8	119,8	119,8	119,8	119,8	119,8	119,8	119,8	119,8	119,8
3	C6-C1-H7	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	120,1	120,1	120,0	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1
4	C1-C2-C3	121,0	121,1	121,1	120,9	120,9	121,1	121,1	121,1	121,1	121,1	121,1	121,1	121,1	121,0	121,1	121,1	121,1	121,1	121,1	121,1	121,1
5	C1-C2-H8	119,5	119,4	119,4	119,7	119,7	119,4	119,4	119,4	119,4	119,4	119,4	119,6	119,6	119,6	119,5	119,5	119,5	119,5	119,5	119,5	119,5
6	C3-C2-H8	119,5	119,5	119,5	119,5	119,5	119,5	119,5	119,5	119,5	119,5	119,5	119,4	119,4	119,7	119,4	119,4	119,4	119,4	119,4	119,4	119,4
7	C2-C3-C4	118,2	118,1	118,1	118,5	118,5	118,1	118,1	118,1	118,1	118,1	118,1	118,1	118,1	118,1	118,0	119,4	119,4	118,2	118,1	118,0	118,0
8	C2-C3-C12	120,5	120,5	120,5	120,1	120,1	120,5	120,5	120,5	120,5	120,5	120,5	120,5	120,5	120,5	120,5	120,3	120,5	120,5	120,5	120,5	120,5
9	C4-C3-C12	121,3	121,4	121,4	121,4	121,4	121,4	121,4	121,4	121,4	121,4	121,4	121,4	121,4	121,4	121,5	121,3	121,4	121,3	121,3	121,4	121,5
10	C3-C4-C5	121,0	121,1	121,0	120,8	120,8	121,1	121,1	121,1	121,1	121,1	121,1	121,1	121,1	121,0	121,1	120,9	121,1	121,0	121,1	121,2	121,2
11	C3-C4-H9	119,5	119,5	119,5	119,5	119,5	119,4	119,6	119,5	119,3	119,3	119,3	119,3	119,3	119,3	119,4	119,3	119,3	119,3	119,3	119,4	119,4
12	C5-C4-H9	119,5	119,4	119,4	119,7	119,7	119,5	119,4	119,6	119,3	119,3	119,3	119,6	119,6	119,7	119,5	119,8	119,6	119,7	119,6	119,5	119,5
13	C4-C5-C6	120,2	120,2	120,2	120,2	120,2	120,2	120,2	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	119,8	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	120,2	120,1
14	C4-C5-H10	119,7	119,7	119,7	119,8	119,8	119,7	119,7	119,7	119,6	119,3	119,3	119,7	119,8	119,8	119,8	119,8	119,7	119,8	119,7	119,8	119,8
15	C6-C5-H10	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1	120,1
16	C1-C6-C5	119,4	119,4	119,4	119,5	119,5	119,4	119,4	119,4	119,5	119,3	119,3	119,5	119,5	119,5	119,4	119,6	119,5	119,5	119,5	119,5	119,4
17	C1-C6-H11	120,3	120,3	120,3	120,2	120,2	120,3	120,3	120,3	120,2	120,2	120,2	120,2	120,2	120,2	120,3	120,2	120,2	120,2	120,2	120,2	120,3
18	C5-C6-H11	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3	120,2	120,3	120,3	120,3	120,3	120,3
19	C3-C12-H13	109,0	108,8	108,8	109,2	109,2	109,0	108,7	108,7	109,2	109,2	109,0	109,2	109,2	109,2	109,1	109,4	109,2	109,3	109,2	109,2	109,1
20	C3-C12-H14	109,5	109,4	109,4	109,9	109,9	109,4	109,4	109,4	109,3	109,3	109,3	109,6	109,6	109,7	109,6	109,9	109,4	109,7	109,6	109,6	109,6

Çizelge 4.7. (Devam) Taban enerji seviyesinde 4-benzilpiperidin molekülünün teorik dihedral bağ açıları

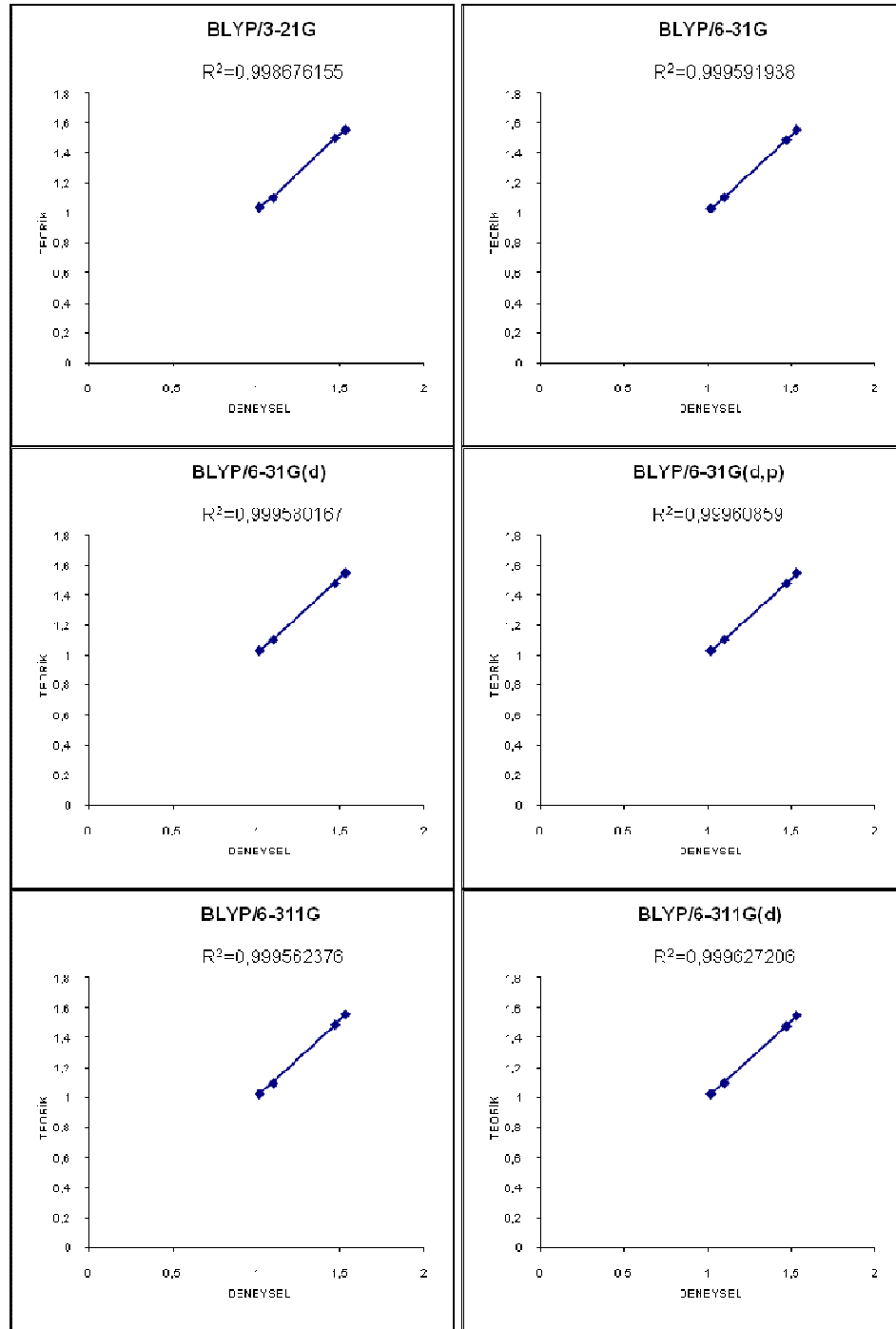
S.N.	AÇILAR	Optimizasyon Açılar (Derece)											
		Hartree-Fock						B3LYP			BLYP		
23	C3-C4-C5-C6	6-31G	6-31G-d	6-31G-d-p	3-21G	3-21G*	6-311G	6-311G-d	6-311G-d-p	6-31G-d	6-31G-d-p	6-311G	6-311G-d
24	C3-C4-C5-H10	-180,0	-180,0	-180,0	180,0	180,0	-180,0	-179,9	-179,9	-179,8	-179,8	-179,9	-179,8
25	H9-C4-C5-C6	179,8	179,7	179,7	179,7	179,7	179,8	179,8	179,8	179,7	179,7	179,7	179,6
26	H9-C4-C5-H10	-0,1	-0,1	-0,1	-0,1	-0,1	-0,1	-0,1	-0,1	-0,1	-0,2	-0,2	-0,1
27	C4-C5-C6-C1	-0,1	-0,1	-0,1	-0,1	-0,1	-0,1	-0,1	-0,1	-0,1	-0,1	-0,1	-0,1
28	C4-C5-C6-H11	-179,9	-179,9	-179,9	-179,9	-179,9	-179,9	-179,9	-179,9	-179,8	-179,8	-179,8	-179,8
29	H10-C5-C6-H11	179,8	179,7	179,7	179,8	179,8	179,7	179,7	179,7	179,7	179,7	179,7	179,6
30	C10-C5-C6-C11	-0,02	-0,02	-0,01	-0,02	-0,02	-0,04	-0,03	-0,03	-0,02	-0,03	-0,04	-0,04
31	C3-C12-C17-C16	172,3	172,6	172,6	173,1	173,1	172,3	172,4	172,5	172,5	172,3	171,4	171,6
32	C3-C12-C17-C18	-64,5	-64,0	-64,0	-64,8	-64,8	-64,1	-64,1	-64,1	-63,7	-64,9	-64,6	-64,3
33	C3-C12-C17-H30	54,4	54,9	54,9	54,5	54,5	54,7	54,8	54,9	54,8	54,9	53,9	54,2
34	H13-C12-C17-C16	50,5	50,8	50,8	51,8	51,8	50,4	50,6	50,7	50,5	50,2	49,4	49,6
35	H13-C12-C17-C18	173,6	174,1	174,2	173,9	173,9	173,9	174,1	174,2	174,3	173,8	173,4	173,7
36	H13-C12-C17-H30	-67,4	-66,9	-66,9	-66,8	-66,8	-67,3	-67,0	-66,9	-67,2	-67,3	-68,1	-67,8
37	H14-C12-C17-C16	-64,8	-64,5	-64,5	-64,8	-64,8	-64,8	-64,7	-64,6	-64,6	-65,1	-67,5	-65,1
38	H14-C12-C17-C18	58,3	58,9	58,9	57,4	57,4	58,7	58,8	59,2	59,3	57,3	58,4	58,9
39	H14-C12-C17-H30	177,3	177,8	177,8	176,6	176,6	177,5	177,9	177,8	177,8	176,3	176,9	177,5
40	N20-C15-C16-C17	-54,8	-53,6	-53,6	-54,9	-54,9	-53,0	-53,6	-53,6	-53,5	-54,9	-53,1	-53,1
41	N20-C15-C16-H21	65,7	67,1	67,2	65,2	65,2	67,7	67,4	67,2	67,1	65,1	67,6	67,8
42	N20-C15-C16-H22	-177,0	-176,2	-176,1	-176,8	-176,8	-175,3	-176,2	-176,2	-176,2	-175,4	-175,4	-175,7
43	H23-C15-C16-C17	68,1	66,8	66,9	64,7	64,7	67,3	67,0	67,0	66,7	64,6	66,9	67,3
44	H23-C15-C16-H21	-171,4	-172,4	-172,3	-175,3	-175,3	-172,0	-172,0	-172,2	-172,6	-172,5	-172,2	-171,8



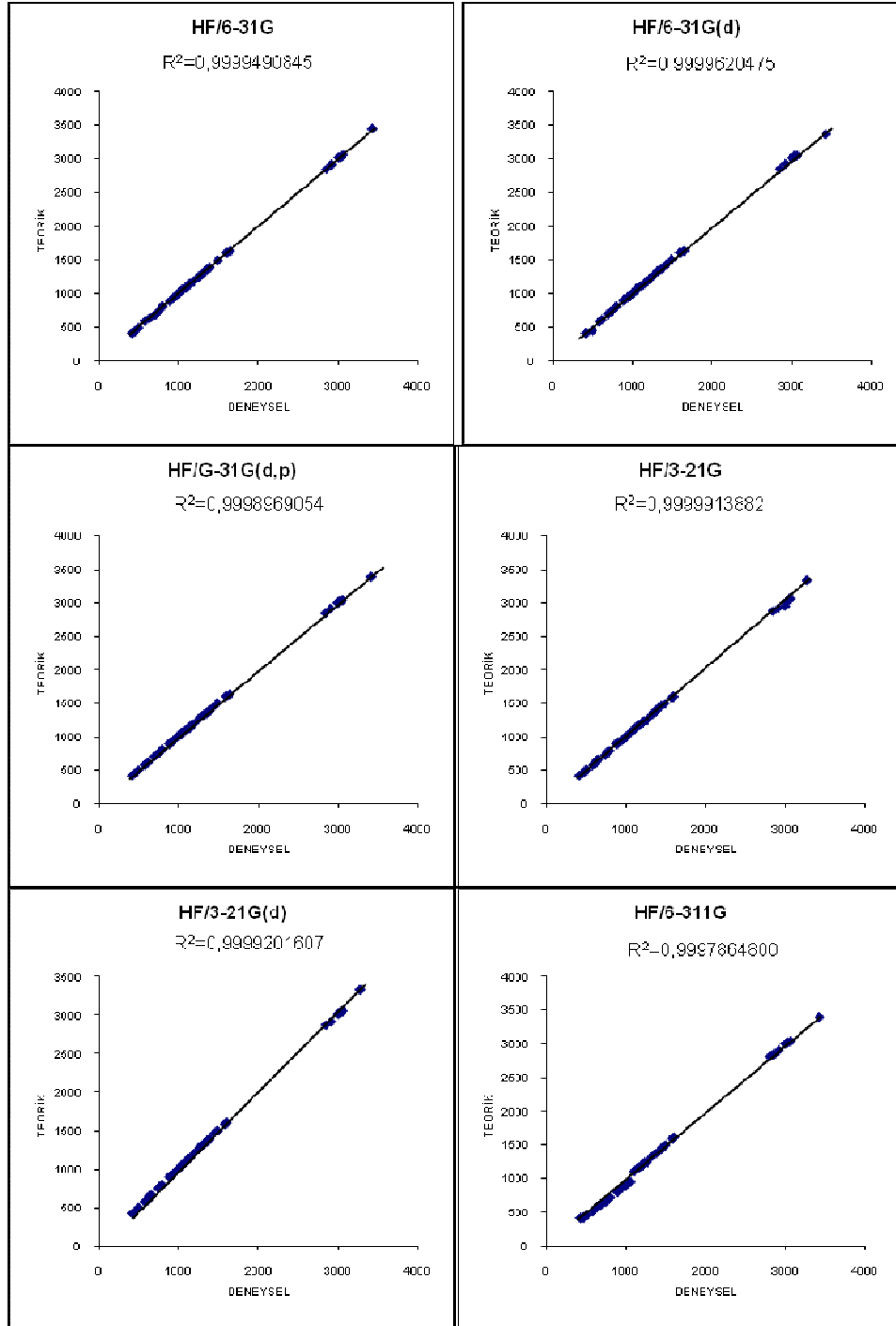
Şekil 4.3. Piperidin molekülünün deneysel bağ uzunluklarının 4-benzilpiperidin molekülünün değişik yöntem ve baz setlerinde hesaplanan teorik bağ uzunlukları ile korelasyon grafikleri



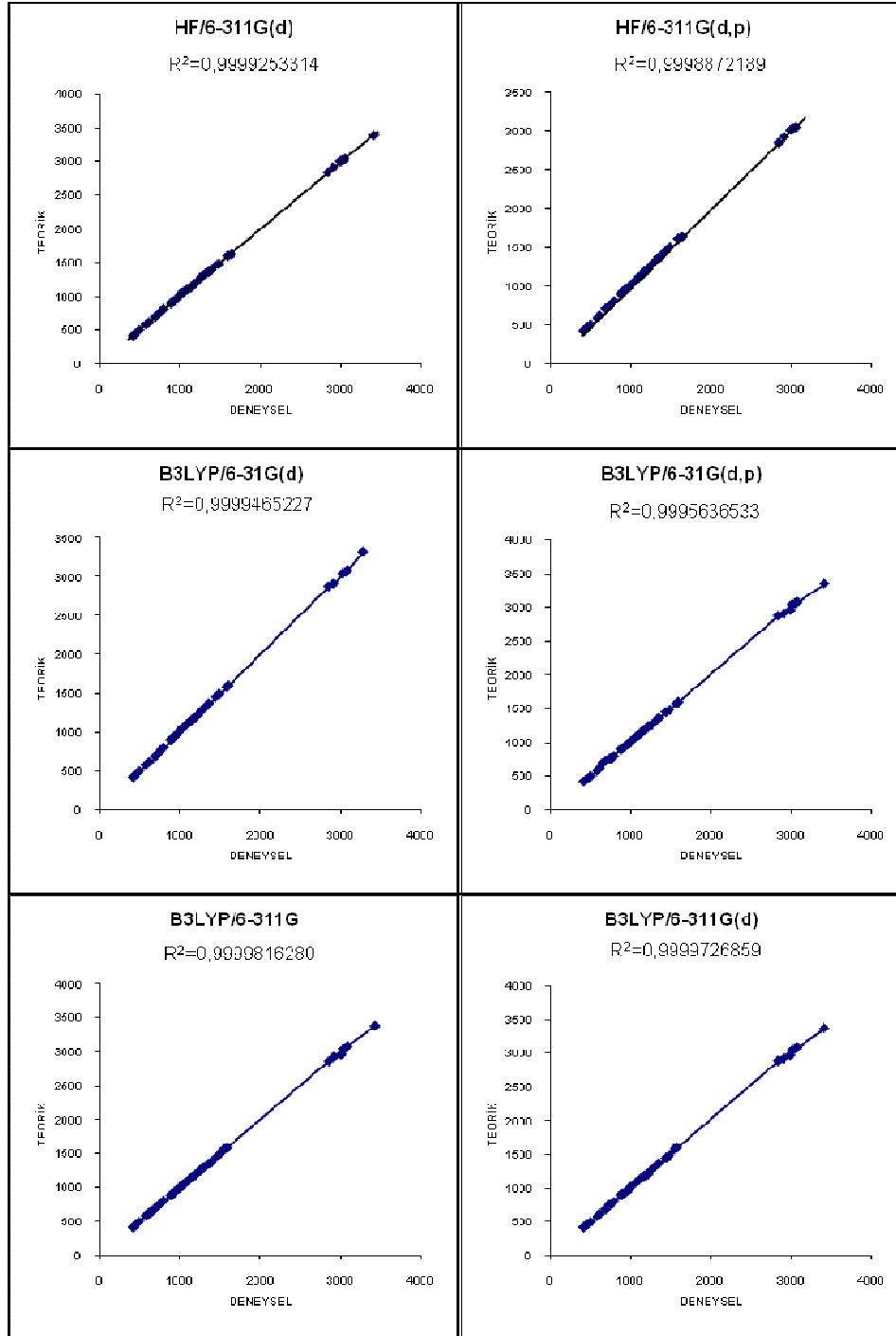
Şekil 4.3.(Devam) Piperidin molekülünün deneysel bağ uzunluklarının 4-benzilpiperidin molekülünün değişik yöntem ve baz setlerinde hesaplanan teorik bağ uzunlukları ile korelasyon grafikleri



