

**AB İNİTİO VE DFT METODLARINI KULLANARAK
TIPTA ÖNEMLİ BAZI MOLEKÜLLERİN YAPI VE
TİTREŞİMLERİNİN
İNCELENMESİ**

Raziye ERTUĞRUL

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK**

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**OCAK 2011
ANKARA**

Raziye ERTUĞRUL tarafından hazırlanan “AB İNİTİO VE DFT METODLARINI KULLANARAK TIPTA ÖNEMLİ BAZI MOLEKÜLLERİN YAPI VE TİTREŞİMLERİNİN İNCELENMESİ” adlı bu tezin Yüksek Lisans tezi olarak uygun olduğunu onaylarım.

Prof. Dr. Ziya KANTARCI

.....

Tez Danışmanı Fizik Anabilim Dalı

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

.....

Fizik Anabilim Dalı, Gazi Üniv.

.....

Fizik Anabilim Dalı, Gazi Üniv.

.....

Fizik Anabilim Dalı, Gazi Üniv.

Tarih : / / 2011

Bu tez ile G.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu Yüksek Lisans derecesini onamıştır.

Prof. Dr. Bilal TOKLU

.....

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

TEZ BİLDİRİMİ

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

Raziye ERTUĞRUL

**AB İNİTİO VE DFT METODLARINI KULLANARAK
TIPTA ÖNEMLİ BAZI MOLEKÜLLERİN YAPI VE TİTREŞİMLERİNİN
İNCELENMESİ
(Yüksek Lisans Tezi)**

Raziye ERTUĞRUL

**GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
Ocak 2011**

ÖZET

Bu çalışma, 2,2'-bipiridin, 2,3'-bipiridin, 2,4'- bipiridin, 2,5'- bipiridin, 2,6'- bipiridin, 3,3'- bipiridin, 3,4'- bipiridin, 3,5'- bipiridin, 3,6'- bipiridin, 4,4'- bipiridin moleküllerinin B3LYP/6-311+g(d,p), MPW1PW91/dgdzvp, MPW1PW91/6-311+g(d,p), HF/dgdzvp, HF/6-311+g(d,p) metotları ve temel setleri kullanılarak moleküllerin kararlı haldeki (en düşük enerji düzeyindeki) geometrik optimizasyonu yapılarak yapısal parametreleri (bağ uzunlukları, bağ açıları) ile titreşim frekanslarının (Infrared ve Raman) hesaplanmasını içermektedir. Teorik olarak elde edilen yapı parametreleri ve frekanslar deneysel yapı parametreleri ve frekanslarla karşılaştırılmıştır.

Bilim Kodu	: 202.1.008
Anahtar Kelimeler	: Titreşim Spektroskopisi, DFT, Yapı
Sayfa Adedi	: 166
Tez Yöneticisi	: Prof. Dr. Ziya KANTARCI

**STRUCTURAL AND VIBRATIONAL STUDIES OF SOME MEDICALLY
IMPORTANT MOLECULES BY USING AB INITIO AND DFT METHOD**

(M.Sc. Thesis)

Raziye ERTUĞRUL

**GAZİ UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY**

January 2011

ABSTRACT

This work, consists of the accounts of vibrational frequencies (Infared and Raman) thanks to 2,2'-bipyridine, 2,3'-bipyridine, 2,4'-bipyridine, 2,5'-bipyridine, 2,6'- bipyridine, 3,3' - bipyridine, 3,4'- bipyridine, 3,5'- bipyridine, 3,6'- bipyridine, 4,4'- bipyridine molecules with the help of the program Gaussian 03W and B3LYP/6-311+g(d,p), MPW1PW91/dgdzvp, MPW1PW91/6-311+g(d,p), HF/dgdzvp, HF/6-311+g(d,p) with the methods and gen [by optimizing the structural parameters of those determined molecules (at the lowest energy level) (the length of the connections, connection angle). Theoretically, the structural parameters and frequencies that we gain are compared with the experimental structural parameters and frequencies.

Science Code	: 202.1.008
Key Words	: Vibrational Spectroscopy, DFT, Structure
Page Number	: 166
Supervisor	: Prof. Dr. Ziya KANTARCI

TEŞEKKÜR

Çalışmalarım süresince bilgi birikimi ve yardımları ile beni yönlendiren, her konuda ilgi ve desteğini eksik etmeyen saygıdeğer hocam Prof. Dr. Ziya KANTARCI' ya teşekkürlerimi sunarım. Ayrıca tez çalışmalarım esnasında koordinatörlüğündeki yüksek bilgisayar sistemini kullanmamda yardımcı olan saygıdeğer hocam Prof. Dr. Nurcan KARACAN' a teşekkür ederim. Yardımlarından dolayı Nagehan KARAKAYA' ya teşekkür ederim. Maddi ve manevi desteklerini esirgemeyen, her durumda yanımda olup bana güç veren aileme sonsuz teşekkür ederim.

Bu araştırmada yer alan nümerik hesaplamalar TÜBİTAK ULAKBİM, Yüksek Başarım ve Grid Hesaplama Merkezi'nde (TR-Grid e-Altyapısı) gerçekleştirilmiştir.

Bu araştırmada yer alan hesaplamaların bir kısmı Gazi Üniversitesi Kimya Bölümü'nde bulunan Prof. Dr. Nurcan KARACAN' ın koordinatörlüğündeki yüksek bilgisayar sistemlerinde gerçekleştirilmiştir.

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
ÖZET	iv
ABSTRACT	v
TEŞEKKÜR	vi
İÇİNDEKİLER	vii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ	xi
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	xii
SİMGELER VE KISALTMALAR	xvi
1. GİRİŞ	1
2. MOLEKÜLER TİTREŞİM SPEKTROSKOPİSİ	2
2.1. Molekül Titreşimleri	2
2.2. İnfrared (Kırmızı Ötesi) Spektroskopisi	6
2.3. Raman Spektroskopisi	8
2.4. Moleküler Simetri	11
2.5. Çok Atomlu Moleküllerin Titreşimleri	12
2.6. Moleküler Titreşim Türleri	13
2.7. Grup Frekansları	16
3. BİLGİSAYAR HESAPLAMALI MOLEKÜLER SPEKTROSKOPİ	17
3.1. Moleküler Mekanik Metotlar	17
3.2. Elektronik Yapı Metodu	17
3.3. Hartre-Fock Teorisi (HF)	19
3.4. Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT)	20
3.5. B3LYP Karma Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi	21

Sayfa

3.6. MPW1PW91 Metodu	22
3.7. Temel Setler	23
4. MATERYAL VE METOD	24
4.1. Gaussian 03W, Gauss View 3.0.....	24
5. SONUÇ VE TARTIŞMALAR.....	25
5.1. Giriş	25
5.2. Kullanılan Metodlar ve Baz Setleri Seçimi	25
5.3. 2,2'-Bipiridin Molekülünün Yapı ve Titreşim Parametrelerinin İncelenmesi	26
5.4. 2,3'-Bipiridin Molekülünün Yapı ve Titreşim Parametrelerinin İncelenmesi	31
5.5. 2,4'-Bipiridin Molekülünün Yapı ve Titreşim Parametrelerinin İncelenmesi	35
5.6. 2,5'-Bipiridin Molekülünün Yapı ve Titreşim Parametrelerinin İncelenmesi	39
5.7. 2,6'-Bipiridin Molekülünün Yapı ve Titreşim Parametrelerinin İncelenmesi	43
5.8. 3,3'-Bipiridin Molekülünün Yapı ve Titreşim Parametrelerinin İncelenmesi	48
5.9. 3,4'-Bipiridin Molekülünün Yapı ve Titreşim Parametrelerinin İncelenmesi	51
5.10. 3,5'-Bipiridin Molekülünün Yapı ve Titreşim Parametrelerinin İncelenmesi	55
5.11. 3,6'-Bipiridin Molekülünün Yapı ve Titreşim Parametrelerinin i İncelenmesi	59
5.12. 4,4'-Bipiridin Molekülünün Yapı ve Titreşim Parametrelerinin İncelenmesi	63
6. YORUM VE ÖNERİLER.....	68

Sayfa

KAYNAKLAR.....	72
EKLER.....	75
EK-1. 2,2'-bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması	76
EK-2. 2,2'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması	79
EK-3. 2,2'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm^{-1}).....	82
EK-4. 2,3'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması	85
EK-5. 2,3'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması	88
EK-6. 2,3'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm^{-1}).....	91
EK-7. 2,4'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması	94
EK-8. 2,4'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması	97
EK-9. 2,4'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm^{-1}).....	100
EK-10. 2,5'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması	103
EK-11. 2,5'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması	106
EK-12. 2,5'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm^{-1}).....	109
EK-13. 2,6'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması	112
EK-14. 2,6'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması	115
EK-15. 2,6'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm^{-1}).....	118
EK-16. 3,3'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması	121
EK-17. 3,3'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması	124
EK-18. 3,3'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm^{-1}).....	127
EK-19. 3,4'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması	130
EK-20. 3,4'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması	133
EK-21. 3,4'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm^{-1}).....	136
EK-22. 3,5'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması	139
EK-23. 3,5'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) d deneysel eğerlerle karşılaştırılması	142
EK-24. 3,5'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm^{-1}).....	145

Sayfa

EK-25. 3,6'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması	148
EK-26. 3,6'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması	151
EK-27. 3,6'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm^{-1}).....	154
EK-28. 4,4'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması	157
EK-29. 4,4'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması	160
EK-30. 4,4'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm^{-1}).....	163
ÖZGEÇMİŞ.....	166

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 2.1. Elektromanyetik spektrum bölgeleri	3
Çizelge 3.1. Enerji türevlerinden fiziksel büyüklüklerin hesaplanması	19

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 2.1. İki atomlu bir molekül için elektronik, titreşim ve dönü geçişleri	5
Şekil 2.2. IR soğurma ve Raman saçılmasının şematik gösterimi	11
Şekil 2.3. Simetrik gerilme	13
Şekil 2.4. Asimetrik gerilme.....	13
Şekil 2.5. Açık bükülme titreşimleri	14
Şekil 2.6. Makaslama titreşimleri	14
Şekil 2.7. Düzlem içi sallanma titreşimleri	14
Şekil 2.8. Düzlem dışı dalgalanma titreşimleri.....	15
Şekil 2.9. Düzlem dışı kıvrılma titreşimleri	15
Şekil 2.10. Burulma titreşimleri	15
Şekil 2.11. Düzlem dışı açık bükülme	16
Şekil 5.1. Piridin molekülünün yapısı.....	26
Şekil 5.2. <i>cis</i> -2,2'-bpy	26
Şekil 5.3. <i>trans</i> -2,2'-bpy	27
Şekil 5.4. 2,2'-bpy molekülünün hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu	29
Şekil 5.5. 2,2'-bpy molekülünün hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu.....	29
Şekil 5.6. 2,2'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu	30
Şekil 5.7. 2,3'-bpy molekülünün yapısı	31
Şekil 5.8. 2,3'-bpy molekülünün hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu	33

Şekil	Sayfa
Şekil 5.9. 2,3'-bpy molekülünün hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu.....	34
Şekil 5.10. 2,3'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının hesaplanan SQM rekanslarına göre korelasyonu.....	34
Şekil 5.11. 2,4'-bpy molekülünün yapısı	35
Şekil 5.12. 2,4'-bpy molekülünün hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu	37
Şekil 5.13. 2,4'-bpy molekülünün hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu	37
Şekil 5.14. 2,4'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu	39
Şekil 5.15. 2,5'-bpy molekülünün yapısı	39
Şekil 5.16. 2,5'-bpy molekülünün hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu	41
Şekil 5.17. 2,5'-bpy molekülünün hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu	41
Şekil 5.18. 2,5'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu	42
Şekil 5.19. 2,6'-bpy molekülünün yapısı	43
Şekil 5.20. 2,6'-bpy molekülünün hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu	46
Şekil 5.21. 2,6'-bpy molekülünün hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu	46
Şekil 5.22. 2,6'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu	47
Şekil 5.23. 3,3'-bpy molekülünün yapısı	48

Şekil	Sayfa
Şekil 5.24. 3,3'-bpy molekülünün hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu.....	49
Şekil 5.25. 3,3'-bpy molekülünün hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu.....	50
Şekil 5.26. 3,3'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu	51
Şekil 5.27. 3,4'-bpy molekülünün yapısı	52
Şekil 5.28. 3,4'-bpy molekülünün hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu.....	53
Şekil 5.29. 3,4'-bpy molekülünün hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu.....	54
Şekil 5.30. 3,4'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu	55
Şekil 5.31. 3,5'-bpy molekülünün yapısı	56
Şekil 5.32. 3,5'-bpy molekülünün hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu.....	57
Şekil 5.33. 3,5'-bpy molekülünün hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu.....	58
Şekil 5.34. 3,5'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu	59
Şekil 5.35. 3,6'-bpy molekülünün yapısı	60
Şekil 5.36. 3,6'-bpy molekülünün hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu	61
Şekil 5.37. 3,6'-bpy molekülünün hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu.....	62
Şekil 5.38. 3,6'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu	63

Şekil	Sayfa
Şekil 5.39. 4,4'-bpy molekülünün yapısı	64
Şekil 5.40. 4,4'-bpy molekülünün hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu.....	66
Şekil 5.41. 4,4'-bpy molekülünün hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu.....	66
Şekil 5.42. 4,4'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu	67

SİMGELER VE KISALTMALAR

Bu çalışmada kullanılan simge ve kısaltmalar açıklamaları ile birlikte aşağıda verilmiştir.

Simgeler	Açıklama
$C_{\mu i}$	Moleküler orbital açılım katsayısı
ε_i	Tek elektron orbital enerjisi
$\vec{E}$	Elektrik alan
E	Molekülün toplam enerjisi
E^C	Korelasyon enerjisi
E_{B3LYP}	B3LYP enerjisi
E_e	Molekülün elektronik enerjisi
E_{B3LYP}^{XC}	B3LYP değiş tokuş ve korelasyon enerjisi
E_{LYP}^C	LYP korelasyon enerjisi
E_{VWN}^C	Vosko, Wilk ve Nussair korelasyon enerjisi
E^J	Coulomb enerjisi
E^T	Kinetik enerji
E_{D30}^X	Dirac değiş tokuş fonksiyoneli
E^X	Değiş tokuş enerjisi
$E_{Becke88}^X$	Becke88 değiş tokuş enerjisi
E_{F30}^X	Fock değiş tokuş enerjisi
E_{H28}^T	Hartree kinetik enerjisi
E_{LDA}^X	Yerel (lokal) değiş tokuş enerjisi
E_{TF27}^T	Thomas-Fermi kinetik enerjisi
E^{XC}	Değiş tokuş ve korelasyon enerjisi

Simgeler	Açıklama
E^V	Nükleer çekim enerjisi
F_{ij}	Kuvvet sabiti
g	Gaussian fonksiyonlar, gradyent vektörü
G	Kuvvet sabiti matrisi, Hessian
$\hat{H}$	Moleküler hamiltoniyen
V	Potansiyel enerji
ρ	Elektron yoğunluğu
ρ_α	α spinli elektronların yoğunluğu
ρ_β	β spinli elektronların yoğunluğu
μ	Dipol moment
ϕ_μ	Atomik orbital
ψ	Moleküler orbital, dalga fonksiyonu
α_{ort}	Ortalama polarizebilite
$\Delta\alpha$	Anizotropik polarizebilite
λ	Dalga boyu
ν	Frekans
ν	Titreşim kuantum sayısı
E_T	Toplam enerji
E_{elek}	Elektronik enerji
$E_{dön}$	Dönme enerjisi
E_{tit}	Titreşim enerjisi
χ	Anharmoniklik katsayısı

Kısaltmalar

Açıklama

B3LYP

3 parametrelili Becke, Lee, Yang, Parr
Fonksiyoneli

Kısaltmalar**Açıklama*****DFT***

Yoğunluk fonksiyonel teoremi

ESR

Elektron Spin Rezonans

GAUSSIAN 03W

Gaussian 03W paket programı

HF

Hartree-Fock metodu

IR

Infrared (Kızılötesi)

NMR

Nükleer Manyetik Rezonans

NQR

Nükleer Quadropol Rezonans

MP₂

2. mertebeden Möller-Plesset teorisi

2,2'-bpy

2,2'-Bipiridin

2,3'-bpy

2,3'-Bipiridin

2,4'-bpy

2,4'-Bipiridin

2,5'-bpy

2,5'-Bipiridin

2,6'-bpy

2,6'-Bipiridin

3,3'-bpy

3,3'-Bipiridin

3,4'-bpy

3,4'-Bipiridin

3,5'-bpy

3,5'-Bipiridin

3,6'-bpy

3,6'-Bipiridin

4,4'-bpy

4,4'-Bipiridin

1.GİRİŞ

Bu çalışmada, bipyridin molekülünde azotun yerleri değiştirilerek oluşturulan 2,2'-bipyridin, 2,3'-bipyridin, 2,4'-bipyridin, 2,5'-bipyridin, 2,6'-bipyridin, 3,3'-bipyridin, 3,4'-bipyridin, 3,5'-bipyridin, 3,6'-bipyridin, 4,4'-bipyridin moleküllerinin B3LYP/6-311+g(d,p), MPW1PW91/dgdzvp, MPW1PW91/6-311+g(d,p), HF/dgdzvp, HF/6-311+g(d,p) metotları ve temel setleri kullanılarak hesaplanan geometrik parametreleri ve titreşim frekansları hesaplanmıştır.

2,2'-bipyridin, 2,3'-bipyridin, 2,4'-bipyridin, 2,5'-bipyridin, 2,6'-bipyridin, 3,3'-bipyridin, 3,4'-bipyridin, 3,5'-bipyridin, 3,6'-bipyridin, 4,4'-bipyridin moleküllerinin geometrik yapıları optimize edilerek, bağ uzunlukları, bağ açıları ve titreşim frekansları ile bu titreşim frekanslarına ait Infrared ve Raman şiddetleri belirlenmiştir. Teorik olarak hesaplanan geometrik ve titreşim parametreleri deneysel verilerle karşılaştırılmıştır.

Bipyridin ve piridin molekülleri tıpta yoğun olarak kullanılan moleküllerdir. Piridin endüstride ve kimya laboratuvarlarında da kullanışlı bir çözücüdür. Piridin birçok maddenin başlangıç maddesi olması bakımından önemlidir. Piridin türevlerinin birçoğu ilaç sanayisinde kullanılan alkaloidlerdir. Piridin türevlerinden nikotinamid bir B vitamini, nikotin asit dietilamid kalbi kuvvetlendirici ilaç, pridoksin B6 vitamini olarak kullanılır. İzonikotin asit hidrazid tüberküloz tedavisinde kullanılır. İki-dişli altı üyeli azot-heterohalkalara en iyi örnek olan 2,2'-bipyridin ligandı anti-kanser etki gösterdiğinden tıpta kanser araştırmalarında yoğun olarak kullanılmaktadır.

2. MOLEKÜLER TİTREŞİM SPEKTROSKOPİSİ

2.1. Molekül Titreşimleri

Molekül titreşim spektroskopisi, moleküllerin yapısının tayininde kullanılır. Elektromanyetik ışınım ile madde arasındaki etkileşimi inceler. Bu inceleme sonucunda molekül simetrisi, bağ uzunluğu, bağlar arasındaki açılar, kimyasal özellikleri (bağ kuvvetleri, kuvvet sabitleri, elektronik dağılımı), titreşim frekansı, molekül enerjisi ile ilgili bilgiler elde edilir [1].

Molekül, bir elektro manyetik ışınım ile etkileştiğinde kuantumlu enerji ya soğurulur ya da yayılır. Bunun olabilmesi için elektro manyetik ışının molekül enerji seviyelerini uyarmak enerjiye sahip olması gerekir.

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

ΔE : iki enerji seviyesi arasındaki farkı, h : Planck sabitini, ν : elektromanyetik dalga ışınının frekansıdır. E'' : üst titreşim seviyesinin enerjisi, E' : alt titreşim seviyesinin enerjisi olmak üzere, E' enerji seviyesinden E'' enerji seviyesine geçilmesi, moleküldeki ışının soğurulmasına, E'' enerji seviyesinden E' enerji seviyesine geçilmesi de ışının yayınımına neden olur.

Moleküllerin enerji düzeyleri arasındaki bu geçişler gelen elektromanyetik dalganın enerjisine bağlı olarak değişik spektrum bölgelerine ayrılır(Çizelge 2.1).

Çizelge2.1. Elektromanyetik spektrum bölgeleri.

Bölge	λ (Dalga Boyu)	ν (Frekans)	Spektroskopi türü
Radyo Frekans	100 m-1 m	$10^6 - 10^9$	NMR ve NQR (Nükleer manyetik ve quadropol rezonans)
Mikrodalga	1 cm – 100 μ m	$10^{10} - 10^{12}$	ESR (elektrospin rezonans) ve moleküle dönme
Infrared	100 μ m – 1 μ m	$10^{12} - 10^{14}$	Moleküler dönme ve titreşim
Görünür ve morötesi (Ultraviole)	1 μ m – 10 nm	$10^{14} - 10^{16}$	Elektronik geçişler (Dış kabuk elektronları yer değişimi.)
X ısları	10 nm – 100 pm	$10^{16} - 10^{18}$	Elektronik geçişler (Dış kabuk elektronları yer değişimi.)
Gamma ısları	100 pm -	10^{18} -	Nükleer geçişler

Radyodalgaları bölgesi: Yüklü parçacıklar olan elektron ve çekirdeğin spinleri manyetik dipol oluşturur. Çekirdeğin spin magnetik momenti ile elektromagnetik dalganın manyetik alanının etkileşmesi bu bölgede incelenir. Bu bölge, NMR (Nükleer Manyetik Rezonans) ve NQR (Nükleer Quadropol Rezonans) spektrumlarını içerir.

Mikrodalga bölgesi: Molekülün dönmesinin incelendiği bölgedir. Dönme enerjileri arasındaki geçişlerin spektrumu bu bölgede meydana gelir. Spin manyetik momenti ile çekirdeğin manyetik momentinin etkileşmesi bu bölgede incelenir. Bu bölge ESR (Elektron Spin Rezonans) spektrumlarını içerir.

Infrared bölgesi: Molekülün dipol momenti ile elektromanyetik dalganın elektrik alan bileşeninin etkileşmesi sonucu moleküllerin dönme ve titreşimleri bu bölgede incelenir.

Görünür veya morötesi bölgesi: Elektromanyetik dalganın elektrik alan bileşeni ile atom veya molekülün dış kabuğundaki elektronların yer değiştirmesi bu bölgede

incelenir. Ayrıca bu bölgedeki tek frekanslı bir ısıyla Raman Saçılma olayı oluşturulabilir. Raman bandları bu bölgede belirir fakat moleküllerin dönme ve titreşimleri hakkında bilgi verir.

X-ışınları bölgesi: Bir atom veya molekülde iç kabuktaki elektronların geçişleri X-ışınları bölgesinde olur. Bu bölgedeki spektroskopi türü X-ışınları spektroskopisi olarak adlandırılır.

Gamma 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. Sürekli bir enerji olmasından dolayı öteleme enerjisi dikkate alınmaz. Nükleer dönme enerjisi ise diğer enerjilerin yanında çok küçük olduğundan ihmal edilebilir [2]. Born-Oppenheimer yaklaşımına göre elektronik, titreşim ve dönme enerjileri birbirinden çok farklıdır. Buna göre bir molekülün toplam enerjisi; titreşim, dönme ve elektronik enerjilerinin toplamı,

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

şeklinde yazılabilir [3].

Bir moleküldeki toplam enerjinin değişimi;

$$\Delta E_{toplam} = \Delta E_{tit.} + \Delta E_{dön.} + \Delta E_{elek.} \quad (cm^{-1}) \quad (2.3)$$

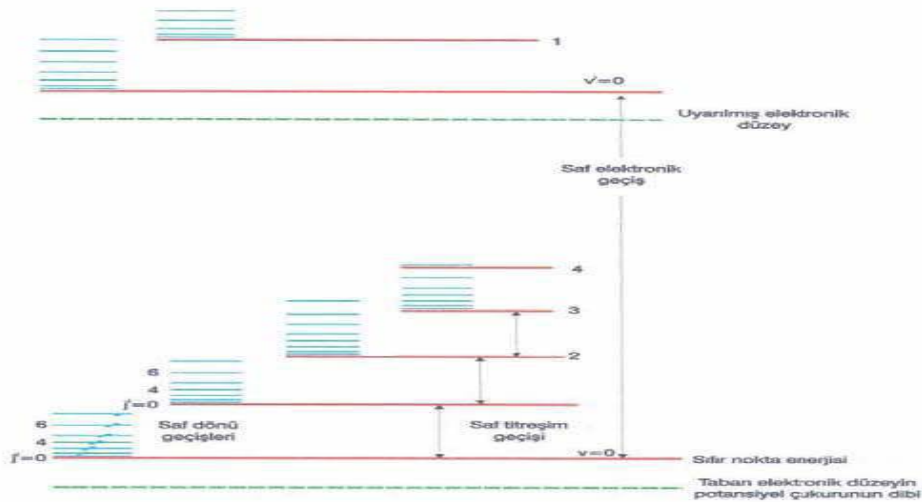
olarak yazıldığında bu değişimlerin birbirine göre oranları;

$$\Delta E_{\text{elek.}} \approx \Delta E_{\text{tit.}} \cdot 10^3 \approx \Delta E_{\text{dön.}} \cdot 10^6 \quad (2.4)$$

olarak yazılabilir [4].

Moleküllerin dönme enerji seviyeleri birbirine çok yakındır. Bu yüzden düşük frekanslarda oluşur. Molekülün saf dönme geçişleri 1 cm-1µm dalga boyu aralığına düşen mikrodalga ve infrared spektroskopileri ile incelenir. Titreşim enerji seviyeleri arasındaki geçişler 100µm - 1µm dalga boyu aralığına düşer ve İnfrared ve Raman spektroskopisi ile incelenir.

Gaz fazındaki örneklerin titreşim enerji geçişleri sırasında, dönme enerjisi de değişebildiğinden titreşim bantları ile üst üste binmiş dönme ince yapısı da gözlenebilir. Moleküllerin elektronik geçişleri görünür veya mor ötesi spektroskopisi ile incelenir. İki atomlu bir molekül için elektronik, titreşim ve dönü geçişleri Şekil 2.1' de verilmiştir.



Sekil 2.1. İki atomlu bir molekül için elektronik, titreşim ve dönü geçişleri [5]

2.2. İnfrared (Kırmızı Ötesi) Spektroskopisi

İnfrared spektroskopisi 1905 de W.Coblentz tarafından sistematik olarak kullanılmaya başlandı. Bu spektroskopi, görünür bölge ile mikrodalga bölgesi arasında kalan ışınların moleküler gruplar tarafından absorplanmasının ölçümüne dayalı bir yöntemdir. Dalga boyuna, frekansa veya dalga sayısına göre yakın, orta ve uzak infrared bölge olmak üzere üç kısma ayrılır [6].

1.Yakın İnfrared: Bu bölgede, molekül titreşimlerinin üst ton ve harmonikleri incelenir. $12800-4000\text{ cm}^{-1}$ dalga boyu arasındadır.

2.Orta İnfrared: Molekül titreşimlerinin çoğunun gözlemlendiği bölgededir. $4000-200\text{ cm}^{-1}$ dalga boyu arasındadır. Temel titreşimler genellikle bu bölgeye düşerler. Bundan dolayı spektroskopide en çok kullanılan bölgedir.

3.Uzak İnfrared: Ağır atomların titreşimleri ile örgü titreşimlerinin incelendiği bölgedir. Mikro dalga bölgesine yakın olduğu için moleküllerin dönme hareketleri de incelenebilir. $200-10\text{ cm}^{-1}$ dalga boyu arasındadır. Düşük frekanslardaki titreşimleri veya dönmeleri dedekte etmek güç olduğundan uzak infrared kimyasal spektroskopide nadiren kullanılır. İnfrared soğurma,klasik kuram ve kuantum kuramı olmak üzere iki şekilde açıklanabilir.

Klasik kuram: Klasik elektrodinamiğe göre, moleküle ait bir titresim bandının infrared spektroskopisinde gözlenebilmesi için, molekülün titreşimi sırasında değişen bir elektriksel dipol momentinin olması gereklidir. Bir sistem elektrik dipol momentindeki periyodik değişiminden dolayı ışınım yayımlar. Yayımlanan ışının frekansı dipol titreşimleri ile eş frekansta olduğu takdirde ışınım soğurulur. Bir molekülün elektrik dipol momenti $\vec{\mu}$, kartezyen koordinat sisteminde μ_x, μ_y, μ_z şeklinde üç bileşeni olan bir vektördür. Titreşimsel hareket için dipol moment basit harmonik yaklaşımına göre, ϕ titreşim normal koordinatının bir fonksiyonu olarak molekülün denge konumu civarında taylor serisine açılırsa;

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_0 + \Sigma \left\{ \left(\frac{\partial \vec{\mu}}{\partial \varphi_k} \right)_0 \varphi_k \right\} + \frac{1}{2} \Sigma_k \left\{ \frac{\partial^2 \vec{\mu}}{\partial^2 \varphi_k} \varphi_k^2 \right\} + \dots \quad (2.5)$$

şeklinde olacaktır. Burada toplam bütün titreşim koordinatları üzerinden alınmıştır. Küçük genlikle salınımlar için , φ_k nın birinci dereceden terimi alınıp, yüksek dereceden olan terimler ihmal edilirse; molekülün elektriksel dipol momentini,

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_0 + \Sigma \left\{ \left(\frac{\partial \vec{\mu}}{\partial \varphi_k} \right)_0 \varphi_k \right\} \quad (2.6)$$

şeklinde yazılabilir [7].

Klasik teoriye göre, titreşimin aktif olabilme şartı, molekülün dipol momentinin veya bileşenlerden en az birinin değişiminin sıfırdan farklı olması gerekir. Yani;

$$\left(\frac{\partial \vec{\mu}_i}{\partial \varphi_k} \right)_0 \neq 0 \quad (i=x,y,z) \quad (2.7)$$

olmalıdır [7].

Kuantum kuramı: Kuantum mekaniğine göre $\Psi(n)$ ve $\Psi(m)$ dalga fonksiyonları ile belirtilen taban ve uyarılmış iki titreşim enerji düzeyi arasında geçiş olabilmesi için, ısıtımın soğrulma şiddetinin bir ölçüsü olan $\vec{\mu}_{nm}$ geçiş dipol momentinin veya bileşenlerinden en az birinin sıfırdan farklı olması gerekir [2].

$$\vec{\mu}_{nm} = \int \psi^{(n)} \vec{\mu} \psi^{(m)} d\tau \neq 0 \quad (2.8)$$

$\psi(n)$; n. Uyarılmış enerji seviyesindeki molekülün titreşim dalga fonksiyonu, $\psi(m)$; taban enerji seviyesindeki molekülün titreşim dalga fonksiyonu, $d\tau$; hacim elemanı, $\vec{\mu}$; elektrik dipol moment operatörüdür. “Eş.2.6”, “Eş.2.8” de yerine yazılırsa;

$$\vec{\mu}_{nm} = \mu_0 \int \psi^{(n)} \psi^{(m)} d\tau + \sum_k \left\{ \left(\frac{\partial \vec{\mu}}{\partial \phi_k} \right)_0 \int \psi^{(n)} \phi_k \psi^{(m)} d\tau \right\} \quad (2.9)$$

elde edilir. Burada ilk terimdeki $\Psi(n)$ ve $\Psi(m)$ ortogonal olduklarından ($n \neq m$) bu terim sıfır olur. İki titreşim enerji düzeyi arasındaki geçiş olasılığı $|\mu_{nm}|^2$ ile orantılıdır. Bu nedenle, infrared spektroskopisinde bir molekülün herhangi bir titreşiminin gözlenebilmesi için, söz konusu titreşimi sırasında molekülün, elektriksel dipol momentindeki değişimin sıfırdan farklı olması gerekir. Yani; $\frac{\partial \mu}{\partial \phi} \neq 0$ ise, o titreşim IR de gözlenir. Buna infrared gözlem (aktiflik) şartı denir.

2.3. Raman Spektroskopisi

İnfrared spektroskopisinin tamamlayıcısı olan Raman spektroskopisi ile maddenin tek frekanslı ışınım üzerinde oluşturduğu saçılma incelenir. *Saçılma*, gelen fotonun moleküle çarparak 360° de küresel olarak yayınlanmasıdır. Raman spektroskopisi klasik kuram ve kuantum kuramı olmak üzere iki şekilde açıklanabilir.

Klasik kuram: Klasik elektrodinamiğe göre, örnek moleküller üzerine $h\nu_0$ enerjili foto gönderildiğinde elektromanyetik dalganın elektrik alanıyla, maddenin (+) ve (-) yük merkezleri etkileşir. Molekülde başlangıçta bir dipol moment yoksa dış alanın etkisiyle bir dipol moment oluşur. Molekülde pozitif ve negatif yük merkezleri (yani bir dipol moment varsa) mevcut ise bu dipol moment uygulanan elektrik alan etkisiyle indüklenir. Bu etkileşme:

$$\vec{\mu} = \alpha \vec{E} \quad (2.10)$$

şeklinde bir bağıntı ile verilir. $\vec{\mu}$: Elektrik dipol moment vektörü, $\vec{E}$: Elektrik alan vektörü, α : Kutuplanma yatkınlığı(polarizabilitesi). Kutuplanabilme yatkınlığı dokuz elemanlı simetrik bir tensör özelliği gösterir.

$$\begin{aligned}\mu_X &= \alpha_{XX}E_X + \alpha_{XY}E_Y + \alpha_{XZ}E_Z \\ \mu_Y &= \alpha_{YX}E_X + \alpha_{YY}E_Y + \alpha_{YZ}E_Z \\ \mu_Z &= \alpha_{ZX}E_X + \alpha_{ZY}E_Y + \alpha_{ZZ}E_Z\end{aligned}\quad (2.11)$$

Eğer molekülün titreşimi (veya dönmesi) sırasında α değişiyorsa, bu katsayının denge konumu civarında Taylor serisine açılımı;

$$\alpha = \alpha_e + \left(\frac{\partial \alpha}{\partial \varphi} \right)_0 \varphi + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \alpha}{\partial \varphi^2} \right)_0 \varphi^2 + \dots \quad (2.12)$$

olur. Burada α_e denge konumunda kutuplanma yatkınlığı, φ ise bir titreşim koordinatıdır. Eğer molekül ν_{tit} frekansıyla titreşiyorsa, φ 'nun kendisi zamanın fonksiyonudur ve aşağıdaki şekilde yazılabilir;

$$\varphi = \varphi_0 \sin(2\pi\nu_{tit}t) \quad (2.13)$$

şeklindedir. Küçük titreşimler için Taylor ifadesindeki ilk iki terimi alıp “Eş.2.10” de yerine koyarak yaptığımızda;

$$\mu = \left[\alpha_e + \left(\frac{\partial \alpha}{\partial \varphi} \right)_0 \varphi_0 \sin(2\pi\nu_{tit}t) \right] E_0 \sin(2\pi\nu_0t) \quad (2.14)$$

elde edilir. Aşağıdaki trigonometrik özdeşliği kullanırsak;

$$\sin A \sin B = \frac{1}{2} [\cos(A - B) - \cos(A + B)] \quad (2.15)$$

(2.14) denklemi;

$$\mu = \alpha_e E_0 \sin(2\pi\nu_0 t) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial \varphi} \right)_0 E_0 \varphi_0 [\cos(2\pi(\nu_0 - \nu_{tit})t) - \cos(2\pi(\nu_0 + \nu_{tit})t)]$$

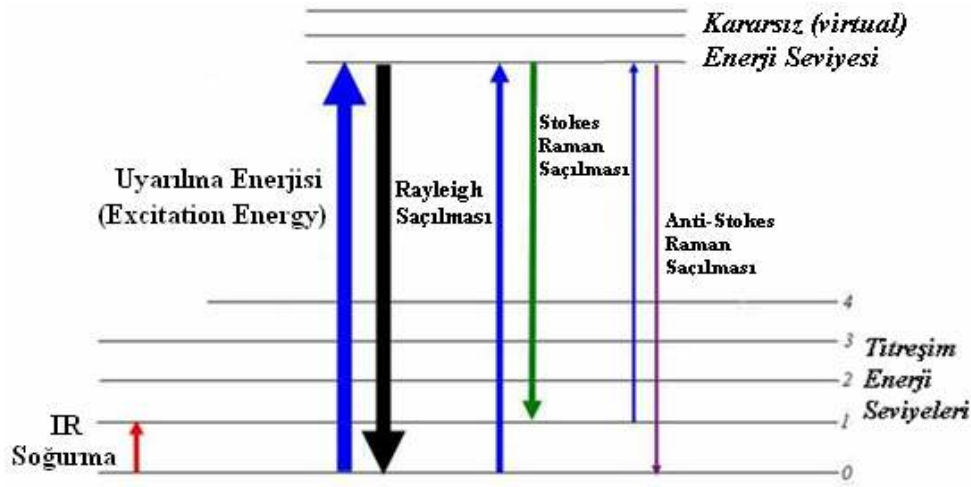
şeklinde olur. Burada ilk terim *Rayleigh saçılmasına*, cosinüslü ilk terim *Stokes saçılmasına*, cosinüslü ikinci terim *anti-Stokes saçılmasına* ,karşılık gelir. Bir titreşimin Raman'da gözlenebilmesi için gerekli olan aktiflik şartı; molekülün titreşimi esnasında değişen bir kutuplanma yatkınlığının (polarizibilite) olmasıdır.

Yani;

$$\frac{\partial \alpha}{\partial \varphi} \neq 0 \text{ olmalıdır.} \quad (2.16)$$

Kuantum kuram: Kuantum mekaniksel kuram, gelen radyasyon ve molekülleri kuantum parçacıkları olarak inceler. Burada, örnek kristal üzerine ν_0 frekanslı elektromanyetik dalga gönderilerek, elektromanyetik dalganın $h\nu_0$ enerjili fotonlarıyla, örnek molekülün esnek ve esnek olmayan çarpışmaları incelenir. Esnek çarpışma sırasında, enerji kaybı olmaz ve moleküller tarafından saçılan fotonun enerjisi $h\nu_0$ olur. (Rayleigh saçılması). Esnek olmayan çarpışmada ise madde molekülleri ile ışın fotonu arasında enerji alış verisi olur. Bu durumda örnek moleküllerin titreşim ve dönü enerji düzeyleri değişebilir. Saçılan fotonun frekansı $\nu_0 \pm \nu_{tit}$ ile verilir, buna *Raman Saçılması* denir.

Molekül taban enerji durumunda iken $h\nu_0$ enerjili fotonlarla uyarılarak bir üst enerji seviyesine geçiş yapar. Üst kararsız titreşim enerji düzeyindeki molekül $h(\nu_0 - \nu_{tit})$ enerjili foton yayınlamaya v=1 uyarılmış enerji düzeyine geçiş yapar. Bu olaya *Stokes saçılması* denir. Molekül taban titreşim enerji düzeyine geçiş yaparsa buna *Rayleigh saçılması* denir. Molekül önce birinci uyarılmış enerji düzeyinde iken $h\nu_0$ enerjisini alarak üst kararsız titreşim enerji düzeylerinden birine uyarılır ve $h(\nu_0 + \nu_{tit})$ enerjili foton salarak taban titreşim enerji düzeyine geçiş yaparsa buna *anti-Stokes saçılması* denir [1].



Şekil 2.2. IR soğurma ve Raman saçılmasının şematik gösterimi

Boltzmann dağılımına göre; oda sıcaklığında taban titreşim enerji seviyesindeki molekül sayısı, bir üst uyarılmış enerji düzeyindeki molekül sayısından fazla olduğundan, Stokes Saçılmaları, anti-Stokes Saçılmalarından daha şiddetlidir. Bu nedenle de Raman Spektroskopisinde Stokes çizgileri gözlenir.

2.4. Moleküler Simetri

Molekülü oluşturan atomların uzaydaki geometrik düzeni molekülün simetrisini oluşturur. Bir molekülün nokta, eksen ve düzlem gibi simetri elemanları bir grup meydana getirir. Simetri işlemleri sonunda molekülün en az bir noktası yer değiştirmemiş olarak kaldığında bu gruplara nokta gruplar denir. Çok sayıdaki molekül, simetri elemanlarının sayısına ve özelliklerine göre sınırlı sayıda gruplar içinde sınıflandırılır.

Moleküllerin simetri özelliklerinden yararlanılarak karakter tabloları hazırlanmıştır. Grup teorisi kullanılarak, karakter tabloları ve indirgeme formülü yardımıyla her bir temel titreşimin indirgenemez gösterimlerinden hangisine temel oluşturduğu ve hangi simetri türünde olduğu bulunabilir. Böylece simetrisi bilinen bir molekülün $3N-6$ tane titreşiminden hangilerinin infared aktif, hangilerinin Raman aktif olduğu tespit edilebilir [8].

2.5. Çok Atomlu Moleküllerin Titreşimleri

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, bütün atomların aynı fazda ve aynı frekansta yaptıkları titreşim hareketidir. N atomlu bir molekülün $3N$ tane serbestlik derecesi vardır.

Doğrusal olmayan moleküller için; 3 tane eksen boyunca öteleme ve 3 eksen etrafında dönme titreşimleri, serbestlik derecesinden çıkarılırsa $3N-6$ tane temel titreşim elde edilir. Kapalı halka oluşturmayan N atomlu bir molekülün N-1 bağ gerilmesi, $2N-5$ açılı bükülme titreşimi vardır.

Doğrusal moleküller için; 3 tane eksen boyunca öteleme ve 2 eksen etrafında dönme titreşimleri, serbestlik derecesinden çıkarılırsa $3N-5$ tane temel titreşim elde edilir. Kapalı halka oluşturmayan N atomlu bir molekülün N-1 bağ gerilmesi, $2N-4$ açılı bükülme titreşimi vardır.

Boltzman olasılık dağılımına göre; moleküller oda sıcaklığında taban titreşim enerji düzeyinde, çok az bir kısmı da uyarılmış titreşim enerji düzeyinde bulunabilir. Bu nedenle bir molekülün infrared spektrumunda en şiddetli bandlar birinci titreşim düzeylerinden kaynaklanan ($v : 0 \rightarrow 1$) geçişlerinde gözlenir. Bu geçişlerde gözlenen titreşim frekanslarına temel titreşim frekansı denir. ($v: 1 \rightarrow 2$) geçişlerine *sıcak band*, ($v: 0 \rightarrow 2,3,4,.....$) geçişlerine ise *üst ton* geçişler denir. Bu bandların şiddeti, temel titreşim bandlarına göre zayıftır. Bu titreşimlerin gözlenebilir olması daha önce ifade ettiğimiz infrared gözlenebilirlik şartı ile mümkündür.

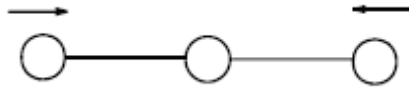
Üst tonlar, birleşim ve fark bantların şiddetleri temel titreşimlere göre oldukça küçüktür. Bu bantların şiddetleri rezonans olayı ile artabilir. Rezonans olayı, iki titreşim modunun titreşim frekansları birbirine çok yakın ise ve her iki modda aynı simetri türünde ise gerçekleşebilir. Bu durumda spektrumda şiddetli bir temel titreşim

bandı ile zayıf bir üst ton veya birleşim bandı gözleneceği yerde, temel titreşim bandı civarında gerçek değerlerden sapmış farklı iki şiddetli bant gözlenir. Bu nedenle bir temel titreşim ile bir üst ton arasındaki rezonans olayına “Fermi Rezonansı” denir [9].

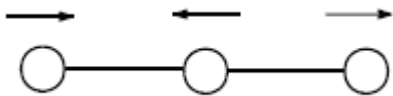
2.6. Moleküler Titreşim Türleri

Çok atomlu moleküllerin titreşimleri ‘’grup frekansı’’ kavramı bakımından dörde ayrılır.

1. *Gerilme titreşimi*: Bağ eksenı doğrultusunda periyodik uzama kısıalma hareketine gerilme titreşimi denir. Molekülün tüm bağlarının uzaması veya kısılması hareketine simetrik gerilme denir. Simetrik gerilme titreşimi ν ile gösterilir (Şekil 2.3). Bağların biri veya birkaçı uzarken diğerrinin kısılmasına asimetrik gerilme denir. Asimetrik gerilme titreşimleri ν_{as} ile gösterilir (Şekil 2.4).

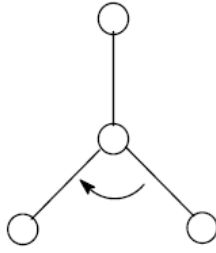


Şekil 2.3. Simetrik gerilme



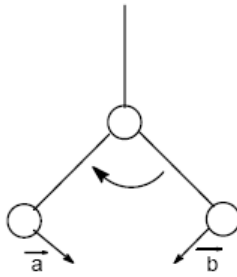
Şekil 2.4. Asimetrik gerilme

2. *Açı bükülme titreşimleri*: İki bağ arasındaki açının periyodik olarak değişim hareketidir. Yer değiştirme vektörleri bağ doğrultusuna diktir. Açı bükülme titreşimleri δ ile gösterilir ve dört gruba ayrılır.



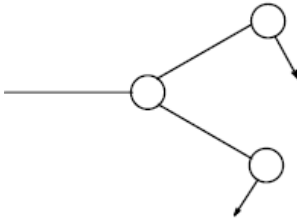
Şekil 2.5. Açık bükülme titreşimleri

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



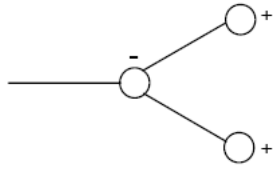
Şekil 2.6. Makaslama titreşimleri

b. Yana sallanma (Rocking): İki bağ arasındaki veya bir bağ ile bir grup atom arasındaki açının yer değiştirme hareketidir. Bağ uzunluğu ve açının değeri değişmez. Yer değiştirme vektörleri birbirini takip edecek yöndedir. ρ_r ile gösterilir.



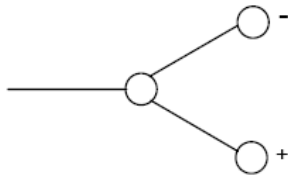
Şekil 2.7. Düzlem içi sallanma titreşimleri

c. Öne arkaya sallanma (Wagging): Bir bağ ile bir düzlem arasındaki açının değişim hareketidir. Molekülün tüm atomları denge konumunda düzlemsel iken, bir atomun bu düzleme dik hareket etmesidir. ρ_w ile gösterilir.



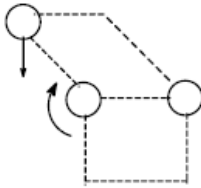
Şekil 2.8. Düzlem dışı dalgalanma titreşimleri

d. Kıvrırma (Twisting): Doğrusal ve düzlemsel olmayan moleküllerde bağların atomlar tarafından bükülmesidir. Yer değiştirme vektörü bağ doğrultusuna diktir. ρ_r ile gösterilir.



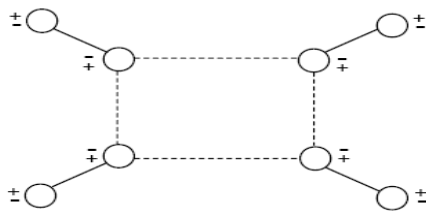
Şekil 2.9. Düzlem dışı kıvrırma titreşimleri

3. Burulma (Torsion): İki düzlem arasındaki açının bir bağ veya açığı bozarak periyodik olarak değişmesi hareketidir. τ ile gösterilir.