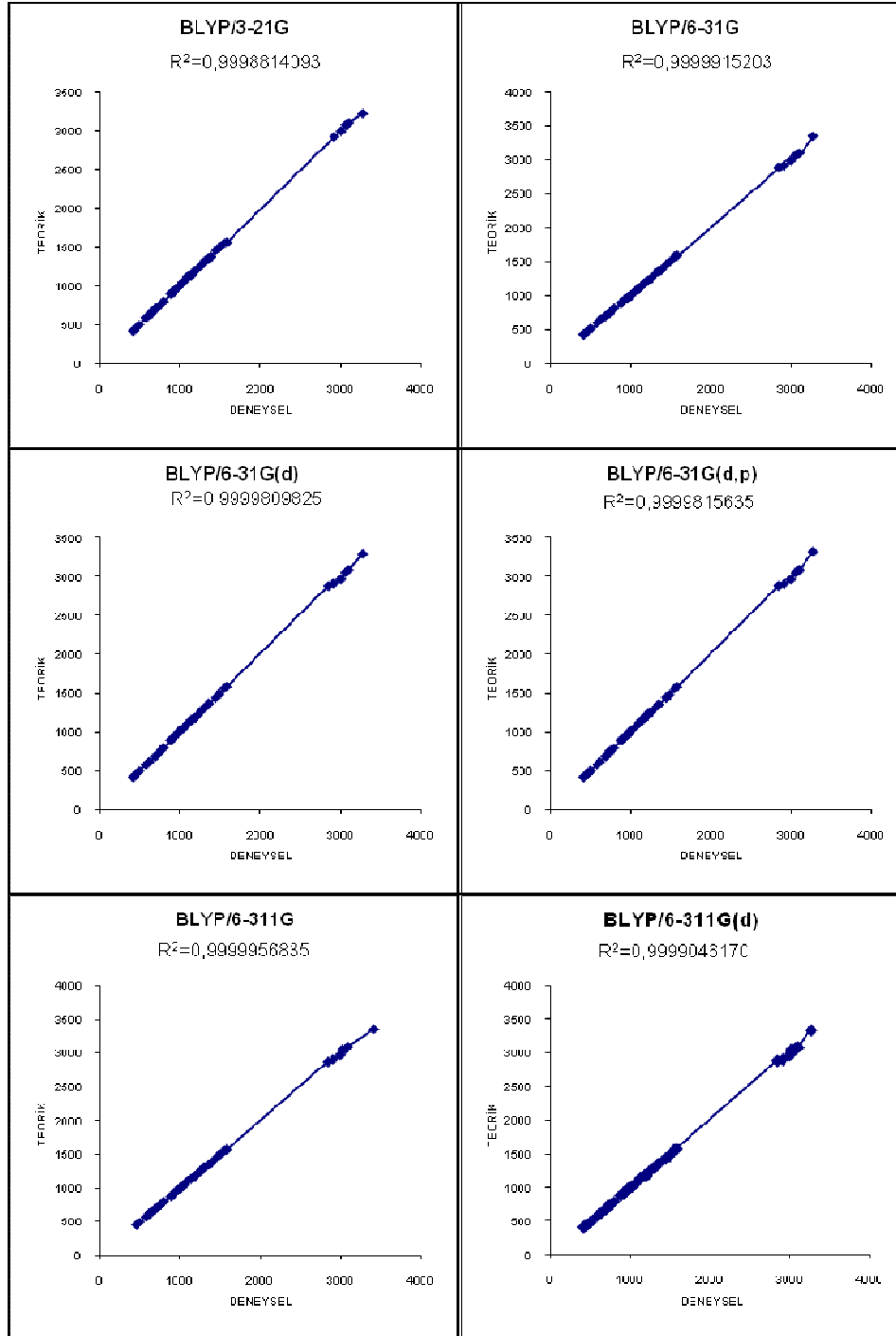
Şekil 4.3.(Devam) Piperidin molekülünün deneysel bağ uzunluklarının 4-benzilpiperidin molekülünün değişik yöntem ve baz setlerinde hesaplanan teorik bağ uzunlukları ile korelasyon grafikleri



Şekil 4.4. 4-benzilpiperidin molekülünün deneysel titreşim modlarının değişik yöntem ve baz setlerinde hesaplanan teorik titreşim modları ile korelasyon grafikleri



Şekil 4.4.(Devam) 4-benzilpiperidin molekülünün deneysel titreşim modlarının değişik yöntem ve baz setlerinde hesaplanan teorik titreşim modları ile korelasyon grafikleri



Şekil 4.4.(Devam) 4-benzilpiperidin molekülünün deneysel titreşim modlarının değişik yöntem ve baz setlerinde hesaplanan teorik titreşim modları ile korelasyon grafikleri

Çizelge 4.8. 4-benzilpiperidin molekülünün HF/6-31G baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması

Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	İnfrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel	Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	İnfrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel
1	τ (halka)	38	34	7,2	0,1		43	ν (CC)	1325	1196	10,0	1,9	
2	τ (halka)	57	51	1,4	0,1		44	δ (HCC)	1326	1197	4,6	0,3	1180 vw
3	τ (halka)	74	67	4,0	0,2		45	δ (HCH)	1340	1209	7,7	0,2	1200 vw
4	δ (HCH)	159	143	0,7	1,6		46	δ (HCC)	1358	1226	4,2	0,6	1227 vw
5	δ (CCC)	234	211	3,9	0,7		47	δ (HCC)	1390	1255	1,6	2,0	
6	τ (halka)	258	233	0,4	0,2		48	δ (HCH)	1430	1291	13,7	2,5	1264 m
7	δ (CCC)	288	260	2,9	0,4		49	ν (CC)	1433	1294	26,3	5,5	
8	δ (HCH)	343	309	0,2	3,5		50	δ (HCH)	1456	1315	12,7	2,7	
9	δ (HCH)	384	347	0,3	0,9		51	δ (HCH)	1490	1345	1,2	6,7	1319 s
10	γ	461	416	1,4	17,2		52	δ (HCC)	1499	1354	6,9	8,7	
11	δ (CCC)	468	422	1,2	0,6		53	δ (HCC)	1510	1363	1,4	16,7	
12	δ (CCC)	469	424	1,2	0,3	425 vw	54	δ (HCC)	1520	1372	1,8	1,1	1362 w
13	δ (CCC)	507	458	2,4	1,5	464 vw	55	δ (HCC)	1526	1377	3,9	1,7	
14	γ	551	498	2,0	60,9	504 s	56	δ (HCC)	1541	1391	9,4	8,0	
15	δ (CCC)	610	551	2,3	41,8		57	δ (HCH)	1574	1421	1,8	4,9	1389 w
16	δ (CCC)	664	599	1,1	8,1	589 s	58	δ (HCC)	1631	1473	1,0	8,7	1449 vs
17	δ (CCC)	705	636	4,7	0,1	625 vw	59	δ (HCN)	1637	1478	8,2	2,7	
18	ν (NH)	757	684	7,4	77,5	700 vs	60	δ (HCH)	1649	1489	0,6	2,8	
19	γ	804	726	0,5	40,5		61	δ (HCH)	1652	1491	11,2	5,4	
20	γ	848	765	11,3	30,1	745 vs	62	δ (HCH)	1656	1496	20,4	8,5	
21	ν (CC)	869	785	5,3	10,7	771 vw	63	δ (HCH)	1667	1506	13,2	2,3	
22	ν (CC)	900	813	3,2	5,8		64	δ (HCH)	1676	1513	10,2	3,7	
23	δ (HCH)	918	829	8,9	5,4	804 sh	65	δ (HCH)	1679	1516	1,2	17,0	1495 s
24	τ (halka)	944	852	6,6	6,8		66	δ (HCC)	1783	1610	10,0	2,5	1554 vw
25	δ (HCH)	984	889	2,0	2,4		67	δ (HCC)	1809	1634	30,0	7,7	1587 vw
26	ν (CC)	989	893	3,1	0,5	894 w	68	ν (CH)	3080	2781	17,7	29,5	2847 m
27	γ	1035	935	0,7	0,4	906 sh	69	ν (CH)	3086	2787	122,8	137,5	
28	δ (HCC)	1070	966	1,2	2,7		70	ν (CH)	3151	2845	74,6	19,0	
29	ν (CC)	1086	981	1,9	2,2	934 w	71	ν (CH)	3174	2866	11,5	5,5	
30	τ (halka)	1098	991	1,2	2,2	962 w	72	ν (CH)	3182	2873	98,5	64,0	
31	τ (halka)	1114	1006	35,4	0,0		73	ν (CH)	3190	2881	83,3	33,2	2917 vs
32	ν (CC)	1146	1034	2,4	2,4		74	ν (CH)	3216	2904	5,8	1,9	
33	τ (halka)	1146	1035	0,2	0,2		75	ν (CH)	3228	2915	74,3	75,8	
34	δ (CCC)	1147	1036	3,7	3,7	979 vw	76	ν (CH)	3236	2922	124,2	61,1	
35	δ (HCC)	1176	1062	5,5	5,5	1009 w	77	ν (CH)	3239	2925	172,9	55,1	
36	ν (CC)	1179	1064	0,5	0,5	1030 w	78	ν (CH)	3245	2930	53,2	69,1	3003 sh
37	ν (CC)	1200	1084	4,4	2,1	1057 m	79	ν (CH)	3342	3018	24,6	10,0	3026 s
38	δ (HCC)	1212	1095	6,6	3,2		80	ν (CH)	3347	3022	72,9	3,1	
39	δ (HCH)	1240	1119	2,1	7,3		81	ν (CH)	3360	3034	98,9	15,5	
40	δ (HCH)	1282	1157	7,1	22,5	1104 m	82	ν (CH)	3370	3043	28,2	52,6	
41	δ (HCH)	1286	1161	4,3	3,7	1141 s	83	ν (CH)	3386	3057	276,4	24,9	3062 w
42	δ (HCC)	1305	1178	6,2	2,1		84	ν (NH)	3816	3445	157,9	0,4	3424 sh

sh (omuz) , vw (çok zayıf) , w (zayıf şiddetli) , m (orta şiddetli) , s (şiddetli) , vs (çok şiddetli)

Titreşim türleri; Gerilme (ν) , Açık bükülme (δ) , Burulma (τ) , Düzlem dışı açı bükülme (γ)

Çizelge 4.9. 4-benzilpiperidin molekülünün HF/6-31G(d) baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması

Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel	Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel
1	τ (halka)	38	34	6,4	0,0		43	ν (CC)	1302	1170	4,1	0,2	
2	τ (halka)	57	52	1,2	0,1		44	δ (HCC)	1320	1186	12,1	4,1	1180 vw
3	τ (halka)	73	66	3,5	0,2		45	δ (HCH)	1323	1189	4,0	5,2	1200 vw
4	δ (HCH)	160	143	1,2	1,8		46	δ (HCC)	1361	1223	3,0	3,0	1227 vw
5	δ (CCC)	229	206	3,6	1,1		47	δ (HCC)	1370	1231	1,9	7,2	
6	τ (halka)	252	227	0,3	0,1		48	δ (HCH)	1412	1269	14,8	14,6	1264 m
7	δ (CCC)	284	255	2,7	0,1		49	ν (CC)	1424	1280	11,9	1,2	
8	δ (HCH)	353	317	0,2	5,8		50	δ (HCH)	1458	1310	12,5	1,3	
9	δ (HCH)	382	343	0,2	2,6		51	δ (HCH)	1477	1327	3,4	1,1	1319 s
10	γ	455	409	1,7	1,1		52	δ (HCC)	1484	1334	0,3	0,6	
11	δ (CCC)	457	411	0,3	0,1		53	δ (HCC)	1501	1349	1,1	4,0	
12	δ (CCC)	463	416	1,0	2,1	425 vw	54	δ (HCC)	1511	1358	4,9	0,6	1362 w
13	δ (CCC)	505	454	2,6	0,8	464 vw	55	δ (HCC)	1532	1376	1,6	1,7	
14	γ	555	499	1,5	6,9	504 s	56	δ (HCC)	1546	1389	3,8	23,4	
15	δ (CCC)	639	574	2,0	6,4		57	δ (HCH)	1552	1394	8,9	0,4	1389 w
16	δ (CCC)	646	581	0,7	7,2	589 s	58	δ (HCC)	1620	1455	1,4	7,6	1449 vs
17	δ (CCC)	682	612	4,6	0,0	625 vw	59	δ (HCN)	1623	1458	20,0	2,7	
18	ν (NH)	780	701	0,5	26,8	700 vs	60	δ (HCH)	1637	1470	8,9	0,3	
19	γ	826	742	8,8	16,6		61	δ (HCH)	1638	1472	3,3	1,4	
20	γ	857	770	6,4	11,5	745 vs	62	δ (HCH)	1642	1476	8,9	8,2	
21	ν (CC)	870	782	2,2	157,4	771 vw	63	δ (HCH)	1649	1482	0,8	12,5	
22	ν (CC)	880	791	2,9	11,8		64	δ (HCH)	1650	1483	10,8	0,3	
23	δ (HCH)	895	804	12,4	3,9	804 sh	65	δ (HCH)	1671	1501	0,5	14,7	1495 s
24	τ (halka)	942	846	5,7	0,5		66	δ (HCC)	1784	1603	8,3	2,3	1554 vw
25	δ (HCH)	958	861	3,0	0,1		67	δ (HCC)	1812	1628	30,4	7,2	1587 vw
26	ν (CC)	990	889	1,1	2,6	894 w	68	ν (CH)	3164	2843	68,6	8,1	2847 m
27	γ	1021	917	0,6	4,2	906 sh	69	ν (CH)	3168	2846	35,2	8,0	
28	δ (HCC)	1037	932	0,7	5,7		70	ν (CH)	3177	2854	22,0	38,4	
29	ν (CC)	1056	949	0,5	7,6	934 w	71	ν (CH)	3196	2871	65,5	33,6	
30	τ (halka)	1066	958	1,3	1,0	962 w	72	ν (CH)	3197	2873	75,4	26,7	
31	τ (halka)	1090	979	26,0	0,1		73	ν (CH)	3203	2878	75,8	72,9	2917 vs
32	ν (CC)	1099	987	0,2	0,3		74	ν (CH)	3220	2893	82,5	57,1	
33	τ (halka)	1100	988	14,8	16,9		75	ν (CH)	3234	2906	64,2	64,3	
34	δ (CCC)	1123	1009	0,2	0,2	979 vw	76	ν (CH)	3248	2918	120,1	47,3	
35	δ (HCC)	1131	1017	9,0	1,5	1009 w	77	ν (CH)	3250	2920	111,8	58,3	
36	ν (CC)	1161	1043	4,9	2,8	1030 w	78	ν (CH)	3252	2922	89,3	91,7	3003 sh
37	ν (CC)	1185	1065	0,9	2,6	1057 m	79	ν (CH)	3345	3006	23,1	10,9	3026 s
38	δ (HCC)	1198	1076	7,7	1,9		80	ν (CH)	3350	3010	72,9	4,2	
39	δ (HCH)	1204	1082	4,0	1,2		81	ν (CH)	3362	3021	105,0	13,8	
40	δ (HCH)	1227	1102	1,0	4,6	1104 m	82	ν (CH)	3372	3029	31,2	55,0	
41	δ (HCH)	1257	1129	4,7	4,9	1141 s	83	ν (CH)	3385	3042	272,7	26,7	3062 w
42	δ (HCC)	1283	1152	8,5	26,0		84	ν (NH)	3737	3358	68,8	0,4	3424 sh

sh (omuz) , vw (çok zayıf) , w (zayıf şiddetli) , m (orta şiddetli) , s (şiddetli) , vs (çok şiddetli)

Titreşim türleri; Gerilme (ν) , Açık bükülme (δ) , Burulma (τ) , Düzlem dışı açı bükülme (γ)

Çizelge 4.10. 4-benzilpiperidin molekülünün HF/6-31G(d,p) baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması

Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel	Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel
1	τ (halka)	38	34	6,4	0,0		43	ν (CC)	1296	1170	4,6	0,2	
2	τ (halka)	57	52	1,2	0,1		44	δ (HCC)	1315	1187	12,5	7,0	1180 vw
3	τ (halka)	73	66	3,5	0,2		45	δ (HCH)	1318	1189	3,7	2,6	1200 vw
4	δ (HCH)	160	144	1,2	1,7		46	δ (HCC)	1355	1223	2,2	2,6	1227 vw
5	δ (CCC)	230	207	3,6	1,1		47	δ (HCC)	1363	1230	2,2	6,9	
6	τ (halka)	253	228	0,3	0,1		48	δ (HCH)	1403	1267	14,1	13,9	1264 m
7	δ (CCC)	284	256	2,7	0,1		49	ν (CC)	1414	1276	11,4	0,8	
8	δ (HCH)	353	319	0,2	5,8		50	δ (HCH)	1449	1308	12,0	1,2	
9	δ (HCH)	382	345	0,2	2,4		51	δ (HCH)	1468	1325	3,8	1,3	1319 s
10	γ	455	411	1,6	1,1		52	δ (HCC)	1476	1333	0,4	0,5	
11	δ (CCC)	457	412	0,4	0,1		53	δ (HCC)	1491	1346	1,2	3,7	
12	δ (CCC)	463	418	1,0	2,1	425 vw	54	δ (HCC)	1501	1355	4,9	0,5	1362 w
13	δ (CCC)	505	456	2,5	0,7	464 vw	55	δ (HCC)	1522	1373	1,5	1,4	
14	γ	555	501	1,5	6,8	504 s	56	δ (HCC)	1536	1386	2,8	22,3	
15	δ (CCC)	638	576	2,0	7,0		57	δ (HCH)	1541	1391	9,5	0,8	1389 w
16	δ (CCC)	646	583	0,7	7,2	589 s	58	δ (HCC)	1607	1450	18,7	2,9	1449 vs
17	δ (CCC)	681	615	4,5	0,0	625 vw	59	δ (HCN)	1614	1456	2,4	7,4	
18	ν (NH)	780	704	0,5	27,8	700 vs	60	δ (HCH)	1621	1463	9,1	0,0	
19	γ	824	743	9,0	13,5		61	δ (HCH)	1622	1464	2,6	1,5	
20	γ	855	772	5,0	37,8	745 vs	62	δ (HCH)	1626	1468	8,3	9,4	
21	ν (CC)	860	776	4,0	144,0	771 vw	63	δ (HCH)	1634	1475	1,1	12,9	
22	ν (CC)	876	791	2,6	1,8		64	δ (HCH)	1635	1475	9,8	0,8	
23	δ (HCH)	893	806	12,0	2,7	804 sh	65	δ (HCH)	1665	1503	0,5	15,5	1495 s
24	τ (halka)	938	847	6,1	0,2		66	δ (HCC)	1782	1608	8,3	2,4	1554 vw
25	δ (HCH)	957	863	3,1	0,0		67	δ (HCC)	1810	1633	30,5	7,5	1587 vw
26	ν (CC)	985	889	1,0	1,8	894 w	68	ν (CH)	3147	2840	54,0	11,1	2847 m
27	γ	1016	917	0,6	3,7	906 sh	69	ν (CH)	3150	2843	54,3	8,1	
28	δ (HCC)	1036	935	0,7	4,9		70	ν (CH)	3159	2851	19,7	35,0	
29	ν (CC)	1052	949	0,5	7,6	934 w	71	$\square$ (CH)	3174	2865	39,2	22,2	
30	τ (halka)	1063	960	1,3	0,9	962 w	72	ν (CH)	3180	2870	139,7	19,2	
31	τ (halka)	1089	983	26,5	0,1		73	ν (CH)	3182	2872	54,2	99,3	2917 vs
32	ν (CC)	1096	989	14,7	16,8		74	ν (CH)	3203	2891	76,4	58,6	
33	τ (halka)	1100	993	0,1	0,0		75	ν (CH)	3220	2906	60,2	52,9	
34	δ (CCC)	1122	1013	0,2	0,1	979 vw	76	ν (CH)	3230	2915	93,1	68,2	
35	δ (HCC)	1129	1019	9,2	1,7	1009 w	77	ν (CH)	3231	2916	181,6	15,2	
36	ν (CC)	1157	1045	4,7	2,8	1030 w	78	ν (CH)	3233	2918	45,0	110,6	3003 sh
37	ν (CC)	1181	1066	0,8	2,9	1057 m	79	ν (CH)	3329	3005	20,3	10,1	3026 s
38	δ (HCC)	1193	1077	7,5	2,0		80	ν (CH)	3333	3009	77,8	3,3	
39	δ (HCH)	1199	1082	4,0	1,0		81	ν (CH)	3346	3020	104,0	13,6	
40	δ (HCH)	1221	1102	1,0	4,3	1104 m	82	ν (CH)	3355	3028	29,2	51,6	
41	δ (HCH)	1250	1128	4,8	4,7	1141 s	83	ν (CH)	3369	3041	275,6	24,5	3062 w
42	δ (HCC)	1279	1155	8,3	25,7		84	ν (NH)	3754	3388	69,1	0,1	3424 sh

sh (omuz) , vw (çok zayıf) , w (zayıf şiddetli) , m (orta şiddetli) , s (şiddetli) , vs (çok şiddetli)

Titreşim türleri; Gerilme (ν) , Açık bükülme (δ) , Burulma (τ) , Düzlem dışı açı bükülme (γ)

Çizelge 4.11. 4-benzilpiperidin molekülünün HF/3-21G baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması

Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel	Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel
1	τ (halka)	41	38	6,7	0,1		43	ν (CC)	1312	1189	5,9	0,1	
2	τ (halka)	60	54	1,7	0,2		44	δ (HCC)	1328	1203	11,1	3,1	1180 vw
3	τ (halka)	72	66	3,8	0,2		45	δ (HCH)	1332	1206	5,5	0,4	1200 vw
4	δ (HCH)	162	147	1,7	2,1		46	δ (HCC)	1369	1240	1,5	2,7	1227 vw
5	δ (CCC)	232	210	3,8	1,4		47	δ (HCC)	1378	1248	3,1	2,9	
6	τ (halka)	252	228	0,5	0,1		48	δ (HCH)	1416	1282	24,6	15,4	1264 m
7	δ (CCC)	286	259	2,9	0,0		49	ν (CC)	1434	1298	10,7	0,0	
8	δ (HCH)	349	316	0,4	10,1		50	δ (HCH)	1463	1325	10,2	1,5	
9	δ (HCH)	387	351	0,2	2,8		51	δ (HCH)	1483	1343	0,5	0,3	1319 s
10	γ	458	414	3,0	1,7		52	δ (HCC)	1493	1352	5,3	1,6	
11	δ (CCC)	463	419	1,0	3,6		53	δ (HCC)	1501	1359	2,1	3,6	
12	δ (CCC)	470	426	0,1	0,0	425 vw	54	δ (HCC)	1508	1366	7,8	1,7	1362 w
13	δ (CCC)	505	457	3,3	0,7	464 vw	55	δ (HCC)	1515	1372	10,3	4,5	
14	γ	564	511	1,7	10,3	504 s	56	δ (HCC)	1523	1379	1,2	0,4	
15	δ (CCC)	641	580	2,3	18,7		57	δ (HCH)	1540	1394	2,4	0,5	1389 w
16	δ (CCC)	665	603	0,7	10,6	589 s	58	δ (HCC)	1625	1472	17,7	10,5	1449 vs
17	δ (CCC)	713	646	4,3	0,0	625 vw	59	δ (HCN)	1626	1473	0,3	8,0	
18	ν (NH)	739	669	3,7	190,4	700 vs	60	δ (HCH)	1646	1491	0,4	0,1	
19	γ	811	734	0,7	43,8		61	δ (HCH)	1651	1495	10,0	5,0	
20	γ	831	752	19,1	12,9	745 vs	62	δ (HCH)	1653	1497	13,4	0,7	
21	ν (CC)	860	779	5,2	29,3	771 vw	63	δ (HCH)	1657	1501	12,4	17,1	
22	ν (CC)	880	797	4,1	2,1		64	δ (HCH)	1661	1504	14,9	0,9	
23	δ (HCH)	903	818	6,5	17,4	804 sh	65	δ (HCH)	1671	1514	2,6	15,9	1495 s
24	τ (halka)	927	839	6,7	1,7		66	δ (HCC)	1752	1587	10,1	3,0	1554 vw
25	δ (HCH)	970	879	1,6	0,7		67	δ (HCC)	1774	1607	28,3	6,3	1587 vw
26	ν (CC)	990	897	4,5	0,1	894 w	68	ν (CH)	3178	2878	21,1	11,5	2847 m
27	γ	1019	922	1,4	4,2	906 sh	69	ν (CH)	3181	2881	86,5	13,3	
28	δ (HCC)	1033	935	1,9	12,7		70	ν (CH)	3193	2892	24,8	3,8	
29	ν (CC)	1056	956	0,2	9,0	934 w	71	ν (CH)	3199	2897	93,2	42,7	
30	τ (halka)	1072	971	16,3	3,9	962 w	72	ν (CH)	3203	2900	50,7	17,8	
31	τ (halka)	1085	982	3,7	3,9		73	ν (CH)	3208	2905	88,4	51,6	2917 vs
32	ν (CC)	1108	1003	35,2	0,1		74	ν (CH)	3226	2922	60,2	36,5	
33	τ (halka)	1142	1034	0,3	2,2		75	ν (CH)	3240	2934	61,2	44,0	
34	δ (CCC)	1153	1044	3,7	2,9	979 vw	76	ν (CH)	3252	2945	81,1	38,1	
35	δ (HCC)	1154	1045	0,1	0,0	1009 w	77	ν (CH)	3254	2946	170,6	23,1	
36	ν (CC)	1170	1060	7,9	7,9	1030 w	78	ν (CH)	3258	2951	24,7	71,6	3003 sh
37	ν (CC)	1186	1074	0,7	2,2	1057 m	79	ν (CH)	3341	3026	23,8	7,2	3026 s
38	δ (HCC)	1187	1075	3,4	0,5		80	ν (CH)	3346	3030	65,9	2,4	
39	δ (HCH)	1210	1096	6,5	13,7		81	ν (CH)	3358	3041	91,4	10,1	
40	δ (HCH)	1219	1104	1,1	3,1	1104 m	82	ν (CH)	3367	3049	26,0	34,0	
41	δ (HCH)	1269	1149	4,3	6,6	1141 s	83	ν (CH)	3382	3063	245,1	16,0	3062 w
42	δ (HCC)	1276	1155	4,6	10,3		84	ν (NH)	3684	3336	78,8	0,2	3424 sh

sh (omuz) , vw (çok zayıf) , w (zayıf şiddetli) , m (orta şiddetli) , s (şiddetli) , vs (çok şiddetli)

Titreşim türleri; Gerilme (ν) , Açık bükülme (δ) , Burulma (τ) , Düzlem dışı açı bükülme (γ)

Çizelge 4.12. 4-benzilpiperidin molekülünün HF/3-21G(d) baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması

Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel	Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel
1	τ (halka)	41	37	6,7	0,1		43	ν (CC)	1312	1185	5,9	0,1	
2	τ (halka)	60	54	1,7	0,2		44	δ (HCC)	1328	1199	11,1	3,1	1180 vw
3	τ (halka)	72	65	3,8	0,2		45	δ (HCH)	1332	1202	5,5	0,4	1200 vw
4	δ (HCH)	162	146	1,7	2,1		46	δ (HCC)	1369	1236	1,5	2,7	1227 vw
5	δ (CCC)	232	210	3,8	1,4		47	δ (HCC)	1378	1244	3,1	2,9	
6	τ (halka)	252	227	0,5	0,1		48	δ (HCH)	1416	1278	24,6	15,4	1264 m
7	δ (CCC)	286	258	2,9	0,0		49	ν (CC)	1434	1294	10,7	0,0	
8	δ (HCH)	349	315	0,4	10,1		50	δ (HCH)	1463	1320	10,2	1,5	
9	δ (HCH)	387	350	0,2	2,8		51	δ (HCH)	1483	1338	0,5	0,3	1319 s
10	γ	458	413	3,0	1,7		52	δ (HCC)	1493	1347	5,3	1,6	
11	δ (CCC)	463	418	1,0	3,6		53	δ (HCC)	1501	1355	2,1	3,6	
12	δ (CCC)	470	424	0,1	0,0	425 vw	54	δ (HCC)	1508	1361	7,8	1,7	1362 w
13	δ (CCC)	505	456	3,3	0,7	464 vw	55	δ (HCC)	1515	1368	10,3	4,5	
14	γ	564	509	1,7	10,3	504 s	56	δ (HCC)	1523	1374	1,2	0,4	
15	δ (CCC)	641	578	2,3	18,7		57	δ (HCH)	1540	1390	2,4	0,5	1389 w
16	δ (CCC)	665	601	0,7	10,6	589 s	58	δ (HCC)	1625	1467	17,7	10,5	1449 vs
17	δ (CCC)	712	643	4,3	0,0	625 vw	59	δ (HCN)	1626	1468	0,3	8,0	
18	ν (NH)	739	667	3,7	190,4	700 vs	60	δ (HCH)	1646	1486	0,4	0,1	
19	γ	811	732	0,7	43,8		61	δ (HCH)	1651	1490	10,0	5,0	
20	γ	831	750	19,1	12,9	745 vs	62	δ (HCH)	1653	1492	13,4	0,7	
21	ν (CC)	860	776	5,2	29,3	771 vw	63	δ (HCH)	1657	1496	12,4	17,1	
22	ν (CC)	880	794	4,1	2,1		64	δ (HCH)	1661	1499	14,9	0,9	
23	δ (HCH)	903	815	6,5	17,4	804 sh	65	δ (HCH)	1671	1509	2,6	15,9	1495 s
24	τ (halka)	927	837	6,7	1,7		66	δ (HCC)	1752	1582	10,1	3,0	1554 vw
25	δ (HCH)	970	876	1,6	0,7		67	δ (HCC)	1774	1602	28,3	6,3	1587 vw
26	ν (CC)	990	894	4,5	0,1	894 w	68	ν (CH)	3178	2869	21,1	11,5	2847 m
27	γ	1019	919	1,4	4,2	906 sh	69	ν (CH)	3181	2872	86,5	13,3	
28	δ (HCC)	1033	932	1,9	12,7		70	ν (CH)	3193	2882	24,8	3,8	
29	ν (CC)	1056	953	0,2	9,0	934 w	71	ν (CH)	3199	2888	93,2	42,7	
30	τ (halka)	1072	968	16,3	3,9	962 w	72	ν (CH)	3203	2891	50,7	17,8	
31	τ (halka)	1085	979	3,7	3,9		73	ν (CH)	3208	2896	88,4	51,6	2917 vs
32	ν (CC)	1108	1000	35,2	0,1		74	ν (CH)	3226	2912	60,2	36,5	
33	τ (halka)	1142	1031	0,3	2,2		75	ν (CH)	3240	2924	61,2	44,0	
34	δ (CCC)	1153	1040	3,7	2,9	979 vw	76	ν (CH)	3252	2935	81,1	38,1	
35	δ (HCC)	1154	1042	0,1	0,0	1009 w	77	ν (CH)	3254	2937	170,6	23,1	
36	ν (CC)	1170	1056	7,9	7,9	1030 w	78	ν (CH)	3258	2941	24,7	71,6	3003 sh
37	ν (CC)	1186	1070	0,7	2,2	1057 m	79	ν (CH)	3341	3016	23,8	7,2	3026 s
38	δ (HCC)	1187	1071	3,4	0,5		80	ν (CH)	3346	3020	65,9	2,4	
39	δ (HCH)	1210	1092	6,5	13,7		81	ν (CH)	3358	3031	91,4	10,1	
40	δ (HCH)	1219	1100	1,1	3,1	1104 m	82	ν (CH)	3367	3039	26,0	34,0	
41	δ (HCH)	1269	1145	4,3	6,6	1141 s	83	ν (CH)	3382	3053	245,1	16,0	3062 w
42	δ (HCC)	1276	1152	4,6	10,3		84	ν (NH)	3684	3325	78,8	0,2	3424 sh

sh (omuz) , vw (çok zayıf) , w (zayıf şiddetli) , m (orta şiddetli) , s (şiddetli) , vs (çok şiddetli)

Titreşim türleri; Gerilme (ν) , Açık bükülme (δ) , Burulma (τ) , Düzlem dışı açı bükülme (γ)

Çizelge 4.13. 4-benzilpiperidin molekülünün HF/6-311G baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması

Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel	Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel
1	τ (halka)	37	34	5,6	0,1		43	ν (CC)	1311	1186	2,3	0,1	
2	τ (halka)	56	50	1,2	0,1		44	δ (HCC)	1326	1199	10,1	7,2	1180 vw
3	τ (halka)	73	66	3,0	0,3		45	δ (HCH)	1330	1203	7,6	0,2	1200 vw
4	δ (HCH)	157	142	1,2	2,1		46	δ (HCC)	1367	1236	0,9	3,2	1227 vw
5	δ (CCC)	232	209	2,9	1,3		47	δ (HCC)	1377	1246	4,1	4,0	
6	τ (halka)	248	224	0,2	0,2		48	δ (HCH)	1416	1281	17,7	12,2	1264 m
7	δ (CCC)	286	259	3,3	0,1		49	ν (CC)	1435	1298	9,8	0,1	
8	δ (HCH)	341	308	0,4	13,6		50	δ (HCH)	1465	1325	12,0	2,0	
9	δ (HCH)	381	345	0,2	2,1		51	δ (HCH)	1485	1343	0,8	0,1	1319 s
10	γ	459	415	3,1	4,8		52	δ (HCC)	1492	1349	2,5	0,9	
11	δ (CCC)	466	421	0,6	2,0		53	δ (HCC)	1506	1362	2,8	3,6	
12	δ (CCC)	467	422	0,1	0,0	425 vw	54	δ (HCC)	1510	1366	1,8	1,7	1362 w
13	δ (CCC)	507	459	3,1	0,6	464 vw	55	δ (HCC)	1521	1375	7,8	3,4	
14	γ	565	511	1,9	8,6	504 s	56	δ (HCC)	1526	1380	6,1	10,0	
15	δ (CCC)	643	581	1,8	37,8		57	δ (HCH)	1546	1398	2,6	1,5	1389 w
16	δ (CCC)	658	595	1,1	11,1	589 s	58	δ (HCC)	1614	1460	0,6	7,1	1449 vs
17	δ (CCC)	698	632	5,3	0,0	625 vw	59	δ (HCN)	1631	1475	13,9	5,4	
18	ν (NH)	727	657	2,6	176,4	700 vs	60	δ (HCH)	1643	1486	14,0	0,8	
19	γ	792	717	0,5	34,0		61	δ (HCH)	1645	1488	2,0	2,6	
20	γ	834	754	13,0	42,2	745 vs	62	δ (HCH)	1652	1494	7,0	14,6	
21	ν (CC)	859	777	5,3	16,0	771 vw	63	δ (HCH)	1654	1496	10,7	2,1	
22	ν (CC)	883	799	2,4	0,9		64	δ (HCH)	1658	1500	2,9	7,1	
23	δ (HCH)	902	816	11,7	6,6	804 sh	65	δ (HCH)	1663	1504	1,7	16,0	1495 s
24	τ (halka)	941	851	6,2	0,8		66	δ (HCC)	1761	1593	9,9	2,5	1554 vw
25	δ (HCH)	973	880	0,5	0,0		67	δ (HCC)	1788	1617	29,7	9,4	1587 vw
26	ν (CC)	985	890	0,8	0,6	894 w	68	ν (CH)	3117	2819	93,3	2,5	2847 m
27	γ	1025	927	0,7	0,9	906 sh	69	ν (CH)	3124	2825	9,8	14,3	
28	δ (HCC)	1053	952	0,5	6,8		70	ν (CH)	3133	2833	45,6	46,1	
29	ν (CC)	1062	961	1,5	5,7	934 w	71	ν (CH)	3150	2848	54,5	17,0	
30	τ (halka)	1073	970	0,7	2,0	962 w	72	ν (CH)	3153	2852	118,9	42,7	
31	τ (halka)	1098	993	37,8	1,2		73	ν (CH)	3156	2855	87,8	78,6	$\square\square$ vs
32	ν (CC)	1101	996	16,7	12,9		74	ν (CH)	3178	2874	81,4	56,6	
33	τ (halka)	1125	1017	0,0	0,0		75	ν (CH)	3191	2886	63,8	75,2	
34	δ (CCC)	1130	1022	1,6	2,8	979 vw	76	ν (CH)	3206	2899	118,4	66,8	
35	δ (HCC)	1142	1033	0,1	0,1	1009 w	77	ν (CH)	3212	2905	111,0	67,0	
36	ν (CC)	1163	1052	4,1	5,1	1030 w	78	ν (CH)	3215	2908	123,6	85,9	3003 sh
37	ν (CC)	1191	1077	7,4	1,2	1057 m	79	ν (CH)	3317	3000	20,0	12,1	3026 s
38	δ (HCC)	1204	1088	7,4	1,9		80	ν (CH)	3321	3004	77,5	4,0	
39	δ (HCH)	1228	1110	0,7	4,4		81	ν (CH)	3335	3016	100,7	19,3	
40	δ (HCH)	1240	1122	2,5	7,3	1104 m	82	ν (CH)	3346	3026	29,8	64,1	
41	δ (HCH)	1270	1149	2,7	2,9	1141 s	83	ν (CH)	3362	3041	283,9	29,3	3062 w
42	δ (HCC)	1292	1168	8,7	20,5		84	ν (NH)	3761	3402	79,3	0,3	3424 sh

sh (omuz) , vw (çok zayıf) , w (zayıf şiddetli) , m (orta şiddetli) , s (şiddetli) , vs (çok şiddetli)