Şekil 2.10. Burulma titreşimleri

4. Düzlem dışı açılı bükülme: En yüksek simetriye sahip bir düzleme dik doğrultudaki açı değişimidir. Genelde kapalı halka oluşturan moleküllerde görülür. γ ile gösterilir.



Şekil 2.11. Düzlem dışı açılı bükülme

2.7. Grup Frekansları

Grup frekansı yöntemi, çok atomlu moleküllerin titreşim spektrumlarının yorumlanmasında en çok kullanılan yöntemlerden birisidir. Bir molekülde temel bir titreşim için bir fonksiyonel grubun potansiyel enerjiye katkısı, molekülün geri kalan kısmına göre çok yüksek ise bu gruptaki atomların genliği o kadar büyük olur ki, sanki molekülün geri kalan kısımları değil de bu grup titreşiyormuş gibi görünür. Bu titreşime o gruba ait grup frekansı denir.

Molekül içindeki bir grup, moleküldeki diğer atomlara oranla daha hafif (OH, NH, NH₂ gibi) veya daha ağır atomlar içeriyorsa (CCl, CBr, Cl gibi), bu tip grupların molekülün geri kalan kısmından bağımsız olarak hareket ettiği kabul edilir. Bunun nedeni bu grupların harmonik titreşim genliğinin molekülün diğer atomlarına oranla daha büyük veya daha küçük olmasıdır.

Harmonik titreşicinin frekansı;

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (2.17)$$

ifadesi ile verilir. Burada; k: kuvvet sabiti, μ : indirgenmiş kütledir. Kuvvet sabitinin büyük olması atomların denge pozisyonunda hareketin zorlanmasına sebep olacağından ikili ve üçlü bağların gerilme frekansları tekli bağlardan daha yüksektir.

3. BİLGİSAYAR HESAPLAMALI MOLEKÜLER SPEKTROSKOPİ

Bilgisayar hesaplamalı moleküler spektroskopi, 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 tanımlanır.

3.1.Moleküler Mekanik Metotlar

Moleküler mekanik metot; bir molekülün enerjisini ve yapısını belirlemek için kullanılan hesaplama metodudur. Moleküler mekanik hesaplamaları moleküler yapının basit klasik mekanik modelinin oluşturulmasına dayanır. Bu modelin bazı moleküllere uygulanması başarılı sonuçlar vermiştir [10]. Bu metotta, molekülün toplam potansiyel enerjisini minimum yapan molekül yapısı bulunur. Moleküler mekanik hesaplamalarında elektronlar dikkate alınmazlar yani bu metotla elektronik yapıya bağlı özellikler elde edilemez. Bir molekül yaylarla birbirine bağlanmış ağırlıklardan oluşan bir sisteme benzer tarzda harmonik kuvvetlerle birbirleriyle etkileşen kütleler topluluğu olarak ele alınır. Burada kütleler, elektronların etrafında küresel olarak dağıldığı atom çekirdeklerini, yaylar ise atomlar arası kimyasal bağları temsil eder.

3.2. Elektronik Yapı Metodu

Elektronik yapı metodları, hesaplamaların kaynağı olarak temel Kuantum mekaniği yasalarını kullanır. Kuantum mekaniği bir molekülün enerjisini ve diğer büyüklükleri,

$$H\psi=E\psi \quad (3.1)$$

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. Elektronik yapı metotları farklı yaklaşık matematiksel metotlar ile karakterize edilir. Bu metotlar, ab initio metotlar ve yarı deneysel metotlar olmak üzere iki kısımda incelenebilir [11].

a. Ab initio metotları: Ab initio metotları, moleküler mekanik ve yarı deneysel metotların tersine hesaplamalar için ışık hızı, Planck sabiti, elektronun kütlesi gibi temel fizik sabitlerini kullanır. Deneysel değerlere ihtiyaç duymaz [12].

Hesaplama süresi moleküler mekanik yöntemlere göre çok daha fazladır. Hesaplama süresini azaltmak için geometrilerde ve kullanılan parametrelerde bazı basitleştirmeler yapılabilir. Ancak bu basitleştirmeler kesin olmayan sonuçların elde edilmesine neden olur. Hesaplama süresi, molekülü veya moleküler sistemi içeren elektron sayısına bağlıdır.

Moleküllerin titreşim spektrumlarının ve kuvvet alanlarının kuantum mekaniksel ab initio yöntemler ile hesaplanması P.Pulay'ın 1969'da ki klasik çalışmasına dayanır. Bu çalışmada; kuvvet veya gradyent metodu denilen metod önerilmiştir. Bu metod çok atomlu moleküllerinin kuvvet alanlarının hesaplanmasında yaklaşık sonuç verir. Pulay'ın bu çalışmasında atomlara etki eden kuvvetlerin ab initio metodlarda analitik olarak elde edilebileceği gösterilmiş ve Hartree-Fock elde edilmiştir. İkinci ve daha üst mertebeden analitik türevlerin elde edilmesi kuantum mekaniksel hesaplama yöntemleri için çok büyük bir gelişme olmuştur. Ab initio metodlardan Hartree- Fock (HF), yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT), Möller Plesset teorisi (MP2) için enerji ifadesinin 1. ve 2. analitik türevleri alınarak spektroskopik büyüklüklerin hesabı için kullanılmıştır [13,14].

Günümüzde kuantum mekaniksel yöntemler kullanılarak yapılan hesaplamalar; GAUSSIAN, CASTEP, GAMES, HONDO ve Q-CHEM gibi paket programları ile yapılmaktadır. Bu programların tamamında değişik mertebeden analitik türevler

kullanmaktadır. Çizelge 3.1' de enerjinin türevlerinden hangi büyüklüklerin hesaplanabileceği verilmektedir.

Çizelge 3.1. Enerji türevlerinden fiziksel büyüklüklerin hesaplanması.

TÜREVLER	HESAPLANABİLEN BÜYÜKLÜKLER
$\frac{\partial E_e}{\partial R}$	Atomlara etki eden kuvvetler, moleküllerin geometrisi, kararlı noktalar.
$\frac{\partial^2 E_e}{\partial R_i \partial R_j}$	Kuvvet sabitleri, titreşim frekansları, İnfrared ve Raman spektrumları
$\frac{\partial^2 E_e}{\partial R_i \partial \varepsilon_\alpha}$	Dipol moment türevleri, harmonik yaklaşımda infrared şiddeti.
$\frac{\partial^3 E_e}{\partial R_i \partial \varepsilon_\alpha \partial \varepsilon_\beta}$	Kutuplanabilirlik türevleri, harmonik yaklaşımda raman şiddeti.

Burada; E_e : Toplam elektronik enerji, R : Atomik koordinatlar, ε : Elektrik alan bileşeni [14].

b. 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 metotlara örnek olarak verilebilir.

3.3. Hartre-Fock Teorisi(HF)

Hartree, 1928 yılında bir atomdaki i. elektronun diğerlerinden tamamen bağımsız olarak y orbitalinde hareket ettiği varsayımı altında toplam kinetik enerjinin her bir elektronun kinetik enerjilerinin toplamı olarak aşağıdaki gibi yazılabileceğini gösterdi,

$$E_{H28}^T = -\frac{1}{2} \sum_i^n \int \psi_i(\vec{r}) \nabla^2 \psi_i(\vec{r}) d\vec{r} \quad (3.2)$$

Tek elektronlu sistemler hariç bu yaklaşım bize tam doğru kinetik enerjiyi vermez. Çünkü gerçekte elektronlar birbirinden bağımsız olarak hareket etmezler. Bu nedenle $E_{H28}^T \langle E^T$. Buna rağmen H28 iyi bir yaklaşıklıklaştır.

1930'da Fock dalga fonksiyonunun antisimetrik olmaması nedeni ile Pauli dışarlama ilkesini ihlal ettiğini ve dalga fonksiyonunun antisimetrikleştirilmesi ile ortadan kaldırılabileceğini gösterdi. Buna Fermi düzeltmesi veya değiş tokuşu denilmektedir. Fock bu düzeltme enerjisinin aşağıdaki değiş tokuş fonksiyonu ile verilebileceğini gösterdi,

$$E_{F30}^X i = -\frac{1}{2} \sum_i^n \sum_j^n \int \frac{\psi_i(\vec{r}) \psi_j(\vec{r}') \psi_i(\vec{r}') \psi_j(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' \quad (3.3)$$

Burada ψ_i antisimetrik dalga fonksiyonudur.

3.4. Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT)

Yoğunluk fonksiyonu teorisi bir moleküler sistemin elektronik enerjisini elektron yoğunluğuna bağlı olarak ifade eder. HF yönteminden farklı olarak değiş tokuş ve korelasyon enerjileride hesaplanır. BP86 (Becke ve Perdew), BLYP (Becke, Lee, Yang ve Parr) ve BLYP'nin modifikasyonu ile oluşan B3LYP DFT yöntemindeki bazı fonksiyonlardır [15,16].

DFT metodları HF metodlarından daha az sürede çok sayıdaki atomlu moleküllerde hesaplama yapmak için kullanılabilir. Walter Kohn, 1964 yılında P.Hohenberg ile yapmış olduğu bir çalışmada, çok cisimli dalga fonksiyonunun, varyasyonel bir yaklaşıklık içerisinde, temel bir değişken olarak alınmasının, problemi oldukça güçleştirdiğini öne sürerek, onun yerine; yer ve zamanın bir fonksiyonu olan elektron yoğunluğunu, temel bir değişken almıştır [17]. Hohenberg ve Kohn, homojen olmayan elektron gazının denge durumunu bulmak için Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi'ni geliştirmişlerdir. Elektron sisteminin, taban durum elektronik enerjiyi

elektron yoğunluğunun bir fonksiyoneli olarak yazılması ile sistemin taban durum özellikleri; taban durum yoğunluk ve enerji fonksiyoneli bilgisiyle tanımlanabilir [18].

Enerjinin açık ifadesi moleküler dalga fonksiyonu ψ 'ye bağımlı ise bu HF metodu olarak bilinir. Eğer enerji ifadesi elektron yoğunluğu ρ 'ya bağlı ise bu yoğunluk fonksiyonu modeli DFT olarak bilinir. Yani yoğunluk fonksiyonu teorisi (DFT)' nin temel dayanak noktası; elektronik sistemin enerjisini elektron yoğunluğuna bağlı olarak ifade etmesidir.

3.5. B3LYP Karma Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi

Yoğunluk fonksiyonu teorisi, moleküllerin değiş-tokuş ve korelasyon enerjilerinin de daha iyi sonuç verir. Fakat kinetik enerji ifadesi için iyi sonuç vermez. Bu yüzden tam enerji ifadelerinin hesabı için, saf HF veya saf DFT modelleri yerine bu modellerin her ikisinin de enerji ifadelerinin toplam elektronik enerji ifadesinde kullanılarak karma modeller ortaya çıkmıştır. Bu modeller, toplam enerjiyi, bağ uzunlukları ve iyonizasyon enerjileri gibi birçok büyüklüğü saf modellerden daha iyi hesaplamaktadır.

Literatürde sıkça kullanılan enerji fonksiyonlarından; Kinetik enerji fonksiyonları: H28, TF27,.. Değiş tokuş enerji fonksiyonları: F30, D30, B88,.. Korelasyon enerji fonksiyonları: LYP,VWN,.. çok sık karşılaşılan fonksiyonellerdir.

Bir karma model, bu enerji ifadelerini birleştirerek yeni bir enerji ifadesi elde edebilir. Becke değiş tokuş ve korelasyon enerjisi (E_{XC}) için aşağıda ki karma modeli önermiştir.

$$E_{karma}^{XC} = c_{HF} E_{HF}^X + c_{DFT} E_{DFT}^{XC} \quad (3.4)$$

Burada c 'ler sabitlerdir. Becke'nin önerdiği karma modeller BLYP ve B3LYP'dir. Bu karma modellerden en iyi sonuç verenlerinden biri; LYP korelasyon enerjili üç parametrelili Becke karma modeli B3LYP'dir . B3LYP modelinde değiş tokuş ve korelasyon enerjisi,

$$E_{B3LYP}^{XC} = E_{LDA}^X + c_0(E_{HF}^X - E_{LDA}^X) + c_1 \nabla E_{B88}^X + E_{VWN}^C + c_2(E_{LYP}^C - E_{VWN}^C) \quad (3.5)$$

ifadesi ile verilmektedir. Burada c_0 , c_1 ve c_2 katsayıları deneysel değerlerden türetilmiş sabitlerdir ve değerleri sırası ile 0,2, 0,7, 0,8 dir. Dolayısı ile B3LYP modelinde bir molekülün toplam elektronik enerji ifadesi,

$$E_{B3LYP} = E^T + E^V + E^J + E_{B3LYP}^{XC} \quad (3.6)$$

olarak elde edilir. DFT modelinde atomik ve moleküler sistemlerde daha iyi sonuç verecek fonksiyonellerle ilgili çalışmalar yoğun olarak devam etmektedir [12,19,20].

3.6. MPW1PW91 Metodu

Yoğunluk fonksiyonu teorisi, moleküllerin değiş-tokuş ve korelasyon enerjilerinin sonuçlarını daha iyi vermesi nedeni ile tam enerji ifadesi için, yalnız HF veya yalnız DFT modelleri yerine karma modeller ortaya çıkmıştır. Bu çalışmada MPW1PW91 metodu kullanıldı.

Barone ve Adamo, Becke'nin tek parametrelili karma fonksiyonunu Perdew-Wang değiş tokuş ve Perdew-Wang 91 korelasyon enerjileri için düzenleyerek kullanmıştır [21]. Barone ve Adamo'nun düzenlediği karma yoğunluk metodu MPW1PW91'dir.

$$E_{xc} = 0.25E_{xc}^{HF} + 0.75(E_x^{LSD} + \Delta E_x^{GGA}) + E_c^{LSD} + \Delta E_c^{GGA} \quad (3.7)$$

Burada, LSD (local spin density approximation) yaklaşımı ve GGA (generalized gradient approximation) yaklaşımı ise;

$$E_e^{GGA} = E_x^{LSD} - \sum_{\sigma} \int F[x_{\sigma}] \rho_{\sigma}(r)^{4/3} dr \text{ ve } E_x^{LSD} = A_x \sum_{\sigma} \int \rho_{\sigma}(r)^{4/3} dr \quad (3.8)$$

ifadesi ile verilir. Dativ bağlar (dative bonds, M-N bağı) ve hidrojen bağları için en güvenilir metotlardan birisi MPW1PW91'dır [22].

3.7. Temel Setler

Temel setler, molekül orbitallerinin oluşumunda kullanılan atomik orbitallerden oluşmuş fonksiyonlar setidir. Bir molekül orbital atomik orbitallerin lineer kombinasyonlarından oluşur.

Bir molekül için genellikle Slater tipi orbital (STO) veya Gaussian tipi orbital (GTO) kullanılır. Fakat hesaplarda kolaylık sağlamak amacıyla gaussian tipi orbital kullanılır. Atomik orbitaller için önerilen temel setlerden birisi minimal temel setidir. Bu temel set herhangi bir atom için iç kabuk ve valans kabuğundaki orbitallerden en az sayıda temel fonksiyon içerir. Minimal temel seti STO-XG şeklinde tanımlanmaktadır. X değeri tamsayıdır ve tek bir temel set içeren temel fonksiyonun sayısını gösterir. Bazı minimal temel setler STO-2G, STO-3G, STO-6G seklindedir.

Diğer bir set olan split valans temel setinde ise her bir valans orbitali farklı büyüklükte temel fonksiyon içerir. Bazı split valans temel setler 3-21G, 6-31G, 6-31G(d) seklindedir.

Örneğin; STO-3G temel seti, bir STO' nun yaklaşık üç GTO' dan oluştuğunu ifade eder. 6-31G(d) temel setinde ise iç kabuk temel fonksiyonlar altı GTO dan oluşmuştur ve iç valans orbitali üç tane GTO dış valans orbitali ise bir tane GTO içerir.

4. MATERYAL VE METOD

4.1. Gaussian 03W, Gauss View 3.0

Bu çalışmada Gaussian 03W paket programı kullanılmıştır. Gaussian 03W programı sayesinde atom ve moleküllerin enerjilerini, yapı parametrelerini, enerjiye bağlı titreşim frekanslarını, kuvvet sabitlerini, dipol momentlerini, termokimyasal özelliklerini, elektron ilgisi ve iyonlaşma enerjilerini hesaplayabiliriz. Bu özellikleri gaz fazında, çözelti içinde ve kristal yapılarında bulabiliriz. Bu çalışma gaz fazında gerçekleşmiştir. GaussView, Gaussian 03'e göndereceğimiz inputları hazırlamamıza yardımcı olan ve Gaussian outputlarını grafiksel olarak incelemek için tasarlanmış bir programdır. GaussView, Gaussian kullanıcılarına 3 ana fayda sağlar.

Birincisi; molekülü gözümüzde canlandırmamızda yardımcı olur. GaussView, büyük molekülleri dahi hızlı bir şekilde tasarlamamızı sağlar, bu molekülleride basit mouse hareketleriyle; döndürme, çevirme ve yaklaştırma işlemlerini yapabiliriz. İkincisi; GaussView, Gaussian hesaplamalarının birçok tipinin kurulmasını kolaylaştırır. Optimizasyonlar, yapı geçisi hesaplamaları, periyodik sınır hesaplamaları ve daha başka ileri metodların kompleks inputlarını hazırlar. Son olarak; GaussView grafik tekniklerinin birçok çeşidini kullanan Gaussian sonuçlarını gözden geçirmemizi sağlar. Bu sonuçlar aşağıdaki gibi sıralanabilir.

- Moleküler yapının optimize edilmesi.
- Moleküler orbitaller, atomik yükler.
- Elektrostatik potansiyel enerjisi.
- Titreşim frekanslarına karşılık gelen normal modların gösterimi.
- IR, Raman, NMR ve diğer Spektrumlar [23].

5. SONUÇ VE TARTIŞMALAR

5.1. Giriş

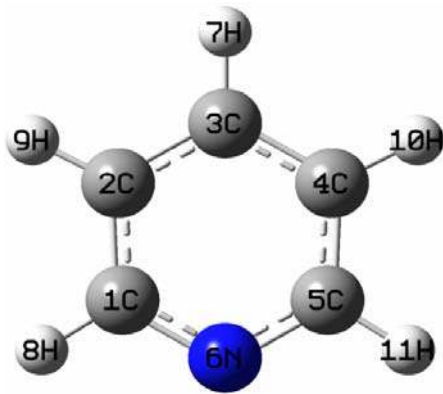
Bu çalışmada, bipyridin molekülünde azotun yerleri değiştirilerek oluşturulan 2,2'-bipyridin, 2,3'-bipyridin, 2,4'-bipyridin, 2,5'-bipyridin, 2,6'-bipyridin, 3,3'-bipyridin, 3,4'-bipyridin, 3,5'-bipyridin, 3,6'-bipyridin, 4,4'-bipyridin moleküllerinin B3LYP/6-311+g(d,p), MPW1PW91/dgdzvp, MPW1PW91/6-311+g(d,p), HF/dgdzvp, HF/6-311+g(d,p) metotları ve temel setleri kullanılarak hesaplanan geometrik parametreleri ve titreşim frekansları, deneysel yollarla bulunan geometrik parametreler ve titreşim frekansları ile karşılaştırıldı ve sonuçlar tartışıldı.

5.2. Kullanılan Metodlar ve Baz Setleri Seçimi

Bu çalışmadaki metodlar belirlenirken piridin (Şekil 5.1) molekülü referans alınmıştır. literatürde Piridin molekülünün C,H,N atomlarından oluşan düzlemsel bir molekül olması nedeniyle yapısı 2,2'-bipyridin, 2,3'-bipyridin, 2,4'-bipyridin, 2,5'-bipyridin, 2,6'-bipyridin, 3,3'-bipyridin, 3,4'-bipyridin, 3,5'-bipyridin, 3,6'-bipyridin, 4,4'-bipyridin moleküllerine benzemektedir. Bu nedenle piridin molekülünün yapısı ile ilgili literatürde yer alan çalışmalar incelendi. Piridin molekülünün yapısı gaz fazda mikrodalga spektroskopisi ile J. A. Creighton tarafından belirlenmiştir [24]. Sonuç olarak bu molekülün referans alınmasının nedeni, bu çalışmada incelediğimiz moleküllere yapı olarak benzemesi ve literatürde gaz fazında deneysel yapı ve titreşim frekans değerlerinin bulunmasıdır.

Bu çalışmada piridin molekülü için deneysel verilere en yakın değerleri veren B3LYP/6-311+g(d,p), MPW1PW91/dgdzvp, MPW1PW91/6-311+g(d,p), HF/dgdzvp, HF/6-311+g(d,p) metotları ve temel setleri kullanılarak hesaplamalar yapıldı. Piridin molekülünün B3LYP/6-311+g(d,p) baz seti kullanılarak yapı ve titreşimleri Wu De-yin ve ark. tarafından hesaplanmış ve deneysel değerlerle oldukça uyumlu olduğu görülmüştür [25]. Piridin için doğru olan metodların 2,2'-bipyridin,

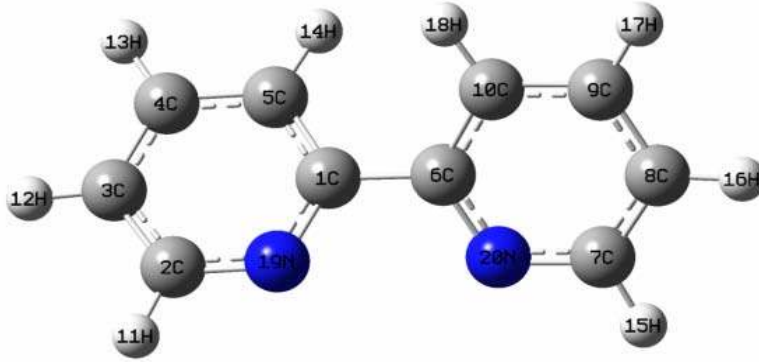
2,3'-bipiridin, 2,4'-bipiridin, 2,5'-bipiridin, 2,6'-bipiridin, 3,3'-bipiridin, 3,4'-bipiridin, 3,5'-bipiridin, 3,6'-bipiridin, 4,4'-bipiridin molekülleri içinde deneysel verilerle uyum sağlayacağı düşünülerek bu metod ve temel settlerde hesaplama yapılmıştır



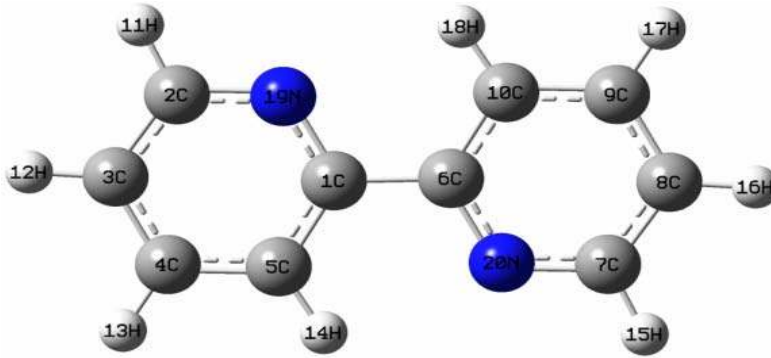
Şekil 5.1. Piridin molekülünün yapısı

5.3. 2,2'-Bipiridin Molekülünün Yapı ve Titreşim Parametrelerinin İncelenmesi

2,2'-bipiridin (2,2'-bpy) molekülü $C_8H_6N_2$ atomlarından oluşan $C_{10}H_8N_2$ kapalı formülüne sahip organik bir molekül olup koordinasyon kimyasında iki dişli ligand olarak bilinir. 2,2'-bpy molekülünün *cis* ve *trans* olmak üzere iki izomeri bulunmaktadır (Şekil 5.2, Şekil 5.3). Katı formda *trans* komplekslerinde ise *cis* formundadır [26]. *Cis* formunda C_{2v} nokta grubunda, *trans* formunda ise C_{2h} nokta grubundadır.



Şekil 5.2. *cis*-2,2'-bpy



Şekil 5.3. *trans*-2,2'-bpy

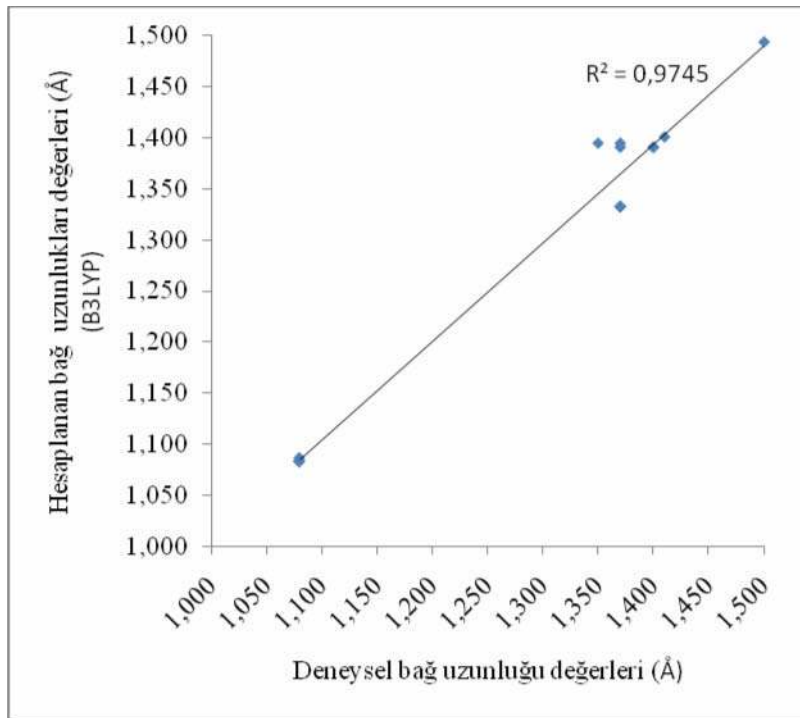
Bu bölümde 2,2'-bpy molekülünün yapı ve titreşim parametreleri ile ilgili deney ve hesaplama sonuçları karşılaştırmalı olarak sunulacaktır. EK-1'de 2,2'-bpy molekülünün yapı parametreleri Merritt ve ark. tarafından X ışını difraksiyon metodu ile elde edilen değerler karşılaştırılmıştır [26].

2,2'-bpy molekülünün X ışını difraksiyon metodu ile belirlenen $C_1 - C_6$ bağ uzunluğu 1,500 Å, $C_1 - C_5$ bağ uzunluğu 1,410 Å, $C_4 - C_5$ bağ uzunluğu 1,400 Å, $C_2 - N_{19}$ bağ uzunluğu 1,370 Å, $C_1 - N_{19}$ bağ uzunluğu 1,350 Å, $C_5 - H_{14}$ bağ uzunluğu 1,080 Å, $C_2 - H_{11}$ bağ uzunluğu 1,080 Å'dır. Bu çalışmada $C_1 - C_6$ bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,490 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,491 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,488 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,497 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz

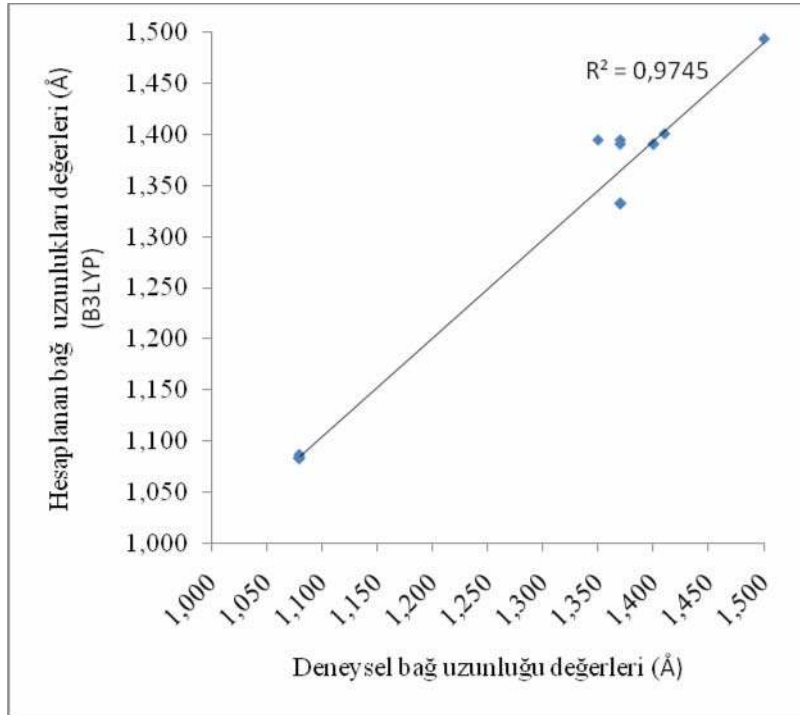
seti eşliğinde 1,497 Å'dur. $C_1 - C_5$ bağ uzunluğu B3LYP/ 6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,401 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,400 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,397 Å, HF/ dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,391 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,390 Å'dur. $C_4 - C_5$ bağ uzunluğu B3LYP/ 6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,391 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,390 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,387 Å, HF/ dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,384 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,383 Å'dur. $C_2 - N_{19}$ bağ uzunluğu B3LYP6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,333 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,331 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,328 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,319 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,317 Å'dur. $C_1 - N_{19}$ bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,340 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,338 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,334 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,323 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,321 Å'dur. $C_5 - H_{14}$ bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,083 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,085 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,083 Å, HF/ dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,073 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,074 Å'dur. $C_2 - H_{11}$ bağ uzunluğu B3LYP / 6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,087 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,088 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,087 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,076 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,077 Å'dur.

Hesaplanan değerlerle deneysel verilerin uygunluğu "Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods" kitabının ön gördüğü şu kriterle ölçülebilir. Hesaplanan bağ uzunluğunun yaklaşık olarak 0,01-0,02 Å, açıların ve dihedral açıların ise yaklaşık $1-2^0$ deneysel değerlerle uyumlu olması hesaplamının başarılı

olduğunu gösterir (Bu değerlerden daha küçük değerler daha doğrudur) [27]. Buna göre bu çalışmada kullanılan bütün metod ve baz setlerinin deneysel verilerle uyum içinde olduğu belirlenmiştir. Bu metod ve baz setlerinden deneysel verilerle en iyi uyum sağlayan metod ve baz setinin B3LYP/6-311+g(d,p) olduğu belirlenmiştir. Şekil 5.4’de 2,2’-bpy molekülünün B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz setinde hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu, Şekil 5.5’de 2,2’-bpy molekülünün B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz setinde hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu verilmiştir.



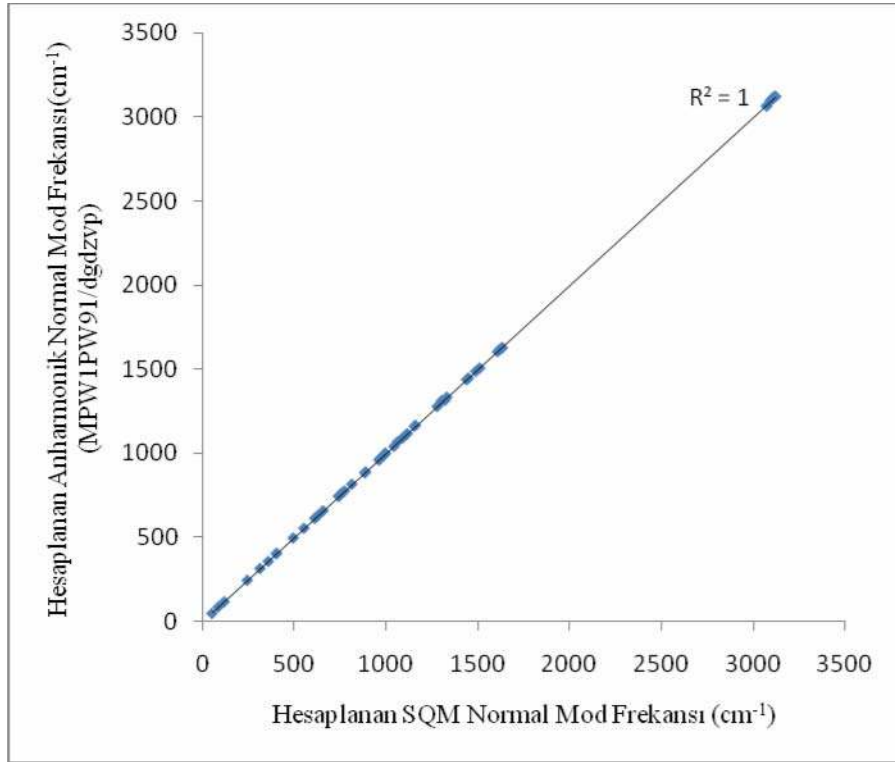
Şekil 5.4. 2,2’-bpy molekülünün hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu



Şekil 5.5. 2,2'-bpy molekülünün hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu

Bu çalışmada 2,2'-bpy molekülü için yapı parametreleri için kullanılan metodlar ve baz seti eşliğinde harmonik titreşimler hesaplanmıştır. Anharmonik titreşimler MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanmıştır. Literatürde 2,2'-bpy molekülünün katı fazdaki IR ve Raman spektrumları L. Ould-Moussa ve ark. tarafından yapılmış deneysel ölçüm sonuçları mevcuttur [28]. Hesaplanan harmonik ve anharmonik frekans değerleri EK-2'de karşılaştırmalı olarak mevcuttur.

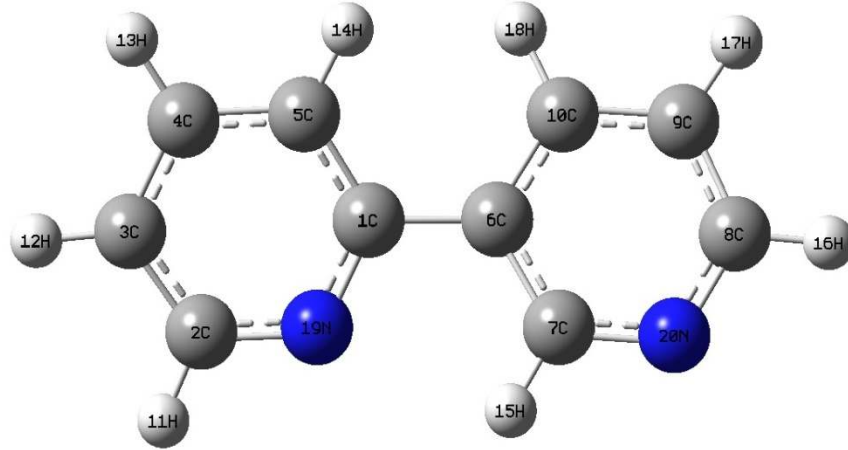
2,2'-bpy molekülü için MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik titreşim frekansları kullanılarak SQM programı yardımıyla TED dağılımları hesaplanıp, EK-3'de verilmiştir. 2,2'-bpy molekülü için SQM sonucunda RMS değeri 3,60 bulunmuştur. Şekil 5.6'da 2,2'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu verilmiştir.



Şekil 5.6. 2,2'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu

5.4. 2,3'-Bipiridin Molekülünün Yapı ve Titreşim Parametrelerinin İncelenmesi

2,3'-bipiridin (2,3'-bpy) molekülü $C_8H_6N_2$ atomlarından oluşan $C_{10}H_8N_2$ kapalı formülüne sahip organik bir molekül olup koordinasyon kimyasında iki dişli ligand olarak bilinir (Şekil 5.7). Literatürde 2,3'-bpy molekülü için gaz fazında deneysel veriler mevcut olmadığından piridin molekülünün deney sonuçları referans alınacaktır [24]. Piridin molekülünün yapısı 2,3'-bpy molekülüne benzemektedir. Bu nedenle piridin molekülünün yapısı ile ilgili literatürde yer alan çalışmalar incelendi. Piridin molekülünün yapısı gaz fazda mikrodalga spektroskopisi ile J. A. Creighton tarafından belirlenmiştir [24].



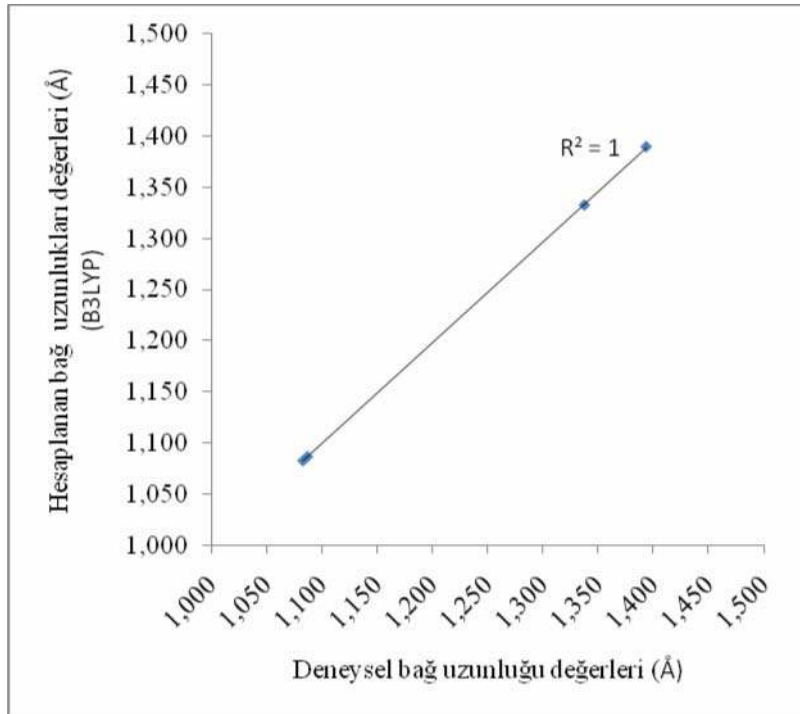
Şekil 5.7. 2,3'-bpy molekülünün yapısı

Bu bölümde 2,3'-bpy molekülünün yapı ve titreşim parametreleri ile ilgili deney ve hesaplama sonuçları karşılaştırmalı olarak sunulacaktır. EK-4'de 2,3'-bpy molekülünün yapı parametreleri J. A. Creighton tarafından gaz fazda mikrodalga spektroskopisi ile elde edilen değerler karşılaştırılmıştır [24].

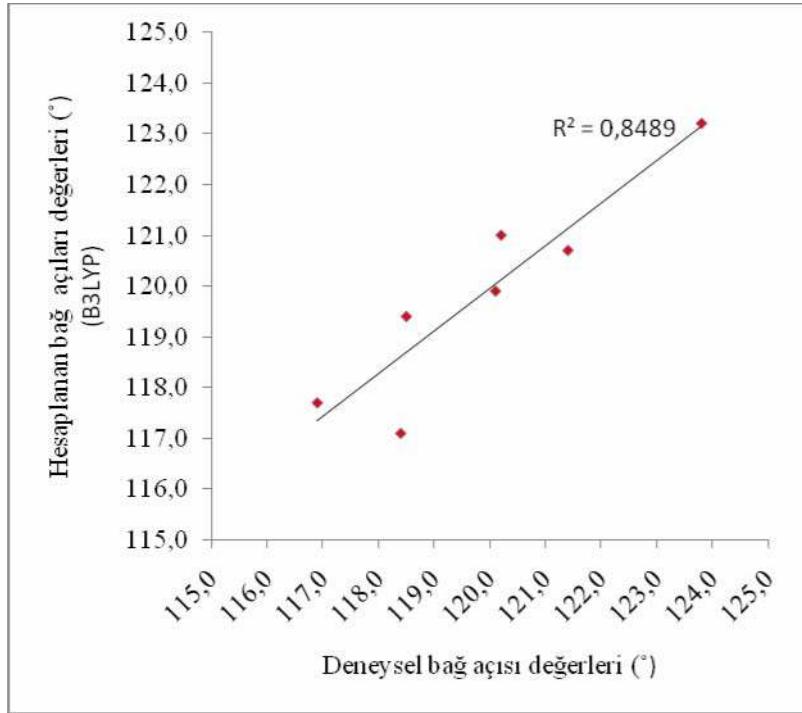
Pridin molekülünün gaz fazda mikrodalga spektroskopisi ile belirlenen C_4-C_5 bağ uzunluğu 1,394 Å, C_2-N_{19} bağ uzunluğu 1,338 Å, C_5-H_{14} bağ uzunluğu 1,083 Å, C_2-H_{11} bağ uzunluğu 1,087 Å'dır. Bu çalışmada C_4-C_5 bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,390 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,389 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,386 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,382 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,381 Å'dır. C_2-N_{19} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,333 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,331 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,328 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,320 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,318 Å'dır. C_5-H_{14} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,083 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,084 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,083 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti

eşliğinde 1,073 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,073 Å'dur. $C_2 - H_{11}$ bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,087 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,087 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,086 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,076 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,077 Å'dur.

Hesaplanan değerlerle deneysel verilerin uygunluğu kriterleri daha önce belirtilmiştir [27]. Buna göre bu çalışmada kullanılan bütün metod ve baz setlerinin deneysel verilerle uyum içinde olduğu belirlenmiştir. Bu metod ve baz setlerinden deneysel verilerle en iyi uyum sağlayan metod ve baz setinin B3LYP/6-311+g(d,p) olduğu belirlenmiştir. Şekil 5.8'de 2,3'-bpy molekülünün B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz setinde hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu, Şekil 5.9'da 2,3'-bpy molekülünün B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz setinde hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu verilmiştir.



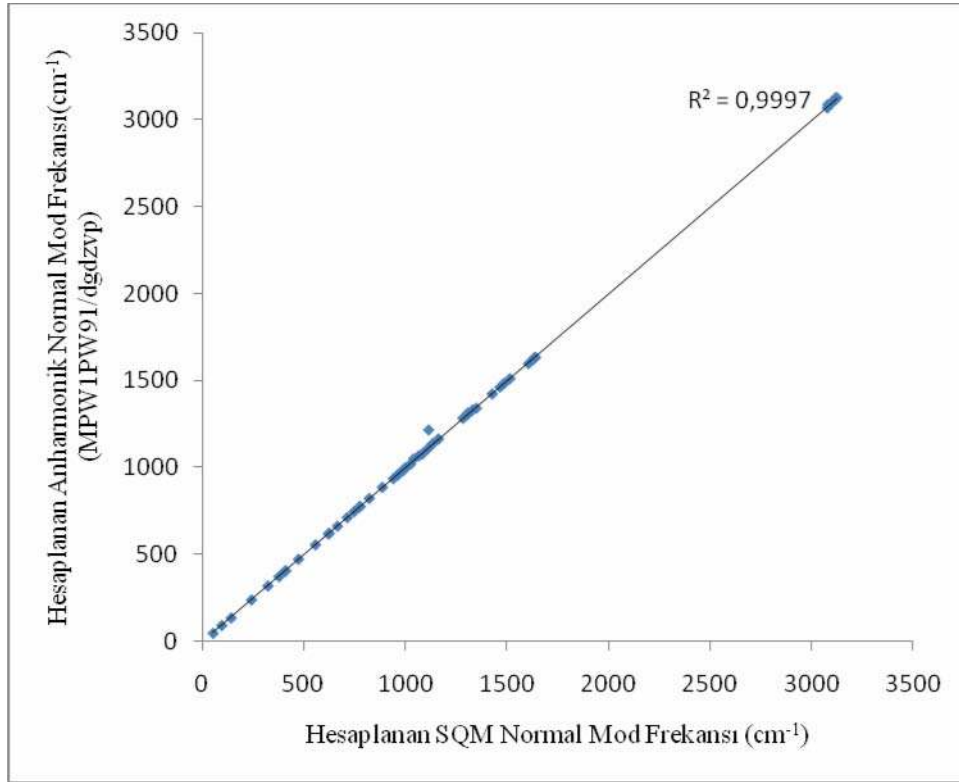
Şekil 5.8. 2,3'-bpy molekülünün hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu



Şekil 5.9. 2,3'-bpy molekülünün hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu

Bu çalışmada 2,3'-bpy molekülü için yapı parametreleri için kullanılan metodlar ve baz seti eşliğinde harmonik titreşimler hesaplanmıştır. Anharmonik titreşimler MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanmıştır. Literatürde 2,3'-bpy molekülünün IR ve Raman spektrumları deneysel ölçüm sonuçları mevcut değildir. Hesaplanan harmonik ve anharmonik frekans değerleri EK-5'de mevcuttur.

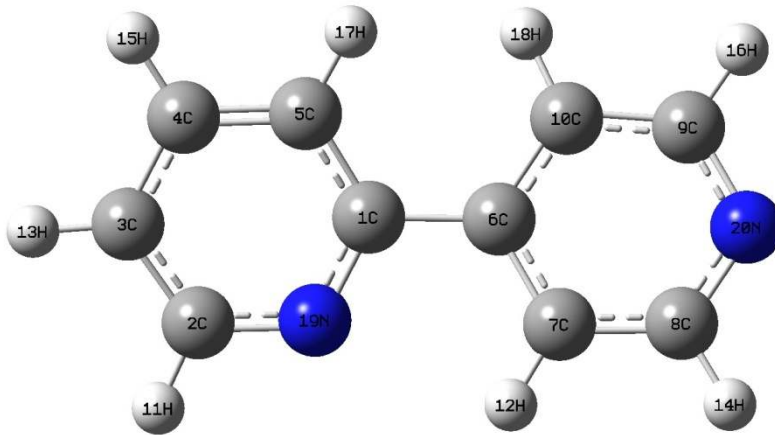
2,3'-bpy molekülü için MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik titreşim frekansları kullanılarak SQM programı yardımıyla TED dağılımları hesaplanıp, EK-6'de verilmiştir. 2,3'-bpy molekülü için SQM sonucunda RMS değeri 3,76 bulunmuştur. Şekil 5.10'da 2,3'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının, hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu verilmiştir.



Şekil 5.10. 2,3'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu

5.5. 2,4'-Bipiridin Molekülünün Yapı ve Titreşim Parametrelerinin İncelenmesi

2,4'-bipiridin (2,4'-bpy) molekülü $C_8H_6N_2$ atomlarından oluşan $C_{10}H_8N_2$ kapalı formülüne sahip organik bir moleküldür (Şekil 5.11). Literatürde 2,4'-bpy molekülü için gaz fazında deneysel veriler mevcut olmadığından piridin molekülünün deney sonuçları referans alınacaktır [24]. Piridin molekülünün yapısı 2,4'-bpy molekülüne benzemektedir.



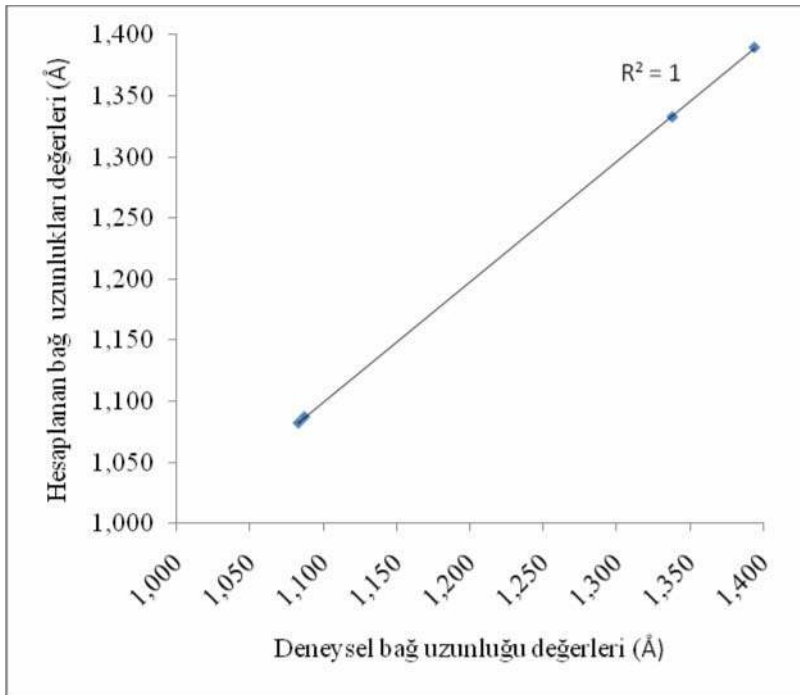
Şekil 5.11. 2,4'-bpy molekülünün yapısı

Bu bölümde 2,4'-bpy molekülünün yapı ve titreşim parametreleri ile ilgili deney ve hesaplama sonuçları karşılaştırmalı olarak sunulacaktır. EK-7'de 2,4'-bpy molekülünün yapı parametreleri J. A. Creighton tarafından gaz fazda mikrodalga spektroskopisi ile elde edilen değerler karşılaştırılmıştır [24].

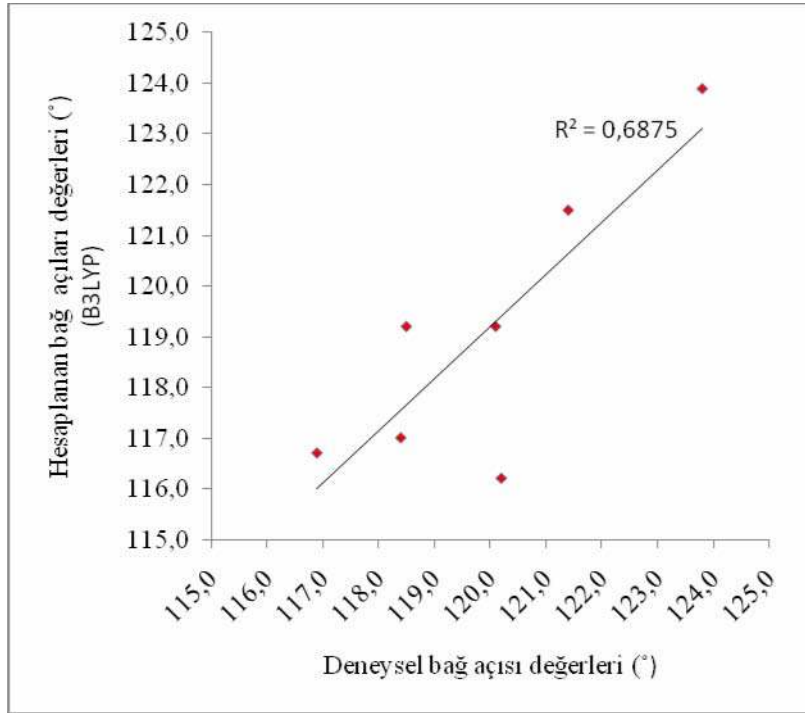
Pridin molekülünün gaz fazda mikrodalga spektroskopisi ile belirlenen C_4-C_5 bağ uzunluğu 1,394 Å, C_2-N_{10} bağ uzunluğu 1,338 Å, C_5-H_{14} bağ uzunluğu 1,083 Å, C_2-H_{11} bağ uzunluğu 1,087 Å'dır. Bu çalışmada C_4-C_5 bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,390 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,389 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,386 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,383 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,382 Å'dır. C_2-N_{10} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,333 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,330 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,327 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,319 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,318 Å'dır. C_5-H_{14} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,082 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,083 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,082 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,072 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,073 Å'dır. C_2-

H_{11} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,087 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,088 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,086 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,076 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,076 Å'dur.

Hesaplanan değerlerle deneysel verilerin uygunluğu, hesaplanan bağ uzunluğunun yaklaşık olarak 0,01-0,02 Å, açıların ve dihedral açıların ise yaklaşık 1-2⁰ deneysel değerlerle uyumlu olması hesaplamaların başarılı olduğunu gösterir [27]. Buna göre bu çalışmada kullanılan bütün metod ve baz setlerinin deneysel verilerle uyum içinde olduğu belirlenmiştir. Bu metod ve baz setlerinden deneysel verilerle en iyi uyum sağlayan metod ve baz setinin B3LYP/6-311+g(d,p) olduğu belirlenmiştir. Şekil 5.12'de 2,4'-bpy molekülünün B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz setinde hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu, Şekil 5.13'de 2,4'-bpy molekülünün B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz setinde hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu verilmiştir.



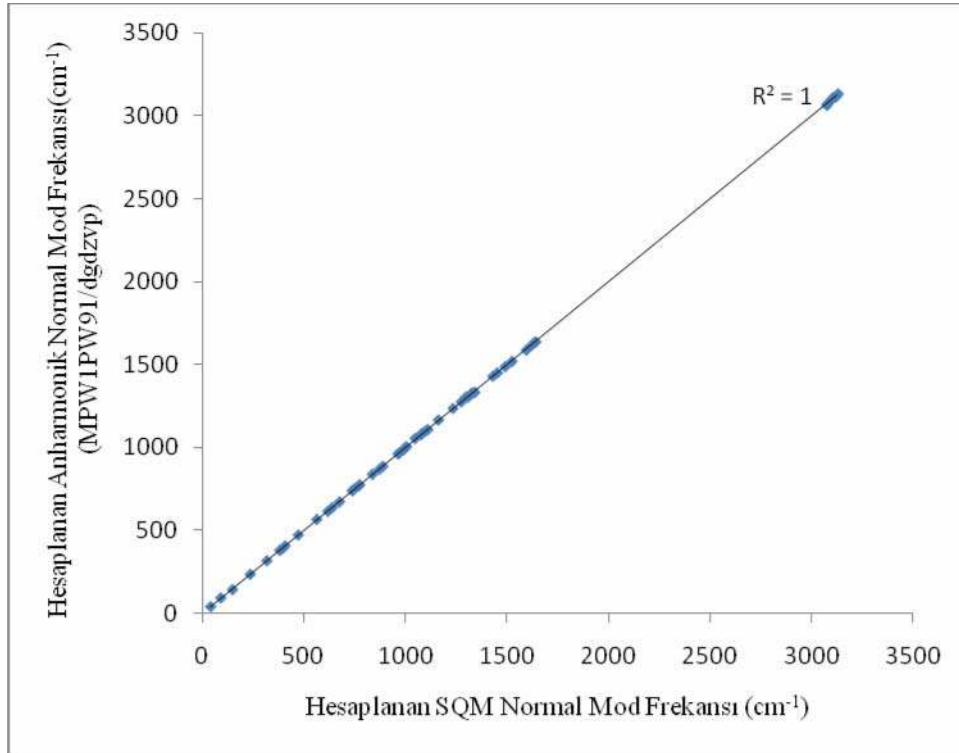
Şekil 5.12. 2,4'-bpy molekülünün hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu



Şekil 5.13. 2,4'-bpy molekülünün hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu

Bu çalışmada 2,4'-bpy molekülü için yapı parametreleri için kullanılan metodlar ve baz seti eşliğinde harmonik titreşimler hesaplanmıştır. Anharmonik titreşimler MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanmıştır. Literatürde 2,4'-bpy molekülünün IR ve Raman spektrumları deneysel ölçüm sonuçları mevcut değildir. Hesaplanan harmonik ve anharmonik frekans değerleri EK-8'de mevcuttur.

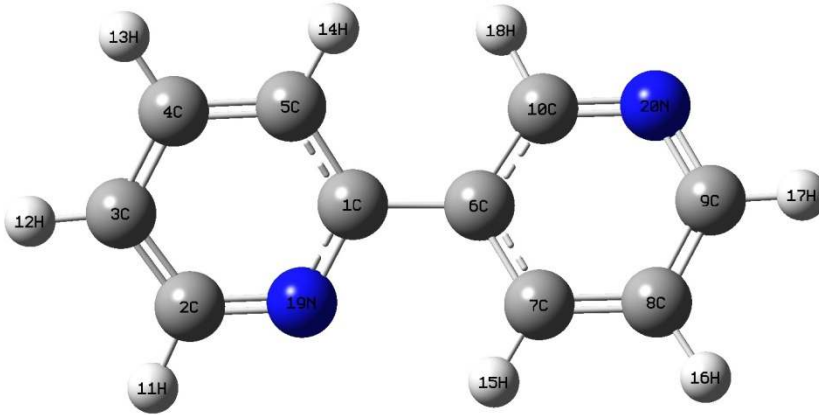
2,4'-bpy molekülü için MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik titreşim frekansları kullanılarak SQM programı yardımıyla TED dağılımları hesaplanıp, EK-9'da verilmiştir. 2,4'-bpy molekülü için SQM sonucunda RMS değeri 3,53 bulunmuştur. Şekil 5.14'de 2,4'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının, hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu verilmiştir.



Şekil 5.14. 2,4'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu

5.6. 2,5'-Bipiridin Molekülünün Yapı ve Titreşim Parametrelerinin İncelenmesi

2,5'-bipiridin (2,5'-bpy) molekülü C,H,N atomlarından oluşan $C_{10}H_8N_2$ kapalı formülüne sahip organik bir moleküldür (Şekil 5.15). 2,5'-bpy molekülü, 2,3'-bpy molekülünün *trans* izomeridir. Literatürde 2,5'-bpy molekülü için gaz fazında deneysel veriler mevcut olmadığından piridin molekülünün deney sonuçları referans alınacaktır [24]. Piridin molekülünün yapısı 2,5'-bpy molekülüne benzemektedir.



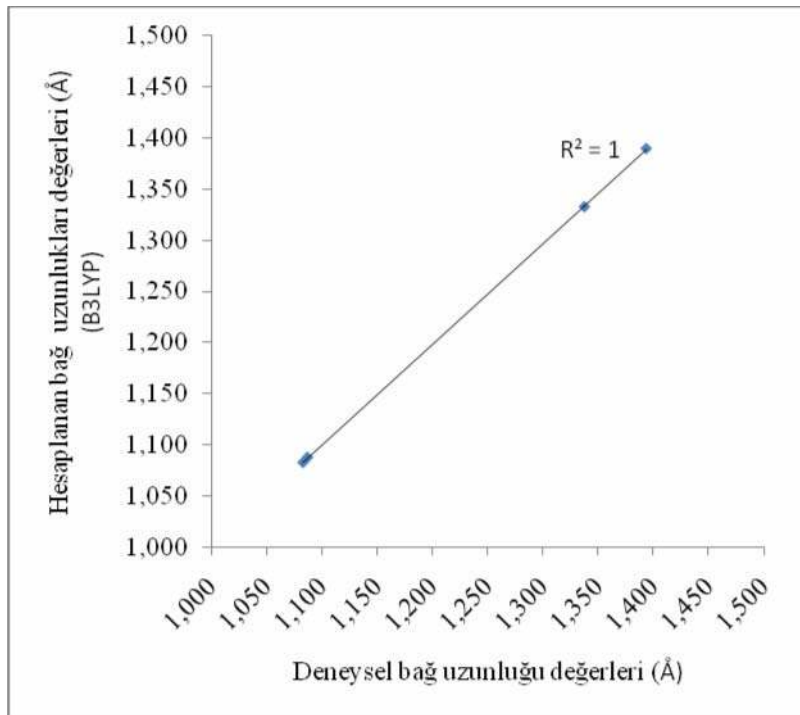
Şekil 5.15. 2,5'-bpy molekülünün yapısı

Bu bölümde 2,5'-bpy molekülünün yapı ve titreşim parametreleri ile ilgili deney ve hesaplama sonuçları karşılaştırmalı olarak sunulacaktır. EK-10'da 2,5'-bpy molekülünün yapı parametreleri J. A. Creighton tarafından gaz fazda mikrodalga spektroskopisi ile elde edilen değerler karşılaştırılmıştır [24].

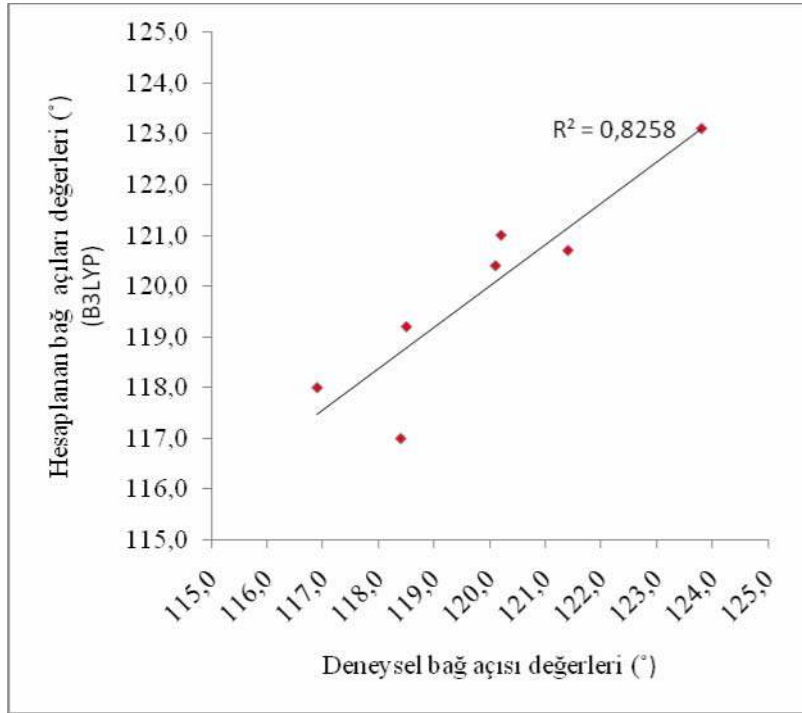
Pridin molekülünün gaz fazda mikrodalga spektroskopisi ile belirlenen C_4-C_5 bağ uzunluğu 1,394 Å, C_2-N_{19} bağ uzunluğu 1,338 Å, C_5-H_{14} bağ uzunluğu 1,083 Å, C_2-H_{11} bağ uzunluğu 1,087 Å'dır. Bu çalışmada C_4-C_5 bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,390 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,389 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,386 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,382 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,381 Å'dır. C_2-N_{19} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,333 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,331 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,328 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,320 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,318 Å'dır. C_5-H_{14} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,082 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,084 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,082 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti

eşliğinde 1,072 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,073 Å'dur. $C_2 - H_{11}$ bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,087 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,087 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,088 Å, HF/ dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,076 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,077 Å'dur.

Bu çalışmada kullanılan bütün metod ve baz setlerinin deneysel verilerle uyum içinde olduğu belirlenmiştir [27]. Bu metod ve baz setlerinden deneysel verilerle en iyi uyum sağlayan metod ve baz setinin B3LYP/6-311+g(d,p) olduğu belirlenmiştir. Şekil 5.16'de 2,5'-bpy molekülünün B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz setinde hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu, Şekil 5.17'de 2,5'-bpy molekülünün B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz setinde hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu verilmiştir.



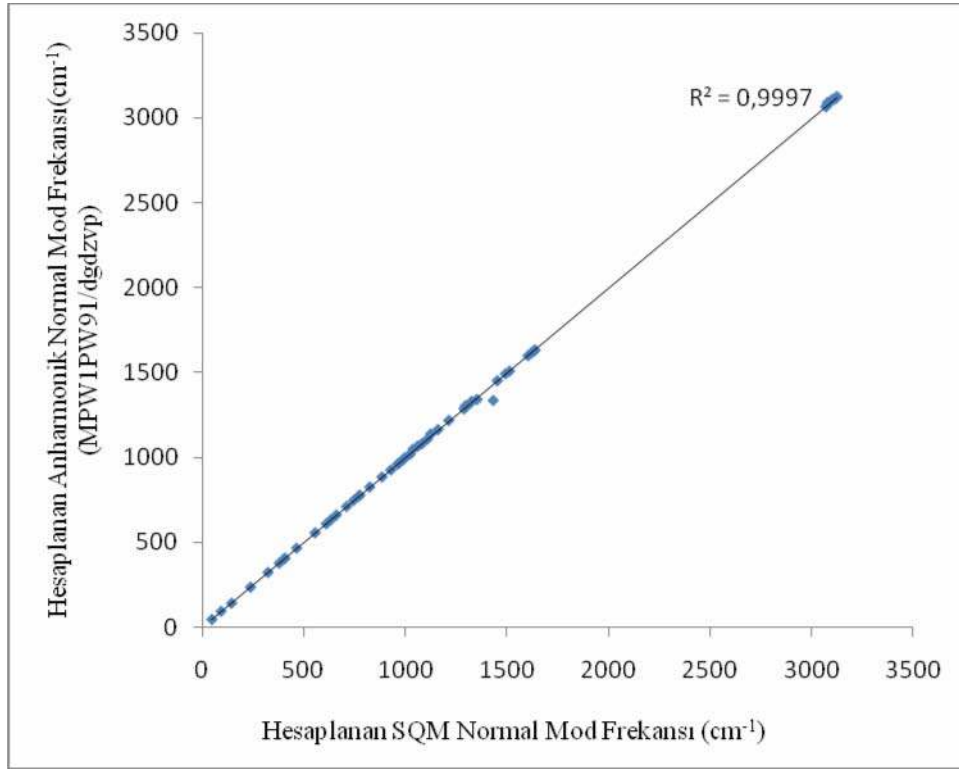
Şekil 5.16. 2,5'-bpy molekülünün hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu



Şekil 5.17. 2,5'-bpy molekülünün hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu

Bu çalışmada 2,5'-bpy molekülü için yapı parametreleri için kullanılan metodlar ve baz seti eşliğinde harmonik titreşimler hesaplanmıştır. Anharmonik titreşimler MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanmıştır. Literatürde 2,5'-bpy molekülünün IR ve Raman spektrumları deneysel ölçüm sonuçları mevcut değildir. Hesaplanan harmonik ve anharmonik frekans değerleri EK-11'de mevcuttur.

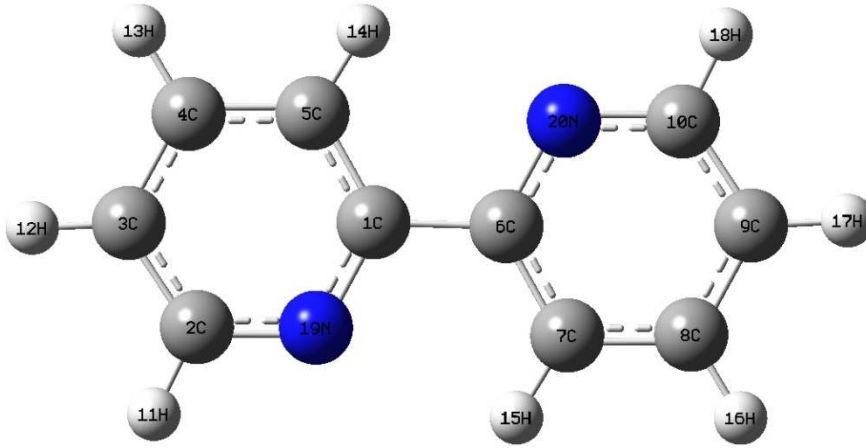
2,5'-bpy molekülü için MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik titreşim frekansları kullanılarak SQM programı yardımıyla TED dağılımları hesaplanıp, EK-12'de verilmiştir. 2,5'-bpy molekülü için SQM sonucunda RMS değeri 4,36 bulunmuştur. Şekil 5.18'da 2,5'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının, hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu verilmiştir.



Şekil 5.18. 2,5'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu

5.7. 2,6'-Bipiridin Molekülünün Yapı ve Titreşim Parametrelerinin İncelenmesi

2,6'-bipiridin (2,6'-bpy) molekülü $C_8H_6N_2$ atomlarından oluşan $C_{10}H_8N_2$ kapalı formülüne sahip organik bir molekül olup koordinasyon kimyasında iki dişli ligand olarak bilinir (Şekil 5.19). 2,6'-bpy molekülü, 2,2'-bpy molekülünün *trans* izomeridir. 2,6'-bpy molekülü C_{2h} nokta grubundadır.



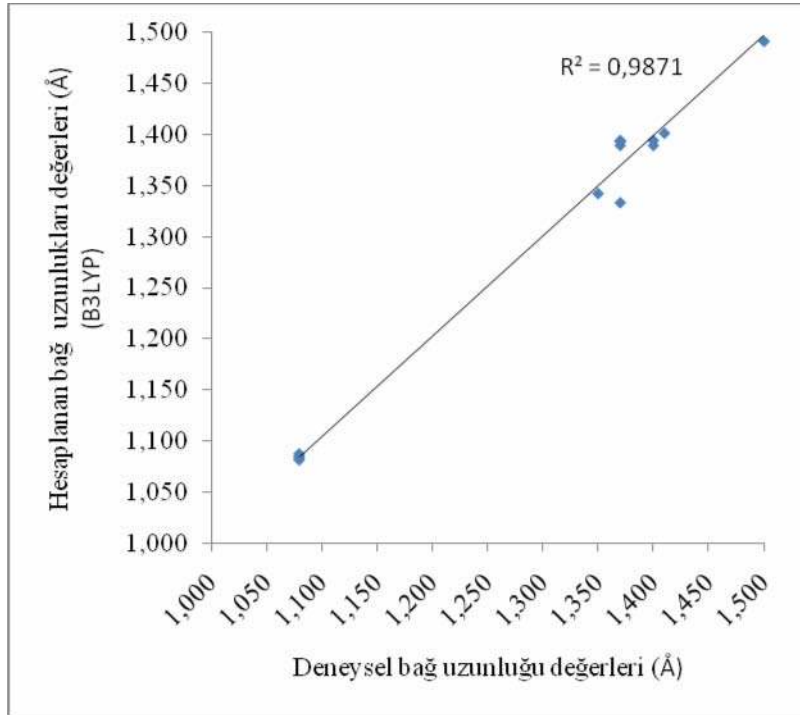
Şekil 5.19. 2,6'-bpy molekülünün yapısı

Bu bölümde 2,6'-bpy molekülünün yapı ve titreşim parametreleri ile ilgili deney ve hesaplama sonuçları karşılaştırmalı olarak sunulacaktır. EK-13'de 2,6'-bpy molekülünün yapı parametreleri Merritt ve ark. tarafından X ışını difraksiyon metodu ile elde edilen değerler karşılaştırılmıştır [26].

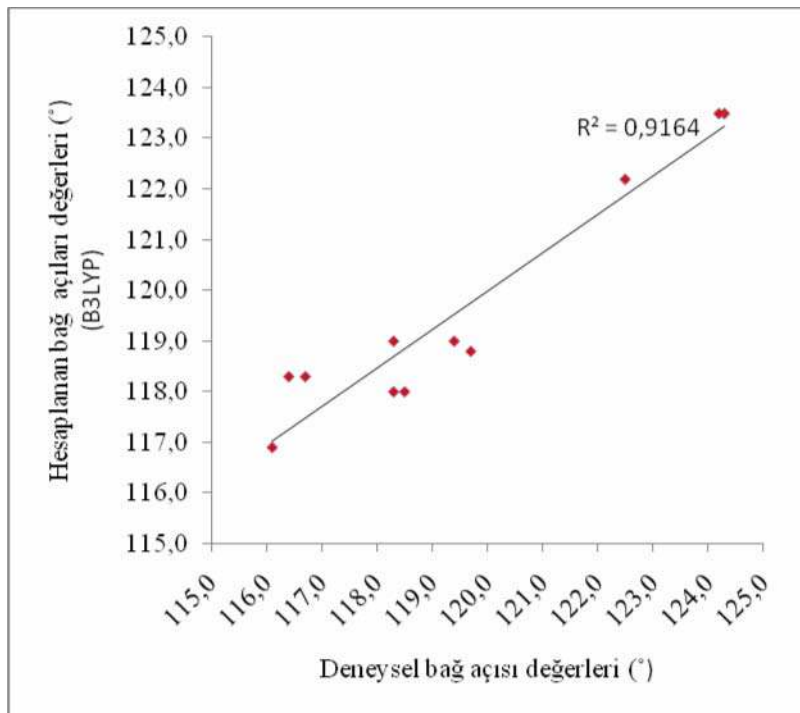
2,6'-bpy molekülünün X ışını difraksiyon metodu ile belirlenen $C_1 - C_6$ bağ uzunluğu 1,500 Å, $C_1 - C_5$ bağ uzunluğu 1,410 Å, $C_4 - C_5$ bağ uzunluğu 1,400 Å, $C_2 - N_{19}$ bağ uzunluğu 1,370 Å, $C_1 - N_{19}$ bağ uzunluğu 1,350 Å, $C_5 - H_{14}$ bağ uzunluğu 1,080 Å, $C_2 - H_{11}$ bağ uzunluğu 1,080 Å'dır. Bu çalışmada $C_1 - C_6$ bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,491 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,487 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,485 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,495 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,496 Å'dur. $C_1 - C_5$ bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,401 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,399 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,396 Å, HF/ dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,392 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,391 Å'dur. $C_4 - C_5$ bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,389

Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,389 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,385 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,382 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,381 Å'dur. C_2-N_{19} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,333 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,331 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,328 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,320 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,318 Å'dur. C_1-N_{19} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,342 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,340 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,336 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,325 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,323 Å'dur. C_5-H_{14} bağ uzunluğu B3LYP / 6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,081 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,085 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,081 Å, HF/ dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,071 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,071 Å'dur. C_2-H_{11} bağ uzunluğu B3LYP / 6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,087 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,088 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,086 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,076 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,077 Å'dur.

Hesaplanan değerlerle deneysel verilerin uygunluğu kriterleri daha önce belirtilmiştir [27]. Buna göre bu çalışmada kullanılan bütün metod ve baz setlerinin deneysel verilerle uyum içinde olduğu belirlenmiştir. Bu metod ve baz setlerinden deneysel verilerle en iyi uyum sağlayan metod ve baz setinin B3LYP/6-311+g(d,p) olduğu belirlenmiştir. Şekil 5.20'de 2,6'-bpy molekülünün B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz setinde hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu, Şekil 5.21'de 2,6'-bpy molekülünün B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz setinde hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu verilmiştir.



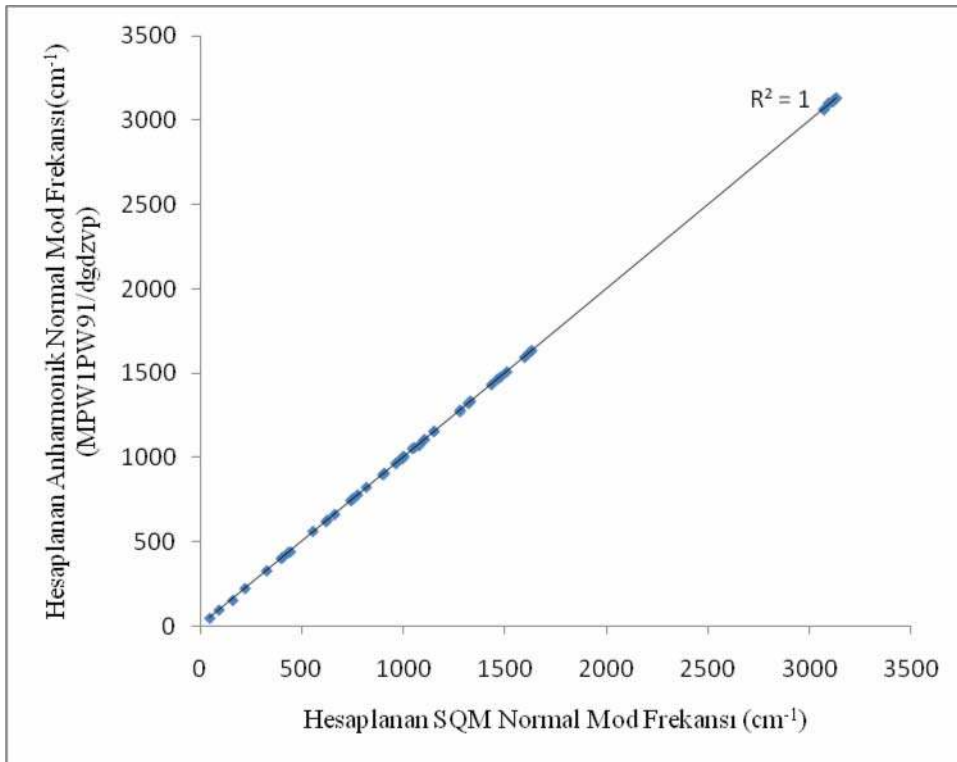
Şekil 5.20. 2,6'-bpy molekülünün hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu



Şekil 5.21. 2,6'-bpy molekülünün hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu

Bu çalışmada 2,6'-bpy molekülü için yapı parametreleri için kullanılan metodlar ve baz seti eşliğinde harmonik titreşimler hesaplanmıştır. Anharmonik titreşimler MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanmıştır. Literatürde 2,6'-bpy molekülünün katı fazdaki IR ve Raman spektrumları Marquez ve ark. tarafından yapılmış deneysel ölçüm sonuçları mevcuttur [28]. Hesaplanan harmonik ve anharmonik frekans değerleri EK-14'de karşılaştırmalı olarak mevcuttur.

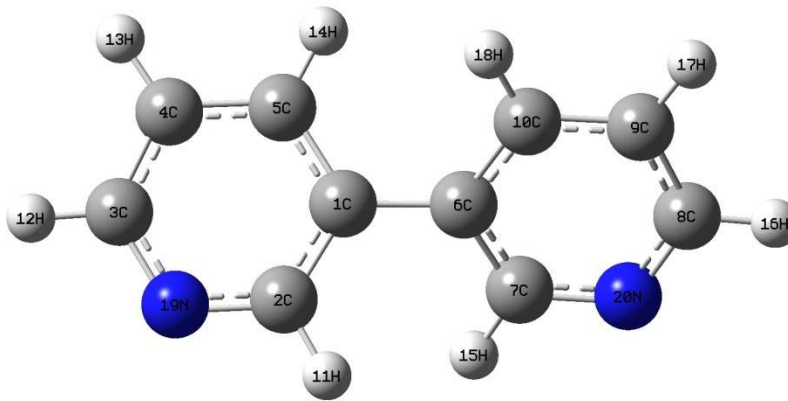
2,6'-bpy molekülü için MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik titreşim frekansları kullanılarak SQM programı yardımıyla TED dağılımları hesaplanıp, EK-15'de verilmiştir. 2,6'-bpy molekülü için SQM sonucunda RMS değeri 3,76 bulunmuştur. Şekil 5.22'de 2,6'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının, hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu verilmiştir.



Şekil 5.22. 2,6'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu

5.8. 3,3'-Bipiridin Molekülünün Yapı ve Titreşim Parametrelerinin İncelenmesi

3,3'-bipiridin (3,3'-bpy) molekülü $C_8H_6N_2$ atomlarından oluşan $C_{10}H_8N_2$ kapalı formülüne sahip organik bir moleküldür (Şekil 5.23). Literatürde 3,3'-bpy molekülü için gaz fazında deneysel veriler mevcut olmadığından piridin molekülünün deney sonuçları referans alınacaktır [24]. Piridin molekülünün yapısı 3,3'-bpy molekülüne benzemektedir.



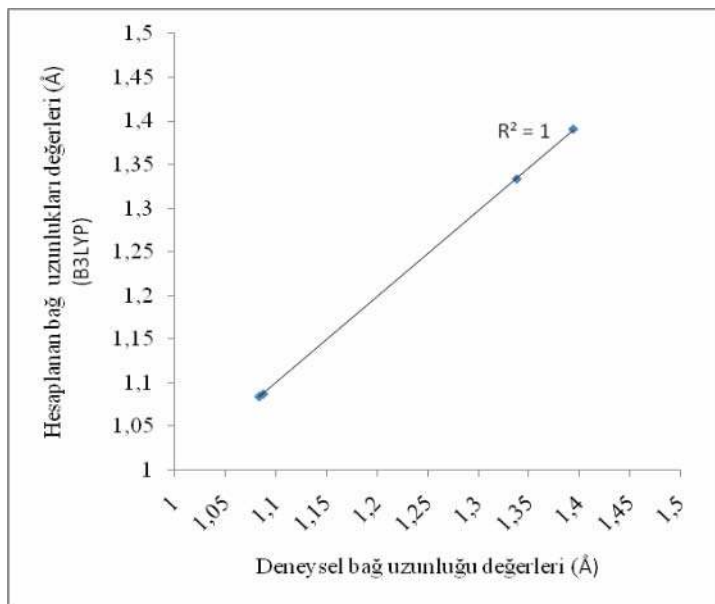
Şekil 5.23. 3,3'-bpy molekülünün yapısı

Bu bölümde 3,3'-bpy molekülünün yapı ve titreşim parametreleri ile ilgili deney ve hesaplama sonuçları karşılaştırmalı olarak sunulacaktır. EK-16'de 3,3'-bpy molekülünün yapı parametreleri J. A. Creighton tarafından gaz fazda mikrodalga spektroskopisi ile elde edilen değerler karşılaştırılmıştır [24].

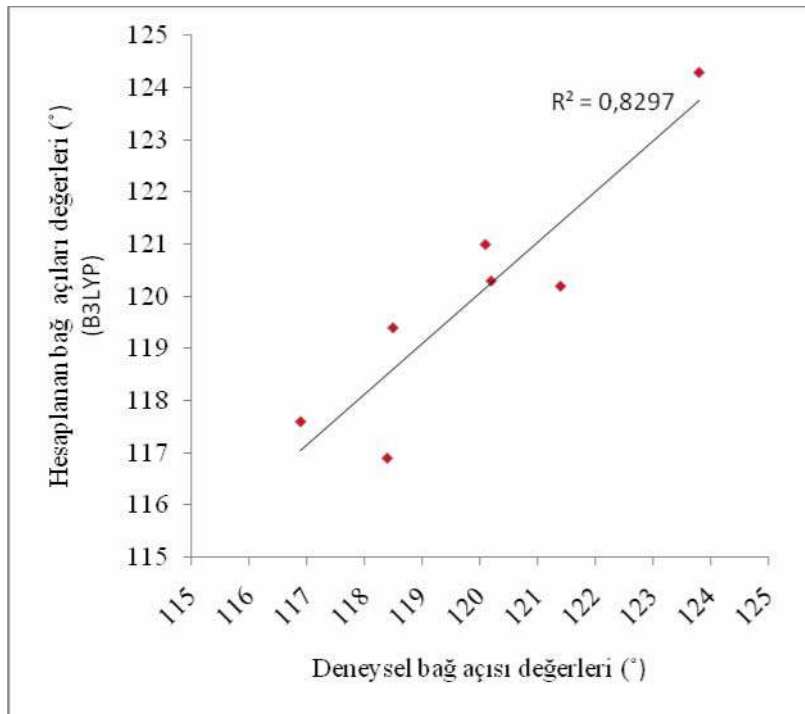
Piridin molekülünün gaz fazda mikrodalga spektroskopisi ile belirlenen C_4-C_5 bağ uzunluğu 1,394 Å, C_2-N_{19} bağ uzunluğu 1,338 Å, C_5-H_{14} bağ uzunluğu 1,083 Å, C_2-H_{11} bağ uzunluğu 1,087 Å dır. Bu çalışmada C_4-C_5 bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,390 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,389 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,386 Å, HF/ dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,383 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,382 Å'dur. C_2-N_{19} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,334 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,332 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,328 Å, HF/dgdzvp metod ve

baz seti eşliğinde 1,320 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,318 Å'dur. C_5-H_{14} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,085 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,086 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,084 Å, HF/ dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,075 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,076 Å'dur. C_2-H_{11} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,086 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,088 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,086 Å, HF/ dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,076 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,076 Å'dur.

Hesaplanan değerlerle deneysel verilerin uygunluğu kriterleri daha önce belirtilmiştir [27]. Buna göre bu çalışmada kullanılan bütün metod ve baz setlerinin deneysel verilerle uyum içinde olduğu belirlenmiştir. Bu metod ve baz setlerinden deneysel verilerle en iyi uyum sağlayan metod ve baz setinin B3LYP/6-311+g(d,p) olduğu belirlenmiştir. Şekil 5.24'da 3,3'-bpy molekülünün B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz setinde hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu, Şekil 5.25'de 3,3'-bpy molekülünün B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz setinde hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu verilmiştir.



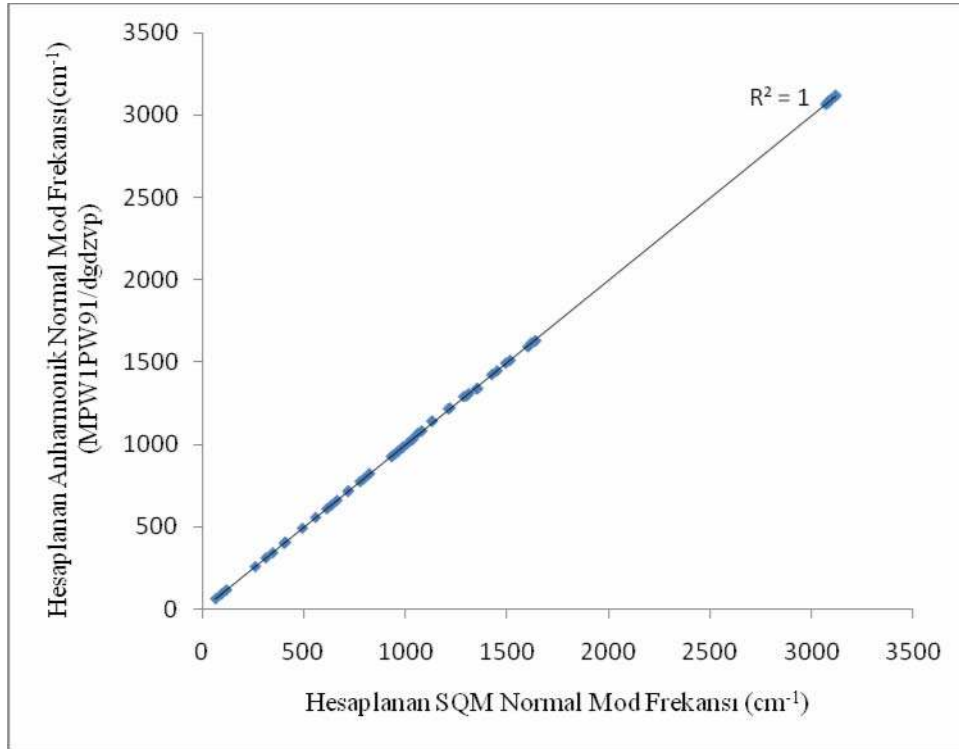
Şekil 5.24. 3,3'-bpy molekülünün hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu



Şekil 5.25. 3,3'-bpy molekülünün hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu

Bu çalışmada 3,3'-bpy molekülü için yapı parametreleri için kullanılan metodlar ve baz seti eşliğinde harmonik titreşimler hesaplanmıştır. Anharmonik titreşimler MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanmıştır. Literatürde 3,3'-bpy molekülünün deneysel ölçüm sonuçları mevcut değildir. Hesaplanan harmonik ve anharmonik frekans değerleri EK-17'de mevcuttur.

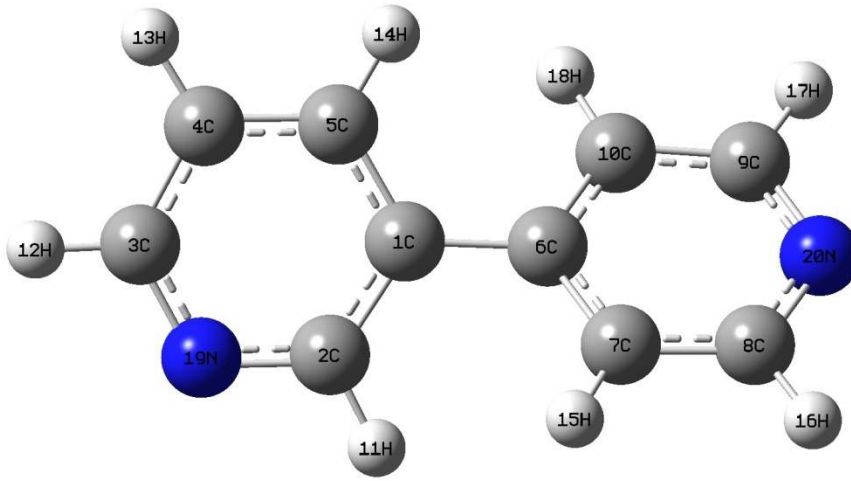
3,3'-bpy molekülü için MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik titreşim frekansları kullanılarak SQM programı yardımıyla TED dağılımları hesaplanıp, EK-18'de verilmiştir. 3,3'-bpy molekülü için SQM sonucunda RMS değeri 4,75 bulunmuştur. Şekil 5.26'de 3,3'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının, hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu verilmiştir.



Şekil 5.26. 3,3'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu

5.9. 3,4'-Bipiridin Molekülünün Yapı ve Titreşim Parametrelerinin İncelenmesi

3,4'-bipiridin (3,4'-bpy) molekülü C,H,N atomlarından oluşan $C_{10}H_8N_2$ kapalı formülüne sahip organik bir moleküldür (Şekil 5.27). Literatürde 3,4'-bpy molekülü için gaz fazında deneysel veriler mevcut olmadığından piridin molekülünün deney sonuçları referans alınacaktır. Piridin molekülünün yapısı 3,4'-bpy molekülüne benzemektedir.



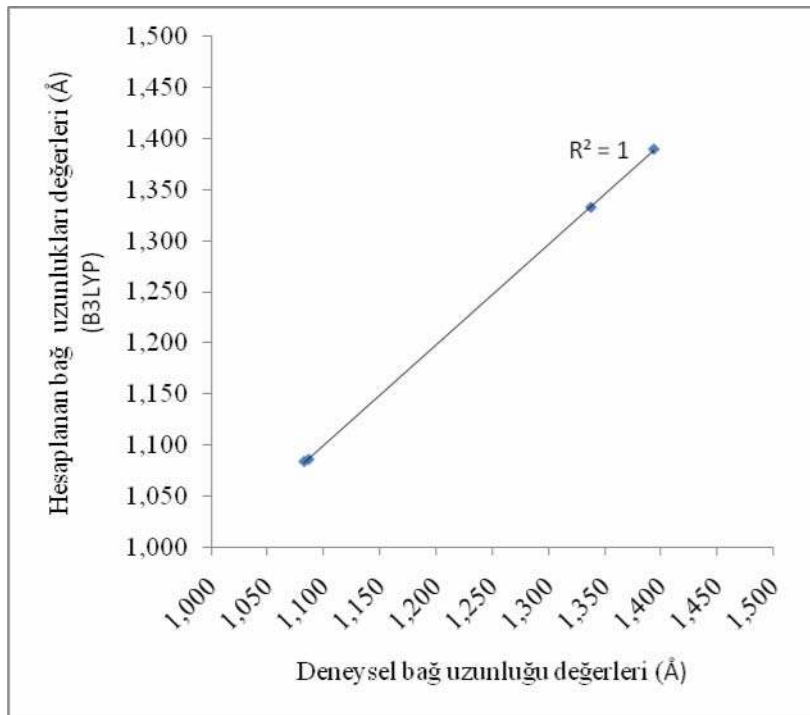
Şekil 5.27. 3,4'-bpy molekülünün yapısı

Bu bölümde 3,4'-bpy molekülünün yapı ve titreşim parametreleri ile ilgili deney ve hesaplama sonuçları karşılaştırmalı olarak sunulacaktır. EK-19'de 3,4'-bpy molekülünün yapı parametreleri J. A. Creighton tarafından gaz fazda mikrodalga spektroskopisi ile elde edilen değerler karşılaştırılmıştır [24].

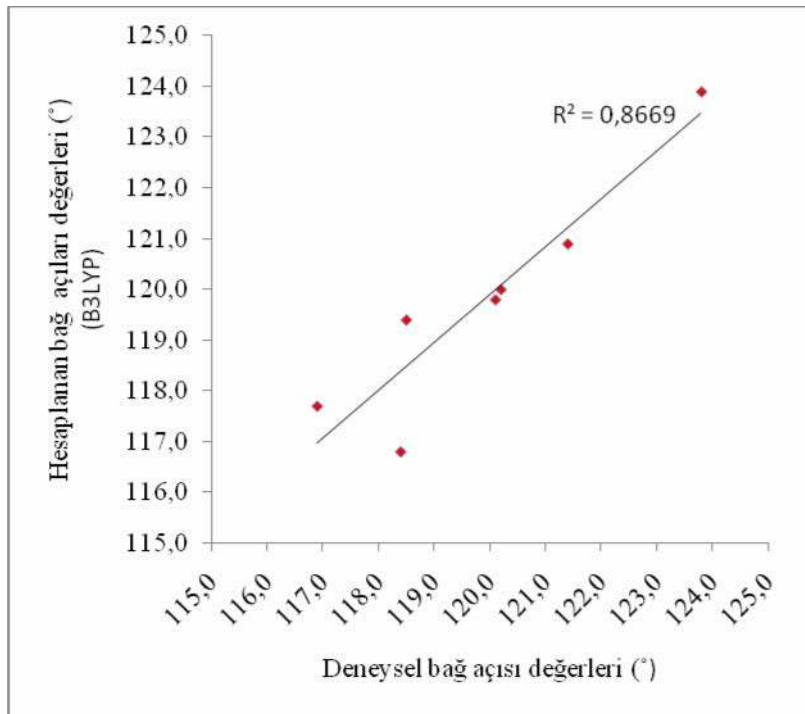
Pridin molekülünün gaz fazda mikrodalga spektroskopisi ile belirlenen C_4-C_5 bağ uzunluğu 1,394 Å, C_2-N_{19} bağ uzunluğu 1,338 Å, C_5-H_{14} bağ uzunluğu 1,083 Å, C_2-H_{11} bağ uzunluğu 1,087 Å'dır. Bu çalışmada C_4-C_5 bağ uzunluğu B3LYP / 6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,390 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,389 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,386 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,383 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,382 Å'dur. C_2-N_{19} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,333 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,331 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,328 Å, HF/ dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,319 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,318 Å'dur. C_5-H_{14} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,084 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,086 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,084 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,075 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,075 Å'dur. C_2-

H_{11} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,086 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,088 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,086 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,076 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,076 Å'dur.

Bu çalışmada kullanılan bütün metod ve baz setlerinin deneysel verilerle uyum içinde olduğu belirlenmiştir [27]. Bu metod ve baz setlerinden deneysel verilerle en iyi uyum sağlayan metod ve baz setinin B3LYP/6-311+g(d,p) olduğu belirlenmiştir. Şekil 5.28'de 3,4'-bpy molekülünün B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz setinde hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu, Şekil 5.29'de 3,4'-bpy molekülünün B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz setinde hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu verilmiştir.