Titreşim türleri; Gerilme (ν) , Açık bükülme (δ) , Burulma (τ) , Düzlem dışı açı bükülme (γ)

Çizelge 4.14. 4-benzilpiperidin molekülünün HF/6-311G(d) baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması

Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel	Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel
1	τ (halka)	38	34	5,5	0,1		43	ν (CC)	1293	1170	2,5	0,2	
2	τ (halka)	57	51	1,1	0,1		44	δ (HCC)	1313	1187	12,0	2,7	1180 vw
3	τ (halka)	72	65	3,1	0,2		45	δ (HCH)	1316	1190	4,0	5,5	1200 vw
4	δ (HCH)	159	144	1,0	1,7		46	δ (HCC)	1355	1226	2,4	3,1	1227 vw
5	δ (CCC)	229	207	2,9	1,2		47	δ (HCC)	1366	1235	1,2	6,3	
6	τ (halka)	252	228	0,2	0,1		48	δ (HCH)	1409	1274	11,7	14,1	1264 m
7	δ (CCC)	283	256	2,8	0,1		49	ν (CC)	1419	1283	8,7	0,6	
8	δ (HCH)	352	318	0,2	5,7		50	δ (HCH)	1452	1313	9,1	1,0	
9	δ (HCH)	381	345	0,1	2,7		51	δ (HCH)	1472	1331	3,9	1,5	1319 s
10	γ	454	411	1,5	1,0		52	δ (HCC)	1477	1336	0,5	0,3	
11	δ (CCC)	455	411	0,6	0,2		53	δ (HCC)	1493	1351	0,8	3,9	
12	δ (CCC)	463	419	1,2	1,9	425 vw	54	δ (HCC)	1503	1360	4,5	0,5	1362 w
13	δ (CCC)	503	455	2,4	0,7	464 vw	55	δ (HCC)	1523	1378	2,0	1,7	
14	γ	553	500	1,6	9,0	504 s	56	δ (HCC)	1537	1390	3,8	21,8	
15	δ (CCC)	638	577	1,8	6,7		57	δ (HCH)	1543	1395	8,7	0,7	1389 w
16	δ (CCC)	645	583	0,8	8,7	589 s	58	δ (HCC)	1608	1455	1,3	7,6	1449 vs
17	δ (CCC)	680	615	4,9	0,0	625 vw	59	δ (HCN)	1611	1457	13,3	2,2	
18	ν (NH)	775	701	0,3	38,6	700 vs	60	δ (HCH)	1624	1469	9,1	0,6	
19	γ	820	741	7,7	20,7		61	δ (HCH)	1625	1470	0,4	1,9	
20	γ	852	771	6,2	14,1	745 vs	62	δ (HCH)	1630	1475	7,1	10,5	
21	ν (CC)	867	784	1,7	143,9	771 vw	63	δ (HCH)	1637	1481	7,0	0,3	
22	ν (CC)	876	792	2,0	19,4		64	δ (HCH)	1659	1500	1,0	13,4	
23	δ (HCH)	890	805	12,5	5,1	804 sh	65	δ (HCH)	1660	1501	0,5	15,6	1495 s
24	τ (halka)	937	847	5,6	0,3		66	δ (HCC)	1771	1602	7,5	2,5	1554 vw
25	δ (HCH)	948	857	0,3	0,1		67	δ (HCC)	1799	1627	28,6	8,4	1587 vw
26	ν (CC)	984	890	0,6	2,5	894 w	68	ν (CH)	3140	2840	44,2	14,0	2847 m
27	γ	1014	917	0,7	2,5	906 sh	69	ν (CH)	3144	2843	88,9	9,0	
28	δ (HCC)	1027	929	0,3	6,7		70	ν (CH)	3154	2853	16,9	39,4	
29	ν (CC)	1051	951	0,6	7,8	934 w	71	ν (CH)	3171	2868	49,5	14,9	
30	τ (halka)	1061	960	1,1	1,3	962 w	72	ν (CH)	3178	2874	142,4	8,3	
31	τ (halka)	1085	981	30,8	0,1		73	ν (CH)	3179	2875	29,4	115,7	2917 vs
32	ν (CC)	1087	983	0,5	0,0		74	ν (CH)	3195	2890	115,6	80,4	
33	τ (halka)	1095	990	12,9	17,6		75	ν (CH)	3213	2906	60,5	60,3	
34	δ (CCC)	1105	1000	0,1	0,1	979 vw	76	ν (CH)	3223	2915	184,0	25,6	
35	δ (HCC)	1123	1015	8,1	2,1	1009 w	77	ν (CH)	3223	2915	89,6	93,4	
36	ν (CC)	1155	1044	3,5	2,8	1030 w	78	ν (CH)	3226	2918	78,9	123,3	3003 sh
37	ν (CC)	1170	1058	0,5	3,4	1057 m	79	ν (CH)	3322	3005	20,2	11,3	3026 s
38	δ (HCC)	1190	1076	6,1	1,9		80	ν (CH)	3327	3009	80,8	3,7	
39	δ (HCH)	1199	1084	5,5	1,6		81	ν (CH)	3339	3020	104,9	18,5	
40	δ (HCH)	1221	1105	0,9	5,7	1104 m	82	ν (CH)	3349	3029	29,6	65,2	
41	δ (HCH)	1249	1129	3,1	5,6	1141 s	83	ν (CH)	3363	3041	286,2	29,7	3062 w
42	δ (HCC)	1277	1155	8,4	24,5		84	ν (NH)	3752	3394	69,6	1,2	3424 sh

sh (omuz) , vw (çok zayıf) , w (zayıf şiddetli) , m (orta şiddetli) , s (şiddetli) , vs (çok şiddetli)

Titreşim türleri; Gerilme (ν) , Açık bükülme (δ) , Burulma (τ) , Düzlem dışı açı bükülme (γ)

Çizelge 4.15. 4-benzilpiperidin molekülünün HF/6-311G(d,p) baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması

Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel	Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel
1	τ (halka)	38	34	5,4	0,0		43	ν (CC)	1288	1170	2,9	0,3	
2	τ (halka)	56	51	1,1	0,1		44	δ (HCC)	1308	1188	11,6	6,9	1180 vw
3	τ (halka)	72	66	3,0	0,2		45	δ (HCH)	1310	1190	4,3	1,1	1200 vw
4	δ (HCH)	159	144	0,9	1,6		46	δ (HCC)	1347	1223	2,1	2,9	1227 vw
5	δ (CCC)	228	207	2,8	1,2		47	δ (HCC)	1357	1233	1,0	6,0	
6	τ (halka)	252	229	0,2	0,1		48	δ (HCH)	1398	1270	10,3	12,6	1264 m
7	δ (CCC)	283	257	2,8	0,1		49	ν (CC)	1408	1280	8,1	0,4	
8	δ (HCH)	350	318	0,2	5,4		50	δ (HCH)	1442	1310	8,7	1,0	
9	δ (HCH)	379	345	0,1	2,3		51	δ (HCH)	1461	1327	3,3	1,7	1319 s
10	γ	453	412	1,6	1,1		52	δ (HCC)	1468	1334	0,5	0,4	
11	δ (CCC)	455	413	0,6	0,2		53	δ (HCC)	1483	1348	0,7	3,4	
12	δ (CCC)	461	419	1,1	1,7	425 vw	54	δ (HCC)	1493	1356	4,8	0,4	1362 w
13	δ (CCC)	502	456	2,3	0,6	464 vw	55	δ (HCC)	1514	1375	2,1	1,3	
14	γ	553	502	1,5	8,6	504 s	56	δ (HCC)	1528	1388	2,8	20,9	
15	δ (CCC)	635	577	1,7	7,3		57	δ (HCH)	1532	1392	9,3	1,5	1389 w
16	δ (CCC)	644	585	0,9	7,8	589 s	58	δ (HCC)	1598	1452	12,4	2,7	1449 vs
17	δ (CCC)	679	617	4,9	0,0	625 vw	59	δ (HCN)	1601	1454	1,2	7,6	
18	ν (NH)	776	705	0,3	37,0	700 vs	60	δ (HCH)	1611	1464	6,9	0,2	
19	γ	819	744	8,3	16,8		61	δ (HCH)	1612	1465	2,0	1,9	
20	γ	851	773	5,4	19,9	745 vs	62	δ (HCH)	1617	1469	6,8	10,8	
21	ν (CC)	861	782	2,1	144,1	771 vw	63	δ (HCH)	1625	1476	6,4	0,4	
22	ν (CC)	872	792	1,8	5,3		64	δ (HCH)	1631	1482	0,8	12,4	
23	δ (HCH)	889	808	12,7	3,4	804 sh	65	δ (HCH)	1652	1501	0,5	16,2	1495 s
24	τ (halka)	934	848	6,0	0,2		66	δ (HCC)	1767	1605	7,6	2,5	1554 vw
25	δ (HCH)	950	863	0,2	0,0		67	δ (HCC)	1794	1630	28,6	9,0	1587 vw
26	ν (CC)	981	892	0,5	1,8	894 w	68	ν (CH)	3124	2838	54,3	11,9	2847 m
27	γ	1011	919	0,7	3,0	906 sh	69	ν (CH)	3128	2841	79,3	8,1	
28	δ (HCC)	1030	936	0,2	4,9		70	ν (CH)	3138	2850	22,9	36,4	
29	ν (CC)	1047	951	0,6	7,1	934 w	71	ν (CH)	3153	2864	43,7	15,5	
30	τ (halka)	1059	962	1,1	1,0	962 w	72	ν (CH)	3160	2870	129,4	48,9	
31	τ (halka)	1083	984	31,7	0,0		73	ν (CH)	3163	2874	68,3	67,3	2917 vs
32	ν (CC)	1093	993	12,2	17,1		74	ν (CH)	3180	2889	105,3	72,2	
33	τ (halka)	1097	997	0,0	0,0		75	ν (CH)	3199	2906	56,9	48,1	
34	δ (CCC)	1114	1012	0,1	0,1	979 vw	76	ν (CH)	3206	2913	147,3	48,0	
35	δ (HCC)	1120	1018	8,8	2,2	1009 w	77	ν (CH)	3207	2914	137,5	55,3	
36	ν (CC)	1151	1046	3,2	2,9	1030 w	78	ν (CH)	3210	2916	73,1	112,9	3003 sh
37	ν (CC)	1168	1061	0,5	3,6	1057 m	79	ν (CH)	3308	3005	18,2	9,5	3026 s
38	δ (HCC)	1186	1078	5,7	1,7		80	ν (CH)	3313	3010	82,5	2,7	
39	δ (HCH)	1195	1085	5,3	1,0		81	ν (CH)	3325	3021	106,1	14,0	
40	δ (HCH)	1216	1105	0,8	5,2	1104 m	82	ν (CH)	3334	3029	29,2	49,6	
41	δ (HCH)	1243	1129	3,2	4,9	1141 s	83	ν (CH)	3347	3041	288,0	22,7	3062 w
42	δ (HCC)	1273	1156	8,2	24,5		84	ν (NH)	3735	3394	68,1	0,0	3424 sh

sh (omuz) , vw (çok zayıf) , w (zayıf şiddetli) , m (orta şiddetli) , s (şiddetli) , vs (çok şiddetli)

Titreşim türleri; Gerilme (ν) , Açık bükülme (δ) , Burulma (τ) , Düzlem dışı açı bükülme (γ)

Çizelge 4.16. 4-benzilpiperidin molekülünün B3LYP/6-31G(d) baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması

Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel	Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel
1	τ (halka)	38	37	7,5	0,0		43	ν (CC)	1214	1166	7,0	0,2	
2	τ (halka)	56	54	1,2	0,1		44	δ (HCC)	1230	1182	19,2	10,0	1180 vw
3	τ (halka)	67	64	3,8	0,2		45	δ (HCH)	1236	1187	6,0	2,3	1200 vw
4	δ (HCH)	148	142	1,5	1,7		46	δ (HCC)	1265	1215	2,2	6,4	1227 vw
5	δ (CCC)	212	204	3,6	1,1		47	δ (HCC)	1301	1249	22,1	15,1	
6	τ (halka)	240	231	0,3	0,0		48	δ (HCH)	1314	1262	12,5	1,6	1264 m
7	δ (CCC)	266	256	2,0	0,0		49	ν (CC)	1341	1288	11,6	1,5	
8	δ (HCH)	331	318	0,2	5,2		50	δ (HCH)	1359	1305	1,7	0,7	
9	δ (HCH)	358	344	0,2	2,5		51	δ (HCH)	1363	1309	7,6	0,5	1319 s
10	γ	419	402	0,1	0,0		52	δ (HCC)	1369	1314	0,8	0,3	
11	δ (CCC)	424	408	1,5	0,5		53	δ (HCC)	1380	1326	2,7	3,7	
12	δ (CCC)	436	419	1,3	2,6	425 vw	54	δ (HCC)	1388	1333	9,3	1,2	1362 w
13	δ (CCC)	474	455	2,5	0,6	464 vw	55	δ (HCC)	1401	1345	6,5	0,4	
14	γ	516	495	1,5	5,4	504 s	56	δ (HCC)	1408	1352	12,4	13,3	
15	δ (CCC)	596	573	1,6	6,9		57	δ (HCH)	1423	1367	3,0	5,9	1389 w
16	δ (CCC)	600	577	0,7	5,2	589 s	58	δ (HCC)	1497	1437	24,0	4,1	1449 vs
17	δ (CCC)	637	612	4,4	0,0	625 vw	59	δ (HCN)	1502	1442	1,3	4,3	
18	ν (NH)	717	688	0,5	24,0	700 vs	60	δ (HCH)	1511	1451	5,7	1,2	
19	γ	759	729	7,0	11,5		61	δ (HCH)	1514	1454	1,2	3,9	
20	γ	796	765	1,7	138,4	745 vs	62	δ (HCH)	1518	1458	2,6	7,7	
21	ν (CC)	802	771	7,9	14,4	771 vw	63	δ (HCH)	1520	1460	13,9	3,1	
22	ν (CC)	819	787	2,4	2,2		64	δ (HCH)	1526	1465	11,4	0,5	
23	δ (HCH)	831	798	8,6	3,0	804 sh	65	δ (HCH)	1546	1485	0,6	10,6	1495 s
24	τ (halka)	862	827	5,5	0,0		66	δ (HCC)	1643	1578	7,9	1,2	1554 vw
25	δ (HCH)	881	846	5,8	2,0		67	δ (HCC)	1665	1599	35,4	5,8	1587 vw
26	ν (CC)	917	880	2,0	3,5	894 w	68	ν (CH)	2995	2876	76,9	1,8	2847 m
27	γ	934	897	0,5	0,7	906 sh	69	ν (CH)	3006	2886	7,8	18,5	
28	δ (HCC)	955	917	1,5	11,8		70	ν (CH)	3013	2893	55,8	23,0	
29	ν (CC)	966	928	0,1	0,2	934 w	71	ν (CH)	3026	2906	46,9	22,1	
30	τ (halka)	978	939	0,4	7,6	962 w	72	ν (CH)	3028	2907	135,2	23,6	
31	τ (halka)	988	949	0,6	1,3		73	ν (CH)	3031	2910	65,8	80,5	2917 vs
32	ν (CC)	994	955	0,5	0,1		74	ν (CH)	3055	2934	69,3	43,6	
33	τ (halka)	1018	978	25,1	0,2		75	ν (CH)	3068	2946	61,1	46,9	
34	δ (CCC)	1019	978	12,0	10,8	979 vw	76	ν (CH)	3079	2957	104,9	42,8	
35	δ (HCC)	1059	1017	11,5	1,9	1009 w	77	ν (CH)	3083	2960	130,1	42,3	
36	ν (CC)	1082	1039	5,1	4,2	1030 w	78	ν (CH)	3084	2962	97,5	62,0	3003 sh
37	ν (CC)	1108	1064	9,1	2,7	1057 m	79	ν (CH)	3171	3045	35,5	10,7	3026 s
38	δ (HCC)	1114	1070	3,4	3,7		80	ν (CH)	3174	3048	56,4	6,6	
39	δ (HCH)	1130	1085	2,2	4,5		81	ν (CH)	3186	3060	112,5	7,4	
40	δ (HCH)	1153	1107	1,7	9,2	1104 m	82	ν (CH)	3195	3068	43,4	43,6	
41	δ (HCH)	1178	1131	6,9	18,0	1141 s	83	ν (CH)	3207	3080	286,2	23,6	3062 w
42	δ (HCC)	1192	1145	5,3	0,1		84	ν (NH)	3461	3323	78,4	2,9	3424 sh

sh (omuz) , vw (çok zayıf) , w (zayıf şiddetli) , m (orta şiddetli) , s (şiddetli) , vs (çok şiddetli)

Titreşim türleri; Gerilme (ν) , Açık bükülme (δ) , Burulma (τ) , Düzlem dışı açı bükülme (γ)

Çizelge 4.17. 4-benzilpiperidin mol.nün B3LYP/6-31G(d,p) baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması

Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel	Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel
1	τ (halka)	38	37	7,5	0,0		43	ν (CC)	1209	1161	7,4	0,2	
2	τ (halka)	56	54	1,2	0,1		44	δ (HCC)	1224	1175	15,0	11,6	1180 vw
3	τ (halka)	67	64	3,8	0,2		45	δ (HCH)	1231	1182	9,2	0,3	1200 vw
4	δ (HCH)	148	142	1,5	1,6		46	δ (HCC)	1257	1207	2,6	6,3	1227 vw
5	δ (CCC)	212	204	3,7	1,1		47	δ (HCC)	1293	1242	21,3	14,7	
6	τ (halka)	240	231	0,3	0,0		48	δ (HCH)	1304	1252	12,5	1,3	1264 m
7	δ (CCC)	266	256	2,0	0,0		49	ν (CC)	1333	1280	11,7	1,3	
8	δ (HCH)	331	318	0,2	5,2		50	δ (HCH)	1350	1297	5,7	1,3	
9	δ (HCH)	358	344	0,2	2,3		51	δ (HCH)	1359	1305	4,4	0,1	1319 s
10	γ	419	402	0,1	0,0		52	δ (HCC)	1361	1307	0,4	0,3	
11	δ (CCC)	424	407	1,5	0,5		53	δ (HCC)	1370	1316	2,9	3,5	
12	δ (CCC)	436	418	1,3	2,6	425 vw	54	δ (HCC)	1379	1324	8,9	1,1	1362 w
13	δ (CCC)	473	455	2,5	0,6	464 vw	55	δ (HCC)	1391	1336	5,5	0,4	
14	γ	515	495	1,5	5,3	504 s	56	δ (HCC)	1398	1343	11,9	13,6	
15	δ (CCC)	595	571	1,5	7,6		57	δ (HCH)	1413	1357	3,0	5,1	1389 w
16	δ (CCC)	600	576	0,7	4,7	589 s	58	δ (HCC)	1482	1423	22,5	4,1	1449 vs
17	δ (CCC)	636	611	4,3	0,0	625 vw	59	δ (HCN)	1494	1436	5,1	4,2	
18	ν (NH)	717	688	0,6	23,4	700 vs	60	δ (HCH)	1496	1438	4,2	1,6	
19	γ	758	727	7,4	9,9		61	δ (HCH)	1499	1440	1,1	2,6	
20	γ	788	757	1,4	153,4	745 vs	62	δ (HCH)	1503	1444	2,7	8,2	
21	ν (CC)	800	768	8,3	2,1	771 vw	63	δ (HCH)	1505	1446	11,8	3,6	
22	ν (CC)	816	784	2,4	1,1		64	δ (HCH)	1510	1451	11,1	0,3	
23	δ (HCH)	829	796	8,5	2,3	804 sh	65	δ (HCH)	1540	1479	0,5	10,9	1495 s
24	τ (halka)	862	827	5,7	0,0		66	δ (HCC)	1640	1576	8,0	1,2	1554 vw
25	δ (HCH)	878	843	6,1	1,2		67	δ (HCC)	1662	1597	35,6	6,1	1587 vw
26	ν (CC)	915	879	2,1	3,0	894 w	68	ν (CH)	2994	2877	79,8	1,5	2847 m
27	γ	932	895	0,4	0,5	906 sh	69	ν (CH)	3003	2886	7,7	21,1	
28	δ (HCC)	949	912	1,4	10,4		70	ν (CH)	3010	2892	61,8	19,0	
29	ν (CC)	971	933	0,1	0,7	934 w	71	ν (CH)	3020	2901	39,6	17,6	
30	τ (halka)	974	935	0,4	6,7	962 w	72	ν (CH)	3024	2905	171,8	31,0	
31	τ (halka)	985	946	0,9	1,2		73	ν (CH)	3026	2907	44,6	80,8	2917 vs
32	ν (CC)	996	957	0,3	0,1		74	ν (CH)	3055	2935	66,7	41,4	
33	τ (halka)	1015	975	13,7	10,4		75	ν (CH)	3068	2948	58,6	40,0	
34	δ (CCC)	1017	976	23,8	0,7	979 vw	76	ν (CH)	3077	2957	111,1	41,8	
35	δ (HCC)	1057	1015	12,0	2,1	1009 w	77	ν (CH)	3079	2958	154,8	30,0	
36	ν (CC)	1078	1035	4,7	4,3	1030 w	78	ν (CH)	3080	2960	64,5	67,9	3003 sh
37	ν (CC)	1105	1061	9,0	2,5	1057 m	79	ν (CH)	3167	3043	32,5	9,6	3026 s
38	δ (HCC)	1111	1066	3,7	3,3		80	ν (CH)	3172	3047	59,7	5,6	
39	δ (HCH)	1124	1080	1,8	4,2		81	ν (CH)	3183	3058	113,5	7,2	
40	δ (HCH)	1146	1100	1,7	9,0	1104 m	82	ν (CH)	3192	3067	43,2	39,2	
41	δ (HCH)	1173	1126	6,9	18,0	1141 s	83	ν (CH)	3204	3079	290,1	21,2	3062 w
42	δ (HCC)	1186	1139	5,4	0,1		84	ν (NH)	3488	3352	79,2	1,8	3424 sh

sh (omuz) , vw (çok zayıf) , w (zayıf şiddetli) , m (orta şiddetli) , s (şiddetli) , vs (çok şiddetli)

Titreşim türleri; Gerilme (ν) , Açık bükülme (δ) , Burulma (τ) , Düzlem dışı açı bükülme (γ)

Çizelge 4.18. 4-benzilpiperidin molekülünün B3LYP/6-311G baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması

Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel	Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel
1	τ (halka)	39	37	6,6	0,1		43	ν (CC)	1225	1184	4,1	0,2	
2	τ (halka)	55	53	1,4	0,1		44	δ (HCC)	1234	1192	13,2	7,4	1180 vw
3	τ (halka)	67	65	3,3	0,3		45	δ (HCH)	1241	1199	14,7	0,2	1200 vw
4	δ (HCH)	148	143	1,5	1,8		46	δ (HCC)	1268	1225	1,2	5,3	1227 vw
5	δ (CCC)	214	207	3,0	1,3		47	δ (HCC)	1302	1259	20,3	13,5	
6	τ (halka)	236	228	0,2	0,2		48	δ (HCH)	1325	1280	9,1	0,4	1264 m
7	δ (CCC)	268	259	2,5	0,1		49	ν (CC)	1340	1295	7,2	0,9	
8	δ (HCH)	324	313	0,3	12,4		50	δ (HCH)	1357	1311	6,4	1,1	
9	δ (HCH)	358	346	0,1	2,4		51	δ (HCH)	1366	1320	4,9	0,5	1319 s
10	γ	426	411	0,1	0,1		52	δ (HCC)	1376	1329	8,9	2,5	
11	δ (CCC)	429	414	2,3	1,2		53	δ (HCC)	1386	1340	4,6	3,6	
12	δ (CCC)	435	420	1,7	6,8	425 vw	54	δ (HCC)	1393	1346	11,5	3,9	1362 w
13	δ (CCC)	475	459	3,0	0,6	464 vw	55	δ (HCC)	1396	1349	1,6	0,2	
14	γ	524	506	1,8	9,0	504 s	56	δ (HCC)	1400	1353	4,9	3,2	
15	δ (CCC)	597	577	0,9	52,2		57	δ (HCH)	1421	1373	2,1	0,9	1389 w
16	δ (CCC)	612	592	1,1	6,8	589 s	58	δ (HCC)	1501	1450	1,0	5,5	1449 vs
17	δ (CCC)	654	632	4,8	0,0	625 vw	59	δ (HCN)	1506	1455	19,1	5,2	
18	ν (NH)	659	637	2,8	161,5	700 vs	60	δ (HCH)	1517	1466	4,2	3,4	
19	γ	730	705	0,4	41,2		61	δ (HCH)	1524	1473	2,0	5,5	
20	γ	770	744	8,5	35,5	745 vs	62	δ (HCH)	1526	1475	3,6	10,3	
21	ν (CC)	800	773	5,8	8,3	771 vw	63	δ (HCH)	1531	1479	5,0	4,5	
22	ν (CC)	821	793	2,0	0,1		64	δ (HCH)	1532	1481	16,3	5,7	
23	δ (HCH)	835	807	7,8	2,0	804 sh	65	δ (HCH)	1543	1491	2,2	12,9	1495 s
24	τ (halka)	876	846	4,1	0,1		66	δ (HCC)	1623	1568	8,5	1,6	1554 vw
25	δ (HCH)	879	850	3,8	0,1		67	δ (HCC)	1644	1589	35,0	7,1	1587 vw
26	ν (CC)	916	885	1,0	1,0	894 w	68	ν (CH)	2964	2864	89,0	2,4	2847 m
27	γ	945	913	0,7	0,0	906 sh	69	ν (CH)	2978	2877	9,6	24,8	
28	δ (HCC)	958	925	0,7	6,6		70	ν (CH)	2985	2884	76,0	23,2	
29	ν (CC)	981	948	1,2	7,7	934 w	71	ν (CH)	2994	2893	48,3	14,3	
30	τ (halka)	989	956	0,2	2,8	962 w	72	ν (CH)	2999	2897	175,9	40,7	
31	τ (halka)	1001	967	0,1	0,1		73	ν (CH)	3000	2899	77,0	85,7	2917 vs
32	ν (CC)	1015	981	13,9	8,4		74	ν (CH)	3029	2927	66,2	44,6	
33	τ (halka)	1026	992	0,7	0,1		75	ν (CH)	3042	2939	61,9	56,3	
34	δ (CCC)	1030	995	39,1	0,0	979 vw	76	ν (CH)	3052	2949	118,8	57,0	
35	δ (HCC)	1057	1022	3,0	3,7	1009 w	77	ν (CH)	3063	2959	125,8	50,8	
36	ν (CC)	1082	1045	4,7	6,0	1030 w	78	ν (CH)	3065	2962	132,5	62,6	3003 sh
37	ν (CC)	1105	1067	12,3	3,9	1057 m	79	ν (CH)	3151	3044	29,7	11,5	3026 s
38	δ (HCC)	1110	1073	1,0	3,6		80	ν (CH)	3154	3048	70,8	4,7	
39	δ (HCH)	1140	1101	4,2	10,0		81	ν (CH)	3168	3061	109,1	15,2	
40	δ (HCH)	1157	1118	1,1	7,9	1104 m	82	ν (CH)	3177	3070	38,1	56,7	
41	δ (HCH)	1188	1148	6,1	13,2	1141 s	83	ν (CH)	3193	3085	307,1	27,5	3062 w
42	δ (HCC)	1210	1169	3,4	0,1		84	ν (NH)	3502	3384	94,6	2,5	3424 sh

sh (omuz) , vw (çok zayıf) , w (zayıf şiddetli) , m (orta şiddetli) , s (şiddetli) , vs (çok şiddetli)

Titreşim türleri; Gerilme (ν) , Açık bükülme (δ) , Burulma (τ) , Düzlem dışı açı bükülme (γ)

Çizelge 4.19. 4-benzilpiperidin mol.nün B3LYP/6-311G(d) baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması

Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel	Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel
1	τ (halka)	40	39	6,5	0,0		43	ν (CC)	1208	1167	4,1	0,3	
2	τ (halka)	56	54	1,3	0,1		44	δ (HCC)	1225	1184	19,7	7,3	1180 vw
3	τ (halka)	66	64	3,4	0,3		45	δ (HCH)	1230	1189	6,7	2,4	1200 vw
4	δ (HCH)	147	142	1,3	1,7		46	δ (HCC)	1260	1218	1,3	5,5	1227 vw
5	δ (CCC)	212	205	2,9	1,3		47	δ (HCC)	1298	1254	15,4	14,9	
6	τ (halka)	239	231	0,3	0,1		48	δ (HCH)	1310	1266	9,7	0,1	1264 m
7	δ (CCC)	266	257	2,2	0,0		49	ν (CC)	1332	1287	7,4	1,2	
8	δ (HCH)	330	318	0,2	5,7		50	δ (HCH)	1347	1302	1,1	0,3	
9	δ (HCH)	358	346	0,1	2,5		51	δ (HCH)	1355	1309	10,2	1,3	1319 s
10	γ	418	404	0,1	0,0		52	δ (HCC)	1366	1320	0,7	0,4	
11	δ (CCC)	423	409	1,7	0,8		53	δ (HCC)	1372	1325	2,1	3,1	
12	δ (CCC)	436	421	1,8	2,5	425 vw	54	δ (HCC)	1382	1335	8,0	0,9	1362 w
13	δ (CCC)	474	458	2,5	0,6	464 vw	55	δ (HCC)	1390	1343	6,6	0,8	
14	γ	515	498	1,5	8,4	504 s	56	δ (HCC)	1396	1349	10,0	11,0	
15	δ (CCC)	597	577	1,3	9,7		57	δ (HCH)	1412	1364	2,2	2,1	1389 w
16	δ (CCC)	601	581	0,9	6,4	589 s	58	δ (HCC)	1486	1436	16,5	3,5	1449 vs
17	δ (CCC)	639	617	4,5	0,0	625 vw	59	δ (HCN)	1491	1441	1,3	5,5	
18	ν (NH)	715	690	0,4	45,2	700 vs	60	δ (HCH)	1498	1447	6,4	3,0	
19	γ	754	729	6,0	10,7		61	δ (HCH)	1503	1452	1,5	4,1	
20	γ	785	758	1,2	166,2	745 vs	62	δ (HCH)	1506	1455	4,6	12,7	
21	ν (CC)	797	771	7,0	1,6	771 vw	63	δ (HCH)	1511	1460	9,5	1,3	
22	ν (CC)	815	787	1,7	1,4		64	δ (HCH)	1515	1463	2,5	5,1	
23	δ (HCH)	828	800	8,2	2,1	804 sh	65	δ (HCH)	1535	1483	0,7	13,0	1495 s
24	τ (halka)	853	824	1,2	0,0		66	δ (HCC)	1630	1575	6,4	1,5	1554 vw
25	δ (HCH)	875	846	5,9	1,2		67	δ (HCC)	1652	1596	32,6	6,4	1587 vw
26	ν (CC)	910	879	0,5	3,5	894 w	68	ν (CH)	2983	2882	112,4	0,9	2847 m
27	γ	928	897	0,9	0,6	906 sh	69	ν (CH)	2990	2889	9,5	21,6	
28	δ (HCC)	949	917	1,2	10,3		70	ν (CH)	2998	2897	59,4	23,6	
29	ν (CC)	960	928	0,1	0,2	934 w	71	ν (CH)	3010	2908	50,0	15,3	
30	τ (halka)	974	941	0,5	8,1	962 w	72	ν (CH)	3014	2912	145,5	44,4	
31	τ (halka)	982	949	0,4	1,9		73	ν (CH)	3017	2915	77,3	76,3	2917 vs
32	ν (CC)	987	953	0,4	0,3		74	ν (CH)	3038	2935	91,0	57,0	
33	τ (halka)	1013	979	11,7	10,9		75	ν (CH)	3053	2950	59,6	47,5	
34	δ (CCC)	1020	985	30,3	0,2	979 vw	76	ν (CH)	3061	2958	131,9	46,5	
35	δ (HCC)	1053	1018	10,2	3,2	1009 w	77	ν (CH)	3065	2961	137,0	54,1	
36	ν (CC)	1077	1041	4,2	4,9	1030 w	78	ν (CH)	3066	2963	113,2	71,7	3003 sh
37	ν (CC)	1102	1065	7,7	3,4	1057 m	79	ν (CH)	3149	3043	32,9	11,2	3026 s
38	δ (HCC)	1108	1071	3,1	5,5		80	ν (CH)	3154	3048	68,1	5,2	
39	δ (HCH)	1127	1089	3,0	6,2		81	ν (CH)	3165	3059	118,6	11,5	
40	δ (HCH)	1147	1108	1,2	9,5	1104 m	82	ν (CH)	3174	3067	42,8	51,5	
41	δ (HCH)	1174	1134	6,9	15,7	1141 s	83	ν (CH)	3187	3079	313,7	26,3	3062 w
42	δ (HCC)	1185	1145	3,4	0,1		84	ν (NH)	3481	3363	83,5	3,8	3424 sh

sh (omuz) , vw (çok zayıf) , w (zayıf şiddetli) , m (orta şiddetli) , s (şiddetli) , vs (çok şiddetli)

Titreşim türleri; Gerilme (ν) , Açık bükülme (δ) , Burulma (τ) , Düzlem dışı açı bükülme (γ)

Çizelge 4.20. 4-benzilpiperidin molekülünün BLYP/3-21G baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması

Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel	Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel
1	τ (halka)	41	41	7,3	0,1		43	ν (CC)	1201	1195	6,8	0,3	
2	τ (halka)	56	56	2,3	0,2		44	δ (HCC)	1206	1199	5,7	5,2	1180 vw
3	τ (halka)	62	62	4,0	0,2		45	δ (HCH)	1210	1203	6,0	0,3	1200 vw
4	δ (HCH)	146	145	2,2	1,8		46	δ (HCC)	1239	1232	2,6	4,8	1227 vw
5	δ (CCC)	206	205	3,5	1,4		47	δ (HCC)	1266	1259	30,5	12,1	
6	τ (halka)	232	231	0,4	0,1		48	δ (HCH)	1286	1279	2,5	0,2	1264 m
7	δ (CCC)	259	258	1,9	0,0		49	ν (CC)	1297	1290	15,7	0,6	
8	δ (HCH)	321	320	0,3	6,5		50	δ (HCH)	1321	1314	7,6	1,3	
9	δ (HCH)	352	350	0,2	2,3		51	δ (HCH)	1331	1324	3,2	0,9	1319 s
10	γ	409	407	2,5	0,4		52	δ (HCC)	1340	1333	16,5	1,6	
11	δ (CCC)	413	410	0,3	0,0		53	δ (HCC)	1348	1341	4,0	3,9	
12	δ (CCC)	424	422	1,3	3,5	425 vw	54	δ (HCC)	1358	1350	6,8	0,3	1362 w
13	δ (CCC)	458	456	3,1	0,7	464 vw	55	δ (HCC)	1366	1358	16,5	2,1	
14	γ	502	499	1,9	9,8	504 s	56	δ (HCC)	1374	1367	2,0	0,8	
15	δ (CCC)	579	575	1,7	9,7		57	δ (HCH)	1384	1376	2,6	0,2	1389 w
16	δ (CCC)	596	593	0,7	5,9	589 s	58	δ (HCC)	1466	1458	21,2	2,4	1449 vs
17	δ (CCC)	642	638	4,3	0,0	625 vw	59	δ (HCN)	1467	1459	0,5	5,0	
18	ν (NH)	675	672	2,9	139,9	700 vs	60	δ (HCH)	1496	1488	7,0	4,2	
19	γ	709	705	1,7	48,5		61	δ (HCH)	1499	1490	1,2	6,9	
20	γ	744	740	12,9	12,3	745 vs	62	δ (HCH)	1501	1493	6,9	10,1	
21	ν (CC)	771	766	6,3	11,4	771 vw	63	δ (HCH)	1503	1494	12,2	4,0	
22	ν (CC)	793	788	3,7	0,6		64	δ (HCH)	1508	1500	12,3	1,8	
23	δ (HCH)	802	797	6,1	1,1	804 sh	65	δ (HCH)	1513	1504	17,3	5,9	1495 s
24	τ (halka)	835	830	6,9	0,1		66	δ (HCC)	1556	1547	10,6	1,8	1554 vw
25	δ (HCH)	850	845	6,1	6,0		67	δ (HCC)	1571	1562	36,8	5,1	1587 vw
26	ν (CC)	885	880	3,7	9,0	894 w	68	ν (CH)	2938	2922	96,1	1,6	2847 m
27	γ	905	900	2,3	0,8	906 sh	69	ν (CH)	2941	2925	20,1	21,8	
28	δ (HCC)	924	919	3,6	17,6		70	ν (CH)	2949	2933	12,4	12,1	
29	ν (CC)	932	927	2,1	1,6	934 w	71	ν (CH)	2959	2942	54,2	12,9	
30	τ (halka)	949	944	0,2	7,7	962 w	72	ν (CH)	2959	2943	147,9	37,9	
31	τ (halka)	954	949	0,3	0,2		73	ν (CH)	2963	2947	73,5	54,0	2917 vs
32	ν (CC)	970	964	14,8	2,1		74	ν (CH)	2985	2968	71,3	45,4	
33	τ (halka)	982	977	0,3	0,1		75	ν (CH)	3002	2985	36,9	31,6	
34	δ (CCC)	1005	999	42,3	0,1	979 vw	76	ν (CH)	3008	2991	157,7	23,6	
35	δ (HCC)	1019	1014	0,2	9,0	1009 w	77	ν (CH)	3010	2994	135,5	24,5	
36	ν (CC)	1033	1028	0,5	1,7	1030 w	78	ν (CH)	3013	2997	21,8	75,2	3003 sh
37	ν (CC)	1043	1038	13,4	10,2	1057 m	79	ν (CH)	3095	3078	38,3	6,9	3026 s
38	δ (HCC)	1069	1063	11,2	2,1		80	ν (CH)	3100	3083	51,2	4,3	
39	δ (HCH)	1084	1078	2,2	8,6		81	ν (CH)	3110	3093	99,7	9,1	
40	δ (HCH)	1131	1125	2,9	10,7	1104 m	82	ν (CH)	3118	3101	34,8	36,1	
41	δ (HCH)	1145	1138	3,1	6,3	1141 s	83	ν (CH)	3133	3116	265,3	18,3	3062 w
42	δ (HCC)	1188	1181	28,7	1,4		84	ν (NH)	3240	3223	88,4	10,6	3424 sh

sh (omuz) , vw (çok zayıf) , w (zayıf şiddetli) , m (orta şiddetli) , s (şiddetli) , vs (çok şiddetli)