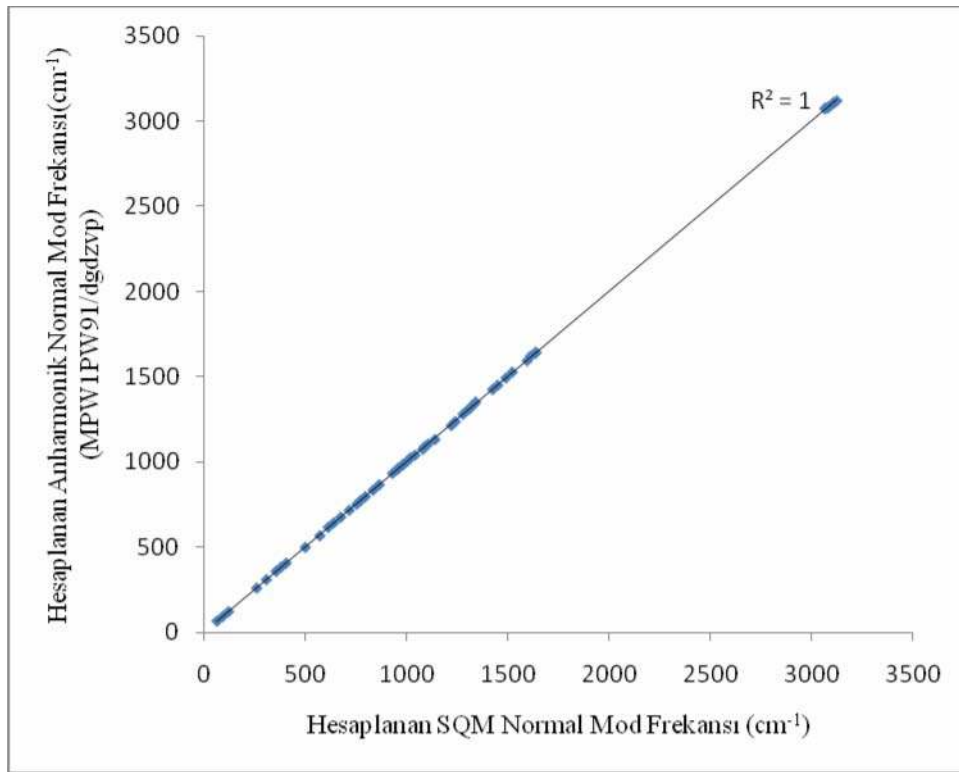
Şekil 5.28. 3,4'-bpy molekülünün hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu



Şekil 5.29. 3,4'-bpy molekülünün hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu

Bu çalışmada 3,4'-bpy molekülü için yapı parametreleri için kullanılan metodlar ve baz seti eşliğinde harmonik titreşimler hesaplanmıştır. Anharmonik titreşimler MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanmıştır. Literatürde 3,4'-bpy molekülünün IR ve Raman spektrumları deneysel ölçüm sonuçları mevcut değildir. Hesaplanan harmonik ve anharmonik frekans değerleri EK-20'de mevcuttur.

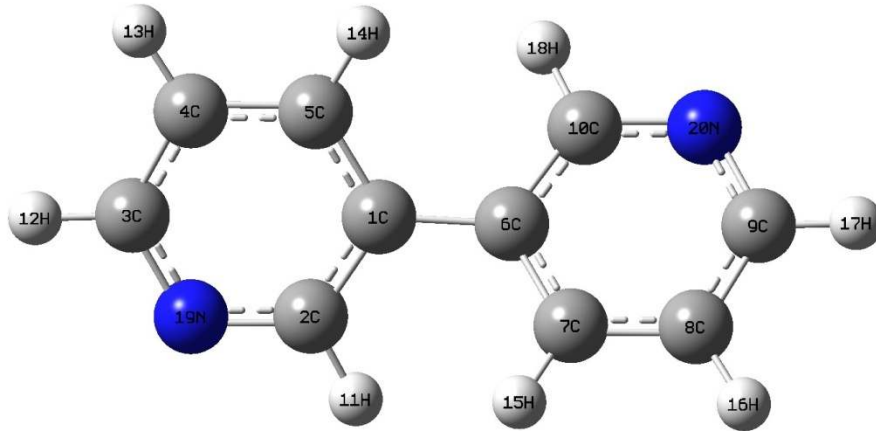
3,4'-bpy molekülü için MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik titreşim frekansları kullanılarak SQM programı yardımıyla TED dağılımları hesaplanıp, EK-21'de verilmiştir. 3,4'-bpy molekülü için SQM sonucunda RMS değeri 3,81 bulunmuştur. Şekil 5.30'de 3,4'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının, hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu verilmiştir.



Şekil 5.30. 3,4'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu

5.10. 3,5'-Bipiridin Molekülünün Yapı ve Titreşim Parametrelerinin İncelenmesi

3,5'-bipiridin (3,5'-bpy) molekülü $C_8H_6N_2$ atomlarından oluşan $C_{10}H_8N_2$ kapalı formülüne sahip organik bir moleküldür (Şekil 5.31). 3,5'-bpy molekülü, 3,3'-bpy molekülünün *trans* izomeridir. Literatürde 3,5'-bpy molekülü için gaz fazında deneysel veriler mevcut olmadığından piridin molekülünün deney sonuçları referans alınacaktır [24]. Piridin molekülünün yapısı 3,5'-bpy molekülüne benzemektedir.



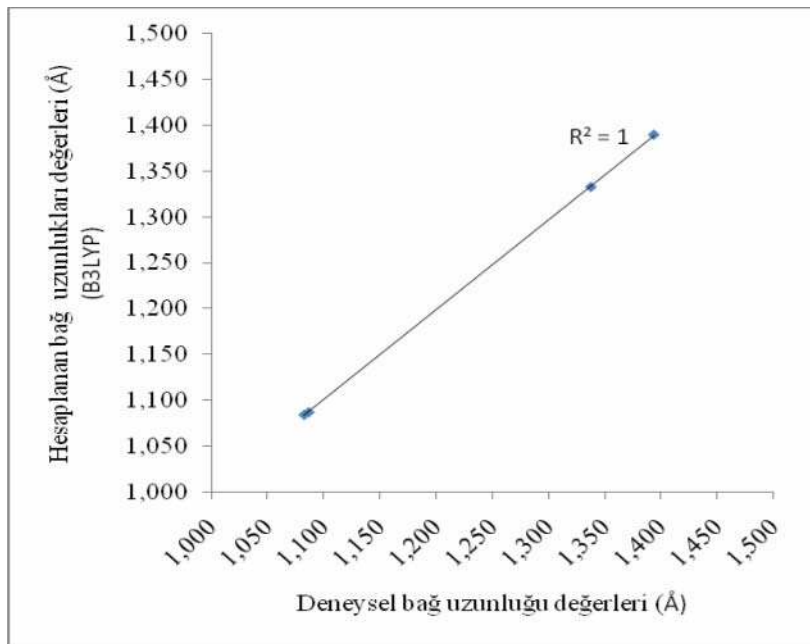
Şekil 5.31. 3,5'-bpy molekülünün yapısı

Bu bölümde 3,5'-bpy molekülünün yapı ve titreşim parametreleri ile ilgili deney ve hesaplama sonuçları karşılaştırmalı olarak sunulacaktır. EK-22'de 3,5'-bpy molekülünün yapı parametreleri J. A. Creighton tarafından gaz fazda mikrodalga spektroskopisi ile elde edilen değerler karşılaştırılmıştır [24].

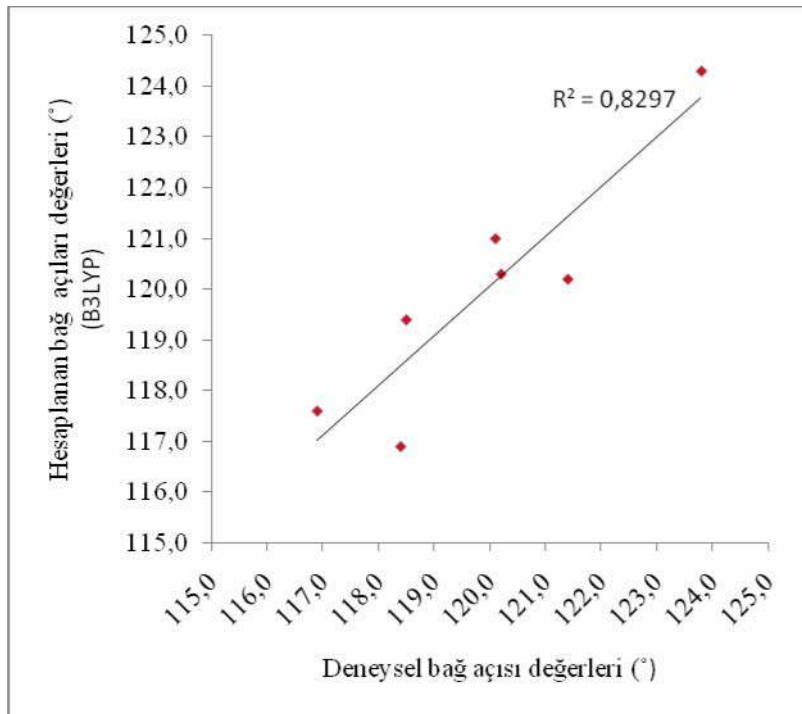
Pridin molekülünün gaz fazda mikrodalga spektroskopisi ile belirlenen C_4-C_5 bağ uzunluğu 1,394 Å, C_2-N_{19} bağ uzunluğu 1,338 Å, C_5-H_{14} bağ uzunluğu 1,083 Å, C_2-H_{11} bağ uzunluğu 1,087 Å'dır. Bu çalışmada C_4-C_5 bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,390 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,389 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,386 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,383 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,382 Å'dır. C_2-N_{19} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,333 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,331 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,328 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,319 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,318 Å'dır. C_5-H_{14} bağ uzunluğu B3LYP / 6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,084 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,086 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,084 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,075 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,076 Å'dır. C_2-H_{11} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,087 Å,

MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,088 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,087 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,076 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,077 Å'dur.

Bu çalışmada kullanılan bütün metod ve baz setlerinin deneysel verilerle uyum içinde olduğu belirlenmiştir [27]. Bu metod ve baz setlerinden deneysel verilerle en iyi uyum sağlayan metod ve baz setinin B3LYP/6-311+g(d,p) olduğu belirlenmiştir. Şekil 5.32'de 3,5'-bpy molekülünün B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz setinde hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu, Şekil 5.33'de 3,5'-bpy molekülünün B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz setinde hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu verilmiştir.



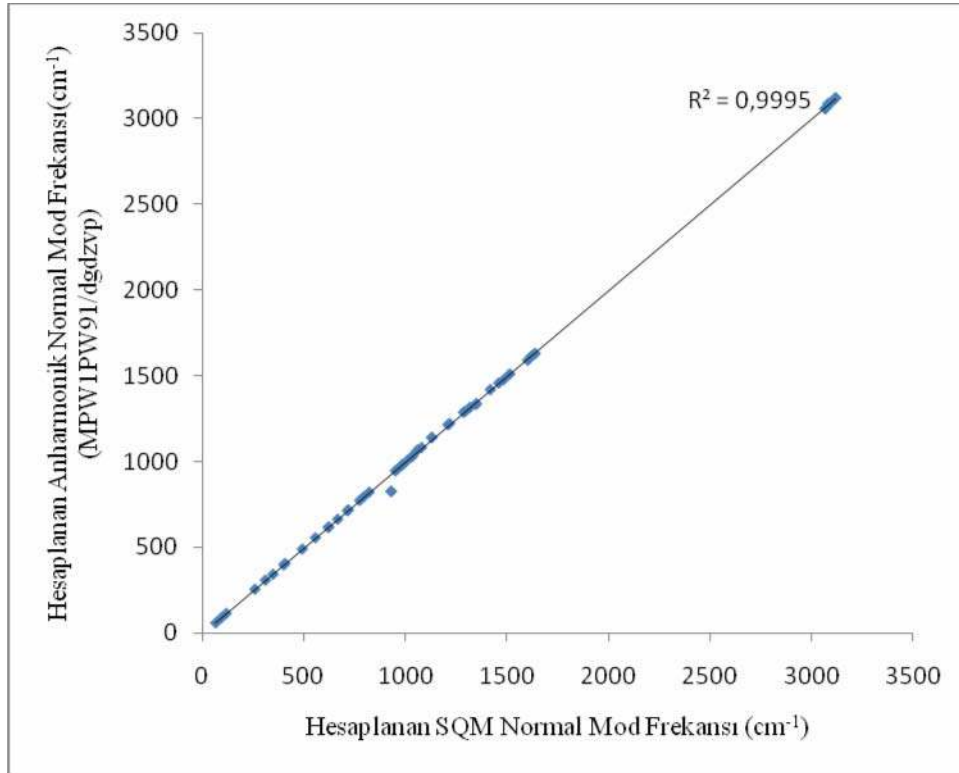
Şekil 5.32. 3,5'-bpy molekülünün hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu



Şekil 5.33. 3,5'-bpy molekülünün hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu

Bu çalışmada 3,5'-bpy molekülü için yapı parametreleri için kullanılan metodlar ve baz seti eşliğinde harmonik titreşimler hesaplanmıştır. Anharmonik titreşimler MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanmıştır. Literatürde 3,5'-bpy molekülünün IR ve Raman spektrumları deneysel ölçüm sonuçları mevcut değildir. Hesaplanan harmonik ve anharmonik frekans değerleri EK-23'da mevcuttur.

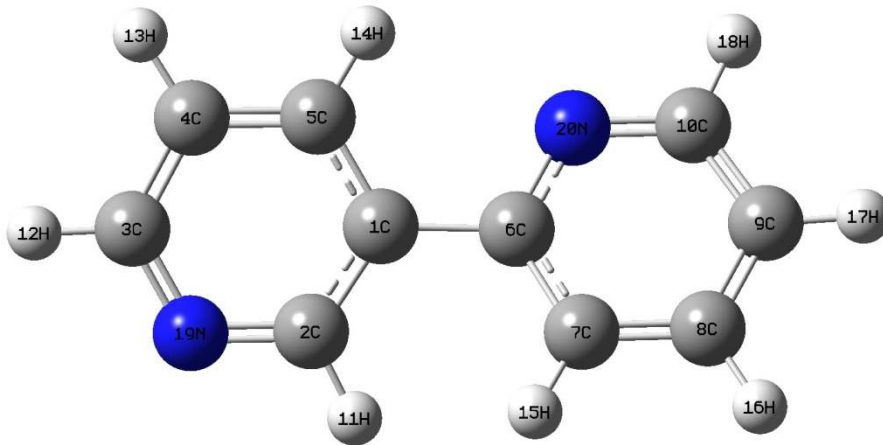
3,5'-bpy molekülü için MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik titreşim frekansları kullanılarak SQM programı yardımıyla TED dağılımları hesaplanıp, EK-24'de verilmiştir. 3,5'-bpy molekülü için SQM sonucunda RMS değeri 5,02 bulunmuştur. Şekil 5.34'de 3,5'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının, hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu verilmiştir.



Şekil 5.34. 3,5'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu

5.11. 3,6'-Bipiridin Molekülünün Yapı ve Titreşim Parametrelerinin İncelenmesi

3,6'-bipiridin (3,6'-bpy) molekülü $C_8H_6N_2$ atomlarından oluşan $C_{10}H_8N_2$ kapalı formülüne sahip organik bir moleküldür (Şekil 5.35). Literatürde 3,6'-bpy molekülü için gaz fazında deneysel veriler mevcut olmadığından piridin molekülünün deney sonuçları referans alınacaktır [24]. Piridin molekülünün yapısı 3,6'-bpy molekülüne benzemektedir.



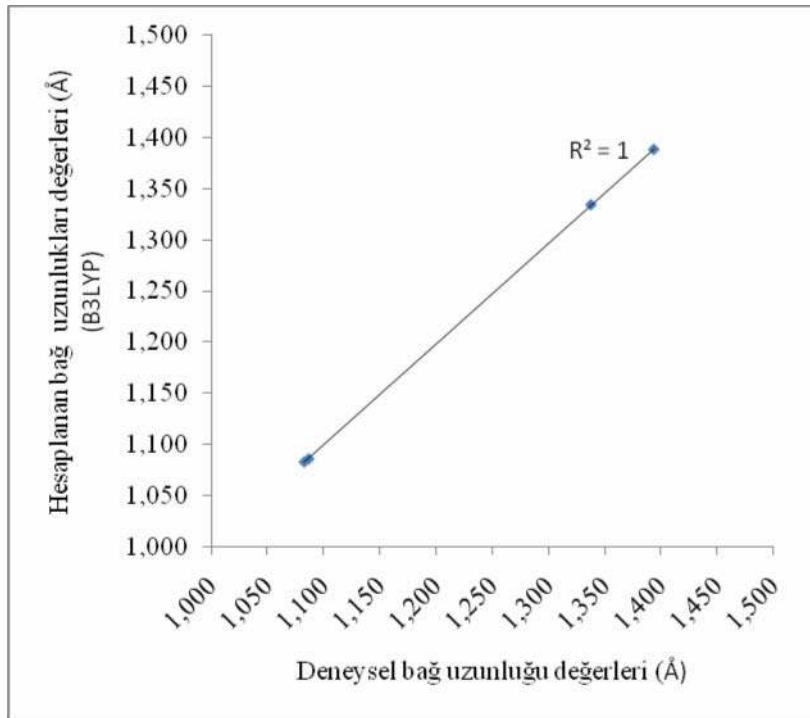
Şekil 5.35. 3,6'-bpy molekülünün yapısı

Bu bölümde 3,6'-bpy molekülünün yapı ve titreşim parametreleri ile ilgili deney ve hesaplama sonuçları karşılaştırmalı olarak sunulacaktır. EK-25'da 3,6'-bpy molekülünün yapı parametreleri J. A. Creighton tarafından gaz fazda mikrodalga spektroskopisi ile elde edilen değerler karşılaştırılmıştır [24].

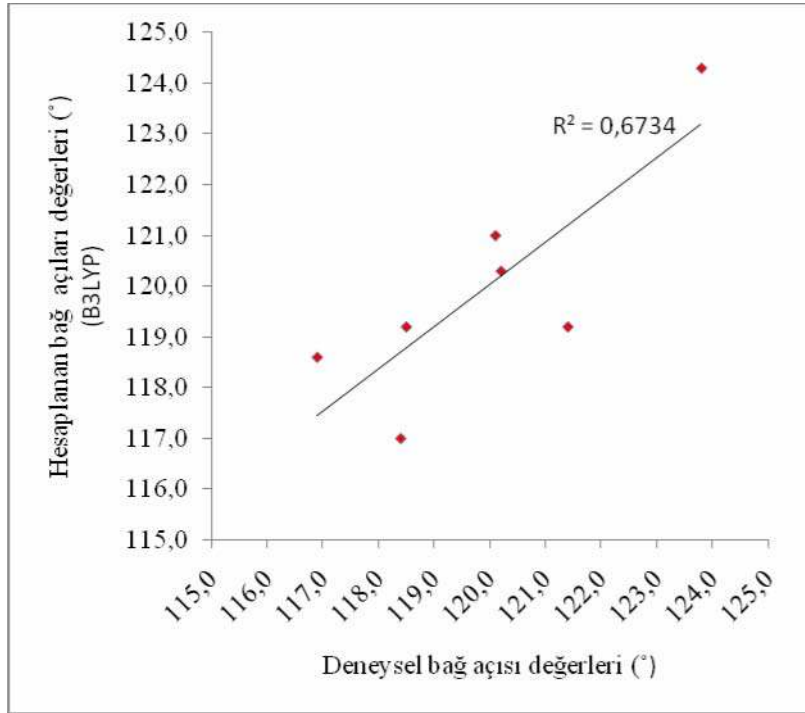
Pridin molekülünün gaz fazda mikrodalga spektroskopisi ile belirlenen C_4-C_5 bağ uzunluğu 1,394 Å, C_2-N_{19} bağ uzunluğu 1,338 Å, C_5-H_{14} bağ uzunluğu 1,083 Å, C_2-H_{11} bağ uzunluğu 1,087 Å'dır. Bu çalışmada C_4-C_5 bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,388 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,388 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,384 Å, HF/ dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,381 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,380 Å'dur. C_2-N_{19} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,334 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,333 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,329 Å, HF/ dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,321 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,319 Å'dur. C_5-H_{14} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,083 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,084 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,083 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,073 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,073 Å'dur. C_2-

H_{11} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,086 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,088 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,086 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,075 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,076 Å'dur.

Hesaplanan değerlerle deneysel verilerin uygunluğu kriterleri daha önce belirtilmiştir [27]. Buna göre bu çalışmada kullanılan bütün metod ve baz setlerinin deneysel verilerle uyum içinde olduğu belirlenmiştir. Bu metod ve baz setlerinden deneysel verilerle en iyi uyum sağlayan metod ve baz setinin B3LYP/6-311+g(d,p) olduğu belirlenmiştir. Şekil 5.36'da 3,6'-bpy molekülünün B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz setinde hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu, Şekil 5.37'de 3,6'-bpy molekülünün B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz setinde hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu verilmiştir.



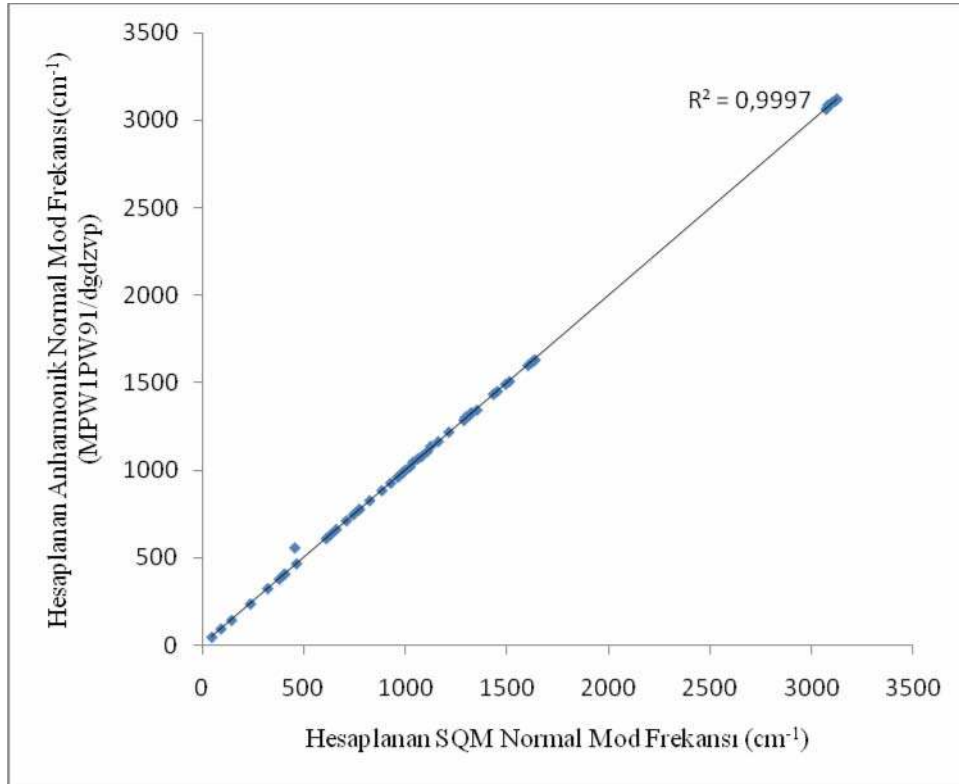
Şekil 5.36. 3,6'-bpy molekülünün hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu



Şekil 5.37. 3,6'-bpy molekülünün hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu

Bu çalışmada 3,6'-bpy molekülü için yapı parametreleri için kullanılan metodlar ve baz seti eşliğinde harmonik titreşimler hesaplanmıştır. Anharmonik titreşimler MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanmıştır. Literatürde 3,6'-bpy molekülünün IR ve Raman spektrumları deneysel ölçüm sonuçları mevcut değildir. Hesaplanan harmonik ve anharmonik frekans değerleri EK-26'de mevcuttur.

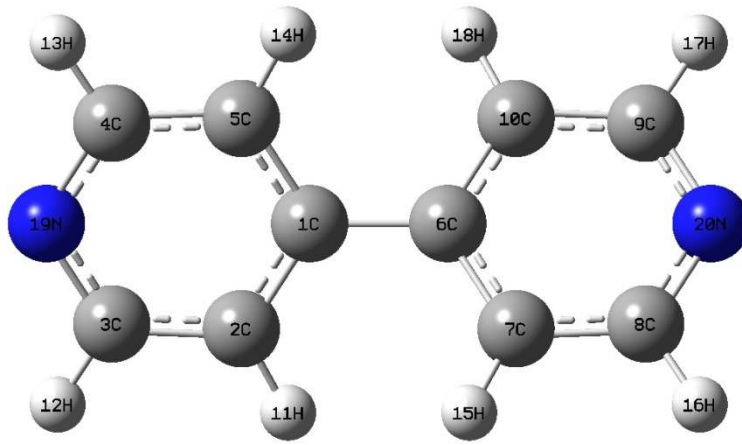
3,6'-bpy molekülü için MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik titreşim frekansları kullanılarak SQM programı yardımıyla TED dağılımları hesaplanıp, EK-27'de verilmiştir. 3,6'-bpy molekülü için SQM sonucunda RMS değeri 4,19 bulunmuştur. Şekil 5.38'de 3,6'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının, hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu verilmiştir.



Şekil 5.38. 3,6'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu

5.12. 4,4'-Bipiridin Molekülünün Yapı ve Titreşim Parametrelerinin İncelenmesi

4,4'-bipiridin (4,4'-bpy) molekülü C,H,N atomlarından oluşan $C_{10}H_8N_2$ kapalı formülüne sahip organik bir moleküldür (Şekil 5.39). 4,4'-bpy molekülü yapısı ile ilgili gaz fazında elektron difraksiyon metodu ile elde edilen deneysel veriler mevcuttur [29].



Şekil 5.39. 4,4'-bpy molekülünün yapısı

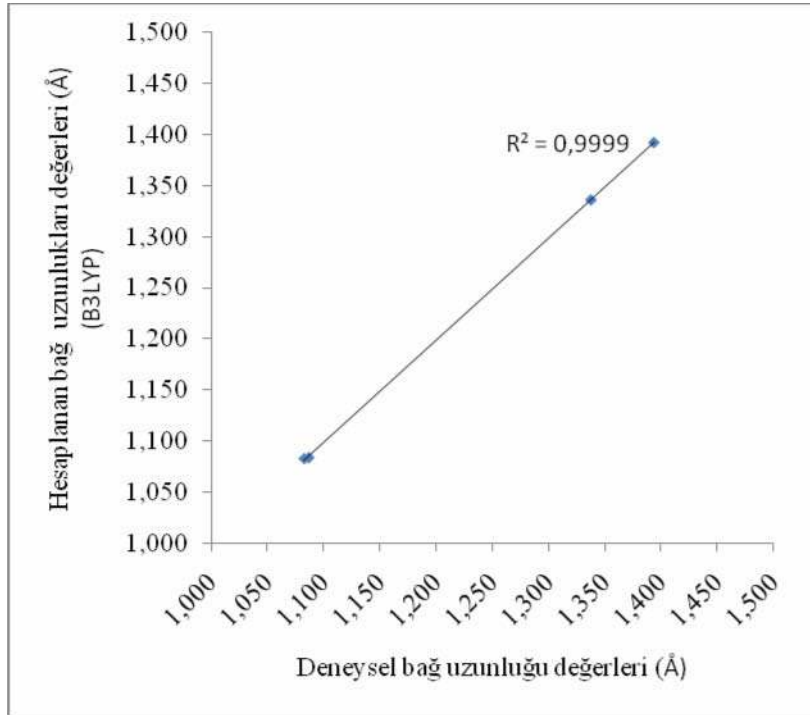
Bu bölümde 4,4'-bpy molekülünün yapı ve titreşim parametreleri ile ilgili deney ve hesaplama sonuçları karşılaştırmalı olarak sunulacaktır. EK-28'da 4,4'-bpy molekülünün yapı parametreleri G. Xue ve ark. ve J. A. Creighton tarafından gaz fazda mikrodalga spektroskopisi ile elde edilen değerler karşılaştırılmıştır [29,24].

4,4'-bpy molekülünün gaz fazında elektron difraksiyon metodu ile G. Xue ve ark. tarafından belirlenen $C_1 - C_6$ bağ uzunluğu 1,470 Å'dur [29]. Bu çalışmada $C_1 - C_6$ bağ uzunluğu B3LYP / 6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,483 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,479 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,477 Å, HF/ dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,489 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,489 Å'dur.

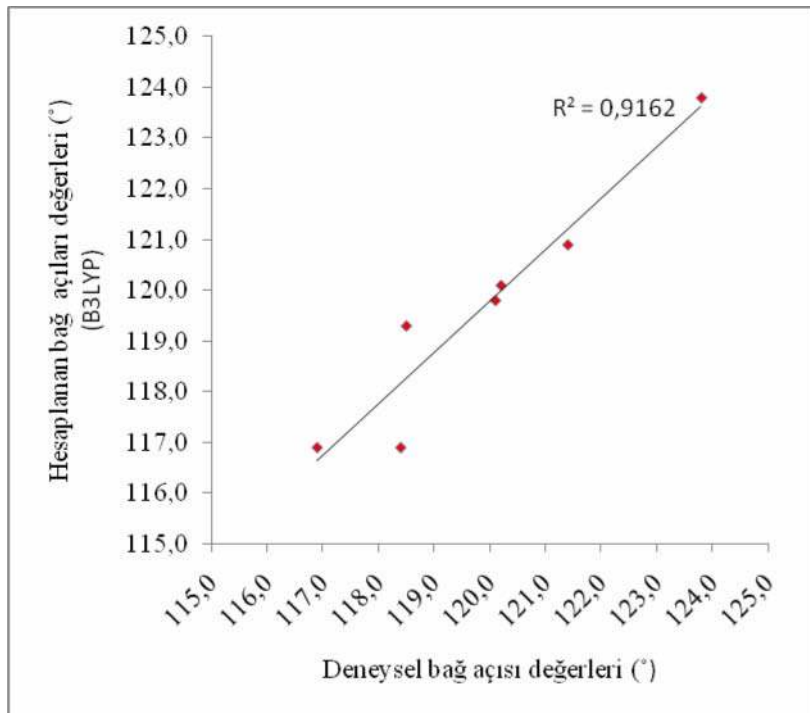
Pridin molekülünün gaz fazda mikrodalga spektroskopisi ile J. A. Creighton tarafından belirlenen $C_4 - C_5$ bağ uzunluğu 1,394 Å, $C_3 - N_{19}$ bağ uzunluğu 1,338 Å, $C_5 - H_{14}$ bağ uzunluğu 1,083 Å, $C_2 - H_{11}$ bağ uzunluğu 1,087 Å dır [24]. Bu çalışmada $C_4 - C_5$ bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,392 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,392 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,388 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,384 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,385 Å'dur. $C_3 -$

N_{19} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,336 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,336 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,331 Å, HF/ dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,321 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,319 Å'dur. C_5-H_{14} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,083 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,085 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,083 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,074 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,074 Å'dur. C_2-H_{11} bağ uzunluğu B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,084 Å, MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,085 Å, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,083 Å, HF/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde 1,074 Å, HF/6-311+g(d,p) metod ve baz seti eşliğinde 1,074 Å'dur.

Hesaplanan değerlerle deneysel verilerin uygunluğu kriterleri daha önce belirtilmiştir [27]. Buna göre bu çalışmada kullanılan bütün metod ve baz setlerinin deneysel verilerle uyum içinde olduğu belirlenmiştir. Şekil 5.40'de 4,4'-bpy molekülünün B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz setinde hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu, Şekil 5.41'de 4,4'-bpy molekülünün B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz setinde hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu verilmiştir.



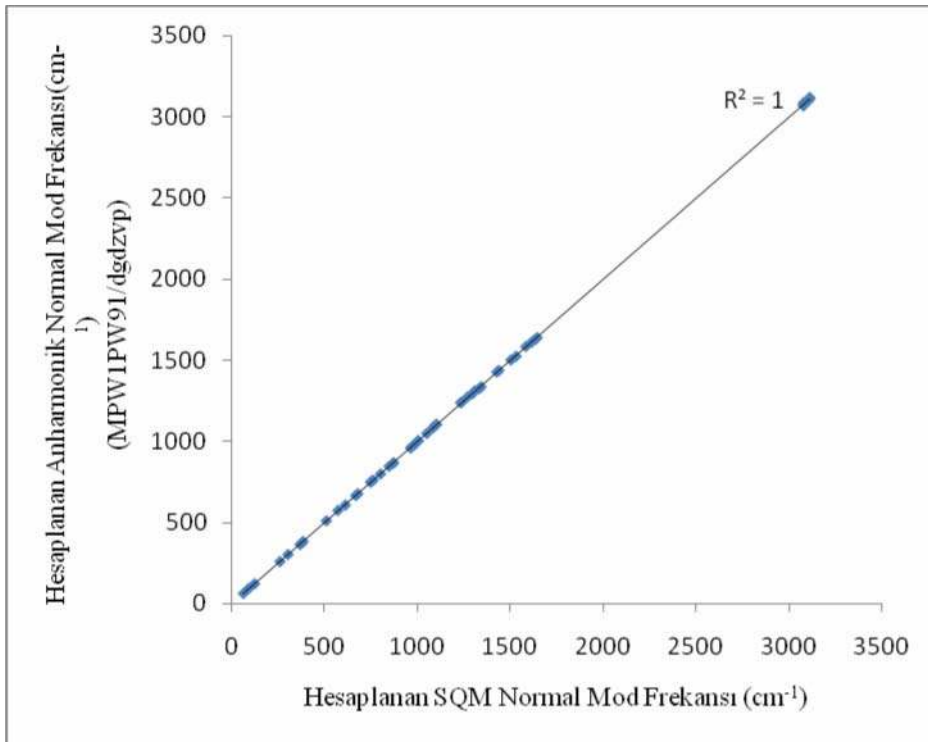
Şekil 5.40. 4,4'-bpy molekülünün hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel değerlere karşı korelasyonu



Şekil 5.41. 4,4'-bpy molekülünün hesaplanan bağ açılarının deneysel değerlere karşı korelasyonu

Bu çalışmada 4,4'-bpy molekülü için yapı parametreleri için kullanılan metodlar ve baz seti eşliğinde harmonik titreşimler hesaplanmıştır. Anharmonik titreşimler MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanmıştır. Literatürde 4,4'-bpy molekülünün IR ve Raman spektrumları L. Ould-Moussa ve ark. tarafından yapılmış deneysel ölçüm sonuçları mevcuttur [30]. Hesaplanan harmonik ve anharmonik frekans değerleri EK-29'da karşılaştırmalı olarak mevcuttur.

4,4'-bpy molekülü için MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik titreşim frekansları kullanılarak SQM programı yardımıyla TED dağılımları hesaplanıp, EK-30'de verilmiştir. 4,4'-bpy molekülü için SQM sonucunda RMS değeri 3,64 bulunmuştur. Şekil 5.42'da 4,4'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının, hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu verilmiştir.



Şekil 5.42. 4,4'-bpy molekülünün MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde hesaplanan anharmonik frekanslarının hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu

6. YORUM VE ÖNERİLER

Bu çalışma 2,2'-bpy, 2,3'-bpy, 2,4'-bpy, 2,5'-bpy, 2,6'-bpy, 3,3'-bpy, 3,4'-bpy, 3,5'-bpy, 3,6'-bpy, 4,4'-bpy molekülleri için teorik olarak tamamlanmıştır. Bu moleküllerin teorik olarak yapısal parametreleri ve harmonik titreşim frekansları B3LYP/6-311+g(d,p), MPW1PW91/dgdzvp, MPW1PW91/6-311+g(d,p), HF/dgdzvp, HF/6-311+g(d,p) metotları ve temel setleri kullanılarak, anharmonik titreşim frekansları ise MPW1PW91/dgdzvp metodu ile hesaplanmıştır.

Bu çalışmada gerçekleştirdiğimiz yapısal parametrelerin teorik hesaplamaları;

- ✓ 2,2'-bpy ve 2,6'-bpy moleküllerinin yapı parametreleri Merritt ve ark. tarafından X ışını difraksiyon metodu ile elde edilen değerleriyle [26],
- ✓ 2,3'-bpy, 2,4'-bpy, 2,5'-bpy, 3,3'-bpy, 3,4'-bpy, 3,5'-bpy, 3,6'-bpy moleküllerinin yapı parametreleri gaz fazda mikrodalga spektroskopisi ile J.A. Creighton tarafından belirlenen değerlerle [24],
- ✓ 4,4'-bpy molekülünün yapı parametreleri G. Xue ve ark. ve J. A. Creighton tarafından gaz fazda mikrodalga spektroskopisi ile elde edilen değerler [29,24]

karşılaştırıldığında Gaussian 03 view ile ilgili “Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods” kitabına göre “Hesaplanan bağ uzunluğu değerleri ile deneysel (gaz fazı) değerler, 0,01-0,02 Å değerleri arasında veya 0,01 Å değerinden daha küçük olarak uyum sağlıyorsa netice doğru sayılır.” bilgisine dayalı olarak uyum göstermektedir [27].

Piridin molekülünün C,H,N atomlarından oluşan düzlemsel bir molekül olması nedeniyle yapısı 2,2'-bpy, 2,3'-bpy, 2,4'-bpy, 2,5'-bpy, 2,6'-bpy, 3,3'-bpy, 3,4'-bpy, 3,5'-bpy, 3,6'-bpy, 4,4'-bpy moleküllerine benzemektedir. Bu yüzden Piridin

molekülü için deneysel verilere en yakın değerleri veren B3LYP/6-311+g(d,p) MPW1PW91/dgdzvp, MPW1PW91/6-311+g(d,p) , HF/dgdzvp, HF/6-311+g(d,p) metotları ve temel setleri kullanılarak hesaplamalar yapıldı. Piridin molekülünün B3LYP/6-311+g(d,p) metod baz seti kullanılarak hesaplanan yapı ve titreşimleri Wu De-yin ve ark. tarafından deneysel olarak ölçülen değerlerle oldukça uyumlu olduğu görülmüştür [25]. Piridin için doğru olan metodların 2,2'-bpy, 2,3'-bpy , 2,4'-bpy , 2,5'-bpy , 2,6'-bpy, 3,3'-bpy, 3,4'-bpy, 3,5'-bpy, 3,6'-bpy, 4,4'-bpy molekülleri içinde deneysel verilerle uyum sağlayacağı düşünülerek bu metod ve temel setlerde hesaplama yapılmıştır. Bu moleküller içinde deneysel değerlere en yakın hesaplamaların B3LYP/6-311+g(d,p) metod ve baz seti olduğu görülmektedir.

EK-1-4-7-10-13-16-19-22-25-28'de görüldüğü gibi B3LYP/6-311+g(d,p), MPW1PW91/dgdzvp, MPW1PW91/6-311+g(d,p), HF/ dgdzvp, HF/6-311+g(d,p) metotları ve temel setlerinin yapı parametreleri birbirine oldukça yakındır. B3LYP ve MPW1PW91 metodları HF metoduna göre deneysel verilerle daha iyi uyum sağladığı görülmektedir.

MPW1PW91/dgdzvp ve MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve temel setleri kullanılarak yapılan hesaplamalar deneysel verilerle karşılaştırıldığında, MPW1PW91/dgdzvp metod ve temel setinde hesaplanan yapı parametrelerinin, MPW1PW91/6-311+g(d,p) metod ve temel setinde hesaplanan yapı parametrelerine göre deneysel verilerle daha iyi uyum sağladığı görülmektedir.

HF/dgdzvp ve HF/6-311+g(d,p) metod ve temel setleri kullanılarak yapılan hesaplamalar deneysel verilerle karşılaştırıldığında, HF/dgdzvp metod ve temel setinde hesaplanan yapı parametrelerinin, HF/6-311+g(d,p) metod ve temel setinde hesaplanan yapı parametrelerine göre deneysel verilerle daha iyi uyum sağladığı görülmektedir.

Her moleküle ait hesaplanan bağ uzunluklarının deneysel verilerle korelasyonu Şekil 5.4-8-12-16-20-24-28-32-36-40 'da verilmiştir. Korelasyonlarda görüldüğü gibi bağ uzunlukları deneysel verilerle çok iyi derecede uyum sağlamıştır.

Her moleküle ait hesaplanan bağ açılarının deneysel verilerle korelasyonu Şekil 5.5-9-13-17-21-25-29-33-37-41'de verilmiştir. Korelasyonlarda görüldüğü gibi bağ açılarının deneysel verilere uyumu bağ uzunluklarındaki kadar başarılı değildir.

EK-2-5-8-11-14-17-20-23-26-29'da görüldüğü gibi B3LYP, MPW1PW91 ve HF metotları ile elde edilen harmonik frekans değerleri yapı parametrelerinde olduğu gibi birbirlerine yakın değildir. HF'dan DFT'ye geçildiğinde harmonik frekans değerleri anharmonik frekans değerlerine (deneysel değerlere) yaklaşmaktadır. Bunun nedeni DFT metodunda HF'a göre elektron korelasyonun var olmasıdır. Elektron korelasyonunun yapı parametreleri üzerinde etkili olmadığı, frekans değerleri üzerinde etkili olduğu görülmektedir.

EK-2-5-8-11-14-17-20-23-26-29'da görüldüğü gibi anharmonik frekans hesaplamalarını harmonik frekans hesaplamalarıyla karşılaştırsak anharmonik frekans değerlerinin deneysel değerlere daha yakın olduğunu görmekteyiz.

EK-3.-9-12-15-18-21-24-27-30'da görüldüğü gibi anharmonik frekans hesaplamalarını SQM hesaplamaları ile karşılaştırsak SQM metodu ile hesaplanan düşük frekans değerlerinin deneysel değerlere çok yakın olduğunu görmekteyiz. Bu sonuçlardan anharmonik frekans hesaplamalarının tam olarak yerine oturmadığı ve düşük frekansların daha doğru tahmin edilebilmesi için anharmonik frekans programında bazı düzeltmelerin gerektiği görülmektedir. SQM metodu hala iyi bir metot olarak geçerliliğini korumaktadır.

Her moleküle ait MPW1PW91/dgdzvp metod ve baz seti eşliğinde anharmonik frekanslarının hesaplanan SQM frekanslarına göre korelasyonu Şekil 5.6-10-14-18-22-26-30-34-38-42' da verilmiştir. Korelasyonlarda görüldüğü gibi anharmonik frekans değerleriyle SQM frekans değerleri çok iyi derecede uyum sağlamıştır.

RMS değeri 2,2'-bpy molekülü için 3,60, 2,3'-bpy molekülü için 3,76, 2,4'-bpy molekülü için 3,53, 2,5'-bpy molekülü için 4,36, 2,6'-bpy molekülü için 3,76, 3,3'-bpy molekülü için 4,75, 3,4'-bpy molekülü için 3,81, 3,5'-bpy molekülü için 5,02, 3,6'-bpy molekülü için 4,19, 4,4'-bpy molekülü için 3,64 olarak bulunmuştur. RMS değeri ne kadar küçükse (<10) hesaplama o kadar başarılı demektir.

KAYNAKLAR

1. Woodward, L. A., "Introduction to the Theory and Molecular Vibration Spectroscopy", **Oxford University Press**, New York, 192-270 (1972).
2. Whiffen, D. H., "Spectroscopy", **Longman**, London, 3-175 (1971).
3. Bransden, B. H., Joachim, C. J., "Physics of Atom and Molecules", **Logman**, London, 386-505 (1983).
4. Banwell, C. N., "Fundamentals of Molecular Spectroscopy", **Mc Graw- Hill**, London, 72 -210 (1983).
5. Nakamoto, K., "Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds", 5th ed., **Wiley**, New York, 51 -179 (1997).
6. Chang, R., "Basic Principles of Spectroscopy", **Mc Graw-Hill**, New York, 221-245 (1971).
7. Bransden, B. H., Joachim, C. J., "Atom ve Molekül Fiziği", Ed. Köksal, F., Gümüş, H., **Bilim Yayıncılık**, Samsun, 389 – 426 (1998).
8. Cotton, F. A., "Chemical Applications of Group Theory", 2th ed., **Wiley**, London, 128-151 (1971).
9. Banwell, C. N., "Fundamentals of Molecular Spectroscopy", 3th ed., **McGraw Hill**, London, 65-119 (1983).
10. Cook, D. B., "Ab-initio Valence Calculations in Chemistry", **John Wiley and Sons Inc.**, New York, 56-211 (1974).
11. Pulay, P., "Analytical Derivative Methods in Quantum Chemistry, Ab initio Methods in Quantum Chemistry", Ed. Lawley, K. P., **John Wiley and Sons Ltd**, New York, 118-143 (1987).
12. Jensen, F., "Introduction to Computational Chemistry", **John Wiley & Sons Ltd**, New York, 120-150 (1999).
13. Pulay, P., "Ab initio calculation of force constants and equilibrium geometries in polyatomic molecules", **Mol. Phys.**, 17:197 (1969).
14. Pulay, P., "Analytical Derivative Methods in Quantum Chemistry, Ab initio Methods in Quantum Chemistry", Ed. Lawley K. P., **John Wiley and Sons Ltd**, New York, 27-95 (1987).

15. Becke, A. D., "A new mixing of hartree-fock and local density functional theories", *J. Chem. Phys.*, 98:1372 (1993).
16. Lee, C., Yang, W., Parr, R.G., "Development of the colle-salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density", *Phys. Rev.*, 37:785 (1988).
17. Hohenberg, P., Kohn W., "Inhomogeneous electron gas", *Phys. Rev.*, 136(3B), 864-875 (1964).
18. Stewart, J., "Quantum chemistry program exchange catalog", *Indiana University*, Blumington, 14: 455-488 (1983).
19. Gill, P. M. W., "DFT, HF and self consistent field", Enc. Of Comp. Chemistry, *John Wiley & Sons Ltd.*, 65-87 (1996).
20. Becke, A. D., "Density Functional Thermochemistry. III. The role of exact Exchange", *J. Chem. Phys.*, 98: 5648-5660 (1993).
21. Adamo, C., Barone, V., "Exchange functional with improved long-range behavior and adiabatic connection methods without adjustable parameters: The MPW and MPW1PW models", *J. Chem. Phys.*, 108: 664 (1998).
22. Denk, M. K., Chem 7113 Advanced Main Group Chemistry Fall Term 2004 http://131.104.156.23/lectures/7113/7113_Computational.html, 01.06.2005., (2004).
23. Frisch, E., Dennington II, R. D., Keith, T. A., Nielsen, B. A., Holder, A. J., "Gauss View Reference", *Gaussian, Inc.*, U.S.A, (2003).
24. Creighton, J. A., "Surface Raman electromagnetic enhancement factors for molecules at the surface of small isolated metal spheres: the determination of adsorbate orientation from sers relative intensities", *Surf. Sci.*, 124: 209 (1983).
25. Wu, D., Ren, B., Jiang, Y., Xu, X., Tian, Z., "Density Functional Study and Normal-Mode analysis of the Binding and Vibrational Frequency Shifts of the PyridinM (M=Cu, Ag, Au, Cu⁺, Ag⁺, Au⁺, and Pt) Complexes," *J. Phys. Chem. A*, 106: 9042-9052 (2002).
26. Merrit, L. L., Schroeder, E. D., "The Crystal Structure of 2,2'-Bipyridine", *Acta Cryst.*, 9: 801-804 (1956).
27. Foresman, J.B., Frisch, E., "Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods", *Gaussian. Inc.*, Pittsburgh, PA, 118 (1996).

28. Ould-Moussa, L., Castella, M., Kassab, E., Poizat, O., Strommen, D. P., Kincaid J. R., "Ab initio and density functional study of the geometrical, electronic and vibrational properties of 2,2'-Bipyridine", *J. Raman Spectrosc.*, 31 :377-390 (2000).
29. Xue, G., Dong, J., Zhang, M., "Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS) and Surface-Enhanced Resonance Raman Scattering (SERRS) on HNO₃-Roughened Copper Foil", *Appl. Spectrosc.*, 45 :756-759 (1991).
30. Ould-Moussa, L., Castella, M., Kassab, E., Poizat, O., Buntinx, G., "Ab Initio Computations of the Geometrical, Electronic, and Vibrational Properties of the Ground State, the Anion Radical, and the N,N'-Dipydro Cation Radical of 4,4'-Bipyridine Compared to Transient Raman Spectra", *J. Phys. Chem.*, 100 :2072-2082 (1996).

EKLER

EK-1. 2,2'-bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF - 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deneysel[26]
Bağ uzunluğu (Å)						
C ₁ ,C ₅	1,401	1,400	1,397	1,390	1,391	1,410
C ₁ ,N ₁₉	1,340	1,338	1,334	1,321	1,323	
C ₂ ,C ₃	1,395	1,394	1,391	1,386	1,387	1,350
C ₂ ,H ₁₁	1,087	1,088	1,087	1,077	1,076	1,080
C ₂ ,N ₁₉	1,333	1,331	1,328	1,317	1,319	1,370
C ₃ ,C ₄	1,333	1,331	1,328	1,317	1,319	1,370
C ₃ ,H ₁₂	1,084	1,085	1,083	1,074	1,074	1,080
C ₄ ,C ₅	1,391	1,390	1,387	1,383	1,384	1,400
C ₄ ,H ₁₃	1,084	1,085	1,084	1,076	1,075	1,080
C ₅ ,H ₁₄	1,083	1,085	1,083	1,074	1,073	1,080
C ₁ ,C ₆	1,494	1,491	1,488	1,497	1,497	1,500
C ₆ ,C ₁₀	1,401	1,400	1,397	1,390	1,391	
C ₆ ,N ₂₀	1,340	1,338	1,334	1,321	1,323	
C ₇ ,C ₈	1,395	1,394	1,391	1,386	1,387	1,370
C ₇ ,H ₁₅	1,087	1,088	1,087	1,077	1,076	
C ₇ ,N ₂₀	1,333	1,331	1,328	1,317	1,319	1,370
C ₈ ,C ₉	1,391	1,391	1,387	1,381	1,383	1,370
C ₈ ,H ₁₆	1,084	1,085	1,083	1,074	1,074	
C ₉ ,C ₁₀	1,391	1,390	1,387	1,383	1,384	1,400
C ₉ ,H ₁₇	1,084	1,085	1,084	1,076	1,075	
C ₁₀ ,H ₁₈	1,083	1,085	1,083	1,074	1,073	
Bağ açısı (°)						
C ₅ ,C ₁ ,C ₆	120,7	120,6	120,6	120,6	120,7	
C ₅ ,C ₁ ,N ₁₉	122,2	122,5	122,4	122,4	122,4	
C ₆ ,C ₁ ,N ₁₉	117,1	117,0	117,0	117,0	117,0	
C ₃ ,C ₂ ,H ₁₁	120,3	120,2	120,2	120,2	120,3	
C ₃ ,C ₂ ,N ₁₉	123,8	124,0	123,9	123,7	123,7	124,7
H ₁₁ ,C ₂ ,N ₁₉	115,9	115,9	115,9	116,1	116,0	
C ₂ ,C ₃ ,C ₄	118,0	118,0	118,0	117,9	117,8	118,3
C ₂ ,C ₃ ,H ₁₂	120,5	120,5	120,5	120,5	120,5	
C ₄ ,C ₃ ,H ₁₂	121,5	121,6	121,5	121,7	121,7	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅	118,8	118,7	118,7	118,8	118,8	119,4
C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	120,8	120,9	120,8	120,8	120,8	
C ₅ ,C ₄ ,H ₁₃	120,4	120,4	120,4	120,4	120,4	
C ₁ ,C ₅ ,C ₄	119,1	119,0	119,0	118,7	118,7	
C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	120,4	120,4	120,3	120,5	120,5	

EK-1.(Devam) 2,2'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF - 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney[26]
Bağ açısı ($^{\circ}$)						
C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	120,4	120,4	120,3	120,5	120,5	
C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	120,6	120,5	120,7	120,8	120,7	
C ₁ ,N ₁₉ ,C ₂	118,1	117,9	118,0	118,5	118,5	116,4
C ₁ ,C ₆ ,C ₁₀	120,7	120,6	120,5	120,6	120,7	
C ₈ ,C ₇ ,N ₂₀	123,8	124,0	123,9	123,7	123,7	124,3
C ₁ ,C ₆ ,N ₂₀	117,1	117,0	117,0	117,0	117,0	116,1
C ₈ ,C ₇ ,H ₁₅	120,3	120,2	120,2	120,2	120,2	
C ₁₀ ,C ₆ ,N ₂₀	122,2	122,5	122,4	122,4	122,4	122,5
H ₁₅ ,C ₇ ,N ₂₀	115,9	115,8	115,9	116,1	116,0	
C ₇ ,C ₈ ,C ₉	118,0	118,0	118,0	117,8	117,8	118,5
C ₇ ,C ₈ ,H ₁₆	120,5	120,5	120,5	120,5	120,5	
C ₉ ,C ₈ ,H ₁₆	121,5	121,6	121,5	121,7	121,7	
C ₈ ,C ₉ ,C ₁₀	118,8	118,7	118,7	118,9	118,8	119,7
C ₈ ,C ₉ ,H ₁₇	120,8	120,9	120,8	120,8	120,8	
C ₁₀ ,C ₉ ,H ₁₇	120,4	120,5	120,4	120,4	120,4	
C ₆ ,C ₁₀ ,C ₉	119,1	119,0	119,0	118,7	118,7	118,3
C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	120,4	120,4	120,3	120,5	120,5	
C ₉ ,C ₁₀ ,H ₁₈	120,6	120,5	120,7	120,8	120,7	
C ₆ ,N ₂₀ ,C ₇	118,1	117,9	118,0	118,5	118,5	116,7
Dihedral açı ($^{\circ}$)						
C ₁ ,C ₆ ,C ₁₀ ,C ₉	-179,8	-179,9	-179,9	179,8	179,9	
C ₁ ,C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	-1,4	-1,8	-1,5	1,2	1,3	
N ₂₀ ,C ₆ ,C ₁₀ ,C ₉	-0,0	-0,2	-0,1	-0,2	-0,1	
N ₂₀ ,C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	178,4	178,0	178,2	-178,2	-178,7	
C ₅ ,C ₁ ,C ₆ ,C ₁₀	-40,8	-40,3	-39,8	46,7	46,2	
N ₁₉ ,C ₁ ,C ₆ ,C ₁₀	139,4	140,9	140,3	-133,3	-133,8	
C ₅ ,C ₁ ,C ₆ ,N ₂₀	139,4	140,9	140,3	-133,3	-133,8	
N ₁₉ ,C ₁ ,C ₆ ,N ₂₀	-40,4	-38,9	-39,4	46,7	46,2	
C ₁₀ ,C ₆ ,N ₂₀ ,C ₇	0,2	0,4	0,3	-0,0	-0,1	
C ₁ ,C ₆ ,N ₂₀ ,C ₇	-180,0	-180,0	-180,0	180,0	179,9	
H ₁₅ ,C ₇ ,C ₈ ,C ₉	-180,0	-180,0	-180,0	179,8	179,9	
H ₁₅ ,C ₇ ,C ₈ ,H ₁₆	0,4	0,3	0,3	-0,3	-0,3	
N ₂₀ ,C ₇ ,C ₈ ,C ₉	0,0	0,1	-0,0	-0,1	-0,0	
N ₂₀ ,C ₇ ,C ₈ ,H ₁₆	-180,0	-180,0	-179,8	179,8	179,8	
C ₈ ,C ₇ ,N ₂₀ ,C ₆	-0,2	-0,2	-0,2	0,2	0,2	
H ₁₅ ,C ₇ ,N ₂₀ ,C ₆	179,7	179,7	179,7	-179,7	-179,7	
C ₇ ,C ₈ ,C ₉ ,C ₁₀	0,2	0,3	0,2	-0,1	-0,2	

EK-1.(Devam) 2,2'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF - 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney[26]
Dihedral açısı (°)						
C ₇ ,C ₈ ,C ₉ ,H ₁₇	-179,3	-179,2	-179,2	179,5	179,4	
H ₁₆ ,C ₈ ,C ₉ ,C ₁₀	180,0	-180,0	180,0	-180,0	-180,0	
H ₁₆ ,C ₈ ,C ₉ ,H ₁₇	0,5	0,6	0,5	-0,4	-0,4	
C ₈ ,C ₉ ,C ₁₀ ,C ₆	-0,2	-0,2	-0,1	0,3	0,3	
C ₈ ,C ₉ ,C ₁₀ ,H ₁₈	-178,6	-178,3	-178,5	178,9	178,9	
H ₁₇ ,C ₉ ,C ₁₀ ,C ₆	179,3	179,3	179,3	-179,3	-179,3	
H ₁₇ ,C ₉ ,C ₁₀ ,H ₁₈	0,9	1,1	1,0	-0,7	-0,7	
C ₆ ,C ₁ ,C ₃ ,C ₄	-179,8	-180,0	-179,9	179,8	179,8	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	-1,4	-1,8	-1,5	1,2	1,3	
N ₁₉ ,C ₁ ,C ₅ ,C ₄	-0,0	-0,2	-0,1	-0,2	-0,1	
N ₁₉ ,C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	178,4	178,0	178,2	-178,8	-178,7	
C ₆ ,C ₁ ,N ₁₉ ,C ₂	-180,0	-180,0	-180,0	180,0	179,9	
C ₅ ,C ₁ ,N ₁₉ ,C ₂	0,2	0,4	0,3	-0,0	-0,1	
H ₁₁ ,C ₂ ,C ₃ ,C ₄	-179,9	-180,0	-180,0	179,8	179,9	
H ₁₁ ,C ₂ ,C ₃ ,H ₁₂	0,4	0,3	0,3	-0,3	-0,3	
N ₁₉ ,C ₂ ,C ₃ ,C ₄	0,0	-0,1	-0,0	-0,1	-0,0	
N ₁₉ ,C ₂ ,C ₃ ,H ₁₂	-179,8	-179,8	-179,8	179,8	179,8	
C ₃ ,C ₂ ,N ₁₉ ,C ₁	-0,2	-0,2	-0,2	0,2	0,2	
H ₁₁ ,C ₂ ,N ₁₉ ,C ₁	179,7	179,7	179,7	-179,7	-179,7	
C ₂ ,C ₃ ,C ₄ ,C ₅	0,2	0,3	0,2	-0,1	-0,2	
C ₂ ,C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	-179,3	-179,2	-179,2	179,5	179,4	
H ₁₂ ,C ₃ ,C ₄ ,C ₅	180,0	-180,0	180,0	-180,0	-180,0	
H ₁₂ ,C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	0,5	0,5	0,5	-0,4	-0,4	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅ ,C ₁	-0,2	-0,2	-0,1	0,3	0,3	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	-178,6	-178,3	-178,5	178,9	178,9	
H ₁₃ ,C ₄ ,C ₅ ,C ₁	179,3	179,3	179,3	-179,3	-179,3	
H ₁₃ ,C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	0,9	1,1	1,0	-0,7	-0,7	

EK-2. 2,2'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp			Deney[28]	Deney[28]
	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	V_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	IR	R
ν_1	54	0,11	8,14	56	50	0,07	8,31	56	0,09	7,41	52	0,21	6,01	52	0,17	7,53		
ν_2	91	3,68	1,47	91	89	3,93	1,67	91	3,74	1,38	103	4,23	1,59	102	4,37	2,07		
ν_3	123	2,46	2,81	123	120	2,46	3,30	123	2,45	2,67	131	2,94	2,59	130	2,99	3,44		
ν_4	252	0,23	2,89	252	247	0,17	4,28	252	0,21	2,97	287	0,10	2,38	287	0,07	3,97		
ν_5	319	0,01	2,40	321	317	0,02	2,44	321	0,02	2,41	338	0,00	4,20	339	0,00	4,34		
ν_6	365	1,45	0,18	367	359	1,54	0,09	367	1,50	0,18	390	1,06	0,08	391	1,06	0,02		332
ν_7	414	5,37	0,19	412	404	5,05	0,63	413	5,19	0,21	456	5,81	0,16	456	6,27	0,50		
ν_8	417	0,54	6,24	415	407	0,45	6,12	417	0,50	5,53	460	0,79	2,59	459	0,74	3,07		
ν_9	507	2,65	0,00	505	498	3,80	0,06	507	2,84	0,01	560	4,49	0,05	559	5,46	0,06		439
ν_{10}	566	1,37	1,96	565	556	1,68	1,77	569	1,43	1,95	615	2,19	1,27	612	2,37	0,95		
ν_{11}	625	4,84	5,78	621	615	4,91	8,29	623	4,87	5,79	669	5,92	5,21	670	6,24	7,78	619	614
ν_{12}	640	4,65	1,95	636	629	4,96	2,52	638	4,63	1,79	684	5,67	2,61	685	6,83	3,18		
ν_{13}	670	10,17	1,77	666	660	11,70	2,64	670	10,52	1,73	718	10,00	1,98	719	10,72	2,92	653	
ν_{14}	756	8,24	1,83	759	745	8,65	1,99	762	8,27	1,71	832	6,83	0,03	833	1,18	0,21		
ν_{15}	760	40,48	0,03	762	748	78,61	0,08	766	46,00	0,02	833	11,17	0,58	834	10,42	1,11		
ν_{16}	775	62,62	0,11	775	764	36,64	0,52	780	60,48	0,12	837	0,54	16,23	840	0,25	12,78		764
ν_{17}	782	0,07	13,37	788	777	0,20	11,32	788	0,12	12,46	848	115,33	0,11	842	125,19	0,31		
ν_{18}	832	5,34	5,70	830	817	5,49	3,91	839	4,98	5,60	908	9,42	6,36	902	10,67	4,09		
ν_{19}	906	0,25	1,18	903	885	0,11	0,14	912	0,27	0,17	993	0,71	0,51	988	0,55	0,42		

EK-2.(Devam) 2,2'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp			Dency[28]	Dency[28]
	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	V_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	IR	R
ν_{20}	911	0,26	3,42	908	890	0,33	3,18	918	0,29	3,00	1002	0,78	1,58	996	0,83	1,52		
ν_{21}	981	0,35	0,07	982	962	0,56	0,31	990	0,36	0,06	1084	1,27	2,30	1087	1,62	4,87		
ν_{22}	984	0,21	0,76	985	964	0,38	1,43	993	0,38	0,66	1087	3,69	82,40	1089	5,40	70,92		
ν_{23}	1007	1,78	1,94	1008	989	0,38	11,18	1016	3,80	68,76	1096	0,45	0,14	1091	0,53	0,25	993	995
ν_{24}	1007	3,96	87,34	1009	989	0,15	0,26	1017	3,15	1,37	1099	0,17	0,44	1094	0,15	1,53		1045
ν_{25}	1013	0,09	0,11	1014	1000	3,32	2,06	1020	0,06	0,10	1123	0,41	0,59	1116	0,42	1,57		
ν_{26}	1013	0,53	7,55	1015	1001	5,81	71,44	1020	1,09	13,57	1123	1,09	0,35	1116	0,38	0,40		
ν_{27}	1054	8,17	1,86	1067	1042	8,14	4,27	1064	7,33	2,24	1125	4,23	1,36	1130	5,45	3,73	1040	
ν_{28}	1069	6,60	46,54	1085	1069	5,46	45,84	1081	6,00	51,17	1140	10,01	37,64	1146	10,07	31,08		
ν_{29}	1098	1,50	0,78	1109	1090	0,66	0,84	1106	0,81	0,92	1160	0,26	4,24	1168	0,25	3,08	1084	
ν_{30}	1112	2,74	1,19	1123	1103	5,47	0,96	1122	3,73	0,90	1165	44,39	3,10	1173	41,96	2,42		
ν_{31}	1127	8,11	2,18	1138	1118	6,90	1,79	1137	7,54	2,08	1180	1,36	1,33	1186	1,29	1,17		
ν_{32}	1173	5,51	6,94	1175	1162	4,48	6,02	1175	4,57	6,57	1197	2,77	0,56	1203	3,65	0,67	1166	
ν_{33}	1177	2,29	3,38	1180	1167	3,07	2,63	1180	2,39	3,83	1207	13,22	2,33	1212	13,37	2,45		
ν_{34}	1279	0,22	0,86	1302	1278	0,19	54,56	1297	0,15	47,46	1302	1,04	2,42	1310	1,00	2,84	1250	1237
ν_{35}	1286	2,53	1,23	1333	1312	0,32	5,02	1320	2,58	2,70	1302	0,67	1,95	1310	0,99	1,94		
ν_{36}	1295	0,02	161,54	1336	1313	0,02	95,32	1321	0,00	100,49	1398	0,30	47,90	1403	0,38	38,25		

EK-2.(Devam) 2,2'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp			Deney[28]	Deney[28]
	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	V_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	IR	R
ν_{37}	1329	3,88	3,95	1347	1316	6,19	0,39	1337	4,43	2,38	1431	0,02	47,71	1439	0,03	46,35		
ν_{38}	1333	0,03	86,09	1360	1334	0,03	54,62	1352	0,01	74,85	1434	12,31	4,11	1440	12,10	4,38		1309
ν_{39}	1451	5,68	28,53	1465	1438	5,03	28,02	1461	6,82	27,87	1575	8,19	8,73	1580	5,27	8,59	1416	1446
ν_{40}	1460	54,09	1,94	1475	1448	53,50	2,20	1471	57,66	2,17	1580	75,03	1,87	1585	71,25	1,75	1453	1482
ν_{41}	1496	27,96	0,09	1516	1488	26,67	0,68	1510	27,33	0,29	1628	41,00	0,65	1634	35,85	1,23		
ν_{42}	1508	5,51	82,10	1540	1507	4,79	93,84	1530	4,31	83,30	1655	4,18	16,38	1664	5,80	21,19	1558	1572
ν_{43}	1603	33,04	14,35	1644	1604	38,67	6,93	1632	37,88	8,28	1752	69,22	8,01	1764	72,26	6,70		1586
ν_{44}	1614	5,79	4,63	1658	1619	5,95	3,74	1645	5,67	4,20	1768	32,93	5,14	1781	27,27	4,35		
ν_{45}	1624	84,50	4,03	1669	1627	91,24	2,09	1655	90,14	3,06	1778	138,09	4,32	1791	152,92	2,46		
ν_{46}	1624	3,49	421,32	1669	1628	1,87	421,52	1656	2,11	426,12	1790	1,68	271,54	1803	1,43	264,67		
ν_{47}	3144	26,15	98,77	3201	3062	26,16	76,86	3173	25,93	92,98	3319	22,15	44,02	3361	23,58	32,94	3054	3048
ν_{48}	3145	20,51	148,79	3202	3065	21,63	139,85	3173	19,47	146,27	3320	12,06	110,89	3361	11,40	111,46	3061	3065
ν_{49}	3168	3,72	148,55	3224	3096	4,85	129,75	3198	4,05	141,06	3330	5,45	156,87	3370	5,81	160,24	3078	3078
ν_{50}	3170	8,97	36,48	3225	3098	6,77	24,86	3199	7,55	31,44	3331	23,74	32,74	3371	30,77	32,11	3086	3088
ν_{51}	3184	20,26	14,78	3239	3114	13,15	23,39	3213	14,26	18,03	3352	30,79	6,38	3388	30,98	12,40		
ν_{52}	3187	6,94	154,80	3241	3115	13,45	74,56	3217	8,23	97,74	3354	6,92	139,99	3391	15,07	80,17		
ν_{53}	3193	21,96	26,58	3250	3118	27,83	16,54	3223	21,10	20,86	3359	17,66	36,12	3396	35,34	28,28		
ν_{54}	3194	5,28	476,58	3250	3120	2,09	490,21	3224	2,68	509,36	3361	3,52	352,60	3397	3,27	423,98		

EK-3. 2,2'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp				SQM	Deney[28]	Deney[28]	TED > %5
	V _{har}	V _{anhar}	I _{IR}	I _R		IR	R	
ν ₁	56	50	0,07	8,31	55			τ _{10,6,1,5} (23)+τ _{10,6,1,19} (24)+τ _{20,6,1,5} (24)+τ _{20,6,1,19} (25)
ν ₂	91	89	3,93	1,67	89			τ _{4,5,1,6} (15)+τ _{9,10,6,1} (15)+τ _{14,5,1,6} (8)+τ _{18,10,6,1} (8)+τ _{2,19,1,6} (13)+τ _{10,6,1,19} (7)+τ _{20,6,1,5} (7)+τ _{7,20,6,1} (13)
ν ₃	123	120	2,46	3,30	122			δ _{5,1,6} (15)+δ _{10,6,1} (15)+δ _{6,1,19} (15)+δ _{20,6,1} (15)+τ _{4,5,1,6} (6)+τ _{9,10,6,1} (6)
ν ₄	252	247	0,17	4,28	247			δ _{5,1,6} (7)+δ _{10,6,1} (7)+δ _{6,1,19} (7)+δ _{20,6,1} (7)+τ _{4,5,1,6} (5)+τ _{9,10,6,1} (5)+τ _{4,5,1,19} (6)+τ _{9,10,6,20} (6)
ν ₅	321	317	0,02	2,44	316			ν _{6,1} (34)+δ _{5,1,19} (11)+δ _{10,6,20} (11)
ν ₆	367	359	1,54	0,09	361		332	δ _{5,1,6} (9)+δ _{10,6,1} (9)+δ _{6,1,19} (8)+δ _{20,6,1} (8)+τ _{4,5,1,19} (5)+τ _{9,10,6,20} (6)
ν ₇	412	404	5,05	0,63	404			τ _{1,5,4,3} (10)+τ _{6,10,9,8} (10)+τ _{1,19,2,3} (9)+τ _{6,20,7,8} (9)
ν ₈	415	407	0,45	6,12	407			τ _{1,5,4,3} (10)+τ _{6,10,9,8} (10)+τ _{1,19,2,3} (9)+τ _{6,20,7,8} (9)
ν ₉	505	498	3,80	0,06	497		439	δ _{5,1,6} (9)+δ _{10,6,1} (9)+δ _{6,1,19} (7)+δ _{20,6,1} (7)
ν ₁₀	565	556	1,68	1,77	555			τ _{5,4,3,2} (6)+τ _{10,9,8,7} (6)+τ _{4,3,2,11} (6)+τ _{13,4,3,2} (6)+τ _{9,8,7,15} (6)+τ _{17,9,8,7} (6)+τ _{4,3,2,19} (7)+τ _{9,8,7,20} (7)
ν ₁₁	621	615	4,91	8,29	614	619	614	δ _{5,4,3} (11)+δ _{10,9,8} (11)+δ _{1,19,2} (11)+δ _{20,6,7} (11)
ν ₁₂	636	629	4,96	2,52	629			δ _{1,5,4} (6)+δ _{5,4,3} (9)+δ _{6,10,9} (6)+δ _{10,9,8} (9)+δ _{1,19,2} (9)+δ _{3,2,19} (6)+δ _{6,20,7} (9)+δ _{8,7,20} (6)
ν ₁₃	666	660	11,70	2,64	659	653		δ _{4,3,2} (8)+δ _{1,5,4} (7)+δ _{9,8,7} (8)+δ _{6,10,9} (7)+δ _{3,2,19} (7)+δ _{5,1,19} (8)+δ _{8,7,20} (7)+δ _{10,6,20} (8)
ν ₁₄	759	745	8,65	1,99	744			τ _{5,4,3,12} (8)+τ _{14,5,4,3} (6)+τ _{10,9,8,16} (8)+τ _{18,10,9,8} (6)+τ _{12,3,2,19} (10)+τ _{14,5,1,19} (6)+τ _{16,8,7,20} (10)+τ _{18,10,6,20} (6)
ν ₁₅	762	748	78,61	0,08	747			τ _{5,4,3,12} (8)+τ _{14,5,4,3} (6)+τ _{10,9,8,16} (8)+τ _{18,10,9,8} (6)+τ _{12,3,2,19} (10)+τ _{14,5,1,19} (6)+τ _{16,8,7,20} (10)+τ _{18,10,6,20} (6)
ν ₁₆	775	764	36,64	0,52	760		764	ν _{5,1} (7)+ν _{6,1} (14)+ν _{10,6} (7)+ν _{19,1} (5)+ν _{20,6} (5)+δ _{4,3,2} (11)+δ _{9,8,7} (11)
ν ₁₇	788	777	0,20	11,32	775			τ _{1,5,4,3} (5)+τ _{6,10,9,17} (5)+τ _{2,19,1,5} (6)+τ _{4,5,1,19} (5)+τ _{1,19,2,11} (5)+τ _{7,20,6,10} (6)+τ _{9,10,6,20} (5)+τ _{6,20,7,15} (5)
ν ₁₈	830	817	5,49	3,91	815			τ _{10,6,1,5} (8)+τ _{20,6,1,19} (8)
ν ₁₉	903	885	0,11	0,14	886			τ _{4,3,2,11} (5)+τ _{13,4,3,12} (8)+τ _{14,5,4,3} (7)+τ _{14,5,1,6} (7)+τ _{9,8,7,15} (5)+τ _{17,9,8,16} (8)+τ _{18,10,6,1} (7)+τ _{18,10,9,8} (7)
ν ₂₀	908	890	0,33	3,18	891			τ _{13,4,3,12} (8)+τ _{14,5,4,3} (7)+τ _{14,5,1,6} (9)+τ _{17,9,8,16} (7)+τ _{18,10,6,1} (9)+τ _{18,10,9,8} (5)
ν ₂₁	982	962	0,56	0,31	963			τ _{4,3,2,11} (7)+τ _{12,3,2,11} (16)+τ _{14,5,4,13} (6)+τ _{9,8,7,15} (7)+τ _{16,8,7,15} (16)+τ _{18,10,9,17} (6)+τ _{1,19,2,11} (7)+τ _{6,20,7,15} (7)
ν ₂₂	985	964	0,38	1,43	966			τ _{4,3,2,11} (8)+τ _{12,3,2,11} (15)+τ _{14,5,4,13} (7)+τ _{9,8,7,15} (8)+τ _{16,8,7,15} (15)+τ _{18,10,9,17} (7)+τ _{1,19,2,11} (7)+τ _{6,20,7,15} (7)
ν ₂₃	1008	989	0,38	11,18	989	993	995	τ _{12,3,2,11} (8)+τ _{13,4,3,12} (13)+τ _{14,5,4,13} (11)+τ _{16,8,7,15} (8)+τ _{17,9,8,16} (13)+τ _{18,10,9,17} (11)

EK-3.(Devam) 2,2'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp				SQM	Deney[28] Deney[28]		TED > %5
	V _{har}	V _{anhar}	I _{IR}	I _R		IR	R	
U ₂₄	1009	989	0,15	0,26	989		1045	$\tau_{12,3,2,11}(9)+\tau_{13,4,3,12}(14)+\tau_{14,5,4,13}(11)+\tau_{16,8,7,15}(9)+\tau_{17,9,8,16}(14)+\tau_{18,10,9,17}(11)$
U ₂₅	1014	1000	3,32	2,06	997			$v_{5,1}(5)+v_{10,6}(5)+v_{19,1}(7)+v_{19,2}(6)+v_{20,6}(7)+v_{20,7}(6)$
U ₂₆	1015	1001	5,81	71,44	998	1064		$v_{19,1}(6)+v_{20,6}(6)$
U ₂₇	1067	1042	8,14	4,27	1045	1040		$v_{3,2}(11)+v_{4,3}(10)+v_{8,7}(11)+v_{9,8}(10)$
U ₂₈	1085	1069	5,46	45,84	1063			$v_{3,2}(14)+v_{4,3}(14)+v_{8,7}(14)+v_{9,8}(14)$
U ₂₉	1109	1090	0,66	0,84	1090	1084		$v_{4,3}(6)+v_{5,1}(5)+v_{9,8}(6)+v_{10,6}(5)+\delta_{12,3,4}(6)+\delta_{4,5,14}(8)+\delta_{16,8,9}(6)+\delta_{9,8,16}(6)$
U ₃₀	1123	1103	5,47	0,96	1103		1093	$v_{3,2}(5)+v_{5,4}(8)+v_{8,7}(5)+v_{10,9}(8)+\delta_{12,3,2}(8)+\delta_{4,3,12}(10)+\delta_{16,8,7}(8)+\delta_{9,8,16}(10)$
U ₃₁	1138	1118	6,90	1,79	1117			$v_{3,2}(7)+v_{5,4}(10)+v_{8,7}(7)+v_{10,9}(10)+\delta_{12,3,2}(8)+\delta_{16,8,7}(8)$
U ₃₂	1175	1162	4,48	6,02	1156	1166		$\delta_{12,3,2}(7)+\delta_{4,3,12}(5)+\delta_{13,4,3}(8)+\delta_{5,4,13}(9)+\delta_{16,8,7}(7)+\delta_{9,8,16}(5)+\delta_{17,9,8}(8)+\delta_{10,9,17}(9)$
U ₃₃	1180	1167	3,07	2,63	1161		1237	$v_{5,4}(6)+v_{10,9}(6)+\delta_{13,4,3}(9)+\delta_{14,5,4}(5)+\delta_{5,4,13}(10)+\delta_{17,9,8}(9)+\delta_{10,9,17}(10)+\delta_{18,10,9}(5)$
U ₃₄	1302	1278	0,19	54,56	1279	1250	1302	$v_{5,1}(10)+v_{6,1}(7)+\delta_{14,5,1}(8)+\delta_{14,5,4}(7)+\delta_{18,10,6}(8)+\delta_{18,10,9}(7)+\delta_{15,7,19}(7)+\delta_{11,2,20}(5)$
U ₃₅	1333	1312	0,32	5,02	1304		1309	$v_{3,2}(5)+v_{8,7}(5)+v_{19,6}(6)+v_{19,7}(19)+v_{20,1}(6)+v_{20,2}(19)$
U ₃₆	1336	1313	0,02	95,32	1306			$v_{5,4}(8)+v_{6,1}(9)+v_{10,6}(8)+v_{19,6}(14)+v_{20,1}(14)$
U ₃₇	1347	1316	6,19	0,39	1322			$v_{5,1}(6)+v_{10,6}(6)+v_{19,6}(6)+v_{20,1}(6)+\delta_{3,2,11}(8)+\delta_{8,7,15}(8)+\delta_{15,7,19}(12)+\delta_{11,2,20}(12)$
U ₃₈	1360	1334	0,03	54,62	1332			$v_{6,1}(16)+v_{19,7}(19)+v_{20,2}(19)+\delta_{15,7,19}(9)+\delta_{11,2,20}(9)$
U ₃₉	1465	1438	5,03	28,02	1440	1416	1446	$\delta_{3,2,11}(5)+\delta_{12,3,2}(7)+\delta_{4,3,12}(8)+\delta_{13,4,3}(7)+\delta_{8,7,15}(5)+\delta_{16,8,7}(7)+\delta_{9,8,16}(8)+\delta_{17,9,8}(7)$
U ₄₀	1475	1448	53,50	2,20	1450	1453	1482	$v_{5,1}(6)+v_{10,6}(6)+\delta_{12,3,2}(5)+\delta_{4,3,12}(8)+\delta_{13,4,3}(8)+\delta_{5,4,13}(5)+\delta_{16,8,7}(5)+\delta_{9,8,16}(8)+\delta_{17,9,8}(7)+\delta_{10,9,17}(5)$
U ₄₁	1516	1488	26,67	0,68	1490			$v_{19,1}(7)+v_{20,6}(7)+\delta_{3,2,11}(9)+\delta_{14,5,1}(5)+\delta_{8,7,15}(9)+\delta_{18,10,6}(5)+\delta_{11,2,19}(9)+\delta_{15,7,20}(9)$
U ₄₂	1540	1507	4,79	93,84	1511	1558	1572	$v_{3,2}(6)+v_{6,1}(13)+v_{8,7}(6)+v_{19,1}(8)+v_{20,6}(8)+\delta_{11,2,19}(7)+\delta_{15,7,20}(7)$
U ₄₃	1644	1604	38,67	6,93	1608		1586	$v_{4,3}(17)+v_{5,1}(6)+v_{9,8}(16)+v_{10,6}(6)$
U ₄₄	1658	1619	5,95	3,74	1621			$v_{4,3}(14)+v_{5,1}(7)+v_{9,8}(14)+v_{10,6}(7)+v_{3,2}(7)+v_{8,7}(6)$
U ₄₅	1669	1627	91,24	2,09	1632			$v_{3,2}(5)+v_{5,4}(14)+v_{8,7}(5)+v_{10,9}(14)+v_{19,2}(10)+v_{20,7}(10)$
U ₄₆	1669	1628	1,87	421,52	1633			$v_{5,1}(6)+v_{5,4}(13)+v_{10,6}(6)+v_{10,9}(13)+v_{19,2}(7)+v_{20,7}(7)$

EK-3. (Devam) 2,2' -Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp				SQM	Deney[28]		TED > %5
	V _{har}	V _{anhar}	I _{IR}	I _R		IR	R	
U ₄₇	3201	3062	26,16	76,86	3072	3054	3048	v _{11,2} (47)+v _{15,7} (47)
U ₄₈	3202	3065	21,63	139,85	3072	3061	3065	v _{11,2} (47)+v _{15,7} (47)
U ₄₉	3224	3096	4,85	129,75	3093	3078	3078	v _{13,4} (28)+v _{14,5} (17)+v _{17,9} (28)+v _{18,10} (17)
U ₅₀	3225	3098	6,77	24,86	3095	3086	3088	v _{13,4} (32)+v _{14,5} (12)+v _{17,9} (32)+v _{18,10} (12)
U ₅₁	3239	3114	13,15	23,39	3108			v _{12,3} (12)+v _{14,5} (28)+v _{16,8} (12)+v _{18,10} (28)+v _{13,4} (8)+v _{17,9} (8)
U ₅₂	3241	3115	13,45	74,56	3110			v _{12,3} (14)+v _{14,5} (32)+v _{16,8} (14)+v _{18,10} (32)
U ₅₃	3250	3118	27,83	16,54	3118			v _{12,3} (32)+v _{13,4} (13)+v _{16,8} (32)+v _{17,9} (13)
U ₅₄	3250	3120	2,09	490,21	3119			v _{12,3} (28)+v _{13,4} (13)+v _{14,5} (6)+v _{16,8} (28)+v _{17,9} (13)+v _{18,10} (6)

EK-4. 2,3'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP – 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF – 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney[24]
Bağ uzunluğu (Å)						
C ₆ ,C ₇	1,405	1,403	1,400	1,394	1,395	
C ₆ ,C ₁₀	1,398	1,397	1,394	1,397	1,388	
C ₆ ,C ₁	1,485	1,481	1,479	1,489	1,489	
C ₇ ,H ₁₅	1,084	1,086	1,084	1,074	1,073	
C ₇ ,N ₂₀	1,333	1,332	1,328	1,317	1,319	
C ₈ ,C ₉	1,393	1,392	1,389	1,382	1,383	
C ₈ ,H ₁₆	1,086	1,088	1,086	1,076	1,076	
C ₈ ,N ₂₀	1,337	1,335	1,332	1,321	1,323	
C ₉ ,C ₁₀	1,390	1,390	1,386	1,383	1,384	
C ₉ ,H ₁₇	1,083	1,085	1,083	1,074	1,074	
C ₁₀ ,H ₁₈	1,084	1,086	1,084	1,075	1,075	
C ₁ ,C ₅	1,403	1,402	1,398	1,393	1,394	
C ₁ ,N ₁₉	1,344	1,341	1,338	1,324	1,326	
C ₂ ,C ₃	1,393	1,393	1,390	1,383	1,384	
C ₂ ,H ₁₁	1,087	1,087	1,086	1,077	1,076	1,087
C ₂ ,N ₁₉	1,333	1,331	1,328	1,318	1,32	1,338
C ₃ ,C ₄	1,392	1,391	1,388	1,383	1,384	
C ₃ ,H ₁₂	1,083	1,084	1,083	1,074	1,074	
C ₄ ,C ₅	1,390	1,389	1,386	1,381	1,382	1,394
C ₄ ,H ₁₃	1,084	1,085	1,084	1,076	1,075	
C ₅ ,H ₁₄	1,083	1,084	1,083	1,073	1,073	1,083
Bağ açısı (°)						
C ₇ ,C ₆ ,C ₁₀	117,1	117,1	117,2	117,0	117,0	118,4
C ₇ ,C ₆ ,C ₁	120,2	120,0	120,1	120,3	120,2	
C ₁ ,C ₆ ,C ₁₀	122,7	122,9	122,7	122,7	122,7	
C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	119,1	119,0	119,0	119,4	119,5	
C ₆ ,C ₇ ,N ₂₀	124,1	124,3	124,1	123,9	124,0	
H ₁₅ ,C ₇ ,N ₂₀	116,8	116,7	116,9	116,7	116,6	
C ₉ ,C ₈ ,H ₁₆	120,6	120,5	120,5	120,5	120,5	
C ₉ ,C ₈ ,N ₂₀	123,2	123,4	123,3	123,2	123,2	123,8
H ₁₆ ,C ₈ ,N ₂₀	116,2	116,2	116,2	116,3	116,3	
C ₇ ,C ₈ ,C ₉	118,6	118,6	118,5	118,3	118,3	
C ₈ ,C ₉ ,H ₁₇	120,4	120,4	120,4	120,5	120,5	
C ₁₀ ,C ₉ ,H ₁₇	121,0	121,1	121,1	121,2	121,2	120,2
C ₆ ,C ₁₀ ,C ₉	119,4	119,2	119,3	119,4	119,4	118,5
C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	120,7	120,9	120,7	120,8	120,9	121,4
C ₉ ,C ₁₀ ,H ₁₈	119,9	119,9	120,0	119,8	119,7	120,1

EK-4.(Devam) 2,3'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP – 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF – 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney[24]
Bağ açısı (°)						
C ₆ ,C ₁ ,C ₅	121,7	121,7	121,6	121,5	121,6	
C ₆ ,C ₁ ,N ₁₉	116,6	116,5	116,5	116,7	116,7	
C ₅ ,C ₁ ,N ₁₉	121,6	121,8	121,8	121,8	121,7	
C ₃ ,C ₂ ,H ₁₁	120,4	120,3	120,4	120,3	120,4	
C ₃ ,C ₂ ,N ₁₉	123,7	123,9	123,8	123,6	123,6	
H ₁₁ ,C ₂ ,N ₁₉	115,9	115,8	115,9	116,0	116,0	
C ₂ ,C ₃ ,C ₄	117,9	117,8	117,9	117,6	117,6	
C ₂ ,C ₃ ,H ₁₂	120,5	120,5	120,5	120,6	120,6	
C ₄ ,C ₃ ,H ₁₂	121,6	121,6	121,6	121,7	121,7	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅	119,0	118,9	118,9	119,1	119,1	
C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	120,7	120,8	120,7	120,7	120,7	
C ₅ ,C ₄ ,H ₁₃	120,3	120,3	120,3	120,2	120,2	
C ₁ ,C ₅ ,C ₄	119,2	119,2	119,1	118,9	118,9	
C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	120,6	120,7	120,5	120,7	120,8	
C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	120,2	120,2	120,3	120,4	120,3	
C ₁ ,N ₁₉ ,C ₂	118,6	118,4	118,5	119,0	119,0	
C ₇ ,N ₂₀ ,C ₈	117,7	117,5	117,6	118,2	118,1	116,9
Dihedral açı (°)						
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	-179,6	-179,5	-179,5	-179,5	179,5	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₇ ,N ₂₀	0,5	0,6	0,6	0,7	-0,7	
C ₁ ,C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	0,3	0,4	0,3	0,2	-0,2	
C ₁ ,C ₆ ,C ₇ ,N ₂₀	-179,6	-179,5	-179,5	-179,6	179,5	
C ₆ ,C ₇ ,C ₁₀ ,C ₉	-0,3	-0,4	-0,4	-0,4	0,4	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	178,2	178,0	178,1	178,3	-178,3	
C ₁ ,C ₆ ,C ₁₀ ,C ₉	179,8	179,7	179,7	179,9	-179,9	
C ₁ ,C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	-1,7	-1,9	-1,8	-1,4	1,5	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₅	153,6	154,16	153,7	149,8	-149,9	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁ ,N ₁₉	-25,6	-24,9	-25,4	-29,5	29,3	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₅	-26,5	-25,9	-26,4	-30,5	30,4	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₁ ,N ₁₉	154,3	155,0	154,5	150,3	-150,5	
C ₆ ,C ₇ ,N ₂₀ ,C ₈	-0,4	-0,4	-0,4	-0,6	0,6	
H ₁₅ ,C ₇ ,N ₂₀ ,C ₈	179,7	179,7	179,7	179,6	-179,6	
H ₁₆ ,C ₈ ,C ₉ ,C ₁₀	179,8	179,9	179,8	-180,0	180,0	
H ₁₆ ,C ₈ ,C ₉ ,H ₁₇	0,5	0,5	0,5	0,5	-0,5	
N ₂₀ ,C ₈ ,C ₉ ,C ₁₀	0,1	0,2	0,1	0,2	-0,3	
N ₂₀ ,C ₈ ,C ₉ ,H ₁₇	-179,3	-179,2	-179,2	-179,3	179,2	
C ₉ ,C ₈ ,N ₂₀ ,C ₇	0,1	-0,0	0,0	0,1	-0,1	

EK-4.(Devam) 2,3'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP – 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF – 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney[24]
Dihedral açısı (°)						
C ₈ ,C ₉ ,C ₁₀ ,H ₁₈	-178,5	-178,4	-178,5	-178,8	178,7	
H ₁₇ ,C ₈ ,C ₉ ,C ₆	179,4	179,4	179,4	179,4	-179,4	
H ₁₇ ,C ₈ ,C ₉ ,H ₁₈	0,8	0,9	0,9	0,7	-0,7	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅ ,C ₄	179,7	179,8	179,7	179,7	-179,8	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	-1,6	-1,7	-1,6	-1,6	1,6	
N ₁₉ ,C ₁ ,C ₅ ,C ₄	-1,2	-1,2	-1,2	-1,0	1,1	
N ₁₉ ,C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	177,6	177,3	177,4	177,6	-177,5	
C ₆ ,C ₁ ,N ₁₉ ,C ₂	-180,0	180,0	-180,0	-180,0	-180,0	
C ₅ ,C ₁ ,N ₁₉ ,C ₂	0,9	0,9	0,9	0,8	-0,8	
H ₁₁ ,C ₂ ,C ₃ ,C ₄	179,4	179,4	179,4	179,5	-179,5	
H ₁₁ ,C ₂ ,C ₃ ,H ₁₂	-0,1	-0,1	-0,1	-0,0	0,0	
N ₁₉ ,C ₂ ,C ₃ ,C ₄	-0,7	-0,8	-0,8	-0,7	0,7	
N ₁₉ ,C ₂ ,C ₃ ,H ₁₂	179,7	179,7	179,7	179,8	-179,8	
C ₃ ,C ₂ ,N ₁₉ ,C ₁	0,1	0,1	0,1	0,1	-0,1	
H ₁₁ ,C ₂ ,N ₁₉ ,C ₁	180,0	180,0	180,0	179,9	-179,9	
C ₂ ,C ₃ ,C ₄ ,C ₅	0,4	0,5	0,4	0,3	-0,4	
C ₂ ,C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	-179,0	-178,9	-179,0	-179,0	179,0	
H ₁₂ ,C ₃ ,C ₄ ,C ₅	180,0	180,0	180,0	179,9	-179,9	
H ₁₂ ,C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	0,6	0,6	0,6	0,5	-0,5	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅ ,C ₁	0,5	0,5	0,5	0,5	-0,5	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	-178,2	-178,0	-178,2	-178,2	178,1	
H ₁₃ ,C ₄ ,C ₅ ,C ₁	180,0	179,9	179,9	179,9	-179,9	
H ₁₃ ,C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	1,2	1,4	1,2	1,2	-1,2	

EK-5. 2,3'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp		
	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	V_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}
ν_1	51	0,07	3,51	52	48	0,06	3,63	52	0,07	3,27	55	0,12	2,97	56	0,10	3,57
ν_2	95	1,06	0,68	95	93	1,23	0,77	95	1,12	0,67	106	1,34	0,76	105	1,42	0,96
ν_3	142	0,43	1,81	142	136	0,41	2,00	141	0,42	1,72	149	0,56	1,70	150	0,58	2,16
ν_4	243	0,60	3,39	244	240	0,52	4,36	244	0,58	3,42	276	0,72	3,12	276	0,68	4,29
ν_5	324	0,04	2,37	326	320	0,04	2,40	326	0,05	2,41	342	0,03	3,06	344	0,03	2,98
ν_6	380	2,73	0,64	382	373	2,91	0,60	381	2,78	0,63	413	2,71	0,62	414	2,78	0,61
ν_7	412	1,46	0,41	411	404	1,20	0,61	412	1,32	0,36	455	2,00	0,25	455	1,74	0,42
ν_8	416	4,37	1,87	415	407	4,20	2,38	416	4,32	1,78	459	4,98	1,21	459	5,73	1,83
ν_9	479	2,06	0,49	478	473	2,56	0,70	480	2,26	0,42	528	3,03	0,16	528	3,32	0,43
ν_{10}	566	4,06	1,00	565	556	4,46	0,39	568	4,18	1,05	617	6,25	1,04	616	6,84	0,41
ν_{11}	629	4,52	7,45	626	619	4,48	9,21	628	4,18	7,03	673	5,16	7,16	675	6,08	9,34
ν_{12}	633	2,78	1,47	629	622	3,06	2,48	631	3,02	1,75	677	3,50	1,44	678	3,37	2,07
ν_{13}	673	5,05	0,51	670	663	5,26	0,77	673	5,09	0,52	721	5,85	0,71	722	5,68	1,04
ν_{14}	722	22,53	0,83	725	713	27,47	0,99	726	23,34	0,79	775	31,73	0,68	775	38,09	0,82
ν_{15}	757	25,66	0,50	760	747	39,74	0,38	763	28,12	0,46	832	18,09	0,68	833	19,94	0,60
ν_{16}	782	1,43	14,21	787	775	37,50	4,96	788	1,52	13,44	836	1,23	16,24	838	1,43	14,58
ν_{17}	787	61,46	0,92	788	776	19,01	9,57	792	61,56	0,87	863	83,95	0,92	859	83,33	0,80
ν_{18}	834	3,06	4,34	855	823	3,22	1,96	840	3,03	4,11	913	4,72	6,01	911	4,04	1,99
ν_{19}	904	0,35	1,88	901	886	0,34	1,77	910	0,35	1,66	991	0,96	1,25	985	1,01	1,34