Titreşim türleri; Gerilme (ν) , Açık bükülme (δ) , Burulma (τ) , Düzlem dışı bükülme (γ)

Çizelge 4.21. 4-benzilpiperidin molekülünün BLYP/6-31G baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması

Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel	Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel
1	τ (halka)	38	38	8,4	0,1		43	ν (CC)	1201	1192	28,2	4,7	
2	τ (halka)	54	54	1,3	0,1		44	δ (HCC)	1204	1195	7,8	1,7	1180 vw
3	τ (halka)	66	65	4,0	0,2		45	δ (HCH)	1208	1199	7,1	2,2	1200 vw
4	δ (HCH)	145	144	2,0	1,8		46	δ (HCC)	1237	1228	2,6	6,0	1227 vw
5	δ (CCC)	208	206	3,5	1,2		47	δ (HCC)	1266	1256	28,0	12,1	
6	τ (halka)	233	231	0,3	0,1		48	δ (HCH)	1292	1282	13,4	0,6	1264 m
7	δ (CCC)	261	259	2,3	0,1		49	ν (CC)	1317	1307	14,7	2,2	
8	δ (HCH)	322	319	0,3	9,0		50	δ (HCH)	1332	1322	3,0	0,3	
9	δ (HCH)	351	348	0,3	2,7		51	δ (HCH)	1336	1325	1,9	0,3	1319 s
10	γ	412	409	0,1	0,1		52	δ (HCC)	1342	1332	17,8	2,6	
11	δ (CCC)	416	413	2,4	0,3		53	δ (HCC)	1351	1340	5,6	2,2	
12	δ (CCC)	428	424	1,5	6,4	425 vw	54	δ (HCC)	1359	1348	13,2	2,9	1362 w
13	δ (CCC)	465	461	3,2	0,7	464 vw	55	δ (HCC)	1364	1354	1,9	0,4	
14	γ	508	504	1,8	7,4	504 s	56	δ (HCC)	1366	1356	7,9	4,3	
15	δ (CCC)	585	581	1,8	28,5		57	δ (HCH)	1387	1377	2,7	2,7	1389 w
16	δ (CCC)	594	590	0,9	4,8	589 s	58	δ (HCC)	1465	1453	22,3	3,5	1449 vs
17	δ (CCC)	636	631	4,4	0,0	625 vw	59	δ (HCN)	1467	1456	0,7	3,7	
18	ν (NH)	652	647	2,5	168,0	700 vs	60	δ (HCH)	1486	1474	4,0	3,0	
19	γ	707	701	0,7	24,4		61	δ (HCH)	1490	1478	6,2	2,6	
20	γ	746	741	11,5	28,7	745 vs	62	δ (HCH)	1492	1481	7,4	6,3	
21	ν (CC)	777	771	7,1	7,7	771 vw	63	δ (HCH)	1497	1485	22,0	0,9	
22	ν (CC)	801	795	4,0	0,3		64	δ (HCH)	1500	1489	10,6	3,5	
23	δ (HCH)	812	806	6,2	1,5	804 sh	65	δ (HCH)	1508	1496	4,2	9,9	1495 s
24	τ (halka)	847	840	6,8	0,0		66	δ (HCC)	1579	1567	9,7	1,1	1554 vw
25	δ (HCH)	858	851	6,5	2,6		67	δ (HCC)	1598	1586	40,6	5,8	1587 vw
26	ν (CC)	890	883	2,8	3,2	894 w	68	ν (CH)	2909	2886	71,4	3,6	2847 m
27	γ	909	903	0,8	0,2	906 sh	69	ν (CH)	2926	2903	14,0	28,8	
28	δ (HCC)	933	926	1,7	8,0		70	ν (CH)	2932	2910	56,9	19,0	
29	ν (CC)	947	940	0,8	5,9	934 w	71	ν (CH)	2943	2921	160,1	47,1	
30	τ (halka)	950	943	0,2	0,2	962 w	72	ν (CH)	2944	2921	55,7	13,4	
31	τ (halka)	962	955	0,1	5,8		73	ν (CH)	2948	2926	76,4	78,2	2917 vs
32	ν (CC)	980	973	1,4	0,2		74	ν (CH)	2974	2952	64,8	48,2	
33	τ (halka)	983	976	16,8	5,0		75	ν (CH)	2987	2965	55,8	54,6	
34	δ (CCC)	1004	996	36,6	0,0	979 vw	76	ν (CH)	2997	2975	119,1	59,8	
35	δ (HCC)	1034	1027	5,1	2,1	1009 w	77	ν (CH)	3011	2988	131,8	45,4	
36	ν (CC)	1047	1039	3,3	4,0	1030 w	78	ν (CH)	3013	2990	122,2	62,8	3003 sh
37	ν (CC)	1058	1050	12,0	13,3	1057 m	79	ν (CH)	3096	3072	28,1	11,4	3026 s
38	δ (HCC)	1080	1071	7,8	1,7		80	ν (CH)	3100	3077	74,1	4,8	
39	δ (HCH)	1097	1089	4,6	8,1		81	ν (CH)	3112	3089	110,3	15,5	
40	δ (HCH)	1133	1124	1,6	7,6	1104 m	82	ν (CH)	3121	3097	37,9	59,3	
41	δ (HCH)	1144	1136	4,7	10,6	1141 s	83	ν (CH)	3137	3113	306,0	29,1	3062 w
42	δ (HCC)	1191	1181	9,6	0,7		84	ν (NH)	3373	3347	102,0	5,7	3424 sh

sh (omuz) , vw (çok zayıf) , w (zayıf şiddetli) , m (orta şiddetli) , s (şiddetli) , vs (çok şiddetli)

Titreşim türleri; Gerilme (ν) , Açık bükülme (δ) , Burulma (τ) , Düzlem dışı açı bükülme (γ)

Çizelge 4.22. 4-benzilpiperidin molekülünün BLYP/6-31G(d) baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması

Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel	Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel
1	τ (halka)	38	38	8,0	0,0		43	ν (CC)	1183	1173	8,7	0,3	
2	τ (halka)	55	54	1,2	0,1		44	δ (HCC)	1190	1181	28,7	6,0	1180 vw
3	τ (halka)	65	64	4,0	0,2		45	δ (HCH)	1199	1190	4,5	6,5	1200 vw
4	δ (HCH)	144	143	1,7	1,6		46	δ (HCC)	1228	1218	2,6	6,8	1227 vw
5	δ (CCC)	205	204	3,5	1,1		47	δ (HCC)	1262	1251	24,9	13,8	
6	τ (halka)	234	232	0,3	0,0		48	δ (HCH)	1278	1267	13,8	3,8	1264 m
7	δ (CCC)	258	256	2,0	0,0		49	ν (CC)	1304	1294	11,9	1,6	
8	δ (HCH)	323	320	0,2	4,5		50	δ (HCH)	1320	1309	7,9	1,1	
9	δ (HCH)	349	346	0,2	2,3		51	δ (HCH)	1330	1320	0,9	0,6	1319 s
10	γ	406	402	0,1	0,0		52	δ (HCC)	1332	1321	2,4	0,0	
11	δ (CCC)	411	408	1,9	0,4		53	δ (HCC)	1339	1329	3,2	3,9	
12	δ (CCC)	426	422	1,4	2,5	425 vw	54	δ (HCC)	1347	1336	17,2	2,5	1362 w
13	δ (CCC)	461	458	2,7	0,6	464 vw	55	δ (HCC)	1356	1345	7,0	0,7	
14	γ	501	497	1,6	4,9	504 s	56	δ (HCC)	1363	1351	12,4	8,8	
15	δ (CCC)	580	575	1,7	5,9		57	δ (HCH)	1381	1369	2,8	8,9	1389 w
16	δ (CCC)	583	579	0,6	4,8	589 s	58	δ (HCC)	1454	1442	24,7	3,2	1449 vs
17	δ (CCC)	621	616	4,4	0,0	625 vw	59	δ (HCN)	1456	1444	0,9	3,0	
18	ν (NH)	694	688	0,6	20,4	700 vs	60	δ (HCH)	1472	1460	4,5	1,2	
19	γ	734	728	8,9	10,5		61	δ (HCH)	1474	1462	1,7	2,8	
20	γ	767	760	2,2	127,3	745 vs	62	δ (HCH)	1478	1466	3,0	5,1	
21	ν (CC)	774	767	7,8	8,0	771 vw	63	δ (HCH)	1481	1469	19,1	1,6	
22	ν (CC)	794	788	3,1	2,8		64	δ (HCH)	1486	1474	11,5	0,7	
23	δ (HCH)	803	796	7,2	1,3	804 sh	65	δ (HCH)	1499	1487	1,2	8,6	1495 s
24	τ (halka)	832	825	6,8	0,0		66	δ (HCC)	1580	1568	8,2	1,0	1554 vw
25	δ (HCH)	855	848	5,8	5,8		67	δ (HCC)	1600	1587	39,6	5,7	1587 vw
26	ν (CC)	883	876	2,3	4,5	894 w	68	ν (CH)	2909	2886	71,4	2,6	2847 m
27	γ	902	895	1,6	2,2	906 sh	69	ν (CH)	2923	2899	10,4	22,5	
28	δ (HCC)	924	916	0,6	1,0		70	ν (CH)	2930	2906	61,8	20,3	
29	ν (CC)	929	922	2,4	16,7	934 w	71	ν (CH)	2941	2918	56,6	19,6	
30	τ (halka)	945	937	0,8	6,0	962 w	72	ν (CH)	2943	2919	143,0	26,5	
31	τ (halka)	950	942	0,2	2,7		73	ν (CH)	2946	2922	59,2	82,5	2917 vs
32	ν (CC)	954	946	0,4	0,4		74	ν (CH)	2967	2943	82,8	53,5	
33	τ (halka)	979	971	14,9	6,6		75	ν (CH)	2982	2957	56,0	46,3	
34	δ (CCC)	989	981	27,8	0,3	979 vw	76	ν (CH)	2991	2966	116,4	48,3	
35	δ (HCC)	1027	1018	10,9	1,8	1009 w	77	ν (CH)	2996	2972	138,2	47,3	
36	ν (CC)	1043	1034	6,0	3,1	1030 w	78	ν (CH)	2998	2973	106,6	65,3	3003 sh
37	ν (CC)	1060	1051	7,6	11,6	1057 m	79	ν (CH)	3084	3059	35,8	11,5	3026 s
38	δ (HCC)	1074	1065	5,5	2,0		80	ν (CH)	3088	3063	61,1	7,2	
39	δ (HCH)	1089	1081	5,4	4,8		81	ν (CH)	3099	3074	119,0	9,7	
40	δ (HCH)	1121	1112	1,8	9,3	1104 m	82	ν (CH)	3107	3082	46,2	52,7	
41	δ (HCH)	1131	1122	5,4	11,8	1141 s	83	ν (CH)	3120	3095	306,7	28,1	3062 w
42	δ (HCC)	1164	1154	6,2	0,1		84	ν (NH)	3327	3300	84,2	7,3	3424 sh

sh (omuz) , vw (çok zayıf) , w (zayıf şiddetli) , m (orta şiddetli) , s (şiddetli) , vs (çok şiddetli)

Titreşim türleri; Gerilme (ν) , Açık bükülme (δ) , Burulma (τ) , Düzlem dışı açı bükülme (γ)

Çizelge 4.23. 4-benzilpiperidin molekülünün BLYP/6-31G(d,p) baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması

Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel	Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel
1	τ (halka)	38	38	8,1	0,0		43	ν (CC)	1178	1169	8,1	0,2	
2	τ (halka)	54	54	1,2	0,1		44	δ (HCC)	1185	1176	28,3	9,2	1180 vw
3	τ (halka)	65	64	4,0	0,1		45	δ (HCH)	1192	1183	4,8	3,2	1200 vw
4	δ (HCH)	144	143	1,7	1,5		46	δ (HCC)	1220	1210	3,0	6,6	1227 vw
5	δ (CCC)	205	204	3,6	1,1		47	δ (HCC)	1254	1244	24,1	13,6	
6	τ (halka)	234	233	0,3	0,0		48	δ (HCH)	1268	1258	13,9	3,4	1264 m
7	δ (CCC)	258	256	2,0	0,0		49	ν (CC)	1295	1285	11,6	1,4	
8	δ (HCH)	322	320	0,2	4,6		50	δ (HCH)	1310	1300	9,5	1,2	
9	δ (HCH)	349	346	0,2	2,1		51	δ (HCH)	1322	1312	1,1	0,7	1319 s
10	γ	405	402	0,1	0,0		52	δ (HCC)	1329	1318	1,8	0,2	
11	δ (CCC)	411	407	1,9	0,4		53	δ (HCC)	1329	1319	3,6	3,6	
12	δ (CCC)	425	422	1,4	2,4	425 vw	54	δ (HCC)	1338	1328	16,3	2,4	1362 w
13	δ (CCC)	461	457	2,6	0,5	464 vw	55	δ (HCC)	1346	1336	5,4	0,7	
14	γ	500	496	1,6	4,9	504 s	56	δ (HCC)	1352	1342	12,3	9,0	
15	δ (CCC)	579	574	1,7	6,7		57	δ (HCH)	1370	1359	2,8	7,9	1389 w
16	δ (CCC)	583	578	0,6	4,0	589 s	58	δ (HCC)	1440	1429	23,4	3,1	1449 vs
17	δ (CCC)	620	615	4,4	0,0	625 vw	59	δ (HCN)	1450	1438	1,9	3,2	
18	ν (NH)	694	689	0,6	19,6	700 vs	60	δ (HCH)	1457	1446	4,9	0,7	
19	γ	733	727	9,2	9,4		61	δ (HCH)	1459	1448	1,8	2,6	
20	γ	760	754	2,2	133,1	745 vs	62	δ (HCH)	1464	1452	2,6	4,9	
21	ν (CC)	772	766	8,0	4,6	771 vw	63	δ (HCH)	1465	1454	18,2	2,1	
22	ν (CC)	791	785	2,9	1,9		64	δ (HCH)	1471	1460	11,5	0,5	
23	δ (HCH)	801	795	7,3	1,3	804 sh	65	δ (HCH)	1492	1480	0,9	8,7	1495 s
24	τ (halka)	832	826	6,9	0,0		66	δ (HCC)	1577	1565	8,3	0,9	1554 vw
25	δ (HCH)	851	845	6,3	4,6		67	δ (HCC)	1597	1584	39,8	6,0	1587 vw
26	ν (CC)	883	876	2,7	4,4	894 w	68	ν (CH)	2913	2891	74,3	2,1	2847 m
27	γ	900	893	1,3	1,4	906 sh	69	ν (CH)	2924	2902	10,6	25,6	
28	δ (HCC)	923	916	2,6	15,2		70	ν (CH)	2931	2909	66,4	16,7	
29	ν (CC)	930	923	0,1	0,4	934 w	71	ν (CH)	2940	2917	49,7	16,3	
30	τ (halka)	941	934	0,7	6,7	962 w	72	ν (CH)	2944	2921	177,1	25,7	
31	τ (halka)	947	939	0,4	2,0		73	ν (CH)	2945	2923	45,3	90,0	2917 vs
32	ν (CC)	957	949	0,2	0,0		74	ν (CH)	2971	2948	76,4	48,6	
33	τ (halka)	975	968	15,2	7,0		75	ν (CH)	2986	2963	54,0	40,6	
34	δ (CCC)	987	979	27,9	0,3	979 vw	76	ν (CH)	2993	2970	127,9	42,4	
35	δ (HCC)	1024	1016	11,4	1,9	1009 w	77	ν (CH)	2996	2973	148,2	39,7	
36	ν (CC)	1039	1031	5,5	3,1	1030 w	78	ν (CH)	2998	2975	82,8	69,6	3003 sh
37	ν (CC)	1057	1049	7,8	11,3	1057 m	79	ν (CH)	3084	3061	33,7	10,9	3026 s
38	δ (HCC)	1070	1062	5,4	2,1		80	ν (CH)	3088	3065	63,5	6,4	
39	δ (HCH)	1084	1076	5,1	4,3		81	ν (CH)	3100	3076	120,2	8,6	
40	δ (HCH)	1114	1106	1,8	8,9	1104 m	82	ν (CH)	3108	3084	46,4	47,4	
41	δ (HCH)	1125	1117	5,4	12,0	1141 s	83	ν (CH)	3121	3097	310,1	25,7	3062 w
42	δ (HCC)	1159	1150	6,3	0,1		84	ν (NH)	3359	3333	85,1	5,3	3424 sh

sh (omuz) , vw (çok zayıf) , w (zayıf şiddetli) , m (orta şiddetli) , s (şiddetli) , vs (çok şiddetli)

Titreşim türleri; Gerilme (ν) , Açık bükülme (δ) , Burulma (τ) , Düzlem dışı açı bükülme (γ)

Çizelge 4.24. 4-benzilpiperidin molekülünün BLYP/6-311G baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması

Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel	Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel
1	τ (halka)	39	39	7,1	0,1		43	ν (CC)	1190	1187	16,8	1,2	
2	τ (halka)	54	54	1,6	0,1		44	δ (HCC)	1195	1192	18,3	4,3	1180 vw
3	τ (halka)	65	65	3,6	0,3		45	δ (HCH)	1200	1197	6,1	2,4	1200 vw
4	δ (HCH)	143	143	1,7	1,7		46	δ (HCC)	1230	1227	1,4	4,8	1227 vw
5	δ (CCC)	207	206	2,9	1,2		47	δ (HCC)	1260	1257	20,5	12,5	
6	τ (halka)	230	230	0,3	0,2		48	δ (HCH)	1287	1284	10,8	0,1	1264 m
7	δ (CCC)	259	258	2,5	0,1		49	ν (CC)	1303	1300	9,1	1,2	
8	δ (HCH)	318	317	0,3	9,9		50	δ (HCH)	1318	1315	2,9	0,8	
9	δ (HCH)	349	348	0,2	2,3		51	δ (HCH)	1324	1321	7,4	0,7	1319 s
10	γ	411	410	0,2	0,1		52	δ (HCC)	1333	1330	15,7	2,7	
11	δ (CCC)	414	413	2,6	0,6		53	δ (HCC)	1344	1341	5,1	2,5	
12	δ (CCC)	424	423	2,3	6,7	425 vw	54	δ (HCC)	1351	1347	9,4	3,0	1362 w
13	δ (CCC)	463	462	3,1	0,6	464 vw	55	δ (HCC)	1357	1353	5,2	1,6	
14	γ	507	506	1,9	9,5	504 s	56	δ (HCC)	1358	1355	3,2	1,8	
15	δ (CCC)	582	581	1,0	36,7		57	δ (HCH)	1377	1373	2,2	1,4	1389 w
16	δ (CCC)	594	592	1,1	6,0	589 s	58	δ (HCC)	1455	1452	0,9	4,3	1449 vs
17	δ (CCC)	636	635	4,7	0,0	625 vw	59	δ (HCN)	1463	1459	20,1	3,4	
18	ν (NH)	644	642	3,2	166,8	700 vs	60	δ (HCH)	1477	1473	2,3	4,0	
19	γ	706	704	0,5	38,9		61	δ (HCH)	1483	1480	3,8	4,6	
20	γ	742	740	10,2	29,9	745 vs	62	δ (HCH)	1485	1481	4,3	8,6	
21	ν (CC)	770	768	5,4	10,7	771 vw	63	δ (HCH)	1491	1487	12,4	1,8	
22	ν (CC)	794	792	2,6	0,3		64	δ (HCH)	1491	1488	4,0	8,2	
23	δ (HCH)	806	804	6,4	1,8	804 sh	65	δ (HCH)	1498	1494	10,0	8,4	1495 s
24	τ (halka)	843	841	2,4	0,1		66	δ (HCC)	1561	1557	8,5	1,5	1554 vw
25	δ (HCH)	849	847	6,7	1,9		67	δ (HCC)	1580	1576	39,0	6,7	1587 vw
26	ν (CC)	882	880	1,7	2,7	894 w	68	ν (CH)	2886	2879	88,1	2,8	2847 m
27	γ	908	905	1,6	0,2	906 sh	69	ν (CH)	2901	2893	15,5	30,8	
28	δ (HCC)	925	923	1,4	8,5		70	ν (CH)	2908	2901	74,2	21,5	
29	ν (CC)	939	936	1,0	5,1	934 w	71	ν (CH)	2917	2909	64,5	13,8	
30	τ (halka)	955	952	0,2	1,1	962 w	72	ν (CH)	2921	2913	184,0	31,9	
31	τ (halka)	956	954	0,1	3,8		73	ν (CH)	2922	2915	77,0	96,6	2917 vs
32	ν (CC)	974	971	16,4	4,7		74	ν (CH)	2948	2940	80,1	55,4	
33	τ (halka)	982	980	0,3	0,2		75	ν (CH)	2962	2954	56,8	53,9	
34	δ (CCC)	998	996	45,7	0,1	979 vw	76	ν (CH)	2970	2963	136,8	65,5	
35	δ (HCC)	1025	1023	1,8	3,4	1009 w	77	ν (CH)	2983	2975	140,3	52,5	
36	ν (CC)	1039	1036	3,0	4,4	1030 w	78	ν (CH)	2985	2978	140,7	67,8	3003 sh
37	ν (CC)	1050	1048	11,5	12,8	1057 m	79	ν (CH)	3067	3060	33,5	12,2	3026 s
38	δ (HCC)	1070	1068	5,6	2,1		80	ν (CH)	3071	3064	78,1	4,7	
39	δ (HCH)	1092	1089	5,3	11,4		81	ν (CH)	3084	3076	116,3	18,8	
40	δ (HCH)	1123	1120	1,5	7,8	1104 m	82	ν (CH)	3093	3085	40,1	67,3	
41	δ (HCH)	1145	1142	4,7	8,4	1141 s	83	ν (CH)	3109	3101	334,1	32,5	3062 w
42	δ (HCC)	1180	1177	5,7	0,3		84	ν (NH)	3369	3360	104,8	6,6	3424 sh

sh (omuz) , vw (çok zayıf) , w (zayıf şiddetli) , m (orta şiddetli) , s (şiddetli) , vs (çok şiddetli)

Titreşim türleri; Gerilme (ν) , Açık bükülme (δ) , Burulma (τ) , Düzlem dışı açı bükülme (γ)

Çizelge 4.25. 4-benzilpiperidin molekülünün BLYP/6-311G(d) baz setinde hesaplanan ve gözlenen titreşim modlarının karşılaştırılması

Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel	Titreşim Numarası	Titreşimin Adı	Hesaplanan Frekans	Ölçeklenmiş Frekans	Raman Şiddet (Teorik)	Infrared Şiddet (Teorik)	IR(Freq)-Deneyisel
1	τ (halka)	40	40	7,1	0,0		43	ν (CC)	1176	1173	5,3	0,2	
2	τ (halka)	54	54	1,4	0,1		44	δ (HCC)	1184	1181	31,3	4,1	1180 vw
3	τ (halka)	64	64	3,8	0,2		45	δ (HCH)	1194	1191	4,2	6,1	1200 vw
4	δ (HCH)	143	142	1,5	1,5		46	δ (HCC)	1223	1220	1,5	5,3	1227 vw
5	δ (CCC)	205	204	2,9	1,2		47	δ (HCC)	1258	1255	16,3	14,4	
6	τ (halka)	233	233	0,3	0,1		48	δ (HCH)	1273	1270	11,4	0,7	1264 m
7	δ (CCC)	257	257	2,2	0,1		49	ν (CC)	1297	1293	8,1	1,3	
8	δ (HCH)	321	321	0,2	5,0		50	δ (HCH)	1311	1308	4,9	0,6	
9	δ (HCH)	348	348	0,2	2,3		51	δ (HCH)	1317	1314	7,1	0,7	1319 s
10	γ	404	403	0,1	0,0		52	δ (HCC)	1328	1324	1,9	0,8	
11	δ (CCC)	410	409	2,2	0,7		53	δ (HCC)	1331	1327	2,2	3,2	
12	δ (CCC)	425	424	2,0	2,5	425 vw	54	δ (HCC)	1340	1337	16,6	2,2	1362 w
13	δ (CCC)	462	460	2,6	0,5	464 vw	55	δ (HCC)	1346	1342	3,3	0,3	
14	γ	500	499	1,6	8,3	504 s	56	δ (HCC)	1352	1348	9,8	6,6	
15	δ (CCC)	581	579	1,5	9,2		57	δ (HCH)	1369	1365	2,0	3,1	1389 w
16	δ (CCC)	584	583	0,8	5,6	589 s	58	δ (HCC)	1446	1442	3,9	4,9	1449 vs
17	δ (CCC)	623	621	4,4	0,0	625 vw	59	δ (HCN)	1447	1443	16,2	2,3	
18	ν (NH)	691	689	0,5	42,8	700 vs	60	δ (HCH)	1459	1455	4,9	2,8	
19	γ	728	726	7,4	10,2		61	δ (HCH)	1465	1461	1,2	5,0	
20	γ	754	752	1,2	148,0	745 vs	62	δ (HCH)	1467	1463	3,3	9,3	
21	ν (CC)	768	766	7,2	4,8	771 vw	63	δ (HCH)	1472	1469	12,6	2,3	
22	ν (CC)	790	788	1,9	2,2		64	δ (HCH)	1474	1470	4,0	2,3	
23	δ (HCH)	800	798	7,1	1,3	804 sh	65	δ (HCH)	1487	1483	1,5	11,2	1495 s
24	τ (halka)	820	818	1,8	0,0		66	δ (HCC)	1567	1563	6,4	1,3	1554 vw
25	δ (HCH)	848	846	6,2	4,5		67	δ (HCC)	1586	1582	36,3	6,1	1587 vw
26	ν (CC)	874	872	0,6	4,5	894 w	68	ν (CH)	2903	2896	107,4	0,9	2847 m
27	γ	896	893	2,1	2,1	906 sh	69	ν (CH)	2911	2904	11,5	26,6	
28	δ (HCC)	914	912	0,5	0,5		70	ν (CH)	2920	2912	70,0	19,9	
29	ν (CC)	922	920	2,2	14,9	934 w	71	ν (CH)	2929	2922	64,5	14,3	
30	τ (halka)	938	936	0,7	5,4	962 w	72	ν (CH)	2933	2926	132,6	42,2	
31	τ (halka)	942	940	0,3	2,5		73	ν (CH)	2936	2929	90,8	81,1	2917 vs
32	ν (CC)	947	944	0,1	2,9		74	ν (CH)	2954	2947	103,6	65,3	
33	τ (halka)	973	970	13,6	6,5		75	ν (CH)	2970	2963	56,8	48,3	
34	δ (CCC)	991	988	35,7	0,1	979 vw	76	ν (CH)	2977	2970	144,3	54,1	
35	δ (HCC)	1021	1019	8,7	3,2	1009 w	77	ν (CH)	2983	2975	153,1	57,2	
36	ν (CC)	1037	1034	4,6	3,6	1030 w	78	ν (CH)	2984	2977	126,1	74,0	3003 sh
37	ν (CC)	1051	1049	7,8	13,3	1057 m	79	ν (CH)	3065	3057	34,6	12,3	3026 s
38	δ (HCC)	1067	1065	4,7	2,8		80	ν (CH)	3070	3062	75,9	5,5	
39	δ (HCH)	1086	1083	5,9	7,2		81	ν (CH)	3081	3073	128,3	13,8	
40	δ (HCH)	1116	1113	1,5	8,9	1104 m	82	ν (CH)	3089	3081	46,3	61,3	
41	δ (HCH)	1131	1128	5,3	10,5	1141 s	83	ν (CH)	3102	3094	341,9	31,5	3062 w
42	δ (HCC)	1158	1155	4,1	0,1		84	ν (NH)	3353	3345	91,8	7,9	3424 sh

sh (omuz) , vw (çok zayıf) , w (zayıf şiddetli) , m (orta şiddetli) , s (şiddetli) , vs (çok şiddetli)

Titreşim türleri; Gerilme (ν) , Açık bükülme (δ) , Burulma (τ) , Düzlem dışı açı bükülme (γ)

Çizelge 4.26. 4-benzilpiperidin Molekülünün BLYP 6-311G Hesaplama Metodu İçin Yaklaşık Ped Hesaplamaları

Tit.Nu.	SimTür.	4-BENZYİPİPERİDİN MOLEKÜLÜNÜN BLYP 6-311G HESAPLAMA METODU İÇİN YAKLAŞIK PED HESAPLAMALARI
1	A	%8 TORS(CCCC+HCCC) + %5 STRE(CC)
2	A	%8 TORS(CCCC+HCCC+HCCH)
3	A	%8 BEND(CCC) + %5 STRE(CC)
4	A	%27 STRE(CC) + %9 BEND(HCC) + %5 STRE(CN) + %5 TORS(CCCC+HCCC+HCCH) + %4 TORS(CCN+HCNC+CCNH+HCNH) + %3 STRE(NH) + %3 BEND(NCC) + %2 STRE(CH) + %2 TORS(CCCC+HCCC) + %1 BEND(CCC)
5	A	%5 STRE(CC)
6	A	%12 TORS(CCCN+HCCN+CCCH+HCCH) + %6 TORS(CCCC+HCCC+HCCH)
7	A	%7 STRE(CC) + %6 BEND(CCC)
8	A	%11 TORS(CCN+HCNC+CCNH+HCNH)
9	A	%5 TORS(CCCC+HCCC+HCCH)
10	A	%22 OUT(CHCC)
11	A	%11 OUT(CHCC) + %10 STRE(CC) + %7 BEND(NCC) + %6 BEND(CCC) + %4 OUT(CCCC) + %4 STRE(CN) + %4 TORS(CCCC+HCCC) + %4 TORS(CCCC+HCCC+HCCH) + %3 TORS(CCCN+HCCN+CCCH+HCCH) + %2 BEND(HCN) + %1 STRE(NH) + %1 BEND(CHC) + %1 TORS(CCCC+HCCC) + %1 TORS(CCN+HCNC+CCNH+HCNH)
12	A	%13 STRE(CC) + %10 TORS(CCCN+HCCN+CCCH+HCCH) + %7 STRE(CH) + %7 STRE(CN) + %6 TORS(CCN+HCNC+CCNH+HCNH) + %5 TORS(CCCC+HCCC+HCCH) + %3 STRE(NH) + %3 BEND(HCN) + %2 BEND(CCC) + %2 BEND(HCC) + %2 OUT(CHCC) + %1 BEND(NCC) + %1 BEND(HNC) + %1 TORS(CCCC+HCCC)
13	A	%21 STRE(CC) + %10 STRE(CH) + %6 STRE(CN) + %4 TORS(CCCC+HCCC+HCCH) + %4 BEND(HCN) + %3 BEND(CCC) + %3 BEND(HCC) + %3 TORS(CCN+HCNC+CCNH+HCNH) + %3 BEND(NCC) + %2 BEND(HNC) + %2 TORS(CCN+HCNC+CCNH+HCNH) + %1 TORS(CCCC+HCCC)
14	A	%9 OUT(CCCC) + %6 OUT(CHCC)
15	A	%17 BEND(HCC) + %7 BEND(CCC) + %6 BEND(NCC) + %4 STRE(CH) + %3 STRE(CN) + %3 BEND(HNC) + %4 TORS(CCCN+HCCN+CCCH+HCCH) + %4 BEND(HCN) + %3 TORS(CCCC+HCCC+HCCH) + %2 STRE(CC) + %2 OUT(CHCC) + %2 OUT(CCCC)
16	A	%6 BEND(CCC)
17	A	%10 STRE(CC)
18	A	%9 STRE(NH) + %5 STRE(CH)
19	A	%21 OUT(CHCC) + %5 BEND(HCC)
20	A	%19 OUT(CHCC) + %16 STRE(CH) + %11 BEND(HCC) + %4 BEND(CHC) + %4 TORS(CCCC+HCCC) + %3 STRE(CN) + %3 STRE(CC) + %3 STRE(NH) + %3 TORS(CCCC+HCCC+HCCH) + %2 OUT(CCCC)
21	A	%13 OUT(CHCC) + %12 STRE(CC) + %10 STRE(CH) + %4 STRE(CN) + %4 TORS(CCCC+HCCC) + %3 BEND(HCC) + %2 STRE(NH) + %2 BEND(CCC) + %2 BEND(CHC) + %1 TORS(CCCN+HCCN+CCCH+HCCH) + %1 OUT(CCCC)
22	A	%6 STRE(CH)
23	A	%14 STRE(CH) + %11 STRE(CC) + %9 BEND(HCC) + %5 OUT(CHCC) + %5 BEND(HNC) + %4 BEND(HCN) + %4 TORS(CCN+HCNC+CCNH+HCNH) + %2 STRE(CN) + %2 BEND(CCC) + %2 OUT(CCCC)
24	A	%24 TORS(CCCC+HCCC+HCCH) + %18 TORS(CCCC+HCCC)
25	A	%19 STRE(CH) + %11 STRE(CC) + %7 BEND(HCC) + %6 TORS(CCCC+HCCC+HCCH) + %5 STRE(CN) + %5 STRE(NH) + %4 TORS(CCN+HCNC+CCNH+HCNH) + %2 TORS(CCCC+HCCC+HCCH) + %2 TORS(CCCC+HCCC) + %2 TORS(CCCN+HCCN+CCCH+HCCH) + %1 BEND(HCN)

Çizelge 4.26.(Devam) 4-benzilpiperidin Molekülünün BLYP 6-311G Hesaplama Metodu İçin Yaklaşık Ped Hesaplamaları

Tit.Nu.	SimTür.	4-BENZİLPIPERİDİN MOLEKÜLÜNÜN BLYP 6-311G HESAPLAMA METODU İÇİN YAKLAŞIK PED HESAPLAMALARI
26	A	%13 STRE(CC)
27	A	% 30 TORS(CCCC+HCCC+HCCH) + %22 OUT(CHCC) + % 12 TORS(CCCC+HCCC)
28	A	% 10 STRE(CH) + %9 TORS(CCCC+HCCC+HCCH) + %8 TORS(CCCN+HCCN+CCCH+HCCH) + %7 BEND(HCC) + %6 TORS(CCNH+HCNC+CCNH+HCNH) + %5 STRE(CC) + %4 TORS(CCCC+HCCC) + %4 BEND(HCN) + %3 OUT(CHCC) + %2 BEND(CHC) + %1 STRE(CN)
29	A	%22 STRE(CC) + %11 BEND(HCC) + %5 STRE(CN) + %4 BEND(HCN) + %3 OUT(CHCC) + %2 TORS(CCCC+HCCC) + %2 TORS(CCCC+HCCC+HCCH) + %2 BEND(NCC) + %2 TORS(CCCN+HCCN+CCCH+HCCH) + %1 BEND(CCC) + %1 OUT(CCCC)
30	A	%32 TORS(CCCC+HCCC+HCCH) + %20 OUT(CHCC)
31	A	%18 TORS(CCCN+HCCN+CCCH+HCCH)
32	A	%15 STRE(CC) + %11 BEND(HCC) + %12 BEND(NCC) + %7 BEND(CCC) + %5 TORS(CCCC+HCCC+HCCH) + %4 STRE(CH) + %4 STRE(CN) + %4 TORS(CCNH+HCNC+CCNH+HCNH) + %2 STRE(NH) + %2 BEND(HNC)
33	A	%60 TORS(CCCC+HCCC+HCCH) + %20 OUT(CHCC)
34	A	%27 STRE(CH) + %7 BEND(CCC)
35	A	%7 STRE(CC) + %5 BEND(CCC) + %5 STRE(CH)
36	A	%15 BEND(HCC) + %10 STRE(CH) + %6 STRE(CC) + %6 TORS(CCCC+HCCC+HCCH) + %5 BEND(CCC) + %3 BEND(HCN) + %2 STRE(CN) + %2 BEND(NCC) + %2 TORS(CCNH+HCNC+CCNH+HCNH) + %1 STRE(CH) + %1 STRE(NH)
37	A	%14 BEND(HCC) + %11 STRE(CC) + %8 BEND(CCC) + %6 STRE(CH) + %3 BEND(HCN) + %3 TORS(CCCC+HCCC+HCCH) + %2 TORS(CCNH+HCNC+CCNH+HCNH) + %1 STRE(NH) + %1 OUT(CHCC) + %1 OUT(CCCC)
38	A	% 16 STRE(CC) + %14 BEND(HCC) + %9 STRE(CH) + %7 BEND(CCC) + %4 STRE(NH) + %2 BEND(CHC) + %2 TORS(CCCC+HCCC) + %1 STRE(CN) + %1 BEND(NCC)
39	A	%7 STRE(CH)
40	A	%6 STRE(NH)
41	A	%12 STRE(CH)
42	A	%54 BEND(HCC)
43	A	%6 STRE(CC)
44	A	%38 BEND(HCC) + %18 BEND(CCC) + %11 STRE(CH) + %10 STRE(CC) + %2 BEND(CHC) + %2 TORS(CCCC+HCCC)
45	A	%17 BEND(CCC) + %17 BEND(HCC) + %10 STRE(CH) + %6 BEND(CHC) + %5 STRE(CC) + %5 TORS(CCCC+HCCC)
46	A	%14 BEND(HCN) + %5 BEND(HCC)
47	A	%37 BEND(HCC) + %27 STRE(CH) + %9 BEND(HNC) + %4 TORS(CCCN+HCCN+CCCH+HCCH) + %3 STRE(NH) + %2 TORS(CCCC+HCCC+HCCH)
48	A	%5 STRE(NH)
49	A	%5 STRE(CC)
50	A	%5 STRE(NH)
51	A	%46 BEND(HCC) + %12 BEND(HNC) + %11 STRE(CH) + %6 BEND(CHC) + %4 STRE(NH) + %2 BEND(HCN)
52	A	%34 BEND(HCC) + %17 STRE(CH) + %9 BEND(HNC) + %4 BEND(CHC) + %4 TORS(CCCC+HCCC+HCCH) + %4 TORS(CCCN+HCCN+CCCH+HCCH) + %3 STRE(NH) + %2 TORS(CCNH+HCNC+CCNH+HCNH)