EK-5.(Devam) 2,3'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF – dgdzvp		
	V _{har}	I _{IR}	I _R	V _{har}	V _{anhar}	I _{IR}	I _R	V _{har}	I _{IR}	I _R	V _{har}	I _{IR}	I _R	V _{har}	I _{IR}	I _R
ν ₂₀	952	0,88	5,44	955	936	0,97	4,84	960	0,95	4,98	1064	0,46	5,44	1063	0,37	5,01
ν ₂₁	975	0,93	0,65	978	957	1,08	0,51	982	0,84	0,40	1084	1,71	39,26	1085	0,32	11,30
ν ₂₂	984	0,13	0,22	985	965	0,24	0,71	993	0,15	0,15	1088	0,92	2,01	1087	2,72	28,27
ν ₂₃	1003	1,03	19,49	1004	983	0,78	9,26	1011	0,79	13,09	1100	0,58	0,21	1095	0,46	0,99
ν ₂₄	1008	1,55	38,79	1009	990	0,15	1,36	1018	2,92	34,84	1111	21,85	5,89	1114	21,77	5,85
ν ₂₅	1012	0,10	0,57	1016	1000	4,11	41,75	1019	0,40	4,45	1113	2,79	34,62	1115	3,86	5,83
ν ₂₆	1032	19,88	3,51	1036	1020	18,85	13,40	1036	17,07	17,08	1123	0,28	1,10	1117	1,68	3,00
ν ₂₇	1044	0,56	46,70	1061	1049	1,71	20,19	1057	1,47	20,91	1123	0,20	1,20	1121	1,07	21,66
ν ₂₈	1070	1,36	72,07	1086	1067	0,67	68,50	1082	0,74	73,51	1144	1,42	67,63	1151	1,45	59,40
ν ₂₉	1089	1,73	1,26	1102	1078	1,91	2,45	1098	1,83	1,99	1159	37,74	2,99	1167	36,62	4,33
ν ₃₀	1118	5,91	1,30	1129	1108	6,14	1,31	1128	5,73	1,45	1164	3,79	15,66	1172	4,84	14,08
ν ₃₁	1143	6,09	2,76	1153	1137	7,02	1,60	1150	6,58	1,84	1177	6,80	1,19	1185	7,10	2,16
ν ₃₂	1179	5,27	6,56	1182	1164	6,14	5,13	1181	5,29	6,16	1208	4,34	2,59	1215	5,92	3,12
ν ₃₃	1222	11,21	7,45	1236	1216	12,60	7,17	1232	12,91	6,38	1243	7,36	6,40	1252	8,21	9,22
ν ₃₄	1274	0,90	6,59	1309	1283	5,19	15,29	1301	3,60	5,61	1304	0,76	4,66	1311	0,99	4,05
ν ₃₅	1282	0,72	29,92	1328	1302	3,32	181,32	1318	0,40	103,08	1329	7,95	1,80	1336	7,50	2,74
ν ₃₆	1306	11,34	224,07	1337	1313	1,56	12,44	1321	6,40	106,49	1407	16,18	113,72	1414	15,71	93,72

EK-5.(Devam) 2,3'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF – dgdzvp		
	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}
ν_{37}	1330	0,35	67,75	1354	1330	1,33	63,32	1348	1,42	73,96	1425	0,38	46,58	1432	0,16	54,74
ν_{38}	1361	1,81	0,71	1372	1341	1,79	6,75	1363	1,83	2,42	1472	3,07	2,34	1477	2,88	2,30
ν_{39}	1435	33,88	4,27	1453	1423	37,53	4,74	1448	39,44	3,87	1554	49,82	1,88	1560	47,16	2,08
ν_{40}	1472	6,52	36,81	1492	1462	2,31	31,44	1486	4,04	33,43	1594	8,33	18,00	1600	6,15	18,32
ν_{41}	1491	58,04	6,93	1510	1482	52,74	2,88	1503	56,59	3,24	1620	73,38	4,08	1626	66,91	3,61
ν_{42}	1515	2,61	68,53	1543	1510	4,65	88,64	1534	4,15	77,91	1651	4,62	16,54	1659	4,55	21,79
ν_{43}	1598	9,30	45,40	1641	1597	9,29	27,46	1628	9,00	32,04	1751	19,80	16,64	1763	19,97	14,42
ν_{44}	1614	27,14	48,69	1660	1618	32,43	28,47	1646	30,80	37,79	1773	56,46	34,30	1786	63,23	26,55
ν_{45}	1625	78,58	530,52	1670	1631	90,02	494,84	1656	88,18	488,28	1782	71,88	63,15	1795	79,33	74,34
ν_{46}	1630	2,12	53,61	1676	1633	0,74	111,75	1662	0,54	102,27	1792	79,89	387,16	1804	84,16	378,29
ν_{47}	3147	23,18	122,96	3205	3065	24,25	108,18	3176	22,63	118,50	3322	16,89	78,24	3363	10,44	72,70
ν_{48}	3150	13,07	134,86	3207	3085	14,04	124,39	3178	12,82	131,95	3323	9,80	97,82	3364	16,25	98,19
ν_{49}	3170	14,39	124,66	3224	3090	16,13	79,97	3198	14,19	94,22	3331	18,54	105,20	3371	25,29	101,33
ν_{50}	3173	5,98	22,71	3227	3095	2,70	45,34	3201	2,94	37,63	3337	18,12	34,91	3376	23,92	38,19
ν_{51}	3185	4,73	16,23	3232	3103	2,96	37,10	3208	2,80	31,73	3356	2,96	181,97	3393	4,51	143,43
ν_{52}	3189	1,45	215,29	3244	3111	3,52	72,60	3219	0,72	140,44	3358	34,16	40,96	3396	48,71	29,38
ν_{53}	3192	25,34	64,47	3247	3122	26,19	159,44	3221	23,96	101,74	3365	2,89	22,01	3400	1,47	65,80
ν_{54}	3197	8,26	292,35	3253	3124	11,06	273,55	3227	7,50	2097,09	3366	5,03	238,94	3401	10,45	263,36

EK-6. 2,3'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp				SQM	TED > %5
	V _{har}	V _{anhar}	I _{IR}	I _R		
υ ₁	52	48	0,06	3,63	51	τ _{5,1,6,7} (25)+τ _{5,1,6,10} (23)+τ _{19,1,6,7} (25)+ τ _{19,1,6,10} (23)
υ ₂	95	93	1,23	0,77	93	τ _{9,10,6,1} (12)+τ _{5,1,2,7} (6)+τ _{4,5,1,6} (16)+τ _{15,7,6,1} (5)+τ _{14,10,6,1} (6)+τ _{14,10,6,1} (8)+τ _{19,1,6,10} (8)+τ _{2,19,1,2} (14)+τ _{20,7,6,1} (12)
υ ₃	142	136	0,41	2,00	140	δ _{7,6,1} (19)+δ _{10,6,1} (18)+δ _{5,1,6} (17)+δ _{19,1,6} (16)
υ ₄	244	240	0,52	4,36	240	δ _{7,6,1} (6)+δ _{10,6,1} (5)+τ _{9,10,6,1} (6)+τ _{4,5,1,6} (6)+τ _{4,5,1,19} (7)+τ _{20,7,6,10} (6)+τ _{20,7,6,1} (7)
υ ₅	326	320	0,04	2,40	321	ν _{6,1} (32)+δ _{7,6,10} (10)+δ _{5,1,19} (10)
υ ₆	382	373	2,91	0,60	375	δ _{7,6,1} (5)+δ _{10,6,1} (8)+δ _{19,1,6} (7)+τ _{20,7,6,10} (8)+τ _{10,9,8,20} (8)
υ ₇	411	404	1,20	0,61	404	τ _{9,10,6,7} (7)+τ _{6,10,9,8} (17)+τ _{18,10,9,8} (6)+τ _{8,20,7,6} (14)+τ _{8,20,7,15} (5)
υ ₈	415	407	4,20	2,38	408	τ _{1,5,4,3} (16)+τ _{5,4,3,2} (9)+τ _{5,4,3,12} (5)+τ _{14,5,4,3} (6)+τ _{1,19,2,3} (14)+τ _{2,19,1,5} (7)+τ _{1,19,2,11} (6)
υ ₉	478	473	2,56	0,70	471	δ _{7,6,1} (9)+δ _{10,6,1} (10)+δ _{5,1,6} (11)+δ _{19,1,6} (10)
υ ₁₀	565	556	4,46	0,39	555	τ _{5,1,6,10} (7)+τ _{4,5,1,6} (6)+τ _{5,4,3,2} (6)+τ _{4,3,2,11} (7)+τ _{13,4,3,2} (7)+τ _{19,1,6,7} (7)+τ _{2,19,1,6} (6)+τ _{4,3,2,19} (8)
υ ₁₁	626	619	4,48	9,21	619	δ _{6,10,9} (12)+δ _{10,9,8} (9)+δ _{6,5,4} (5)+δ _{20,7,6} (8)+δ _{7,20,8} (18)
υ ₁₂	629	622	3,06	2,48	622	δ _{4,3,2} (5)+δ _{5,4,3} (16)+δ _{19,1,6} (5)+δ _{1,19,2} (17)+δ _{7,20,8} (6)
υ ₁₃	670	663	5,26	0,77	663	δ _{7,6,10} (6)+δ _{10,9,8} (9)+δ _{9,3,2} (7)+δ _{1,5,4} (8)+δ _{3,2,19} (9)+δ _{5,1,19} (6)+δ _{20,7,6} (8)+δ _{9,8,20} (6)
υ ₁₄	725	713	27,47	0,99	711	τ _{10,9,8,16} (10)+τ _{18,10,6,7} (7)+τ _{18,10,9,8} (9)+τ _{8,20,7,6} (8)+τ _{7,20,8,9} (10)+τ _{20,7,6,10} (5)+τ _{10,9,8,20} (8)+τ _{8,20,7,15} (8)+τ _{7,20,8,16} (11)
υ ₁₅	760	747	39,74	0,38	745	τ _{5,4,3,12} (15)+τ _{1,5,4,13} (5)+τ _{14,5,4,3} (12)+τ _{1,19,2,3} (6)+τ _{4,3,2,19} (6)+τ _{12,3,2,19} (19)+τ _{14,5,1,19} (11)
υ ₁₆	787	775	37,50	4,96	773	τ _{1,5,4,13} (7)+τ _{6,10,9,17} (7)+τ _{2,19,1,5} (7)+τ _{4,5,1,19} (7)+τ _{1,19,2,11} (6)+τ _{17,9,8,20} (8)
υ ₁₇	788	776	19,01	9,57	774	ν _{10,6} (8)+ν _{6,1} (13)+ν _{5,1} (6)+ν _{19,1} (5)+δ _{4,3,2} (10)+δ _{9,8,20} (12)
υ ₁₈	855	823	3,22	1,96	820	τ _{5,1,6,10} (5)+τ _{6,10,9,17} (15)+τ _{18,10,6,1} (9)+τ _{17,9,8,20} (14)
υ ₁₉	901	886	0,34	1,77	884	τ _{4,3,2,11} (7)+τ _{5,4,3,12} (9)+τ _{13,4,3,12} (15)+τ _{14,5,1,6} (16)+τ _{14,5,4,3} (14)+τ _{14,5,4,13} (8)+τ _{12,3,2,19} (8)+ τ _{14,5,1,19} (9)
υ ₂₀	955	936	0,97	4,84	938	τ _{15,7,6,10} (11)+τ _{15,7,6,1} (12)+τ _{10,9,8,16} (12)+τ _{17,9,8,16} (20)+τ _{18,10,6,7} (7)+τ _{18,10,9,8} (7)+τ _{18,10,6,1} (6)+τ _{8,20,7,15} (5)+τ _{7,20,8,16} (7)
υ ₂₁	978	957	1,08	0,51	959	τ _{15,7,6,10} (6)+τ _{15,7,6,1} (11)+τ _{18,10,9,8} (6)+τ _{18,10,6,1} (7)+τ _{18,10,9,17} (23)+τ _{8,20,7,15} (10)

EK-6.(Devam) 2,3'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp				SQM	TED > %5
	V _{har}	V _{anhar}	I _{IR}	I _R		
υ ₂₂	985	965	0,24	0,71	967	τ _{9,8,7,15} (15)+τ _{16,8,7,15} (28)+τ _{17,9,8,7} (7)+τ _{18,10,9,17} (10)+τ _{6,19,7,15} (14)
υ ₂₃	1004	983	0,78	9,26	986	τ _{15,7,6,10} (6)+τ _{15,7,6,1} (8)+τ _{10,9,8,16} (5)+τ _{17,9,8,16} (28)+τ _{18,10,9,17} (11)+τ _{8,20,7,15} (8)+τ _{7,20,8,16} (11)
υ ₂₄	1009	990	0,15	1,36	990	τ _{12,3,2,11} (15)+τ _{13,4,3,2} (5)+τ _{1,5,4,13} (8)+τ _{13,4,3,12} (27)+τ _{14,5,4,13} (23)
υ ₂₅	1016	1000	4,11	41,75	999	v _{3,2} (6)+v _{5,1} (10)+v _{19,1} (14)+v _{19,2} (10)+δ _{5,4,3} (7)+δ _{1,19,2} (7)+δ _{3,2,19} (5)
υ ₂₆	1036	1020	18,85	13,40	1023	v _{20,8} (7)+δ _{6,10,9} (10)+δ _{10,9,8} (7)+δ _{15,7,6} (6)+δ _{17,9,8} (6)+δ _{20,7,6} (9)+δ _{7,20,8} (12)
υ ₂₇	1061	1049	1,71	20,19	1038	v _{7,6} (13)+v _{9,8} (11)+v _{10,6} (12)+v _{10,9} (12)
υ ₂₈	1086	1067	0,67	68,50	1063	v _{9,8} (15)+v _{3,2} (17)+v _{4,3} (17)+v _{20,8} (7)
υ ₂₉	1102	1078	1,91	2,45	1081	v _{7,6} (8)+v _{9,8} (8)+v _{10,6} (6)+v _{4,3} (8)+v _{5,1} (6)+δ _{14,5,4} (6)
υ ₃₀	1129	1108	6,14	1,31	1107	v _{3,2} (14)+v _{4,3} (5)+v _{5,4} (14)+δ _{12,3,2} (18)+δ _{4,3,12} (18)+δ _{14,5,4} (6)
υ ₃₁	1153	1137	7,02	1,60	1131	v _{10,9} (22)+δ _{17,9,8} (8)+δ _{10,9,17} (17)+δ _{18,10,6} (10)+δ _{18,10,9} (15)
υ ₃₂	1182	1164	6,14	5,13	1160	v _{4,3} (6)+v _{5,4} (11)+δ _{12,3,2} (9)+δ _{4,3,12} (7)+δ _{13,4,3} (17)+δ _{5,4,13} (19)+δ _{14,5,1} (9)+δ _{14,5,4} (10)
υ ₃₃	1236	1216	12,60	7,17	1112	v _{9,8} (8)+v _{20,7} (9)+v _{20,8} (17)+δ _{9,8,16} (8)+δ _{17,9,8} (9)+δ _{15,7,20} (9)+δ _{16,8,20} (17)
υ ₃₄	1309	1283	5,19	15,29	1281	v _{7,6} (12)+v _{10,6} (11)+v _{5,1} (9)+v _{19,1} (6)+v _{20,7} (10)+δ _{3,2,11} (6)+δ _{14,5,1} (7)+δ _{11,2,19} (10)
υ ₃₅	1328	1302	3,32	181,32	1301	v _{1,6} (20)+v _{5,4} (8)+v _{20,8} (5)+δ _{14,5,1} (8)+δ _{14,5,4} (10)+δ _{15,7,20} (6)
υ ₃₆	1337	1313	1,56	12,44	1305	v _{3,2} (6)+v _{4,3} (6)+v _{5,1} (12)+v _{19,1} (20)+v _{19,2} (12)+v _{20,7} (8)+v _{20,8} (8)
υ ₃₇	1354	1330	1,33	63,32	1328	v _{6,1} (13)+v _{19,2} (19)+v _{20,7} (5)+δ _{3,2,11} (9)+δ _{11,2,19} (18)
υ ₃₈	1372	1341	1,79	6,75	1347	δ _{15,7,6} (19)+δ _{9,8,16} (9)+δ _{18,10,6} (10)+δ _{18,10,9} (8)+δ _{15,7,20} (18)+δ _{16,8,20} (9)
υ ₃₉	1453	1423	37,53	4,74	1425	v _{6,1} (7)+v _{19,2} (6)+v _{20,7} (9)+δ _{9,8,16} (7)+δ _{12,3,2} (5)+δ _{4,3,12} (6)+δ _{13,4,3} (8)+δ _{5,4,13} (6)+δ _{16,8,20} (11)
υ ₄₀	1492	1462	2,31	31,44	1463	v _{5,1} (5)+v _{19,2} (6)+v _{20,7} (8)+δ _{9,8,16} (5)+δ _{12,3,2} (7)+δ _{4,3,12} (10)+δ _{13,4,3} (6)+δ _{16,8,20} (8)
υ ₄₁	1510	1482	52,74	2,88	1482	v _{19,1} (8)+δ _{13,9,8} (7)+δ _{10,9,17} (7)+δ _{3,2,11} (9)+δ _{14,5,1} (5)+δ _{11,2,19} (10)+δ _{16,7,20} (5)

EK-6.(Devam) 2,3'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp				SQM	TED > %5
	V _{har}	V _{anh}	I _{IR}	I _R		
υ ₄₂	1543	1510	4,65	88,64	1512	v _{10,9} (7)+v _{1,6} (10)+v _{19,1} (7)+v _{20,8} (8)+δ _{17,9,8} (6)+δ _{3,2,11} (5)+δ _{11,2,19} (5)
υ ₄₃	1641	1597	9,29	27,46	1604	v _{7,6} (6)+v _{9,8} (13)+v _{3,2} (6)+v _{4,3} (18)+v _{5,1} (6)+v _{19,1} (6)
υ ₄₄	1660	1618	32,43	28,47	1623	v _{7,6} (7)+v _{9,8} (10)+v _{10,6} (14)+v _{4,3} (13)+v _{19,1} (8)+v _{20,8} (9)
υ ₄₅	1670	1631	90,02	494,84	1633	v _{3,2} (13)+v _{5,1} (13)+v _{5,4} (21)+v _{19,2} (13)
υ ₄₆	1676	1633	0,74	111,75	1638	v _{7,6} (5)+v _{10,6} (10)+v _{10,9} (23)+v _{20,7} (15)+δ _{18,10,6} (5)
υ ₄₇	3205	3065	24,25	108,18	3075	v _{11,2} (94)
υ ₄₈	3207	3085	14,04	124,39	3078	v _{16,8} (90)+v _{17,9} (8)
υ ₄₉	3224	3090	16,13	79,97	3093	v _{17,9} (10)+v _{18,10} (69)+v _{13,4} (8)+v _{14,5} (8)
υ ₅₀	3227	3095	2,70	45,34	3097	v _{18,10} (12)+v _{12,3} (8)+v _{13,4} (61)+v _{14,5} (14)
υ ₅₁	3232	3103	2,96	37,10	3101	v _{15,7} (97)
υ ₅₂	3244	3111	3,52	72,60	3113	v _{17,9} (15)+v _{14,3} (19)+v _{13,4} (6)+v _{14,5} (56)
υ ₅₃	3247	3122	26,19	159,44	3116	v _{17,9} (63)+v _{18,10} (16)+v _{13,3} (6)+v _{14,5} (10)
υ ₅₄	3253	3124	11,06	273,55	3122	v _{12,3} (61)+v _{13,4} (23)+v _{14,5} (12)

EK-7. 2,4'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP- 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF - 6-311+g(d,p)	HF- dgdzvp	Deney[24]
Bağ uzunluğu (Å)						
C ₆ ,C ₇	1,399	1,397	1,397	1,389	1,389	
C ₆ ,C ₁₀	1,400	1,398	1,395	1,389	1,389	
C ₆ ,C ₁	1,488	1,488	1,482	1,493	1,492	
C ₇ ,C ₈	1,391	1,390	1,395	1,383	1,384	
C ₇ ,H ₁₅	1,082	1,083	1,082	1,072	1,072	
C ₈ ,H ₁₆	1,087	1,088	1,086	1,076	1,076	
C ₈ ,N ₂₀	1,338	1,336	1,332	1,321	1,322	
C ₉ ,C ₁₀	1,392	1,399	1,388	1,385	1,386	
C ₉ ,H ₁₇	1,087	1,088	1,086	1,077	1,076	
C ₉ ,N ₂₀	1,336	1,334	1,330	1,318	1,320	
C ₁₀ ,H ₁₈	1,083	1,085	1,083	1,074	1,073	
C ₁ ,C ₅	1,402	1,400	1,397	1,391	1,392	
C ₁ ,N ₁₉	1,343	1,345	1,337	1,323	1,325	
C ₂ ,C ₃	1,394	1,394	1,390	1,384	1,385	
C ₂ ,H ₁₁	1,087	1,088	1,086	1,076	1,076	1,087
C ₂ ,N ₁₉	1,333	1,330	1,327	1,318	1,319	1,338
C ₃ ,C ₄	1,391	1,399	1,387	1,383	1,383	
C ₃ ,H ₁₂	1,083	1,084	1,083	1,074	1,074	
C ₄ ,C ₅	1,390	1,389	1,386	1,382	1,383	1,394
C ₄ ,H ₁₃	1,084	1,085	1,084	1,076	1,075	
C ₅ ,H ₁₄	1,082	1,087	1,082	1,073	1,072	1,083
Bağ açısı (°)						
C ₇ ,C ₆ ,C ₁₀	117,0	117,0	117,1	117,3	117,3	118,4
C ₇ ,C ₆ ,C ₁	120,4	120,3	120,3	120,5	120,4	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₁	122,6	122,9	122,6	122,2	122,3	
C ₆ ,C ₇ ,C ₈	119,2	119,2	119,1	118,9	119,0	
C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	119,8	119,8	119,7	120,5	120,6	
C ₈ ,C ₇ ,H ₁₅	120,9	121,0	121,2	120,6	120,5	
C ₇ ,C ₈ ,H ₁₆	120,0	120,0	120,0	120,0	120,0	
C ₇ ,C ₈ ,N ₂₀	123,9	124,9	124,0	123,9	123,9	123,8
H ₁₆ ,C ₈ ,N ₂₀	116,0	115,9	116,0	116,2	116,2	
C ₁₀ ,C ₉ ,H ₁₇	120,0	119,8	120,0	119,9	119,9	
C ₁₀ ,C ₉ ,N ₂₀	123,9	124,5	124,0	123,8	123,8	
H ₁₇ ,C ₉ ,N ₂₀	116,2	116,1	116,1	116,4	116,4	120,2
C ₆ ,C ₁₀ ,C ₉	119,2	119,2	119,1	119,0	119,0	118,5
C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	121,5	121,7	121,6	121,7	121,8	121,4

EK-7.(Devam) 2,4'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91 - 6-311+g(d,p)	HF - 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney[24]
Bağ açısı ($^{\circ}$)						
C ₉ ,C ₁₀ ,H ₁₈	119,2	119,0	119,3	119,3	119,2	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅	121,9	121,8	121,8	121,5	121,6	
C ₆ ,C ₁ ,N ₁₉	116,5	116,1	116,4	117,0	117,0	
C ₅ ,C ₁ ,N ₁₉	121,6	121,9	121,9	122,0	122,0	
C ₃ ,C ₂ ,H ₁₁	120,4	120,3	120,4	120,4	120,4	
C ₃ ,C ₂ ,N ₁₉	123,6	123,8	123,7	124,0	124,0	
H ₁₁ ,C ₂ ,N ₁₉	116,0	115,9	116,0	116,1	116,1	
C ₂ ,C ₃ ,C ₄	117,9	117,9	118,0	117,7	117,7	
C ₂ ,C ₃ ,H ₁₂	120,5	120,5	120,5	120,6	120,6	
C ₄ ,C ₃ ,H ₁₂	121,6	121,6	121,6	121,7	121,7	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅	118,9	118,9	119,0	119,0	119,0	
C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	120,7	120,8	120,8	120,7	120,7	
C ₅ ,C ₄ ,H ₁₃	120,3	120,3	120,3	120,2	120,2	
C ₁ ,C ₅ ,C ₄	119,2	119,2	119,1	118,8	118,8	
C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	120,6	120,7	120,6	120,7	120,8	
C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	120,1	120,1	120,2	120,5	120,3	
C ₁ ,N ₁₉ ,C ₂	118,6	118,4	119,0	119,0	119,0	
C ₈ ,N ₂₀ ,C ₉	116,7	116,5	116,7	117,2	117,2	
Dihedral açısı ($^{\circ}$)						
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₇ ,C ₈	0,7	0,7	0,7	-0,7	-0,8	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	-179,2	-179,2	-179,2	179,2	179,2	
C ₁ ,C ₆ ,C ₇ ,C ₈	-179,5	-179,5	-179,5	179,4	179,3	
C ₁ ,C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	0,6	0,6	0,6	-0,6	-0,7	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁₀ ,C ₉	-0,5	-0,5	-0,5	0,4	0,4	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	178,1	177,9	178,0	-178,1	-178,0	
C ₁ ,C ₆ ,C ₁₀ ,C ₉	179,7	179,7	179,7	-179,7	-179,7	
C ₁ ,C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	-1,7	-1,8	-1,8	1,8	1,9	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₅	158,7	159,4	158,8	-151,4	-152,0	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁ ,N ₁₉	-20,5	-19,7	-20,3	27,7	27,5	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₅	-21,5	-20,8	-21,4	28,7	29,0	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₁ ,N ₁₉	159,3	160,1	159,4	-152,1	-152,4	
C ₆ ,C ₇ ,C ₈ ,H ₁₆	179,6	179,6	179,6	-180,0	-180,0	
C ₆ ,C ₇ ,C ₈ ,N ₂₀	-0,4	-0,4	-0,4	0,4	0,5	
H ₁₅ ,C ₇ ,C ₈ ,H ₁₆	-0,5	-0,5	-0,5	0,6	0,5	

EK-7.(Devam) 2,4'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF - 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney[24]
Dihedral açısı(⁰)						
H ₁₅ ,C ₇ ,C ₈ ,N ₂₀	179,5	179,5	179,5	-179,4	-179,5	
C ₇ ,C ₈ ,N ₂₀ ,C ₉	-0,2	-0,2	-0,2	0,1	0,1	
H ₁₆ ,C ₈ ,N ₂₀ ,C ₉	179,8	179,8	179,8	-179,9	-179,9	
H ₁₇ ,C ₈ ,C ₉ ,C ₆	179,6	179,6	179,6	-180,0	-180,0	
H ₁₇ ,C ₈ ,C ₉ ,H ₁₈	1,0	1,2	1,2	-1,0	-1,0	
N ₂₀ ,C ₉ ,C ₁₀ ,C ₆	-0,1	-0,1	-0,1	0,2	0,2	
N ₂₀ ,C ₉ ,C ₁₀ ,H ₁₈	-178,7	-178,6	-178,6	178,7	178,7	
C ₁₀ ,C ₉ ,N ₂₀ ,C ₈	0,4	0,5	0,5	-0,5	-0,5	
H ₁₇ ,C ₉ ,N ₂₀ ,C ₈	-179,3	-179,3	-179,3	179,3	179,3	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅ ,C ₄	179,8	180,0	179,8	180,0	180,0	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	-1,3	-14,0	-1,3	1,2	1,2	
N ₁₉ ,C ₁ ,C ₅ ,C ₄	-1,0	-10,1	-1,2	0,9	0,9	
N ₁₉ ,C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	177,8	177,7	177,7	-177,9	-177,8	
C ₆ ,C ₁ ,N ₁₉ ,C ₂	-179,8	-180,0	-180,0	179,9	-180,0	
C ₅ ,C ₁ ,N ₁₉ ,C ₂	1,0	1,0	1,0	-1,0	-1,0	
H ₁₁ ,C ₂ ,C ₃ ,C ₄	179,5	179,5	179,5	-179,6	-180,0	
H ₁₁ ,C ₂ ,C ₃ ,H ₁₂	-0,1	-0,1	-0,1	-0,0	-0,0	
N ₁₉ ,C ₂ ,C ₃ ,C ₄	-0,5	-0,6	-0,5	0,3	0,5	
N ₁₉ ,C ₂ ,C ₃ ,H ₁₂	179,9	179,9	179,9	180,0	-180,0	
C ₃ ,C ₂ ,N ₁₉ ,C ₁	-0,2	-0,2	-0,2	0,3	0,3	
H ₁₁ ,C ₂ ,N ₁₉ ,C ₁	179,8	179,8	179,7	-179,7	-179,7	
C ₂ ,C ₃ ,C ₄ ,C ₅	0,5	0,5	0,5	-0,5	-0,5	
C ₂ ,C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	-179,1	-179,0	-179,1	179,1	179,1	
H ₁₂ ,C ₃ ,C ₄ ,C ₅	-179,9	-180,0	-180,0	180,0	180,0	
H ₁₂ ,C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	0,5	0,5	0,5	-0,5	-0,5	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅ ,C ₁	0,3	0,2	0,3	-0,1	-0,2	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	-178,6	-178,4	-178,6	178,6	178,5	
H ₁₃ ,C ₄ ,C ₅ ,C ₁	179,8	179,8	179,8	-179,7	-179,7	
H ₁₃ ,C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	1,1	1,1	1,1	-1,0	-1,0	

EK-8. 2,4'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF – dgdzvp		
	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}
ν_1	43	0,82	2,54	43	42	0,83	2,58	43	0,82	2,36	52	0,84	2,87	51	0,87	3,45
ν_2	94	0,05	0,58	94	95	0,09	0,72	94	0,07	0,57	105	0,13	0,72	104	0,14	0,96
ν_3	150	1,06	1,27	151	145	1,02	1,32	150	1,06	1,21	153	1,04	1,44	154	1,04	1,79
ν_4	241	3,77	2,36	241	237	3,57	2,81	242	3,73	2,38	275	4,29	2,07	275	4,32	2,82
ν_5	322	0,13	2,87	324	319	0,12	3,05	324	0,12	2,96	338	0,13	3,91	340	0,15	3,87
ν_6	389	0,09	0,55	389	381	0,09	0,57	388	0,08	0,47	423	4,76	0,39	424	5,02	0,50
ν_7	402	6,87	0,48	403	394	7,16	0,63	403	7,13	0,43	439	0,07	0,37	439	0,08	0,45
ν_8	416	2,02	1,10	416	408	1,62	1,43	416	1,74	1,04	459	3,52	0,76	458	3,81	1,17
ν_9	481	8,68	0,22	480	475	9,42	0,42	482	8,89	0,19	536	12,28	0,07	536	13,15	0,29
ν_{10}	575	2,81	1,99	575	568	2,44	1,57	578	2,79	2,04	627	4,40	1,93	624	4,65	1,54
ν_{11}	628	13,09	3,94	624	617	13,46	5,11	626	13,12	3,77	672	15,46	3,48	673	16,43	4,70
ν_{12}	650	11,71	2,55	647	640	12,33	3,21	648	11,56	2,50	695	13,07	2,41	696	14,00	3,10
ν_{13}	684	1,00	5,11	682	674	1,12	6,55	685	1,03	5,12	732	0,80	5,19	734	0,99	6,60
ν_{14}	750	16,90	0,25	753	741	28,49	0,55	755	18,63	0,24	815	10,84	0,03	815	17,73	0,43
ν_{15}	757	2,77	0,50	762	750	0,50	0,72	762	2,63	0,46	828	2,43	13,38	831	3,90	8,69
ν_{16}	776	1,71	13,07	781	770	1,91	11,04	781	1,67	12,37	832	11,72	0,89	832	10,71	3,21
ν_{17}	791	75,40	0,67	790	777	77,52	0,41	796	77,00	0,64	867	90,95	1,68	864	88,79	0,89
ν_{18}	855	7,50	2,69	854	840	8,44	0,93	861	7,40	2,65	942	13,93	3,75	937	12,89	1,36
ν_{19}	889	1,28	3,16	890	871	1,52	3,16	895	1,31	2,82	974	0,83	2,50	971	0,87	2,33

EK-8.(Devam) 2,4'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp		
	V _{har}	I _{IR}	I _R	V _{har}	V _{anhar}	I _{IR}	I _R	V _{har}	I _{IR}	I _R	V _{har}	I _{IR}	I _R	V _{har}	I _{IR}	I _R
ν ₂₀	908	0,08	0,36	906	888	0,23	0,28	915	0,09	0,29	999	0,24	0,69	993	0,26	0,77
ν ₂₁	983	0,34	0,20	983	963	0,21	0,33	990	0,29	0,16	1084	3,15	1,59	1084	0,83	1,89
ν ₂₂	985	0,06	0,08	986	966	0,20	0,66	993	0,11	0,07	1088	2,83	32,34	1087	3,87	4,61
ν ₂₃	1006	1,53	3,88	1008	986	0,42	2,55	1014	0,90	2,39	1091	6,09	54,45	1093	9,69	66,83
ν ₂₄	1009	1,36	1,54	1011	991	0,24	2,41	1018	2,17	4,28	1099	0,18	0,64	1094	1,26	8,65
ν ₂₅	1012	5,76	76,23	1016	1001	3,36	9,37	1020	1,79	17,20	1123	0,69	0,80	1117	0,15	0,66
ν ₂₆	1015	1,58	29,67	1021	1006	7,63	80,69	1023	5,01	70,62	1124	0,31	0,66	1118	0,22	1,32
ν ₂₇	1055	2,06	6,75	1068	1056	1,79	6,76	1065	5,56	6,60	1126	4,25	7,92	1131	4,91	8,66
ν ₂₈	1085	2,41	25,12	1098	1079	2,43	24,19	1095	2,82	26,17	1154	20,22	20,02	1161	19,92	21,20
ν ₂₉	1090	8,22	0,30	1102	1086	11,41	0,44	1098	10,38	0,86	1160	3,58	21,74	1167	2,43	20,12
ν ₃₀	1113	0,33	3,58	1123	1104	0,03	5,08	1119	0,07	5,23	1168	14,56	2,82	1175	15,96	1,33
ν ₃₁	1120	2,66	1,70	1131	1109	3,30	2,13	1129	2,77	2,13	1176	7,28	1,55	1183	7,32	1,49
ν ₃₂	1180	3,86	4,77	1182	1167	3,96	3,61	1182	3,58	4,37	1203	0,91	0,31	1210	1,42	0,44
ν ₃₃	1244	1,80	27,75	1257	1237	1,63	19,62	1252	1,54	24,20	1232	3,79	15,73	1242	5,51	20,47
ν ₃₄	1267	1,08	21,00	1304	1277	2,44	27,37	1295	1,95	23,54	1305	0,82	3,89	1313	1,10	3,33
ν ₃₅	1281	0,25	68,24	1326	1305	1,29	173,74	1313	0,73	128,53	1339	4,93	10,09	1345	4,86	9,69
ν ₃₆	1308	7,65	206,40	1338	1306	2,64	32,04	1326	4,04	86,90	1407	10,28	130,16	1415	10,09	106,81

EK-8.(Devam) 2,4'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF – dgdzvp		
	V _{har}	I _{IR}	I _R	V _{har}	V _{anhar}	I _{IR}	I _R	V _{har}	I _{IR}	I _R	V _{har}	I _{IR}	I _R	V _{har}	I _{IR}	I _R
U ₃₇	1327	1,23	47,81	1355	1329	1,85	60,50	1346	2,54	65,31	1420	0,28	21,53	1427	0,12	33,18
U ₃₈	1356	2,03	5,31	1364	1334	3,05	3,41	1359	2,49	5,14	1464	1,89	3,43	1468	1,77	4,18
U ₃₉	1437	18,45	3,80	1456	1431	20,36	5,59	1448	20,99	4,34	1550	25,91	2,11	1557	23,96	1,92
U ₄₀	1463	22,65	26,47	1479	1452	21,74	21,56	1475	24,21	23,47	1584	33,28	12,35	1590	30,27	12,35
U ₄₁	1496	43,28	19,19	1519	1489	38,86	10,04	1511	42,57	10,94	1630	56,29	3,79	1637	48,85	4,36
U ₄₂	1526	1,82	62,39	1554	1520	4,76	91,70	1545	3,22	77,81	1669	2,11	28,61	1677	3,69	33,32
U ₄₃	1588	36,16	1,27	1633	1589	40,76	0,99	1620	40,93	1,21	1739	69,65	1,34	1751	71,72	1,03
U ₄₄	1615	4,11	65,02	1659	1619	3,62	42,12	1647	3,77	55,67	1770	19,05	28,31	1782	16,30	20,77
U ₄₅	1626	40,93	287,35	1671	1633	55,91	240,29	1657	55,82	231,32	1781	144,45	61,13	1794	153,86	65,13
U ₄₆	1633	73,55	190,75	1678	1638	63,81	240,30	1665	61,94	236,60	1798	30,53	249,27	1811	35,21	242,53
U ₄₇	3147	30,13	125,02	3203	3064	27,27	120,46	3175	27,87	122,13	3321	30,33	103,46	3360	31,94	108,85
U ₄₈	3148	20,27	121,73	3205	3071	21,88	95,34	3176	20,29	112,73	3323	14,01	82,48	3364	19,44	58,02
U ₄₉	3152	17,50	155,90	3207	3074	19,91	150,81	3180	16,49	150,62	3326	22,98	117,57	3365	25,85	138,84
U ₅₀	3173	7,70	97,53	3229	3104	7,48	85,18	3202	6,83	92,05	3334	15,53	89,14	3374	21,26	88,28
U ₅₁	3186	4,71	57,00	3239	3113	5,07	53,96	3215	4,25	55,19	3355	6,43	77,09	3390	6,60	64,46
U ₅₂	3193	16,12	147,52	3249	3114	17,10	64,15	3223	14,02	103,17	3359	18,46	119,24	3397	28,67	126,68
U ₅₃	3201	8,13	195,67	3255	3125	9,38	247,09	3229	6,51	227,88	3371	6,28	135,02	3406	10,00	153,90
U ₅₄	3210	2,25	71,96	3261	3133	2,63	66,60	3236	2,30	71,04	3381	2,35	67,42	3417	3,45	65,95

EK-9. 2,4'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp				SQM	TED > %5
	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}		
ν_1	43	42	0,83	2,58	42	$\tau_{5,1,6,7}(25)+\tau_{5,1,6,10}(24)+\tau_{19,1,6,7}(25)+\tau_{19,1,6,10}(23)$
ν_2	94	95	0,09	0,72	92	$\tau_{8,7,6,1}(12)+\tau_{4,5,1,6}(12)+\tau_{10,6,1,2}(6)+\tau_{9,10,6,1}(16)+\tau_{15,7,6,1}(5)+\tau_{18,10,6,1}(5)+\tau_{14,5,1,6}(8)+\tau_{19,1,2,10}(7)+\tau_{7,19,6,1}(14)$
ν_3	151	145	1,02	1,32	150	$\delta_{7,6,1}(19)+\delta_{10,6,1}(19)+\delta_{5,1,6}(18)+\delta_{19,1,6}(17)$
ν_4	241	237	3,57	2,81	237	$\tau_{8,7,6,10}(5)+\tau_{9,10,6,7}(5)+\tau_{8,7,6,1}(7)+\tau_{4,5,1,6}(7)+\tau_{9,10,6,1}(7)+\tau_{2,19,1,6}(6)+\tau_{2,19,1,5}(5)+\tau_{4,5,1,19}(7)$
ν_5	324	319	0,12	3,05	319	$\nu_{6,1}(32)+\delta_{7,6,10}(11)+\delta_{5,1,19}(9)$
ν_6	389	381	0,09	0,57	382	$\tau_{16,8,7,6}(8)+\tau_{6,10,9,17}(7)+\tau_{20,8,7,6}(21)+\tau_{6,5,4,20}(20)+\tau_{3,20,9,10}(6)+\tau_{20,8,7,15}(6)+\tau_{18,10,9,20}(7)$
ν_7	403	394	7,16	0,63	397	$\delta_{7,6,1}(6)+\delta_{10,6,1}(7)+\delta_{5,1,6}(7)+\delta_{19,1,6}(7)+\tau_{1,5,4,3}(6)+\tau_{1,19,2,3}(6)+\tau_{4,3,2,19}(6)+\tau_{4,5,1,19}(6)$
ν_8	416	408	1,62	1,43	408	$\tau_{1,5,4,3}(14)+\tau_{5,4,3,2}(10)+\tau_{5,4,3,12}(5)+\tau_{14,5,4,3}(6)+\tau_{1,19,2,3}(12)+\tau_{2,19,1,5}(8)+\tau_{1,19,2,11}(5)$
ν_9	480	474	9,42	0,42	473	$\delta_{7,6,1}(7)+\delta_{10,6,1}(9)+\delta_{5,1,6}(9)+\delta_{19,1,6}(7)+\tau_{4,3,2,19}(5)$
ν_{10}	575	568	2,44	1,57	564	$\tau_{5,1,6,10}(6)+\tau_{4,3,2,11}(5)+\tau_{13,4,3,2}(5)+\tau_{19,1,6,7}(7)+\tau_{4,3,2,19}(6)+\tau_{9,20,8,7}(6)+\tau_{8,20,9,10}(7)+\tau_{9,20,8,16}(6)+\tau_{8,20,9,17}(6)$
ν_{11}	624	617	13,46	5,11	619	$\delta_{4,3,2}(6)+\delta_{5,4,3}(17)+\delta_{19,1,6}(5)+\delta_{1,19,2}(18)+\delta_{5,1,19}(6)$
ν_{12}	647	640	12,33	3,21	641	$\delta_{7,6,1}(6)+\delta_{1,5,4}(13)+\delta_{3,2,19}(12)+\delta_{5,1,19}(5)+\delta_{8,20,9}(10)$
ν_{13}	682	674	1,12	6,55	676	$\delta_{8,7,6}(14)+\delta_{6,10,9}(13)+\delta_{15,7,6}(5)+\delta_{18,10,6}(5)+\delta_{20,8,7}(15)+\delta_{10,9,20}(16)$
ν_{14}	753	741	28,49	0,55	739	$\tau_{5,4,3,12}(9)+\tau_{1,5,4,17}(6)+\tau_{14,5,4,3}(7)+\tau_{12,3,2,19}(11)+\tau_{14,5,1,19}(6)+\tau_{20,8,7,6}(5)+\tau_{5,20,8,7}(6)+\tau_{8,20,9,10}(6)$
ν_{15}	762	750	0,50	0,72	747	$\tau_{1,19,2,3}(7)+\tau_{4,3,2,19}(6)+\tau_{2,19,1,5}(6)+\tau_{4,5,1,19}(5)+\tau_{12,3,2,19}(6)+\tau_{14,5,1,19}(6)$
ν_{16}	781	770	1,91	11,04	770	$\nu_{7,6}(6)+\nu_{10,6}(6)+\nu_{6,1}(15)+\nu_{5,1}(7)+\nu_{19,1}(6)+\tau_{4,3,2}^{\text{TM}}(13)+\tau_{3,2,19}^{\text{TM}}(5)+\tau_{8,20,9}^{\text{TM}}(12)$
ν_{17}	790	777	77,52	0,41	775	$\tau_{18,10,6,7}(6)+\tau_{1,5,4,13}(7)+\tau_{13,5,1,6}(6)+\tau_{1,19,2,11}(5)+\tau_{20,8,7,15}(7)+\tau_{18,10,9,20}(9)$
ν_{18}	854	840	8,44	0,93	838	$\tau_{10,6,1,5}(5)+\tau_{16,8,7,6}(5)+\tau_{6,10,9,17}(13)+\tau_{8,10,6,1}(17)+\tau_{8,20,9,17}(6)+\tau_{18,10,9,20}(9)$
ν_{19}	890	871	1,52	3,16	873	$\tau_{15,7,6,10}(12)+\tau_{15,7,6,1}(14)+\tau_{16,8,7,6}(10)+\tau_{18,10,6,7}(8)+\tau_{18,10,6,1}(7)+\tau_{20,8,7,15}(14)+\tau_{9,20,3,16}(8)+\tau_{18,10,9,20}(6)$
ν_{20}	906	888	0,23	0,28	889	$\tau_{4,3,2,11}(6)+\tau_{5,4,3,12}(7)+\tau_{13,4,3,12}(13)+\tau_{14,5,1,6}(15)+\tau_{14,5,4,3}(12)+\tau_{14,5,4,13}(7)+\tau_{12,3,2,19}(7)+\tau_{14,5,1,19}(8)$
ν_{21}	983	963	0,21	0,33	964	$\tau_{16,8,7,15}(12)+\tau_{1,10,9,17}(9)+\tau_{18,10,9,17}(31)+\tau_{12,3,2,11}(6)+\tau_{8,20,9,17}(9)$
ν_{22}	986	966	0,20	0,66	967	$\tau_{18,10,9,17}(5)+\tau_{4,3,2,11}(14)+\tau_{12,3,2,11}(28)+\tau_{13,4,3,2}(7)+\tau_{14,5,4,13}(10)+\tau_{1,19,2,11}(13)$

EK-9.(Devam) 2,4'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp				SQM	TED > %5
	ν _{har}	ν _{anhar}	I _{IR}	I _R		
ν ₂₃	1008	986	0,42	2,55	988	τ _{16,8,7,6} (9)+ τ _{16,8,7,15} (36)+ τ _{18,10,9,17} (11)+ τ _{9,20,8,16} (14)+ τ _{8,20,9,17} (7)
ν ₂₄	1011	991	0,24	2,41	991	τ _{12,3,2,11} (15)+ τ _{13,4,3,2} (6)+ τ _{1,5,4,13} (8)+ τ _{13,4,3,12} (28)+ τ _{14,5,4,13} (23)
ν ₂₅	1016	1001	3,36	9,37	1000	ν _{5,1} (7)+ ν _{19,1} (10)+ν _{19,2} (8)+ ν _{19,2} (8)+ TM _{5,4,3} (5) + TM _{1,19,2} (5)
ν ₂₆	1021	1006	7,63	80,69	1005	ν _{8,7} (5)+ ν _{20,8} (9)+ ν _{20,9} (8)+ TM _{7,6,10} (5)+ TM _{8,20,9} (5)
ν ₂₇	1068	1056	1,79	6,76	1048	ν _{3,2} (15)+ ν _{4,3} (15)+ ν _{5,4} (7) + TM _{3,2,11} (6)+ TM _{1,19,2} (7)+ TM _{3,2,19} (5)
ν ₂₈	1098	1079	2,43	24,19	1077	ν _{8,7} (6)+ ν _{3,2} (7)+ ν _{4,3} (14)+ ν _{5,1} (7)+ν _{19,1} (5)+ TM _{14,5,1} (5)+ TM _{14,5,4} (6)
ν ₂₉	1102	1086	11,41	0,44	1081	ν _{7,6} (6)+ν _{8,7} (5)+ν _{10,6} (8)+ν _{20,8} (11)+ ν _{20,9} (7)+ TM _{15,7,6} (19)+ TM _{8,7,15} (8)+ TM _{18,10,6} (12)
ν ₃₀	1123	1104	0,03	5,08	1102	ν _{8,7} (10)+ ν _{10,9} (20)+ TM _{8,7,15} (12)+ TM _{10,9,17} (6)+ TM _{18,10,6} (7)+ TM _{18,10,9} (12)
ν ₃₁	1131	1109	3,30	2,13	1110	ν _{3,2} (12)+ ν _{4,3} (7)+ ν _{5,4} (13)+ TM _{12,8,2} (17)+ TM _{4,3,12} (18)
ν ₃₂	1182	1167	3,96	3,61	1162	ν _{4,3} (6)+ ν _{5,4} (12)+ TM _{12,3,2} (9)+ TM _{4,3,12} (7)+ TM _{13,4,3} (18)+ TM _{5,4,13} (20)+ TM _{14,5,1} (9)+ TM _{14,5,4} (10)
ν ₃₃	1257	1237	1,63	19,62	1234	ν _{10,9} (5)+ ν _{20,8} (12)+ ν _{20,9} (9)+ TM _{8,7,15} (7)+ TM _{16,8,7} (6)+ TM _{10,9,17} (8)+ TM _{18,10,9} (7)+ TM _{16,8,20} (14)+ TM _{17,9,20} (16)
ν ₃₄	1304	1277	2,44	27,37	1275	ν _{7,6} (11)+ ν _{10,6} (16)+ ν _{5,1} (8)+ ν _{20,8} (9)+ ν _{20,9} (11)+ TM _{14,5,1} (6) + TM _{11,2,19} (7)
ν ₃₅	1326	1305	1,29	173,74	1297	ν _{8,7} (5)+ ν _{6,1} (14)+ ν _{3,2} (6)+ ν _{5,4} (12)+ ν _{19,1} (20)+ ν _{19,2} (5)
ν ₃₆	1338	1306	2,64	32,04	1309	ν _{10,9} (10)+ ν _{6,1} (8)+ ν _{5,1} (7)+ ν _{20,8} (13)+ ν _{20,9} (12)+ TM _{14,5,4} (5)
ν ₃₇	1355	1329	1,85	60,50	1326	ν _{6,1} (12)+ ν _{19,2} (32)+ TM _{3,2,11} (7)+ TM _{11,2,19} (15)
ν ₃₈	1364	1334	3,05	3,41	1341	TM _{15,7,6} (9)+ TM _{8,7,15} (6)+ TM _{16,8,7} (10)+ TM _{10,9,18} (9)+ TM _{18,10,6} (10)+ TM _{18,10,9} (8)+ TM _{16,8,20} (8) + TM _{17,9,20} (7)
ν ₃₉	1456	1431	20,36	5,59	1430	ν _{8,7} (11)+ ν _{10,9} (12)+ TM _{16,8,7} (7)+ TM _{10,9,17} (6)+ TM _{16,8,20} (15)+ TM _{17,9,20} (15)
ν ₄₀	1479	1452	21,74	21,56	1452	ν _{5,1} (8)+ ν _{19,2} (9)+ TM _{12,3,2} (10)+ TM _{4,3,12} (13) + TM _{13,4,3} (11)+ TM _{5,4,13} (6)
ν ₄₁	1519	1489	38,86	10,04	1491	ν _{3,2} (6)+ ν _{19,1} (13)+ TM _{3,2,11} (13)+ TM _{14,5,1} (9)+ TM _{14,5,4} (7)+ TM _{11,2,19} (14)
ν ₄₂	1554	1520	4,76	91,70	1524	ν _{7,6} (7)+ ν _{6,1} (9)+ ν _{20,8} (9)+ TM _{16,8,7} (10)+ TM _{10,9,17} (8)+ TM _{16,3,20} (7)+ TM _{17,9,20} (6)

EK-9.(Devam) 2,4'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp				SQM	TED > %5
	ν_{har}	ν_{anh}	I_{IR}	I_{R}		
ν_{43}	1633	1589	40,76	0,99	1595	$\nu_{7,6}(14) + \nu_{10,6}(15) + \nu_{4,3}(11) + \nu_{20,8}(9) + \nu_{20,9}(14)$
ν_{44}	1659	1619	3,62	42,12	1622	$\nu_{7,6}(5) + \nu_{10,6}(9) + \nu_{4,3}(22) + \nu_{5,1}(5) + \nu_{5,4}(5) + \nu_{19,1}(12) + \nu_{20,8}(5)$
ν_{45}	1671	1633	55,91	240,29	1633	$\nu_{3,2}(14) + \nu_{5,1}(14) + \nu_{5,4}(23) + \nu_{19,2}(16)$
ν_{46}	1678	1638	63,81	240,30	1641	$\nu_{7,6}(9) + \nu_{8,7}(20) + \nu_{10,6}(7) + \nu_{10,9}(20)$
ν_{47}	3203	3064	27,27	120,46	3073	$\nu_{16,8}(10) + \nu_{17,9}(84) + \nu_{18,10}(5)$
ν_{48}	3205	3071	21,88	95,34	3075	$\nu_{11,2}(93)$
ν_{49}	3207	3074	19,91	150,81	3077	$\nu_{16,8}(85) + \nu_{17,9}(9)$
ν_{50}	3229	3104	7,48	85,18	3098	$\nu_{12,3}(10) + \nu_{13,4}(71) + \nu_{14,5}(15)$
ν_{51}	3239	3113	5,07	53,96	3107	$\nu_{17,9}(6) + \nu_{18,10}(83)$
ν_{52}	3249	3114	17,10	64,15	3117	$\nu_{18,10}(7) + \nu_{12,3}(46) + \nu_{14,5}(45)$
ν_{53}	3255	3125	9,38	247,09	3122	$\nu_{12,3}(37) + \nu_{13,4}(24) + \nu_{14,5}(35)$
ν_{54}	3261	3133	2,63	66,60	3128	$\nu_{15,7}(97)$

EK-10. 2,5'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF - 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney[24]
Bağ uzunluğu (Å)						
C ₆ ,C ₇	1,400	1,398	1,395	1,390	1,391	
C ₆ ,C ₁₀	1,402	1,401	1,397	1,388	1,390	
C ₆ ,C ₁	1,485	1,481	1,479	1,489	1,489	
C ₇ ,C ₈	1,388	1,388	1,384	1,384	1,381	
C ₇ ,H ₁₅	1,083	1,084	1,083	1,073	1,073	
C ₈ ,C ₉	1,394	1,394	1,390	1,386	1,386	
C ₈ ,H ₁₆	1,084	1,085	1,083	1,074	1,074	
C ₉ ,H ₁₇	1,086	1,087	1,086	1,077	1,076	
C ₉ ,N ₂₀	1,336	1,334	1,331	1,318	1,320	
C ₁₀ ,H ₁₈	1,086	1,088	1,086	1,076	1,075	
C ₁₀ ,N ₂₀	1,334	1,333	1,329	1,319	1,321	
C ₁ ,C ₅	1,403	1,401	1,398	1,393	1,394	
C ₁ ,N ₁₉	1,344	1,342	1,338	1,324	1,326	
C ₂ ,C ₃	1,393	1,393	1,389	1,383	1,384	
C ₂ ,H ₁₁	1,087	1,088	1,086	1,077	1,076	1,087
C ₂ ,N ₁₉	1,333	1,331	1,328	1,318	1,328	1,338
C ₃ ,C ₄	1,392	1,392	1,388	1,386	1,384	
C ₃ ,H ₁₂	1,083	1,084	1,083	1,074	1,076	
C ₄ ,C ₅	1,390	1,389	1,386	1,381	1,382	1,394
C ₄ ,H ₁₃	1,084	1,086	1,084	1,076	1,075	
C ₅ ,H ₁₄	1,082	1,084	1,082	1,073	1,072	1,083
Bağ açısı (°)						
C ₇ ,C ₆ ,C ₁₀	117,0	117,1	117,1	117,0	117,0	118,4
C ₇ ,C ₆ ,C ₁	120,7	120,4	120,6	120,8	120,7	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₁	122,3	122,5	122,3	122,1	122,3	
C ₆ ,C ₇ ,C ₈	119,2	119,1	119,1	119,2	119,2	118,5
C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	119,2	119,2	119,1	119,7	119,7	
C ₈ ,C ₇ ,H ₁₅	122,0	121,7	121,8	121,2	121,1	
C ₇ ,C ₈ ,C ₉	118,7	118,7	118,7	118,5	118,5	
C ₇ ,C ₈ ,H ₁₆	121,0	121,1	121,1	121,2	121,2	120,2
C ₉ ,C ₈ ,H ₁₆	120,3	120,2	120,3	120,4	120,4	
C ₈ ,C ₉ ,H ₁₇	120,7	120,6	120,6	120,5	120,5	121,4
C ₈ ,C ₉ ,N ₂₀	123,1	123,3	123,3	123,2	123,1	123,8
H ₁₇ ,C ₉ ,N ₂₀	116,2	116,1	116,1	116,4	116,3	
C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	120,4	120,4	120,3	120,4	120,5	120,1
C ₆ ,C ₁₀ ,N ₂₀	124,3	124,4	124,3	124,2	124,2	

EK-10.(Devam) 2,5'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF - 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney[24]
Bağ açısı ($^{\circ}$)						
H ₁₈ ,C ₁₀ ,N ₂₀	115,3	115,1	115,4	115,4	115,3	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅	122,0	122,0	121,9	121,8	121,9	
C ₆ ,C ₁ ,N ₁₉	116,4	116,2	116,3	116,4	116,4	
C ₅ ,C ₁ ,N ₁₉	122,0	121,8	121,8	121,7	121,7	
C ₃ ,C ₂ ,H ₁₁	120,4	120,3	120,3	120,3	120,4	
C ₃ ,C ₂ ,N ₁₉	123,7	123,8	123,7	123,6	123,6	
H ₁₁ ,C ₂ ,N ₁₉	116,0	115,9	116,0	116,0	116,0	
C ₂ ,C ₃ ,C ₄	117,9	117,8	117,9	117,6	117,6	
C ₂ ,C ₃ ,H ₁₂	120,6	120,5	120,6	120,7	120,7	
C ₄ ,C ₃ ,H ₁₂	122,0	121,7	121,6	121,8	121,8	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅	119,0	119,0	119,0	119,1	119,2	
C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	120,7	120,8	120,7	120,7	120,7	
C ₅ ,C ₄ ,H ₁₃	120,2	120,3	120,3	120,2	120,2	
C ₁ ,C ₅ ,C ₄	119,1	119,2	119,1	118,9	118,9	
C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	120,6	120,7	120,6	120,8	120,9	
C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	120,2	120,1	120,3	120,3	120,2	
C ₁ ,N ₁₉ ,C ₂	118,6	118,4	118,5	119,0	119,1	
C ₉ ,N ₂₀ ,C ₁₀	118,0	117,4	117,5	118,0	118,0	116,9
Dihedral açı ($^{\circ}$)						
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₇ ,C ₈	1,2	1,2	1,2	1,1	1,1	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	-178,8	-178,7	-178,7	-179,0	-179,0	
C ₁ ,C ₆ ,C ₇ ,C ₈	-180,0	-179,6	-179,6	-179,6	-179,7	
C ₁ ,C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	0,5	0,4	0,6	0,4	0,3	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	177,4	177,2	177,3	177,8	177,7	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁₀ ,N ₂₀	-1,2	-1,2	-1,3	-0,9	-0,9	
C ₁ ,C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	-1,9	-1,9	-1,9	-1,5	-1,5	
C ₁ ,C ₇ ,C ₁₀ ,N ₂₀	180,0	179,6	179,5	179,8	179,9	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₅	157,0	157,6	156,7	152,2	152,7	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁ ,N ₁₉	-22,6	-21,5	-22,4	-27,0	-26,4	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₅	-24,2	-23,3	-24,1	-28,5	-28,1	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₁ ,N ₁₉	156,6	157,6	156,8	152,4	152,8	
C ₆ ,C ₇ ,C ₈ ,C ₉	-0,3	-0,3	-0,3	-0,5	-0,5	
C ₆ ,C ₇ ,C ₈ ,H ₁₆	179,6	179,6	179,5	179,5	179,5	
H ₁₅ ,C ₇ ,C ₈ ,C ₉	179,6	179,6	179,6	179,5	179,5	
H ₁₅ ,C ₇ ,C ₈ ,H ₁₆	-0,5	-0,5	-0,5	-0,4	-0,4	
C ₇ ,C ₈ ,C ₉ ,H ₁₇	179,6	179,6	179,6	180,0	180,0	

EK-10.(Devam) 2,5'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF - 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney[24]
Dihedral açı ($^{\circ}$)						
C ₇ ,C ₈ ,C ₉ ,N ₂₀	-0,7	-0,7	-0,8	-0,4	-0,4	
H ₁₆ ,C ₈ ,C ₉ ,H ₁₇	-0,3	-0,3	-0,3	-0,1	-0,1	
H ₁₆ ,C ₈ ,C ₉ ,N ₂₀	179,4	179,4	179,4	179,6	179,6	
C ₈ ,C ₉ ,N ₂₀ ,C ₁₀	0,7	0,8	0,8	0,6	0,6	
H ₁₇ ,C ₉ ,N ₂₀ ,C ₁₀	-179,6	-179,6	-179,5	-179,7	-179,7	
C ₆ ,C ₁₀ ,N ₂₀ ,C ₉	0,3	0,3	0,3	0,1	0,1	
H ₁₈ ,C ₁₀ ,N ₂₀ ,C ₉	-178,4	-178,3	-178,4	-178,7	-178,6	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅ ,C ₄	179,6	179,7	179,6	179,7	179,8	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	-1,6	-1,8	-1,7	-1,5	-1,5	
N ₁₉ ,C ₁ ,C ₅ ,C ₄	-1,3	-1,3	-1,4	-1,2	-1,2	
N ₁₉ ,C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	177,5	177,3	177,4	177,5	177,5	
C ₆ ,C ₁ ,N ₁₉ ,C ₂	-179,8	-179,9	-179,8	-180,0	180,0	
C ₅ ,C ₁ ,N ₁₉ ,C ₂	1,0	1,0	1,1	0,9	0,9	
H ₁₁ ,C ₂ ,C ₃ ,C ₄	179,4	179,3	179,3	179,5	179,5	
H ₁₁ ,C ₂ ,C ₃ ,H ₁₂	-0,2	-0,1	-0,2	-0,1	-0,1	
N ₁₉ ,C ₂ ,C ₃ ,C ₄	-0,8	-0,8	-0,8	-0,7	-0,7	
N ₁₉ ,C ₂ ,C ₃ ,H ₁₂	179,7	179,7	179,7	179,8	179,8	
C ₃ ,C ₂ ,N ₁₉ ,C ₁	0,1	0,1	0,0	0,0	0,1	
H ₁₁ ,C ₂ ,N ₁₉ ,C ₁	180,0	180,0	179,9	179,9	179,9	
C ₂ ,C ₃ ,C ₄ ,C ₅	0,4	0,5	0,5	0,4	0,4	
C ₂ ,C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	-179,0	-179,0	-179,0	-179,0	-179,0	
H ₁₂ ,C ₃ ,C ₄ ,C ₅	180,0	180,0	180,0	179,9	179,9	
H ₁₂ ,C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	0,6	0,6	0,6	0,5	0,5	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅ ,C ₁	0,5	0,5	0,6	0,5	0,5	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	-178,3	-178,1	-178,2	-178,2	-178,2	
H ₁₃ ,C ₄ ,C ₅ ,C ₁	180,0	179,9	180,0	180,0	180,0	
H ₁₃ ,C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	1,1	1,3	1,2	1,2	1,2	

EK-11. 2,5'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp		
	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}
ν_1	49	3,70	2,88	49	47	3,72	2,95	50	3,70	2,68	55	3,72	2,54	54	3,79	3,09
ν_2	95	0,92	0,57	95	95	1,08	0,63	95	0,97	0,56	106	1,18	0,66	105	1,24	0,82
ν_3	146	2,79	1,74	147	143	2,73	1,88	145	2,82	1,65	153	2,89	1,65	154	2,82	2,03
ν_4	242	0,93	3,54	242	237	0,85	4,61	243	0,91	3,58	275	1,12	3,30	275	1,07	4,59
ν_5	326	0,04	2,58	328	324	0,07	2,69	328	0,06	2,67	344	0,04	3,23	346	0,05	3,18
ν_6	385	1,46	0,38	387	379	1,66	0,43	386	1,54	0,35	417	1,37	0,29	418	1,43	0,35
ν_7	410	0,20	0,90	409	401	0,04	1,45	410	0,16	0,83	453	2,09	0,37	453	1,73	0,84
ν_8	417	5,05	0,50	416	408	4,70	0,69	417	4,86	0,45	459	4,08	0,57	458	4,67	0,94
ν_9	474	1,98	0,48	473	467	2,51	0,52	475	2,19	0,42	524	3,08	0,08	524	3,39	0,17
ν_{10}	568	3,95	1,52	567	557	4,13	1,21	570	4,03	0,58	619	5,90	1,28	618	6,25	0,93
ν_{11}	622	4,72	6,28	618	610	4,82	8,15	620	4,56	6,22	665	5,59	5,68	667	6,42	7,78
ν_{12}	644	1,50	0,99	640	633	1,44	1,24	642	1,44	0,93	688	1,80	1,58	690	1,95	1,69
ν_{13}	670	6,59	2,27	667	662	7,02	3,07	670	6,65	2,25	718	7,60	2,29	719	7,56	3,10
ν_{14}	722	20,29	0,36	725	712	24,39	0,34	726	21,00	0,33	775	30,54	0,49	775	36,94	0,60
ν_{15}	758	27,24	0,95	760	747	40,06	0,76	763	30,02	0,87	833	18,16	0,51	833	19,50	0,80
ν_{16}	783	2,54	13,45	788	776	17,59	10,19	789	2,99	12,67	836	1,81	15,55	839	2,20	13,69
ν_{17}	789	60,83	0,58	789	777	41,89	3,82	794	60,18	0,63	863	84,35	0,95	859	85,05	1,03
ν_{18}	839	2,89	6,01	842	827	3,09	3,08	845	2,81	5,67	918	4,33	6,89	917	3,36	2,96
ν_{19}	906	0,20	0,84	903	886	0,20	0,89	912	0,21	0,70	993	0,71	0,75	987	0,80	0,86

EK-11.(Devam) 2,5'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp		
	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	V_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}
ν_{20}	945	0,90	5,11	947	927	1,03	4,57	952	0,91	4,53	1057	0,33	4,76	1056	0,23	4,02
ν_{21}	979	0,61	0,18	983	962	0,74	0,45	988	0,61	0,14	1084	4,28	39,38	1087	5,26	38,22
ν_{22}	985	0,04	0,12	987	966	0,04	0,56	993	0,04	0,10	1095	0,43	0,09	1092	0,34	0,79
ν_{23}	1007	3,80	51,52	1009	987	1,01	9,72	1015	1,77	26,90	1101	0,33	0,18	1097	0,20	0,46
ν_{24}	1011	1,20	4,90	1010	989	0,08	1,46	1019	2,26	16,80	1111	10,62	1,19	1114	12,20	1,50
ν_{25}	1013	0,07	0,55	1016	1000	4,09	38,55	1020	0,71	6,12	1115	3,35	53,88	1116	0,25	5,88
ν_{26}	1033	13,83	5,27	1037	1020	16,28	17,32	1037	14,26	20,87	1123	0,54	0,65	1117	1,51	2,96
ν_{27}	1045	2,34	51,04	1061	1049	2,58	22,41	1058	2,23	23,06	1124	0,96	0,31	1121	3,85	38,30
ν_{28}	1069	2,72	62,49	1085	1068	1,80	60,22	1081	2,00	63,73	1142	4,52	49,55	1149	4,72	44,56
ν_{29}	1090	1,58	1,28	1103	1082	2,27	2,47	1099	1,93	2,36	1162	38,36	13,50	1170	38,53	12,63
ν_{30}	1120	4,41	1,83	1130	1109	4,29	2,30	1129	3,87	2,27	1169	0,18	1,11	1176	0,36	0,71
ν_{31}	1137	8,12	10,75	1145	1139	10,74	2,64	1143	9,61	9,15	1176	2,26	5,25	1185	2,37	5,64
ν_{32}	1179	3,68	4,83	1181	1165	3,63	3,91	1181	3,25	4,77	1206	3,09	1,42	1212	3,74	1,70
ν_{33}	1222	8,96	13,16	1238	1219	10,37	13,97	1234	10,40	11,91	1242	7,28	22,49	1251	7,94	24,23
ν_{34}	1277	0,89	86,61	1315	1286	4,60	28,43	1306	4,06	42,52	1305	0,29	6,08	1312	0,33	5,49
ν_{35}	1282	3,17	5,26	1325	1304	2,01	153,11	1312	1,33	96,94	1329	10,02	2,17	1336	10,07	3,10
ν_{36}	1316	7,34	175,56	1344	1316	2,00	23,57	1334	3,09	66,63	1416	11,64	150,43	1423	13,21	98,21

EK-11. (Devam) 2,5'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp		
	V _{har}	I _{IR}	I _R	V _{har}	V _{anhar}	I _{IR}	I _R	V _{har}	I _{IR}	I _R	V _{har}	I _{IR}	I _R	V _{har}	I _{IR}	I _R
υ ₃₇	1325	7,95	60,57	1355	1330	3,21	54,81	1345	3,82	73,00	1419	3,51	5,31	1425	1,34	45,89
υ ₃₈	1364	3,72	11,72	1375	1342	2,49	29,85	1366	2,55	21,81	1475	3,07	5,42	1481	2,71	6,94
υ ₃₉	1441	14,25	2,17	1460	1336	8,77	7,00	1454	12,82	4,85	1559	27,52	1,15	1566	20,76	1,51
υ ₄₀	1463	65,19	31,77	1480	1452	69,14	20,05	1474	71,69	22,35	1583	82,70	16,01	1588	82,35	15,98
υ ₄₁	1499	26,50	7,62	1520	1493	21,56	3,41	1513	23,02	3,69	1631	32,21	2,85	1638	28,08	2,71
υ ₄₂	1515	1,53	72,96	1544	1509	4,00	94,60	1534	3,42	85,35	1648	4,47	19,80	1657	4,43	25,26
υ ₄₃	1598	2,09	6,66	1641	1600	2,85	5,50	1627	2,85	5,43	1750	14,03	13,73	1763	12,90	11,46
υ ₄₄	1615	41,48	130,27	1660	1619	44,47	84,38	1646	44,22	111,16	1773	56,63	26,92	1785	64,05	19,14
υ ₄₅	1625	61,06	532,44	1670	1629	78,71	525,72	1657	74,83	504,84	1784	89,26	81,72	1796	97,48	100,65
υ ₄₆	1631	10,19	16,15	1676	1633	3,41	57,38	1662	4,28	47,56	1791	66,94	282,90	1803	69,83	369,29
υ ₄₇	3147	23,33	123,67	3200	3065	23,25	47,38	1175	22,37	118,83	3321	19,41	83,35	3362	24,95	85,17
υ ₄₈	3150	28,73	97,60	3204	3071	24,02	107,86	1176	26,73	57,16	3322	16,34	100,27	3364	19,74	100,29
υ ₄₉	3153	3,24	78,69	3208	3090	10,91	123,05	1180	4,37	117,75	3331	25,54	82,81	3367	21,18	39,94
υ ₅₀	3172	5,34	90,50	3229	3106	5,24	80,14	3202	5,07	86,45	3334	5,92	34,99	3373	11,55	74,94
υ ₅₁	3182	16,56	179,06	3238	3107	14,35	132,12	3212	12,40	144,90	3350	18,96	147,52	3388	27,60	155,40
υ ₅₂	3193	15,57	150,07	3248	3117	13,98	59,70	3222	12,25	97,92	3358	18,85	145,04	3396	27,48	128,68
υ ₅₃	3200	5,81	175,65	3254	3118	10,04	112,96	3229	6,63	185,12	3369	4,69	119,77	3404	8,07	149,07
υ ₅₄	3204	3,61	99,43	3255	3125	5,03	131,64	3230	4,08	146,36	3373	3,70	87,67	3411	5,03	78,09

EK-12. 2,5'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp				SQM	TED > %5
	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}		
ν_1	49	47	3,72	2,95	48	$\tau_{5,1,6,7}(24)+\tau_{5,1,6,10}(24)+\tau_{19,1,6,7}(25)+\tau_{19,1,6,10}(24)$
ν_2	95	95	1,08	0,63	93	$\tau_{3,2,6,1}(12)+\tau_{5,1,6,7}(7)+\tau_{4,5,1,6}(17)+\tau_{15,7,6,1}(6)+\tau_{18,10,6,1}(6)+\tau_{14,5,1,6}(8)+\tau_{19,1,6,10}(7)+\tau_{2,19,1,6}(14)+\tau_{20,10,6,1}(12)$
ν_3	147	143	2,73	1,88	145	$\delta_{7,6,1}(19)+\delta_{10,6,1}(18)+\delta_{5,1,6}(17)+\delta_{19,1,6}(16)$
ν_4	242	237	0,85	4,61	238	$\delta_{7,6,1}(6)+\delta_{10,6,1}(5)+\tau_{8,7,6,10}(5)+\tau_{8,7,6,1}(6)+\tau_{4,5,1,6}(6)+\tau_{2,19,1,6}(5)+\tau_{4,5,1,19}(7)+\tau_{20,10,6,7}(6)+\tau_{20,10,6,1}(7)$
ν_5	328	324	0,07	2,69	324	$\nu_{1,6}(33)+\delta_{7,6,10}(10)+\delta_{5,1,19}(10)$
ν_6	387	379	1,66	0,43	380	$\delta_{7,6,1}(6)+\delta_{10,6,1}(6)+\delta_{5,1,6}(7)+\delta_{19,1,6}(6)+\tau_{20,9,8,7}(8)+\tau_{20,10,6,7}(8)$
ν_7	409	401	0,04	1,45	401	$\tau_{9,8,7,6}(15)+\tau_{8,7,6,10}(6)+\tau_{9,20,10,6}(11)+\tau_{9,20,10,18}(5)$
ν_8	416	408	4,70	0,69	408	$\tau_{1,5,4,3}(15)+\tau_{5,4,3,2}(8)+\tau_{14,5,4,3}(5)+\tau_{1,19,2,3}(13)+\tau_{2,19,1,5}(6)+\tau_{1,19,2,11}(5)$
ν_9	473	467	2,51	0,52	465	$\delta_{7,6,1}(8)+\delta_{10,6,1}(10)+\delta_{5,1,6}(11)+\delta_{19,1,6}(9)$
ν_{10}	567	557	4,13	1,21	556	$\tau_{5,1,6,10}(7)+\tau_{4,5,1,6}(6)+\tau_{5,4,3,2}(6)+\tau_{4,3,2,11}(7)+\tau_{13,4,3,2}(7)+\tau_{19,1,6,7}(8)+\tau_{2,19,1,6}(6)+\tau_{4,3,2,19}(8)+\tau_{10,20,9,3}(5)+\tau_{20,10,6,1}(5)$
ν_{11}	618	610	4,82	8,15	611	$\delta_{8,7,6}(10)+\delta_{5,4,3}(10)+\delta_{1,19,2}(10)+\delta_{9,20,10}(15)$
ν_{12}	640	633	1,44	1,24	633	$\delta_{8,7,6}(6)+\delta_{9,8,7}(5)+\delta_{1,5,4}(8)+\delta_{5,4,3}(11)+\delta_{1,19,2}(10)+\delta_{3,2,19}(8)+\delta_{9,20,10}(9)$
ν_{13}	667	662	7,02	3,07	660	$\delta_{9,8,7}(8)+\delta_{7,6,10}(7)+\delta_{4,3,2}(9)+\delta_{1,5,4}(7)+\delta_{3,2,19}(7)+\delta_{5,1,19}(8)+\delta_{20,9,8}(7)+\delta_{20,10,6}(8)$
ν_{14}	725	712	24,39	0,34	711	$\tau_{9,8,7,6}(5)+\tau_{9,8,7,15}(8)+\tau_{15,7,6,10}(6)+\tau_{17,9,8,7}(10)+\tau_{18,10,6,7}(5)+\tau_{20,9,8,7}(9)+\tau_{20,10,6,7}(5)+\tau_{9,20,10,6}(8)+\tau_{10,20,9,8}(10)+\tau_{10,20,9,17}(11)+\tau_{9,20,10,18}(8)$
ν_{15}	760	747	40,06	0,76	745	$\tau_{10,9,8,16}(15)+\tau_{14,5,4,3}(11)+\tau_{1,19,2,3}(6)+\tau_{4,3,2,19}(6)+\tau_{12,3,2,19}(19)+\tau_{14,5,1,19}(11)$
ν_{16}	788	776	17,59	10,19	773	$\tau_{16,8,7,6}(5)+\tau_{1,5,4,13}(7)+\tau_{14,5,1,6}(5)+\tau_{2,19,1,5}(7)+\tau_{4,5,1,19}(7)+\tau_{1,19,2,11}(6)+\tau_{20,9,8,16}(6)$
ν_{17}	789	777	41,89	3,82	776	$\nu_{7,6}(7)+\nu_{1,6}(12)+\nu_{5,1}(6)+\delta_{4,3,2}(9)+\delta_{20,9,8}(11)$
ν_{18}	842	827	3,09	3,08	825	$\tau_{15,7,6,1}(8)+\tau_{16,8,7,6}(17)+\tau_{20,9,8,16}(16)$
ν_{19}	903	886	0,20	0,89	885	$\tau_{4,3,3,11}(7)+\tau_{5,4,3,12}(8)+\tau_{13,4,3,12}(15)+\tau_{14,5,1,6}(16)+\tau_{14,5,4,3}(14)+\tau_{14,5,4,13}(8)+\tau_{12,3,2,19}(8)+\tau_{14,5,1,19}(9)$
ν_{20}	947	927	1,03	4,57	929	$\tau_{17,9,8,16}(12)+\tau_{18,10,6,7}(20)+\tau_{18,10,6,1}(26)+\tau_{9,20,10,18}(15)$
ν_{21}	983	962	0,74	0,45	963	$\tau_{9,8,7,15}(5)+\tau_{16,8,7,15}(6)+\tau_{18,9,8,7}(7)+\tau_{17,9,8,16}(7)+\tau_{4,3,2,11}(9)+\tau_{12,3,2,11}(19)+\tau_{1,19,2,11}(8)+\tau_{10,20,9,17}(7)$

EK-12.(Devam) 2,5' -Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

MPW1PW91-dgdzvp					TED > %5	
	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	SQM	
ν_{22}	987	966	0,04	0,56	967	$\tau_{17,9,8,7}(7)+\tau_{17,9,8,16}(8)+\tau_{4,3,2,11}(8)+\tau_{12,3,2,11}(16)+\tau_{13,5,4,13}(6)+\tau_{1,19,2,11}(8)+\tau_{10,20,9,17}(7)$
ν_{23}	1009	987	1,01	9,72	989	$\tau_{15,7,6,10}(8)+\tau_{15,7,6,1}(9)+\tau_{16,8,7,15}(30)+\tau_{17,9,8,17}(23)$
ν_{24}	1010	989	0,08	1,46	990	$\tau_{12,3,2,11}(14)+\tau_{13,4,3,2}(6)+\tau_{1,5,4,13}(8)+\tau_{13,4,3,12}(28)+\tau_{14,5,4,13}(25)$
ν_{25}	1016	1000	4,09	38,55	999	$\nu_{3,2}(6)+\nu_{5,1}(10)+\nu_{19,1}(14)+\nu_{19,2}(10)+\delta_{5,4,3}(7)+\delta_{1,19,2}(7)+\delta_{3,2,19}(5)$
ν_{26}	1037	1020	16,28	17,32	1024	$\nu_{20,9}(6)+\delta_{8,7,6}(10)+\delta_{9,8,7}(7)+\delta_{9,8,16}(6)+\delta_{18,10,6}(6)+\delta_{20,10,6}(9)+\delta_{9,20,10}(12)$
ν_{27}	1061	1049	2,58	22,41	1038	$\nu_{7,6}(13)+\nu_{8,7}(12)+\nu_{9,8}(13)+\nu_{10,6}(11)$
ν_{28}	1085	1068	1,80	60,22	1062	$\nu_{9,8}(17)+\nu_{3,2}(16)+\nu_{4,3}(16)+\nu_{20,9}(5)$
ν_{29}	1103	1082	2,27	2,47	1082	$\nu_{7,6}(7)+\nu_{9,8}(6)+\nu_{10,6}(6)+\nu_{4,3}(10)+\nu_{5,1}(6)+\nu_{19,1}(6)+\delta_{14,5,4}(6)$
ν_{30}	1130	1109	4,29	2,30	1109	$\nu_{3,2}(15)+\nu_{4,3}(5)+\nu_{5,4}(14)+\delta_{12,3,2}(18)+\delta_{4,3,12}(18)+\delta_{14,5,4}(5)$
ν_{31}	1145	1139	10,74	2,64	1125	$\nu_{8,7}(20)+\nu_{20,10}(5)+\delta_{15,7,6}(12)+\delta_{8,7,15}(18)+\delta_{16,8,7}(18)+\delta_{9,8,16}(9)$
ν_{32}	1181	1165	3,63	3,91	1161	$\nu_{4,3}(6)+\nu_{5,4}(12)+\delta_{12,3,2}(9)+\delta_{4,3,12}(7)+\delta_{13,4,3}(18)+\delta_{5,4,13}(20)+\delta_{14,5,1}(10)+\delta_{14,5,4}(11)$
ν_{33}	1238	1219	10,37	13,97	1214	$\nu_{9,8}(8)+\nu_{20,9}(19)+\nu_{20,10}(11)+\delta_{9,8,16}(7)+\delta_{17,9,8}(9)+\delta_{17,9,20}(17)+\delta_{18,10,20}(6)$
ν_{34}	1315	1286	4,60	28,43	1289	$\nu_{7,6}(6)+\nu_{10,6}(16)+\nu_{5,1}(8)+\nu_{20,10}(10)+\delta_{3,2,11}(6)+\delta_{14,5,1}(8)+\delta_{14,5,4}(6)+\delta_{11,2,19}(10)$
ν_{35}	1325	1304	2,01	153,11	1296	$\nu_{1,6}(11)+\nu_{3,2}(5)+\nu_{5,1}(6)+\nu_{5,4}(12)+\nu_{19,1}(23)$
ν_{36}	1344	1316	2,00	23,57	1316	$\nu_{7,6}(7)+\nu_{9,8}(6)+\nu_{1,6}(7)+\nu_{20,9}(10)+\nu_{20,10}(16)+\delta_{5,4,13}(5)+\delta_{14,5,4}(6)$
ν_{37}	1355	1330	3,21	54,81	1326	$\nu_{1,6}(12)+\nu_{19,2}(33)+\delta_{11,2,19}(10)$
ν_{38}	1375	1342	2,49	29,85	1353	$\delta_{15,7,6}(10)+\delta_{8,7,15}(8)+\delta_{17,9,8}(7)+\delta_{18,10,6}(21)+\delta_{17,9,20}(5)+\delta_{18,10,20}(21)$
ν_{39}	1460	1336	8,77	7,00	1433	$\nu_{10,6}(5)+\nu_{20,10}(12)+\delta_{17,9,8}(10)+\delta_{3,2,11}(6)+\delta_{12,3,2}(5)+\delta_{4,3,12}(6)+\delta_{13,4,3}(5)+\delta_{17,9,20}(14)$
ν_{40}	1480	1452	69,14	20,05	1453	$\nu_{5,1}(5)+\nu_{8,7}(5)+\nu_{10,6}(8)+\nu_{19,7}(7)+\delta_{17,8,7}(6)+\delta_{9,8,16}(9)+\delta_{17,9,8}(9)+\delta_{10,9,17}(6)+\delta_{13,4,20}(6)$
ν_{41}	1520	1493	21,56	3,41	1493	$\nu_{19,1}(8)+\delta_{9,8,16}(5)+\delta_{17,9,8}(5)+\delta_{18,10,6}(5)+\delta_{3,2,11}(9)+\delta_{14,5,1}(6)+\delta_{11,2,19}(8)$
ν_{42}	1544	1509	4,00	94,60	1513	$\nu_{8,7}(6)+\nu_{9,8}(5)+\nu_{6,1}(11)+\nu_{3,2}(6)+\nu_{19,1}(6)+\nu_{20,9}(5)+\delta_{16,8,7}(6)+\delta_{9,8,16}(6)+\delta_{18,10,6}(5)+\delta_{11,2,19}(5)+\delta_{18,10,20}(5)$
ν_{43}	1641	1600	2,85	5,50	1605	$\nu_{7,6}(9)+\nu_{9,8}(9)+\nu_{10,6}(5)+\nu_{3,2}(6)+\nu_{4,3}(17)+\nu_{5,1}(5)+\nu_{19,1}(6)+\nu_{20,9}(11)$

EK-12.(Devam) 2,5'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp				SQM	TED > %5
	U _{har}	U _{anhar}	I _{IR}	I _R		
U ₄₄	1660	1619	44,47	84,38	1624	v _{7,6} (7)+v _{9,8} (11)+v _{10,6} (10)+v _{4,3} (16)+v _{5,4} (5)+v _{19,1} (9)+v _{20,9} (6)
U ₄₅	1670	1629	78,71	525,72	1634	v _{7,6} (6)+v _{8,7} (5)+v _{3,2} (12)+v _{5,1} (13)+v _{5,4} (15)+v _{19,2} (10)
U ₄₆	1676	1633	3,41	57,38	1639	v _{7,6} (6)+v _{8,7} (21)+v _{10,6} (7)+v _{5,4} (7)+v _{19,2} (6)+v _{20,10} (13)
U ₄₇	3200	3065	23,25	47,38	3071	v _{18,10} (95)
U ₄₈	3204	3071	24,02	107,86	3075	v _{11,2} (95)
U ₄₉	3208	3090	10,91	123,05	3079	v _{16,8} (8)+v _{17,9} (88)
U ₅₀	3229	3106	5,24	80,14	3099	v _{12,3} (10)+v _{13,4} (74)+v _{14,5} (13)
U ₅₁	3238	3107	14,35	132,12	3109	v _{15,7} (21)+v _{16,8} (71)+v _{17,9} (7)
U ₅₂	3248	3117	13,98	59,70	3118	v _{12,3} (44)+v _{14,5} (53)
U ₅₃	3254	3118	10,04	112,96	3123	v _{12,3} (40)+v _{13,4} (24)+v _{14,5} (32)
U ₅₄	3255	3125	5,03	131,64	3125	v _{15,7} (77)+v _{16,8} (21)

EK-13. 2,6'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF - 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney[26]
Bağ uzunluğu (Å)						
C ₆ ,C ₁	1,491	1,487	1,485	1,496	1,495	1,500
C ₆ ,N ₂₀	1,342	1,340	1,336	1,323	1,325	1,350
C ₇ ,C ₈	1,389	1,389	1,385	1,381	1,382	1,370
C ₇ ,H ₁₅	1,081	1,083	1,081	1,071	1,071	1,080
C ₈ ,C ₉	1,393	1,392	1,389	1,384	1,385	1,370
C ₈ ,H ₁₆	1,085	1,086	1,084	1,076	1,075	1,080
C ₉ ,C ₁₀	1,394	1,393	1,390	1,383	1,384	1,400
C ₉ ,H ₁₇	1,083	1,085	1,082	1,074	1,074	1,080
C ₁₀ ,H ₁₈	1,087	1,088	1,086	1,077	1,076	1,080
C ₁₀ ,N ₂₀	1,333	1,331	1,328	1,318	1,320	
C ₁ ,C ₅	1,401	1,399	1,396	1,391	1,392	
C ₁ ,N ₁₉	1,342	1,340	1,336	1,323	1,325	
C ₂ ,C ₃	1,394	1,393	1,390	1,383	1,384	1,370
C ₂ ,H ₁₁	1,087	1,088	1,086	1,077	1,076	
C ₂ ,N ₁₉	1,333	1,331	1,328	1,318	1,320	1,370
C ₃ ,C ₄	1,393	1,392	1,389	1,384	1,385	1,370
C ₃ ,H ₁₂	1,083	1,085	1,083	1,074	1,074	
C ₄ ,C ₅	1,389	1,389	1,385	1,381	1,382	1,400
C ₄ ,H ₁₃	1,085	1,086	1,084	1,076	1,075	
C ₅ ,H ₁₄	1,081	1,083	1,081	1,071	1,071	
Bağ açısı (°)						
C ₇ ,C ₆ ,C ₁	120,8	120,6	120,6	120,8	120,8	
C ₇ ,C ₆ ,N ₂₀	122,2	122,6	122,5	122,3	122,3	122,5
C ₁ ,C ₆ ,N ₂₀	116,9	116,9	116,9	116,9	116,9	116,1
C ₆ ,C ₇ ,C ₈	118,8	118,7	118,7	118,5	118,5	119,7
C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	119,1	119,1	119,0	119,8	119,9	
C ₈ ,C ₇ ,H ₁₅	122,1	122,2	122,3	121,8	121,7	
C ₇ ,C ₈ ,C ₉	119,0	119,0	119,0	119,2	119,2	118,3
C ₇ ,C ₈ ,H ₁₆	120,3	120,4	120,4	120,2	120,2	
C ₉ ,C ₈ ,H ₁₆	120,6	120,7	120,6	120,6	120,6	
C ₈ ,C ₉ ,C ₁₀	118,0	118,0	118,0	117,8	117,8	118,5
C ₈ ,C ₉ ,H ₁₇	121,6	121,6	121,6	121,7	121,7	
C ₁₀ ,C ₉ ,H ₁₇	120,4	120,4	120,4	120,5	120,5	
C ₉ ,C ₁₀ ,H ₁₈	120,4	120,3	120,4	120,4	120,4	
C ₉ ,C ₁₀ ,N ₂₀	123,5	123,7	123,6	123,4	123,4	124,3

EK-13.(Devam) 2,6'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF - 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney[26]
Bağ açısı ($^{\circ}$)						
H ₁₈ , C ₁₀ , N ₂₀	116,0	116,0	116,0	116,2	116,2	
C ₆ , C ₁ , C ₅	120,8	120,6	120,6	120,8	120,8	
C ₆ , C ₁ , N ₁₉	117,0	117,0	116,9	116,9	116,9	
C ₅ , C ₁ , N ₁₉	122,2	122,6	122,5	122,3	122,3	
C ₃ , C ₂ , H ₁₁	120,4	120,3	120,4	120,4	120,4	
C ₃ , C ₂ , N ₁₉	123,5	123,7	123,6	123,4	123,4	124,2
H ₁₁ , C ₂ , N ₁₉	116,0	116,0	116,0	116,2	116,2	
C ₂ , C ₃ , C ₄	118,0	118,0	118,0	117,8	117,8	118,3
C ₂ , C ₃ , H ₁₂	120,4	120,4	120,4	120,5	120,5	
C ₄ , C ₃ , H ₁₂	121,6	121,6	121,6	121,7	121,7	
C ₃ , C ₄ , C ₅	119,0	119,9	119,0	119,2	119,2	119,4
C ₃ , C ₄ , H ₁₃	120,6	120,7	120,6	120,6	120,6	
C ₅ , C ₄ , H ₁₃	120,3	120,4	120,4	120,2	120,2	
C ₁ , C ₅ , C ₄	118,8	118,7	118,7	118,5	118,5	
C ₁ , C ₅ , H ₁₄	119,1	119,1	119,0	119,8	119,9	
C ₄ , C ₅ , H ₁₄	122,1	122,2	122,3	121,8	121,7	
C ₁ , N ₁₉ , C ₂	118,3	118,1	118,2	118,9	118,9	116,4
C ₆ , N ₂₀ , C ₁₀	118,3	118,1	118,2	118,9	118,9	116,7
Dihedral açısı ($^{\circ}$)						
C ₁ , C ₆ , C ₇ , C ₈	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	
C ₁ , C ₆ , C ₇ , H ₁₅	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	
N ₂₀ , C ₆ , C ₇ , C ₈	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	
N ₂₀ , C ₆ , C ₇ , H ₁₅	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	
C ₇ , C ₆ , C ₁ , C ₅	-180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	
C ₇ , C ₆ , C ₁ , N ₁₉	-0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	
N ₂₀ , C ₆ , C ₁ , C ₅	-0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	
N ₂₀ , C ₆ , C ₁ , N ₁₉	-180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	
C ₇ , C ₆ , N ₂₀ , C ₁₀	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	
C ₁ , C ₆ , N ₂₀ , C ₁₀	-180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	
C ₆ , C ₇ , C ₈ , C ₉	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	
C ₆ , C ₇ , C ₈ , H ₁₆	-180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	
H ₁₅ , C ₇ , C ₈ , C ₉	-180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	
H ₁₅ , C ₇ , C ₈ , H ₁₆	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	
C ₇ , C ₈ , C ₉ , C ₁₀	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	

EK-13.(Devam) 2,6'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF - 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney[26]
Dihedral açısı (°)						
C ₇ ,C ₈ ,C ₉ ,H ₁₇	180,0	-180,0	180,0	180,0	180,0	
H ₁₆ ,C ₈ ,C ₉ ,C ₁₀	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	
H ₁₆ ,C ₈ ,C ₉ ,H ₁₇	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	
C ₈ ,C ₉ ,C ₁₀ ,H ₁₈	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	
C ₈ ,C ₉ ,C ₁₀ ,N ₂₀	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	
H ₁₇ ,C ₉ ,C ₁₀ ,H ₁₈	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	
H ₁₇ ,C ₉ ,C ₁₀ ,N ₂₀	180,0	-180,0	180,0	-180,0	180,0	
C ₉ ,C ₁₀ ,N ₂₀ ,C ₆	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	
H ₁₈ ,C ₁₀ ,N ₂₀ ,C ₆	-180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅ ,C ₄	180,0	180,0	180,0	-180,0	180,0	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	
N ₁₉ ,C ₁ ,C ₅ ,C ₄	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	
N ₁₉ ,C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	
C ₆ ,C ₁ ,N ₁₉ ,C ₂	-180,0	-180,0	180,0	180,0	180,0	
C ₅ ,C ₁ ,N ₁₉ ,C ₂	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	
H ₁₁ ,C ₂ ,C ₃ ,C ₄	180,0	180,0	180,0	-180,0	180,0	
H ₁₁ ,C ₂ ,C ₃ ,H ₁₂	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	
N ₁₉ ,C ₂ ,C ₃ ,C ₄	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	
N ₁₉ ,C ₂ ,C ₃ ,H ₁₂	180,0	180,0	180,0	-180,0	180,0	
C ₃ ,C ₂ ,N ₁₉ ,C ₁	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	
H ₁₁ ,C ₂ ,N ₁₉ ,C ₁	-180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	
C ₂ ,C ₃ ,C ₄ ,C ₅	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	
C ₂ ,C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	
H ₁₂ ,C ₃ ,C ₄ ,C ₅	180,0	-180,0	180,0	180,0	180,0	
H ₁₂ ,C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅ ,C ₁	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	-180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	
H ₁₃ ,C ₄ ,C ₅ ,C ₁	-180,0	180,0	180,0	180,0	180,0	
H ₁₃ ,C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	

EK-14. 2,6'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp			Deney[28]	Deney[28]
	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	IR	R
ν_1	49	3,47	0,00	50	46	3,74	0,00	52	3,46	0,00	45	3,53	0,00	43	3,93	0,00		
ν_2	95	3,52	0,00	95	95	3,55	0,00	96	3,58	0,00	107	4,15	0,00	106	3,96	0,00		
ν_3	164	7,30	0,00	163	152	6,99	0,00	164	7,39	0,00	176	8,18	0,00	177	7,95	0,00		
ν_4	225	0,00	5,07	226	223	0,00	7,33	227	0,00	5,07	255	0,00	4,90	253	0,00	7,99		
ν_5	333	0,00	1,69	335	328	0,00	1,72	235	0,00	1,80	354	0,00	2,48	355	0,00	2,49		332
ν_6	411	9,17	0,00	409	401	9,58	0,00	412	9,04	0,00	457	9,74	0,00	455	11,20	0,00		
ν_7	417	0,00	0,38	416	408	0,00	1,03	416	0,00	0,39	460	0,00	0,32	459	0,00	1,03		
ν_8	443	0,16	0,00	442	434	0,49	0,00	443	0,20	0,00	473	0,00	1,10	475	0,00	1,24		
ν_9	447	0,00	1,44	450	440	0,00	1,69	450	0,00	1,42	491	1,00	0,00	491	1,00	0,00		439
ν_{10}	568	0,00	0,90	467	562	0,00	0,27	571	0,00	0,95	618	0,00	0,78	615	0,00	0,13		
ν_{11}	629	0,00	11,62	626	620	0,00	13,75	628	0,00	11,35	672	0,00	11,61	674	0,00	13,64	619	
ν_{12}	637	12,24	0,00	632	629	12,55	0,00	635	12,05	0,00	680	15,53	0,00	682	16,92	0,00		
ν_{13}	671	6,05	0,00	669	662	6,77	0,00	671	6,36	0,00	719	6,01	0,00	721	6,16	0,00	653	614
ν_{14}	756	0,00	0,18	758	744	0,00	0,27	762	0,00	0,15	822	9,65	0,00	820	22,75	0,00		
ν_{15}	759	0,10	0,00	765	753	1,40	0,00	765	0,01	0,00	831	0,00	0,07	831	0,00	0,47		
ν_{16}	773	121,74	0,00	771	757	132,58	0,00	778	125,37	0,00	836	0,00	14,45	839	0,00	13,35		
ν_{17}	783	0,00	13,56	789	778	0,00	12,95	789	0,00	12,83	849	142,91	0,00	846	134,93	0,00		764
ν_{18}	838	0,00	5,17	836	823	0,00	3,12	845	0,00	5,02	915	0,00	9,80	910	0,00	5,78		
ν_{19}	919	1,10	0,00	919	898	1,32	0,00	925	1,15	0,00	1006	1,91	0,00	1002	2,21	0,00		