Çizelge 4.26.(Devam) 4-benzilpiperidin Molekülünün BLYP 6-311G Hesaplama Metodu İçin Yaklaşık Ped Hesaplamaları

Tit.Nu.	SimTür.	4-BENZİLPIPERİDİN MOLEKÜLÜNÜN BLYP 6-311G HESAPLAMA METODU İÇİN YAKLAŞIK PED HESAPLAMALARI
53	A	%38 BEND(HCC) + %13 BEND(HNC) + %12 STRE(CH) + %6 TORS(CCCC+HCCC+HCCH) + %4 BEND(CHC) + %2 STRE(NH) + %1 TORS(CCCC+HCCC) + %1 TORS(CCCN+HCCN+CCCH+HCCH)
54	A	%43 BEND(HCC) + %20 STRE(CH) + %13 BEND(HNC) + %5 STRE(NH) + %2 BEND(HCN)
55	A	%43 BEND(HCC) + %13 STRE(CH) + %8 BEND(HNC) + %4 STRE(NH) + %4 BEND(CHC)
56	A	%18 BEND(HCC)
57	A	%30 BEND(HNC) + %22 BEND(HCC)
58	A	%61 BEND(HCC)
59	A	%16 BEND(HHC) + %14 TORS(CCNC+HCNC+CCNH+HCNH) + %12 BEND(HCN)
60	A	%71 BEND(HHC)
61	A	%68 BEND(HHC)
62	A	%75 BEND(HHC)
63	A	%56 BEND(HHC)
64	A	%56 BEND(HHC)
65	A	%36 BEND(HCC) + %27 BEND(HHC)
66	A	%42 BEND(HCC)
67	A	%63 BEND(HCC) + %6 BEND(CCC)
68	A	%41 STRE(CH) + %9 STRE(NH)
69	A	%85 STRE(CH)
70	A	%73 STRE(CH) + %6 STRE(NH)
71	A	%73 STRE(CH)
72	A	%66 STRE(CH)
73	A	%73 STRE(CH) + %7 STRE(NH)
74	A	%46 STRE(CH)
75	A	%47 STRE(CH)
76	A	%56 STRE(CH) + %9 STRE(NH)
77	A	%63 STRE(CH)
78	A	%50 STRE(CH) + %7 STRE(NH)
79	A	%69 STRE(CH)
80	A	%72 STRE(CH)
81	A	%94 STRE(CH)
82	A	%94 STRE(CH)
83	A	%95 STRE(CH)
84	A	%32 STRE(CH) + %21 STRE(NH)

P.E.D. hesaplamaları Gar2Ped programı ile yapılmıştır[36].

4.3. Hesaplama Sonuçları

Değişik yöntem ve baz setlerinde 4-benzilpiperidin molekülü için teorik olarak hesaplanan değerler piperidin molekülü için deneysel olarak hesaplanan değerlerle karşılaştırılmış; deneysel olarak H-C-H ($110,0^\circ$) bağ açısı BLYP 3-21G hesaplama metodunda $107,9^\circ$, C-N-C ($110,7^\circ$) bağ açısı BLYP 3-21G hesaplama metodunda $110,9^\circ$, N-C-C ($110,5^\circ$) bağ açısı HF 6-31G hesaplama metodunda $109,7^\circ$ ve C-C-C ($111,1^\circ$) bağ açısı BLYP 6-31G hesaplama metodunda $111,2^\circ$ olarak hesaplanmıştır. Tüm bağ açıları birlikte düşünüldüğünde HF 6-311G hesaplama metodunun en yaklaşık sonucu verdiği görülmüştür.

Değişik yöntem ve baz setlerinde 4-benzilpiperidin molekülü için teorik olarak hesaplanan değerler piperidin molekülü için deneysel olarak hesaplanan değerlerle karşılaştırılmış; deneysel olarak N-H ($1,015 \text{ Å}$) bağ uzunluğu B3LYP 6-311G hesaplama metodunda $1,0148 \text{ Å}$, C-H ($1,098 \text{ Å}$) bağ uzunluğu B3LYP 6-311G hesaplama metodunda $1,0977 \text{ Å}$, N-C ($1,469 \text{ Å}$) bağ uzunluğu B3LYP 6-31G (d) hesaplama metodunda $1,467 \text{ Å}$ ve C-C ($1,530 \text{ Å}$) bağ uzunluğu HF 6-311G (d) hesaplama metodunda $1,5309 \text{ Å}$ olarak hesaplanmıştır. Yukarıda bahsi geçen tüm bağ uzunlukları birlikte düşünüldüğünde Şekil 4.3' deki korelasyon grafiklerinden de görüleceği üzere HF 3-21G(d) ve HF 3-21G hesaplama metodlarının en yaklaşık sonuçları verdiği görülmüştür.

Yukarıdaki bağ açıları ve bağ uzunlukları ile ilgili sonuçlar göz önüne alındığında bir molekülün daha kompleks (karmaşık) bir molekül içerisinde bulunması durumunda bağ açılarının bağ uzunluklarına göre daha çok değişebileceği (etkilenebileceği) yönünde bir teoreme bulunabiliriz.

Değişik yöntem ve baz setlerinde 4-benzilpiperidin molekülü için deneysel olarak hesaplanan frekans değerleri ile teorik olarak hesaplanan frekans değerleri karşılaştırıldı ve korelasyon grafikleri çizildi. Bu grafiklerden de görüldüğü gibi genel olarak deneysel olarak elde edilen değerlerden BLYP' de hesaplananlar HF ve B3LYP' de hesaplananlara göre daha iyi sonuç verirler(Şekil 4.4).

Deneyisel değerler ile teorik değerlerin en iyi sonuç verdiği hesaplamalardan BLYP 6-311G Hesaplama metodu için Çizelge 4.26'daki yaklaşık PED hesaplamalarından faydalanılarak Çizelge 4.24' deki titreşim mod değerleri çeşitli titreşimler için deneysel ve teorik olarak aşağıda verilmiştir.

NH gerilme titreşimi için 642 cm^{-1} ve 3360 cm^{-1} olarak gözlemlenen band, 700 cm^{-1} ve 3424 cm^{-1} olarak hesaplanmıştır.

CH gerilme titreşimi için 2915 cm^{-1} ve 2978 cm^{-1} olarak gözlemlenen band, 2917 cm^{-1} ve 3003 cm^{-1} olarak hesaplanmıştır.

CC gerilme titreşimi için 936 cm^{-1} ve 1023 cm^{-1} olarak gözlemlenen band, 934 cm^{-1} ve 1009 cm^{-1} olarak hesaplanmıştır.

HCC açılı bükülme titreşimi için 1036 cm^{-1} ve 1048 cm^{-1} olarak gözlemlenen band, 1030 cm^{-1} ve 1057 cm^{-1} olarak hesaplanmıştır.

CCC açılı bükülme titreşimi için 1576 cm^{-1} olarak gözlemlenen band, 1587 cm^{-1} olarak hesaplanmıştır.

HCN açılı bükülme titreşimi için 1227 cm^{-1} olarak gözlemlenen band, 1227 cm^{-1} olarak hesaplanmıştır.

HCH açılı bükülme titreşimi için 1494 cm^{-1} olarak gözlemlenen band, 1495 cm^{-1} olarak hesaplanmıştır.

Değişik yöntem ve baz setlerinde 4-benzilpiperidin molekülü için hesaplanan ölçeklenmiş frekanslar deneysel frekanslar ile karşılaştırıldığında, metodlar arasında birini diğerine tercih edecek kadar büyük farklılıklar olmasa da, BLYP metodu ile yapılan hesaplamaların deneysel verilere daha çok uyduğu gözlenmiştir.

Bunun nedeni karma yoğunluk fonksiyon teorisinin tam enerji ifadelerinin hesabı için saf HF veya saf DFT modelleri yerine bu modellerin her ikisinin de enerji ifadelerinden yararlanması olabilir.

KAYNAKLAR

1. Woodward, L. A., "Introduction to the Theory and Molecular Vibration Spectroscopy, **Oxford University Pres**, New York, 1-55 (1972).
2. Chang, R., "Basic Principles of Spectroscopy" , **Mc Graw Hill**, New York, 1-100 (1971).
3. Whiffen, D.H., "Spectroscopy", 2nd ed. , **Longman**, London, 550-60 (1971).
4. Bransden, B. H., Joachim, C. J., "Physics of Atom and Molecules", **Longman**, London, 1-100 , 453-600 (1983).
5. Banwell, C.N., "Fundamentals of Molecular Spectroscopy", 3nd ed., **Mc.Graw Hill**, London, 30-80 (1983).
6. Gans,P., "Vibrating molecules" , **Chapman and Hall** , London , 15-25 (1971)
7. Szymnanski, H.A., Keiser, W.E., Alpert, N.L., "IR Theory and Practice of IR spectroscopy", **Plenum Pres**, New York, 10-62 (1970).
8. Höltje, H.D., Sippl, W., Rognan, D., Folkers, G., "Molecular Modeling" , 2nd ed., **Wiley-VCH**, 18-78 (2003).
9. Çelik, İ., Akkurt, M., İde, S., Tutar, A., Çakmak, O., "C₇H₈Br₄ molekülünün konformasyon analizi ve kuantum mekanik yöntemle optimizasyonu, elde edilen elektronik ve yapısal parametrelerin x-ışınları yapı analiz sonuçları ile karşılaştırılması", **G.Ü. Journal of Science**, 16 (1): 27-35 (2003)
10. Leach, A. E., "Molecular modelling principles and applications", **Paerson Education Limited**, England, 457-501(2001).
11. Jensen, F., "Introduction to Computational Chemistry", **John Wiley&Sons Ltd**, 440-462 (1999).
12. Pulay, P., "Analytical Derivative Methods in Quantum Chemistry, Ab Initio Methods in Quantum Chemistry" , By K. P. Lawley 11nd ed., **John Wiley&Sons Ltd**, 118-143 (1987)
13. Pople, J. A., Krishnan, R., Schlegel, H.B., Binkley, J.S., **Int.J.Quantum Chem. Symp.**, 13:225 (1979).
14. Atkins, P.W., Friedman, R. S., "Moleküler quantum mechanics", **Oxford University Pres**, New York, 240-244 (1977).

15. Frish, A., Nielsen, A.B., Holder, A.J., "Gaussview Users Manual", **Gaussian Inc.**, Pittsburg, 325-410 (2000).
16. Becke, A.D., "Density functional thermochemistry. III. The role of exact exchange", **J.Chem.Phys.**, 14: 125 (1971).
17. Csizmadia, G. L., "Computational Adv. In organic chem., Molecular str. And reactivity". Ed. by Öğretir, C., Csizmadia, G.L., NATO ASI series. **Kluwer Academic Publishers**, USA, 15-74 (1981).
18. Hehre, W. J., Radom, L., Schleyer, P. V., Pople, J., "Ab Initio Molecular Orbital Theory", **Wiley-Interscience**, New York, 55-80 (1986).
19. Nakamoto, K., "Infrared and Raman Spectra of Organic and Coordination Compounds, part A.", **John Wiley&Sons Inc.**, New York, 45-57 (1997).
20. Wilson, E.B., Decius, J.C., Cross, C.P., "Molecular vibrations", **Mc Graw Hill Company**, London, 10-35 (1955).
21. Arslan, H., "p-Toluidino-p-klorofenilglioksim ligandı ve bazı metal komplekslerinin termal davranışlarının incelenmesi ve normal koordinat analizi" Doktora Tezi, **Niğde Üniv., Fen Bilimleri Enst.**, Niğde, 29-32 (1998).
22. Bahat M., "Kinazolin molekülünün kuvvet alanının DFT B3LYP/6-31 G* tabanlı SQM metodu ile hesabı ve bazı hofmann-tipi komplekslerin titreşimsel spektroskopi ile incelenmesi", Doktora tezi, **Gazi Üniv. Fen Bil. Enst.**, Ankara, 8-45 (2000).
23. Keresztury, G., Jalsovszky, G., "An alternative calculation of the vibrational potential energy distribution", **Journal of Molecular Structure**, 10 (2): 304-305(1971).
24. Pulay, P., Fogorasi, G., Pang, F., Bogs, J.E., "Systematic ab initio gradient calculation of molecular geometries, force constants and dipol moment derivates", **J.Am.Chem.Soc.**, 105:7037-7040(1979).
25. Pulay, P., Meyer, W., "Comprasion of tfe ab initio force constant of ethane, ethylene and acetylene", **Mol. Phys.**, 27:473-475 (1974).
26. Bleicher, W.,Botschvina, P., "Quantum chemical calculations of formyl radicals II. Ground state of the fluoroformyl radical", **Mol.Phys.**, 30: 1029-1036(1979).
27. Blom, C.E., Altona, C., "Application of self-consistent field ab initio calculations to organic molecules II. Scale factor method fort he calculation of vibrational frequencies from ab initio force constants: ethane, propane and cyclopropane", **Mol. Phys.**, 31: 1377 (1976)

28. Fogorasi, G., Zhou, X., Taylor, P. W., Pulay, P., "The calculation of ab initio molecular geometries: Efficient optimization by natural internal coordinates and empirical correction by offset forces", *J.Am.Chem.Soc.*, 114:8191 (1992).
29. Pulay, P., "Combination of theoretical ab initio and experimental information to obtain reliable harmonic force constants. Scaled quantum mechanical (SQM) force fields for glyoxal, acrolein, butadiene, formaldehyde and ethylene", *J.Am.Chem.Soc.*, 105:7037 (1983)
30. Fogorasi, G., Pulay, P., "Vibrational spectra and structure", Ed. Durig, J.R., *Elsevier Pub.*, 14:125 (1985).
31. Pongor, G., Fogorasi, G., Magdo, I., Boggs, J.E., Keresztury, G., Ignatyev, I.S., "Theoretical prediction of vibrational spectra. The a priori Scaled quantum mechanical (SQM) force field and vibrational spectra of pyrimidine", *Spectrochim. Acta.*, 48A:1-11(1992).
32. Rauhut, G., Pulay, P., "Transferable scaling factors for density functional derived vibrational force fields", *J.Phys.Chem.*, 99(10):3094-3097(1995).
33. Frisch, M.J., Trucks, G.W., Schlegel, H.B., Scuseria, G.E., Robb, M.A., Cheeseman, J.R., Zakrzewski, V.G., Montgomery J.A., Jr., Stratmann, R. E., Burant, J. C., Dapprich, S., Millam, J.M., Daniels, A.D., Kudin, K.N., Strain, M.C., Farkas, O., Tomasi, J., Barone, V., Cossi, M., Cami, R., Mennucci, B., Pomelli, C., Adamo, C., Clifford, S., Ochterski, J., Petersson, G.A., Ayala, P.Y., Cui, Q., Morokuma, K., Malick, D.K., Rabuck, A.D., Raghavachari, K., Foresman, J.B., Cioslowski, J., Ortiz, J.V., Baboul, A.G., Stefanov, B.B., Liu, G., Liashenko, A., Piskorz, P., Komaromi, I., Gomperts, R., Martin, R.L. , Fox, D.J., Keith, T., Al-Laham, M.A., Peng, C.Y., Nanayakkara, A., Challacombe, M., Gill, P.M.W., Johnson, B., Chen, W., Wong, M.W., Andres, J.L., Gonzalez, C., Head-Gordon, M., Replogle, E.S., and Pople, J.A., "Gaussian 98, Revision A.9", *Gaussian, Inc.*, Pittsburgh PA (1998).
34. Vedal, D., Ellestad, H., Klaboe, P., "The vibrational spectra of piperidine and morpholine and their N-deuterated analogs", *Spectrochim. Acta.*, 32A: 77-890(1976).
35. Gundersen, G. And Rankin, D. W. H., "The gas phase molecular structure of piperidine studied by electron diffraction", *Acta Chem. Scand. A.*, 37: 865 (1983).
36. Martin, J.M.L., Van Alsenoy C., "GAR2PED", *University of Antwerp*, (1995)
37. Internet : "Ölçekleme faktörleri" <http://srdata.nist.gov/cccbdb/vsf.asp> (2007)

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı, adı : ERDOĞDU, Ercan
 Uyruğu : T.C.
 Doğum tarihi ve yeri : 25.11.1980 İzmir
 Medeni hali : Evli
 Telefon : 0 505 323 09 36
 E-posta : ercan_erdogdu@yahoo.com

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Yüksek lisans	İstanbul Üniversitesi/Fizik Öğr. Bölümü	2003
Lisans	Gazi Üniversitesi/ Fizik Bölümü	2002
Lise	Sakarya Atatürk Lisesi	1997

İş Deneyimi

Yıl	Yer	Görev
2003-2004	Rönesans Dershanesi	Fizik Öğretmeni
2005-	İstanbul Emniyet Müdürlüğü	Polis Memuru

Yabancı Dil

İngilizce

Hobiler

Kitap okumak, Seyahat etmek, Spor yapmak...