EK-14.(Devam) 2,6'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp			Deney[28]	Deney[28]
	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	IR	R
ν_{20}	927	0,00	0,24	927	906	0,00	0,27	934	0,00	0,20	1018	0,00	0,85	1014	0,00	0,89		
ν_{21}	983	0,84	0,00	984	964	1,15	0,00	991	0,85	0,00	1085	5,84	0,00	1088	7,80	0,00		
ν_{22}	988	0,00	0,38	989	969	0,00	2,33	999	0,00	0,32	1092	0,00	104,29	1091	0,46	0,00		
ν_{23}	1010	6,07	0,00	1018	994	8,96	0,00	1020	7,42	0,00	1096	0,58	0,00	1094	0,00	92,06	993	995
ν_{24}	1013	0,00	131,91	1018	994	0,38	0,00	1022	0,00	107,92	1101	0,00	0,48	1095	0,00	2,61		
ν_{25}	1021	0,29	0,00	1018	1005	0,00	1,32	1027	0,00	0,60	1126	17,25	0,00	1122	0,89	0,00		
ν_{26}	1021	0,00	0,61	1020	1006	0,00	103,62	1027	0,32	0,00	1128	0,00	1,35	1122	0,00	2,75		
ν_{27}	1055	12,78	0,00	1067	1053	10,32	0,00	1065	9,96	0,00	1128	0,87	0,00	1131	18,38	0,00	1040	1045
ν_{28}	1065	0,00	49,52	1080	1058	0,00	52,88	1076	0,00	53,60	1134	0,00	51,71	1146	0,00	46,99		
ν_{29}	1088	5,74	0,00	1099	1071	11,56	0,00	1096	9,68	0,00	1161	60,59	0,00	1169	62,01	0,00	1064	
ν_{30}	1112	17,46	0,00	1125	1103	16,37	0,00	1123	16,34	0,00	1162	0,00	19,72	1170	0,00	18,00	1084	
ν_{31}	1117	0,00	9,81	1125	1107	0,00	11,72	1124	0,00	12,70	1174	16,48	0,00	1181	15,55	0,00		1093
ν_{32}	1170	0,00	16,82	1172	1155	2,70	0,00	1172	2,30	0,00	1200	0,00	13,59	1205	0,00	13,09		
ν_{33}	1170	2,84	0,00	1172	1155	0,00	13,69	1172	0,00	16,26	1205	2,66	0,00	1211	3,27	0,00	1166	
ν_{34}	1273	0,00	226,45	1306	1272	1,49	0,00	1300	0,00	232,08	1299	0,00	32,09	1307	0,00	29,36		
ν_{35}	1283	4,63	0,00	1309	1282	0,00	214,39	1300	1,97	0,00	1309	10,36	0,00	1317	13,14	0,00	1250	1237
ν_{36}	1314	4,01	0,00	1354	1321	0,00	1,40	1342	0,00	8,21	1399	2,69	0,00	1404	2,78	0,00		1302

EK-14.(Devam) 2,6'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp			Deney[28]	Deney[28]
	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	IR	R
ν_{37}	1323	0,00	141,99	1359	1325	0,00	114,62	1344	10,47	0,00	1416	0,00	174,28	1424	0,00	163,67		1309
ν_{38}	1338	0,00	42,30	1359	1335	12,08	0,00	1352	0,00	114,46	1442	0,00	6,29	1448	0,00	9,82		
ν_{39}	1448	39,12	0,00	1461	1432	38,99	0,00	1458	43,09	0,00	1569	54,27	0,00	1574	48,71	0,00	1416	1446
ν_{40}	1474	0,00	143,86	1493	1465	0,00	100,31	1489	0,00	110,67	1598	0,00	60,09	1603	0,00	59,64	1453	1482
ν_{41}	1487	73,67	0,00	1508	1477	67,42	0,00	1501	70,96	0,00	1617	92,30	0,00	1624	85,78	0,00		
ν_{42}	1510	0,00	134,26	1540	1508	0,00	179,50	1530	0,00	153,65	1653	0,00	68,64	1662	0,00	82,30		
ν_{43}	1597	39,94	0,00	1640	1594	43,94	0,00	1627	43,62	0,00	1746	76,20	0,00	1759	78,52	0,00		
ν_{44}	1615	0,00	166,56	1660	1621	0,00	144,38	1647	0,00	375,74	1774	0,00	138,11	1787	0,00	210,99	1558	1572
ν_{45}	1628	98,45	0,00	1672	1631	103,07	0,00	1658	103,53	0,00	1779	162,87	0,00	1792	166,84	0,00		1586
ν_{46}	1628	0,00	380,75	1673	1634	0,00	375,24	1660	0,00	360,15	1780	0,00	380,35	1801	0,00	395,94		
ν_{47}	3147	47,75	0,00	3202	3062	48,16	0,00	3174	46,05	0,00	3319	35,13	0,00	3360	34,72	0,00	3054	3048
ν_{48}	3147	0,00	249,75	3202	3066	0,00	217,81	3174	0,00	240,04	3320	0,00	171,18	3361	0,00	167,19	3061	3065
ν_{49}	3171	0,00	204,01	3227	3102	0,00	179,76	3200	0,00	194,51	3332	0,00	185,87	3371	0,00	182,15	3078	3078
ν_{50}	3171	21,12	0,00	3227	3102	21,36	0,00	3200	19,26	0,00	3332	38,88	0,00	3371	51,93	0,00	3086	3088
ν_{51}	3191	36,54	0,00	3248	3111	34,92	0,00	3222	29,95	0,00	3357	43,09	0,00	3395	59,45	0,00		
ν_{52}	3191	0,00	500,09	3249	3117	0,00	415,60	3222	0,00	463,05	3357	0,00	104,98	3395	0,00	104,50		
ν_{53}	3216	3,59	0,00	3264	3132	4,95	0,00	3242	4,48	0,00	3395	1,35	0,00	3428	2,02	0,00		
ν_{54}	3217	0,00	145,38	3265	3132	0,00	152,68	3242	0,00	153,57	3395	0,00	113,74	3429	0,00	113,75		

EK-15. 2,6'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

MPW1PW91-dgdzvp						TED > %5
	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	SQM	
ν_1	50	46	3,74	0,00	49	$\tau_{5,1,6,7}(27)+\tau_{19,1,6,7}(24)+\tau_{5,1,6,20}(24)+\tau_{19,1,6,20}(22)$
ν_2	95	95	3,55	0,00	94	$\tau_{8,7,6,1}(16)+\tau_{4,5,1,6}(16)+\tau_{15,7,6,1}(7)+\tau_{14,5,1,6}(7)+\tau_{2,19,1,6}(14)+\tau_{10,20,6,1}(14)+\tau_{19,1,6,20}(8)$
ν_3	163	152	6,99	0,00	162	$\delta_{7,6,1}(24)+\delta_{5,1,6}(24)+\delta_{19,1,6}(21)+\delta_{1,6,20}(21)$
ν_4	226	223	0,00	7,33	222	$\tau_{8,7,6,1}(11)+\tau_{4,5,1,6}(11)+\tau_{2,19,1,6}(8)+\tau_{2,19,1,5}(5)+\tau_{4,5,1,19}(7)+\tau_{8,7,6,20}(7)+\tau_{10,20,6,7}(5)+\tau_{10,20,6,1}(8)$
ν_5	335	328	0,00	1,72	329	$\nu_{1,6}(34)+\delta_{5,1,19}(11)+\delta_{7,6,20}(11)$
ν_6	409	401	9,58	0,00	401	$\tau_{9,8,7,6}(9)+\tau_{1,5,4,3}(9)+\tau_{1,19,2,3}(9)+\tau_{6,20,10,9}(9)$
ν_7	416	408	0,00	1,03	407	$\tau_{9,8,7,6}(10)+\tau_{1,5,4,3}(10)+\tau_{1,19,2,3}(9)+\tau_{6,20,10,9}(9)$
ν_8	442	434	0,49	0,00	433	$\tau_{5,4,3,2}(9)+\tau_{10,9,8,7}(9)+\tau_{10,9,8,16}(5)+\tau_{18,10,9,8}(5)+\tau_{4,3,2,11}(5)+\tau_{13,4,3,2}(5)+\tau_{9,8,7,19}(5)+\tau_{2,19,1,5}(6)+\tau_{10,20,6,7}(6)+\tau_{20,10,9,8}(5)+\tau_{19,1,6,20}(8)$
ν_9	450	440	0,00	1,69	445	$\delta_{7,6,1}(18)+\delta_{5,1,6}(18)+\delta_{19,1,6}(19)+\delta_{1,6,20}(19)$
ν_{10}	467	562	0,00	0,27	556	$\tau_{5,4,3,2}(5)+\tau_{10,9,8,7}(5)+\tau_{10,9,8,16}(6)+\tau_{18,10,9,8}(6)+\tau_{4,3,2,11}(6)+\tau_{13,4,3,2}(6)+\tau_{19,1,6,7}(6)+\tau_{2,19,1,6}(5)+\tau_{4,3,2,19}(7)+\tau_{20,10,9,8}(7)+\tau_{10,20,6,1}(5)+\tau_{5,1,6,20}(6)$
ν_{11}	626	620	0,00	13,75	621	$\delta_{8,7,6}(7)+\delta_{9,8,7}(10)+\delta_{1,5,4}(7)+\delta_{5,4,3}(10)+\delta_{1,19,2}(9)+\delta_{3,2,19}(7)+\delta_{6,20,10}(9)+\delta_{20,10,9}(7)$
ν_{12}	632	629	12,55	0,00	627	$\delta_{9,8,7}(10)+\delta_{5,4,3}(10)+\delta_{1,19,2}(11)+\delta_{6,20,10}(11)$
ν_{13}	669	662	6,77	0,00	663	$\delta_{8,7,6}(8)+\delta_{10,9,8}(7)+\delta_{4,3,2}(7)+\delta_{1,5,4}(8)+\delta_{3,2,19}(8)+\delta_{5,1,19}(7)+\delta_{7,6,20}(7)+\delta_{20,10,9}(8)$
ν_{14}	758	744	0,00	0,27	743	$\tau_{9,8,7,15}(5)+\tau_{17,9,8,7}(8)+\tau_{5,4,3,12}(8)+\tau_{14,5,4,3}(5)+\tau_{12,3,2,19}(10)+\tau_{14,5,1,19}(5)+\tau_{15,7,6,20}(5)+\tau_{20,10,9,17}(10)$
ν_{15}	765	753	1,40	0,00	750	$\tau_{1,19,2,3}(7)+\tau_{4,3,2,19}(6)+\tau_{2,19,1,5}(7)+\tau_{4,5,1,19}(6)+\tau_{8,7,6,20}(6)+\tau_{10,20,6,7}(7)+\tau_{6,20,10,9}(7)+\tau_{20,10,9,8}(6)$
ν_{16}	771	757	132,58	0,00	756	$\tau_{16,8,7,6}(8)+\tau_{10,9,8,16}(6)+\tau_{17,9,8,7}(9)+\tau_{5,4,3,12}(9)+\tau_{13,4,3,2}(6)+\tau_{1,5,4,13}(8)+\tau_{12,3,2,19}(9)+\tau_{20,10,9,17}(9)$
ν_{17}	789	778	0,00	12,95	776	$\nu_{7,6}(7)+\nu_{6,1}(14)+\nu_{5,1}(7)+\nu_{19,1}(6)+\nu_{20,6}(6)+\delta_{10,9,8}(11)+\delta_{4,3,2}(11)$
ν_{18}	836	823	0,00	3,12	819	$\tau_{19,1,6,7}(8)+\tau_{5,1,6,20}(8)$
ν_{19}	919	898	1,32	0,00	900	$\tau_{9,8,7,15}(8)+\tau_{15,7,6,1}(6)+\tau_{17,9,8,16}(10)+\tau_{13,4,3,12}(10)+\tau_{14,5,1,6}(6)+\tau_{14,5,4,3}(8)$
ν_{20}	927	906	0,00	0,27	908	$\tau_{9,8,7,15}(7)+\tau_{15,7,6,1}(8)+\tau_{13,4,3,12}(9)+\tau_{17,9,8,16}(9)+\tau_{14,5,1,6}(8)+\tau_{14,5,4,3}(7)$
ν_{21}	984	964	1,15	0,00	964	$\tau_{18,10,9,8}(8)+\tau_{18,10,9,17}(21)+\tau_{10,3,2,11}(8)+\tau_{12,3,2,11}(21)+\tau_{1,19,2,11}(8)+\tau_{6,20,10,18}(8)$

EK-15.(Devam) 2,6'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

MPW1PW91-dgdzvp						TED > %5
	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	SQM	
ν_{22}	989	969	0,00	2,33	969	$\tau_{18,10,9,8}(7)+\tau_{18,10,9,17}(21)+\tau_{4,3,2,11}(7)+\tau_{12,3,2,11}(21)+\tau_{1,19,2,11}(8)+\tau_{6,20,10,18}(8)$
ν_{23}	1018	994	8,96	0,00	997	$\tau_{16,8,7,15}(17)+\tau_{13,4,3,12}(12)+\tau_{17,9,8,16}(12)+\tau_{14,5,4,13}(17)$
ν_{24}	1018	994	0,38	0,00	997	$\tau_{16,8,7,15}(18)+\tau_{13,4,3,12}(11)+\tau_{17,9,8,16}(11)+\tau_{14,5,4,13}(18)$
ν_{25}	1018	1005	0,00	1,32	1000	$\nu_{7,6}(6)+\nu_{5,1}(6)+\nu_{19,1}(7)+\nu_{19,2}(6)+\nu_{20,6}(7)+\nu_{20,10}(6)$
ν_{26}	1020	1006	0,00	103,62	1004	$\nu_{19,1}(6)+\nu_{20,6}(6)$
ν_{27}	1067	1053	10,32	0,00	1046	$\nu_{9,8}(10)+\nu_{10,9}(8)+\nu_{3,2}(8)+\nu_{4,3}(10)+\delta_{1,19,2}(6)+\delta_{6,20,10}(6)$
ν_{28}	1080	1058	0,00	52,88	1055	$\nu_{4,3}(16)+\nu_{10,6}(10)+\nu_{3,2}(10)+\nu_{9,8}(15)$
ν_{29}	1099	1071	11,56	0,00	1079	$\nu_{7,6}(7)+\nu_{5,1}(7)+\nu_{19,1}(5)+\nu_{20,6}(5)+\delta_{8,7,15}(9)+\delta_{14,5,4}(9)$
ν_{30}	1125	1103	16,37	0,00	1102	$\nu_{8,7}(8)+\nu_{10,9}(9)+\nu_{3,2}(9)+\nu_{5,4}(8)+\delta_{17,9,8}(5)+\delta_{10,9,17}(9)+\delta_{12,3,2}(9)+\delta_{4,3,12}(5)$
ν_{31}	1125	1107	0,00	11,72	1105	$\nu_{8,7}(7)+\nu_{10,9}(8)+\nu_{3,2}(8)+\nu_{5,4}(7)+\delta_{8,7,15}(7)+\delta_{17,9,8}(8)+\delta_{10,9,17}(6)+\delta_{12,3,2}(6)+\delta_{4,3,12}(8)+\delta_{14,5,4}(7)$
ν_{32}	1172	1155	2,70	0,00	1152	$\nu_{8,7}(5)+\nu_{5,4}(5)+\delta_{15,7,6}(5)+\delta_{16,8,7}(10)+\delta_{9,8,16}(9)+\delta_{13,4,3}(9)+\delta_{5,4,13}(10)+\delta_{14,5,1}(5)$
ν_{33}	1172	1155	0,00	13,69	1152	$\nu_{4,3}(6)+\nu_{9,8}(6)+\delta_{16,8,7}(8)+\delta_{9,8,16}(8)+\delta_{17,9,8}(6)+\delta_{10,5,17}(8)+\delta_{12,3,2}(8)+\delta_{4,3,12}(6)+\delta_{13,4,3}(8)+\delta_{5,4,13}(8)$
ν_{34}	1306	1272	1,49	0,00	1280	$\nu_{8,7}(9)+\nu_{6,1}(12)+\nu_{5,4}(9)+\nu_{19,1}(6)+\nu_{19,2}(7)+\nu_{20,6}(6)+\nu_{20,10}(7)+\delta_{15,7,6}(5)+\delta_{8,7,15}(6)+\delta_{14,5,1}(5)+\delta_{14,5,4}(6)$
ν_{35}	1309	1282	0,00	214,39	1281	$\nu_{7,6}(7)+\nu_{5,1}(7)+\nu_{19,1}(8)+\nu_{20,6}(8)+\delta_{15,7,6}(5)+\delta_{18,10,9}(6)+\delta_{3,2,11}(6)+\delta_{14,5,1}(5)+\delta_{11,2,19}(12)+\delta_{18,10,20}(12)$
ν_{36}	1354	1321	0,00	1,40	1322	$\nu_{10,9}(6)+\nu_{3,2}(6)+\nu_{19,1}(10)+\nu_{19,2}(15)+\nu_{20,6}(10)+\nu_{20,10}(15)$
ν_{37}	1359	1325	0,00	114,62	1323	$\nu_{6,1}(10)+\nu_{19,2}(11)+\nu_{20,10}(11)+\delta_{16,8,7}(7)+\delta_{5,4,13}(7)$
ν_{38}	1359	1335	12,08	0,00	1332	$\nu_{6,1}(10)+\nu_{19,2}(6)+\nu_{20,10}(6)+\delta_{18,10,9}(9)+\delta_{3,2,11}(9)+\delta_{11,2,19}(17)+\delta_{18,10,20}(17)$
ν_{39}	1461	1432	38,99	0,00	1435	$\nu_{19,2}(7)+\nu_{20,10}(7)+\delta_{16,8,7}(6)+\delta_{9,8,16}(9)+\delta_{17,9,8}(7)+\delta_{10,9,17}(6)+\delta_{12,3,2}(6)+\delta_{4,3,12}(7)+\delta_{13,4,3}(9)+\delta_{5,4,13}(6)$
ν_{40}	1493	1465	0,00	100,31	1465	$\nu_{7,6}(5)+\nu_{5,1}(5)+\delta_{9,8,16}(5)+\delta_{17,9,8}(9)+\delta_{10,9,17}(7)+\delta_{12,3,2}(7)+\delta_{4,3,12}(9)+\delta_{13,4,3}(5)$
ν_{41}	1508	1477	67,42	0,00	1480	$\nu_{19,1}(8)+\nu_{20,6}(8)+\delta_{18,10,9}(9)+\delta_{3,2,11}(9)+\delta_{11,2,19}(10)+\delta_{18,10,20}(10)$
ν_{42}	1540	1508	0,00	179,50	1510	$\nu_{6,1}(12)+\nu_{19,1}(7)+\nu_{20,6}(7)+\delta_{18,10,9}(6)+\delta_{3,2,11}(6)+\delta_{11,2,19}(6)+\delta_{18,10,20}(6)$

EK-15.(Devam) 2,6' -Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp				SQM	TED > %5
	ν _{ηap}	ν _{avηap}	I _{IR}	I _R		
ν ₄₃	1640	1594	43.94	0.00	1598	ν _{7,6} (6)+ν _{9,8} (15)+ν _{10,9} (7)+ν _{3,2} (7)+ν _{4,3} (15)+ν _{5,1} (6)+ν _{19,1} (7)+ν _{20,6} (7)
ν ₄₄	1660	1621	0.00	144.38	1619	ν _{8,7} (10)+ ν _{9,8} (13)+ν _{4,3} (13)+ν _{5,4} (10)+ν _{19,1} (8)+ν _{19,2} (5)+ν _{20,6} (8)+ν _{20,10} (5)
ν ₄₅	1672	1631	103.07	0.00	1630	ν _{8,7} (15)+ν _{10,9} (5)+ν _{3,2} (5)+ν _{5,4} (15)+ν _{19,2} (9)+ν _{20,10} (9)
ν ₄₆	1673	1634	0.00	375.24	1633	ν _{7,6} (13)+ν _{10,9} (10)+ν _{3,2} (10)+ν _{5,1} (13)
ν ₄₇	3202	3063	48.16	0.00	3071	ν _{18,10} (47)+ν _{11,2} (47)
ν ₄₈	3202	3066	0.00	217.81	3071	ν _{18,10} (47)+ν _{11,2} (47)
ν ₄₉	3227	3102	0.00	179.76	3095	ν _{16,8} (40)+ν _{17,9} (7)+ν _{12,3} (7)+ν _{13,4} (40)
ν ₅₀	3227	3102	21.36	0.00	3095	ν _{16,8} (40)+ν _{17,9} (7)+ν _{12,3} (7)+ν _{13,4} (40)
ν ₅₁	3248	3111	34.92	0.00	3115	ν _{16,8} (7)+ν _{17,9} (40)+ν _{12,3} (40)+ν _{13,4} (7)
ν ₅₂	3249	3117	0.00	415.60	3116	ν _{16,8} (7)+ν _{17,9} (40)+ν _{12,3} (40)+ν _{13,4} (7)
ν ₅₃	3264	3132	4.95	0.00	3131	ν _{15,7} (47)+ν _{14,5} (47)
ν ₅₄	3265	3132	0.00	152.68	3131	ν _{15,7} (47)+ ν _{14,5} (47)

EK-16. 3,3'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP -6- 311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6- 311+g(d,p)	HF - 6- 311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney [24]
Bağ uzunluğu (Å)						
C ₆ ,C ₇	1,404	1,402	1,399	1,392	1,393	
C ₆ ,C ₁₀	1,400	1,398	1,395	1,389	1,390	
C ₆ ,C ₁	1,480	1,476	1,474	1,487	1,487	
C ₇ ,H ₁₅	1,086	1,088	1,086	1,076	1,076	
C ₇ ,N ₂₀	1,334	1,332	1,328	1,318	1,320	
C ₈ ,C ₉	1,393	1,393	1,390	1,384	1,385	
C ₈ ,H ₁₆	1,086	1,087	1,086	1,076	1,076	
C ₈ ,N ₂₀	1,336	1,334	1,331	1,319	1,321	
C ₉ ,C ₁₀	1,390	1,389	1,386	1,382	1,383	
C ₉ ,H ₁₇	1,084	1,085	1,083	1,074	1,074	
C ₁₀ ,H ₁₈	1,085	1,086	1,084	1,076	1,075	
C ₁ ,C ₂	1,400	1,402	1,399	1,392	1,393	
C ₁ ,C ₅	1,404	1,398	1,395	1,389	1,390	
C ₂ ,H ₁₁	1,086	1,088	1,086	1,076	1,076	1,087
C ₂ ,N ₁₉	1,334	1,332	1,328	1,318	1,320	1,338
C ₃ ,C ₄	1,393	1,393	1,390	1,384	1,385	
C ₃ ,H ₁₂	1,086	1,087	1,086	1,076	1,076	
C ₃ ,N ₁₉	1,336	1,334	1,331	1,319	1,321	
C ₄ ,C ₅	1,390	1,389	1,386	1,382	1,383	1,394
C ₄ ,H ₁₃	1,084	1,085	1,083	1,074	1,074	
C ₅ ,H ₁₄	1,085	1,086	1,084	1,076	1,075	1,083
Bağ açısı (°)						
C ₇ ,C ₆ ,C ₁₀	116,9	116,9	116,9	116,8	116,8	118,4
C ₇ ,C ₆ ,C ₁	121,2	121,2	121,1	121,2	121,3	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₁	122,0	122,0	122,0	122,0	121,9	
C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	119,8	119,7	119,7	119,8	119,9	
C ₆ ,C ₇ ,N ₂₀	124,3	124,5	124,3	124,2	124,2	
H ₁₅ ,C ₇ ,N ₂₀	116,0	115,8	116,0	116,0	116,0	
C ₉ ,C ₈ ,H ₁₆	120,6	120,5	120,6	120,5	120,5	
C ₉ ,C ₈ ,N ₂₀	123,1	123,3	123,2	123,1	123,1	123,8
H ₁₆ ,C ₈ ,N ₂₀	116,3	116,2	116,2	116,4	116,4	
C ₈ ,C ₉ ,C ₁₀	118,7	118,6	118,6	118,4	118,4	
C ₈ ,C ₉ ,H ₁₇	120,3	120,3	120,4	120,5	120,5	
C ₁₀ ,C ₉ ,H ₁₇	121,0	121,1	121,1	121,2	121,2	120,2
C ₆ ,C ₁₀ ,C ₉	119,4	119,3	119,3	119,4	119,5	118,5
C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	120,2	120,3	120,2	120,3	120,3	121,4

EK-16.(Devam) 3,3'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6- 311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91 - 6- 311+g(d,p)	HF - 6- 311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney [24]
Bağ açısı ($^{\circ}$)						
C ₆ ,C ₁ ,C ₂	122,0	121,2	121,1	121,2	121,3	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅	121,1	122,0	122,0	122,0	121,9	
C ₂ ,C ₁ ,C ₅	116,9	116,9	117,0	116,8	116,8	
C ₁ ,C ₂ ,H ₁₁	120,6	119,7	119,7	119,8	119,9	
C ₁ ,C ₂ ,N ₁₉	123,1	124,5	124,3	124,2	124,2	
H ₁₁ ,C ₂ ,N ₁₉	116,3	115,8	116,0	116,0	116,0	
C ₄ ,C ₃ ,H ₁₂	118,7	120,5	120,6	120,5	120,5	
C ₄ ,C ₃ ,N ₁₉	120,3	123,3	123,2	123,1	123,1	
H ₁₂ ,C ₃ ,N ₁₉	121,0	116,2	116,2	116,4	116,4	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅	119,4	118,6	118,6	118,4	118,4	
C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	120,2	120,3	120,6	120,5	120,5	
C ₅ ,C ₄ ,H ₁₃	120,4	121,1	121,1	121,2	121,2	
C ₁ ,C ₅ ,C ₄	117,7	119,3	119,3	119,4	119,5	
C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	117,7	120,3	120,2	120,3	120,3	
C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	124,3	120,4	120,5	120,3	120,2	
C ₁ ,N ₁₉ ,C ₂	119,8	117,5	117,6	118,1	118,1	
C ₇ ,N ₂₀ ,C ₈	116,0	117,5	117,6	118,1	118,1	116,9
Dihedral açı ($^{\circ}$)						
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	-178,2	178,1	178,2	178,8	-178,9	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₇ ,N ₂₀	0,6	-0,6	-0,6	-0,4	0,3	
C ₁ ,C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	1,6	-1,7	-1,6	-1,0	1,0	
C ₁ ,C ₆ ,C ₇ ,N ₂₀	-179,6	179,6	179,6	179,8	-179,8	
C ₆ ,C ₇ ,C ₁₀ ,C ₉	-0,3	0,3	0,3	0,1	-0,3	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	-179,0	178,8	179,0	179,1	-179,1	
C ₁ ,C ₆ ,C ₁₀ ,C ₉	180,0	-180,0	-180,0	179,9	-179,9	
C ₁ ,C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	1,2	-1,4	-1,3	-1,1	1,1	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₂	-138,3	-42,2	-41,9	-47,6	49,4	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₅	41,9	138,0	138,3	132,5	-130,8	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₂	41,5	138,0	138,3	132,5	-130,8	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₅	-138,3	-41,7	-41,6	-47,4	49,1	
C ₆ ,C ₇ ,N ₂₀ ,C ₈	-0,4	0,4	0,4	0,3	-0,3	
H ₁₅ ,C ₇ ,N ₂₀ ,C ₈	178,5	-178,4	-178,5	-179,0	178,9	
H ₁₆ ,C ₈ ,C ₉ ,C ₁₀	-179,4	179,5	179,4	179,7	-179,7	

EK-16.(Devam) 3,3'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP – 6 311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6- 311+g(d,p)	HF - 6- 311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney [24]
Dihedral açısı (°)						
N ₂₀ ,C ₈ ,C ₉ ,C ₁₀	0,6	-0,6	-0,6	-0,3	0,3	
N ₂₀ ,C ₈ ,C ₉ ,H ₁₇	179,8	-179,8	-179,8	-179,7	179,7	
C ₉ ,C ₈ ,N ₂₀ ,C ₇	-0,3	0,3	0,3	0,1	-0,0	
H ₁₆ ,C ₈ ,N ₂₀ ,C ₇	179,8	-179,8	-179,8	-180,0	180,0	
C ₈ ,C ₉ ,C ₁₀ ,C ₆	-0,3	0,3	0,3	0,3	-0,3	
C ₈ ,C ₉ ,C ₁₀ ,H ₁₈	178,4	-178,3	-178,4	-178,8	178,8	
H ₁₇ ,C ₈ ,C ₉ ,C ₆	-179,5	179,5	179,5	179,6	-179,6	
H ₁₇ ,C ₈ ,C ₉ ,H ₁₈	-0,9	1,0	0,9	0,6	-0,6	
C ₆ ,C ₁ ,C ₂ ,H ₁₁	179,9	-1,7	-1,6	-1,3	1,0	
C ₆ ,C ₁ ,C ₂ ,N ₁₉	1,2	179,6	179,6	179,8	-179,8	
C ₅ ,C ₂ ,C ₃ ,H ₁₁	-0,3	178,1	178,2	178,8	-178,9	
C ₅ ,C ₂ ,C ₃ ,N ₁₉	-178,9	-0,6	-0,6	-0,4	0,3	
C ₆ ,C ₁ ,C ₂ ,N ₁₉	-179,6	-180,0	-179,9	179,9	-179,9	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	1,6	-1,4	-1,3	-1,1	1,1	
C ₂ ,C ₁ ,C ₅ ,C ₄	0,6	0,3	0,3	0,1	-0,0	
C ₂ ,C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	-178,2	178,8	178,9	179,1	-179,1	
C ₁ ,C ₂ ,N ₁₉ ,C ₃	-179,4	0,4	0,4	0,3	-0,3	
H ₁₁ ,C ₂ ,N ₁₉ ,C ₃	-0,2	-178,4	-178,5	-179,0	178,9	
H ₁₂ ,C ₃ ,C ₄ ,C ₅	0,6	179,5	179,4	179,7	-179,7	
H ₁₂ ,C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	179,8	0,2	0,2	0,3	-0,3	
N ₁₉ ,C ₃ ,C ₄ ,C ₅	-0,3	-0,6	-0,6	-0,3	0,3	
N ₁₉ ,C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	179,8	-179,8	-179,8	-179,7	179,7	
C ₄ ,C ₃ ,N ₁₉ ,C ₂	-0,3	0,3	0,3	0,1	-0,0	
H ₁₂ ,C ₃ ,N ₁₉ ,C ₂	178,4	-179,8	-179,8	-180,0	180,0	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅ ,C ₁	-179,5	0,3	0,3	0,3	-0,3	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	-0,9	-178,3	-178,4	-178,8	178,8	
H ₁₃ ,C ₄ ,C ₅ ,C ₁	-0,4	179,5	179,5	179,6	-179,6	
H ₁₃ ,C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	178,5	1,0	0,9	0,6	-0,6	

EK-17. 3,3'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp		
	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}
ν_1	64	0,41	7,50	66	65	0,41	8,04	66	0,42	7,10	61	0,59	5,99	57	0,60	7,53
ν_2	96	0,27	1,63	95	94	0,30	1,81	96	0,27	1,61	106	0,34	1,77	105	0,38	2,23
ν_3	120	0,20	2,64	118	119	0,21	2,78	119	0,22	2,51	126	0,17	2,48	125	0,15	2,92
ν_4	262	0,15	2,49	263	260	0,27	3,20	263	0,18	2,54	296	0,19	2,16	297	0,30	2,78
ν_5	315	0,02	4,08	316	313	0,02	3,83	317	0,02	4,05	333	0,03	4,65	333	0,03	4,23
ν_6	352	1,24	0,26	351	344	1,26	0,27	352	1,20	0,23	380	1,40	0,16	378	1,36	0,15
ν_7	411	5,90	0,09	410	402	5,42	0,07	411	5,79	0,08	453	6,03	0,07	453	6,07	0,13
ν_8	416	0,62	2,37	415	408	0,64	2,76	416	0,61	2,21	459	0,99	1,53	459	1,17	2,02
ν_9	498	0,60	0,33	499	493	0,87	0,50	499	0,67	0,26	553	1,43	0,01	556	1,47	0,13
ν_{10}	568	0,61	2,31	568	559	0,85	1,99	571	0,77	2,32	621	1,17	1,87	620	1,25	1,63
ν_{11}	621	1,30	4,57	617	611	1,39	5,87	619	1,27	4,51	665	2,13	4,14	667	2,85	5,62
ν_{12}	642	4,82	1,22	640	632	4,98	1,66	642	4,73	1,17	688	5,46	1,82	690	6,21	2,29
ν_{13}	671	3,09	2,87	668	662	2,84	4,29	671	2,94	2,93	719	4,43	3,02	720	3,80	4,36
ν_{14}	727	8,14	0,98	730	716	8,83	0,94	732	8,42	0,92	781	13,32	0,96	780	14,98	0,90
ν_{15}	731	52,68	1,13	733	720	63,90	0,30	736	54,67	0,12	785	62,39	0,17	784	74,11	0,34
ν_{16}	782	1,10	13,06	787	776	1,18	12,74	788	1,09	12,54	835	1,40	15,98	837	1,64	13,74
ν_{17}	808	39,20	0,05	811	794	37,60	0,34	814	39,70	0,05	891	44,55	0,18	891	37,72	0,07
ν_{18}	835	5,21	7,42	838	824	5,69	5,20	841	5,25	6,90	916	7,16	5,69	914	6,76	2,71
ν_{19}	946	1,33	0,05	949	928	1,66	0,14	954	1,43	0,05	1057	0,83	0,41	1055	0,57	0,48

EK-17.(Devam) 3,3'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp		
	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	V_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}
ν_{20}	948	0,10	13,81	953	931	0,17	12,62	957	0,10	12,53	1061	0,07	7,16	1059	0,06	5,98
ν_{21}	967	0,83	0,02	970	948	0,63	0,04	975	0,74	0,03	1081	0,46	0,07	1079	0,29	0,10
ν_{22}	978	0,24	0,31	982	960	0,45	0,08	986	0,26	0,12	1092	0,86	1,82	1090	0,67	1,59
ν_{23}	1005	0,08	7,24	1005	983	0,06	6,08	1013	0,08	6,94	1095	13,06	2,43	1099	17,37	4,09
ν_{24}	1005	0,97	0,06	1005	983	1,11	0,08	1013	1,06	0,05	1112	4,68	1,88	1114	1,76	16,21
ν_{25}	1017	14,84	1,54	1024	1009	19,63	0,84	1025	16,52	0,56	1114	9,80	69,88	1115	0,07	0,07
ν_{26}	1040	11,80	67,93	1046	1029	12,38	50,28	1045	11,18	63,24	1122	0,34	0,14	1118	4,24	5,04
ν_{27}	1040	2,14	2,54	1056	1036	0,27	6,12	1052	0,24	3,41	1122	1,59	1,25	1121	11,77	37,19
ν_{28}	1067	0,85	80,67	1083	1070	0,84	67,06	1080	0,82	70,87	1139	3,82	51,99	1145	3,75	50,96
ν_{29}	1087	1,27	1,48	1101	1084	0,33	1,51	1097	0,46	1,50	1158	22,88	11,57	1166	21,33	10,97
ν_{30}	1140	10,81	9,48	1151	1143	1,92	0,38	1148	11,73	7,04	1164	2,54	6,98	1175	2,68	5,83
ν_{31}	1143	1,61	0,59	1151	1143	12,93	5,82	1149	1,85	0,58	1175	4,62	2,68	1184	6,13	3,35
ν_{32}	1218	1,78	8,16	1235	1218	4,28	9,54	1231	3,45	8,12	1228	7,20	8,67	1235	7,34	8,42
ν_{33}	1226	8,81	7,90	1241	1223	8,35	7,74	1237	9,32	6,73	1249	5,25	5,53	1258	6,23	8,34
ν_{34}	1273	5,70	1,85	1315	1292	8,20	1,80	1303	6,60	3,52	1327	6,70	2,14	1333	6,18	2,76
ν_{35}	1277	0,02	7,01	1331	1297	0,47	10,85	1314	0,34	8,28	1329	8,14	5,29	1336	9,17	7,90
ν_{36}	1314	0,82	202,87	1336	1309	1,14	164,82	1330	1,66	172,83	1411	1,58	92,48	1419	2,04	78,47

EK-17.(Devam) 3,3'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp		
	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	V_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}
ν_{37}	1359	7,52	11,13	1371	1340	0,54	1,16	1366	0,54	0,45	1465	8,54	6,13	1472	7,04	6,20
ν_{38}	1367	0,72	0,40	1379	1341	2,42	20,61	1367	3,40	18,35	1478	0,20	0,69	1483	0,12	0,87
ν_{39}	1431	11,95	1,38	1453	1426	11,73	2,13	1446	13,26	1,77	1549	19,79	0,96	1556	17,15	1,29
ν_{40}	1456	46,30	3,79	1478	1448	48,63	2,90	1470	51,45	3,49	1575	70,27	2,08	1582	67,19	1,82
ν_{41}	1502	15,80	4,89	1520	1495	13,88	3,84	1513	15,38	4,51	1629	26,67	2,20	1635	23,21	2,18
ν_{42}	1518	0,00	25,85	1545	1512	0,09	36,66	1536	0,01	32,86	1645	0,13	1,74	1653	0,00	2,56
ν_{43}	1594	12,77	24,75	1638	1594	17,31	14,48	1625	15,01	18,69	1755	25,91	6,47	1768	34,91	4,57
ν_{44}	1609	5,51	4,96	1654	1618	5,93	2,97	1641	5,36	4,17	1768	6,79	7,63	1781	9,78	5,65
ν_{45}	1627	0,74	516,28	1674	1629	10,96	1,65	1660	9,94	1,53	1784	22,79	1,67	1797	30,09	1,93
ν_{46}	1628	7,52	1,66	1675	1632	0,83	503,05	1660	0,79	499,77	1796	1,98	306,60	1810	2,22	286,20
ν_{47}	3147	30,78	45,60	3197	3066	25,10	39,19	3173	27,27	41,96	3322	28,73	68,84	3359	35,47	48,91
ν_{48}	3152	2,77	166,69	3202	3073	8,32	67,43	3178	5,81	74,73	3324	0,45	125,23	3364	0,53	54,36
ν_{49}	3154	11,43	10,26	3210	3076	18,67	23,01	3182	14,18	11,53	3325	6,43	16,65	3364	7,27	76,32
ν_{50}	3156	3,99	131,91	3210	3086	0,02	218,74	3182	0,45	223,71	3330	7,19	62,80	3365	4,65	102,64
ν_{51}	3168	19,05	57,14	3222	3094	19,45	42,33	3196	16,22	51,30	3331	34,66	22,03	3371	48,42	12,50
ν_{52}	3172	0,71	55,38	3224	3096	2,02	48,52	3199	1,17	46,16	3335	3,98	76,91	3374	5,62	93,76
ν_{53}	3190	15,60	95,98	3247	3114	17,96	83,95	3220	14,46	93,37	3356	21,52	74,08	3394	31,16	69,18
ν_{54}	3190	13,87	350,26	3247	3122	12,55	319,52	3221	10,98	336,82	3357	11,75	305,83	3395	16,07	321,93

EK-18. 3,3'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

MPW1PW91-dgdzvp					TED > %5
ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	SQM	
ν_1	66	65	0,41	8,04	64 $\tau_{2,1,6,7}(24)+\tau_{2,1,6,10}(24)+\tau_{5,1,6,7}(24)+\tau_{5,1,6,10}(25)$
ν_2	95	94	0,30	1,81	93 $\tau_{9,10,6,1}(12)+\tau_{2,1,6,10}(7)+\tau_{5,1,6,7}(7)+\tau_{4,5,1,6}(12)+\tau_{15,7,6,1}(6)+\tau_{18,10,6,1}(6)+\tau_{15,7,6,1}(6)+\tau_{14,5,1,6}(6)+\tau_{19,2,1,6}(12)+\tau_{20,7,6,1}(12)$
ν_3	118	119	0,21	2,78	117 $\delta_{7,6,1}(16)+\delta_{10,6,1}(16)+\delta_{2,1,6}(16)+\delta_{5,1,6}(16)$
ν_4	263	260	0,27	3,20	259 $\delta_{2,1,6}(6)+\delta_{5,1,6}(6)+\delta_{7,6,1}(6)+\delta_{10,6,1}(5)+\tau_{4,5,1,2}(5)+\tau_{9,10,6,7}(5)+\tau_{19,2,1,6}(5)+\tau_{19,2,1,5}(6)+\tau_{20,7,6,10}(6)+\tau_{20,7,6,1}(5)$
ν_5	316	313	0,02	3,83	311 $\nu_{6,1}(31)+\delta_{2,1,5}(10)+\delta_{7,6,10}(10)$
ν_6	351	344	1,26	0,27	345 $\delta_{2,1,6}(8)+\delta_{5,1,6}(8)+\delta_{7,6,1}(8)+\delta_{10,6,1}(8)+\tau_{19,2,1,5}(6)+\tau_{20,7,6,10}(6)$
ν_7	410	402	5,42	0,07	401 $\tau_{1,5,4,3}(11)+\tau_{6,10,9,8}(11)+\tau_{3,19,2,1}(8)+\tau_{8,20,7,6}(8)$
ν_8	415	408	0,64	2,76	407 $\tau_{1,5,4,3}(10)+\tau_{6,10,9,8}(10)+\tau_{8,19,7,6}(8)+\tau_{3,20,2,1}(8)$
ν_9	499	493	0,87	0,50	491 $\delta_{2,1,6}(10)+\delta_{5,1,6}(9)+\delta_{7,6,1}(10)+\delta_{10,6,1}(9)$
ν_{10}	568	559	0,85	1,99	556 $\tau_{2,1,6,7}(8)+\tau_{5,1,6,10}(9)+\tau_{19,2,1,6}(5)+\tau_{2,19,3,4}(6)+\tau_{13,4,3,19}(5)+\tau_{7,20,8,9}(6)+\tau_{20,7,6,1}(5)+\tau_{17,9,8,20}(5)$
ν_{11}	617	611	1,39	5,87	611 $\delta_{1,5,4}(10)+\delta_{6,10,9}(10)+\delta_{7,20,8}(13)+\delta_{2,19,3}(13)$
ν_{12}	640	632	4,98	1,66	633 $\delta_{1,5,4}(7)+\delta_{5,4,3}(7)+\delta_{6,10,9}(7)+\delta_{10,9,8}(7)+\delta_{19,2,1}(7)+\delta_{2,19,3}(11)+\delta_{20,7,6}(7)+\delta_{7,20,8}(11)$
ν_{13}	668	662	2,84	4,29	661 $\delta_{2,1,5}(7)+\delta_{5,4,3}(8)+\delta_{7,6,10}(7)+\delta_{10,9,8}(8)+\delta_{19,2,1}(7)+\delta_{4,3,19}(8)+\delta_{20,7,6}(7)+\delta_{9,8,20}(8)$
ν_{14}	730	716	8,83	0,94	715 $\tau_{7,20,8,16}(6)+\tau_{2,19,3,12}(6)$
ν_{15}	733	720	63,90	0,30	718 $\tau_{7,20,8,16}(6)+\tau_{2,19,3,12}(6)$
ν_{16}	787	776	1,18	12,74	775 $\nu_{5,1}(7)+\nu_{6,1}(12)+\nu_{10,6}(7)+\delta_{9,8,20}(11)+\delta_{4,3,19}(11)$
ν_{17}	811	794	37,60	0,34	794 $\tau_{1,5,4,13}(11)+\tau_{6,10,9,17}(11)+\tau_{17,9,8,20}(11)+\tau_{13,4,3,19}(11)$
ν_{18}	838	824	5,69	5,20	821 $\tau_{1,5,4,13}(11)+\tau_{14,5,1,6}(6)+\tau_{6,10,9,17}(11)+\tau_{18,10,6,1}(6)+\tau_{17,9,8,20}(10)+\tau_{13,4,3,19}(10)$
ν_{19}	949	928	1,66	0,14	930 $\tau_{11,2,1,5}(10)+\tau_{11,2,1,6}(11)+\tau_{13,4,3,12}(7)+\tau_{15,7,6,1}(11)+\tau_{15,7,6,10}(10)+\tau_{17,9,8,16}(7)+\tau_{8,20,7,15}(7)+\tau_{3,19,2,11}(7)$
ν_{20}	953	931	0,17	12,62	934 $\tau_{11,2,1,5}(8)+\tau_{11,2,1,6}(9)+\tau_{13,4,3,12}(9)+\tau_{15,7,6,1}(9)+\tau_{15,7,6,10}(8)+\tau_{17,9,8,16}(9)$
ν_{21}	970	948	0,63	0,04	950 $\tau_{5,4,3,12}(5)+\tau_{14,5,4,3}(5)+\tau_{14,5,4,13}(12)+\tau_{10,9,8,16}(5)+\tau_{18,10,9,8}(5)+\tau_{18,10,9,17}(12)$

EK-18.(Devam) 3,3'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

MPW1PW91-dgdzvp					TED > %5	
	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	SQM	
ν_{22}	982	960	0.45	0.08	962	$\tau_{11,2,1,6}(6)+\tau_{14,5,4,13}(10)+\tau_{15,7,6,1}(6)+\tau_{18,10,9,17}(10)+\tau_{8,20,7,15}(5)+\tau_{3,19,2,11}(5)$
ν_{23}	1005	983	0.06	6.08	984	$\tau_{13,4,3,12}(16)+\tau_{14,5,4,13}(9)+\tau_{17,9,8,16}(16)+\tau_{18,10,9,17}(9)$
ν_{24}	1005	983	1.11	0.08	984	$\tau_{13,4,3,12}(16)+\tau_{14,5,4,13}(9)+\tau_{17,9,8,16}(16)+\tau_{18,10,9,17}(9)$
ν_{25}	1024	1009	19.63	0.84	1010	$\nu_{4,3}(5)+\nu_{9,8}(5)+\nu_{19,2}(5)+\nu_{19,3}(6)+\nu_{20,7}(5)+\nu_{20,8}(6)$
ν_{26}	1046	1029	12.38	50.28	1032	$\nu_{5,1}(6)+\nu_{10,6}(6)+\delta_{7,20,8}(7)+\delta_{2,19,3}(7)$
ν_{27}	1056	1036	0.27	6.12	1034	$\nu_{2,1}(8)+\nu_{5,1}(8)+\nu_{5,4}(7)+\nu_{7,6}(8)+\nu_{10,6}(8)+\nu_{10,9}(7)$
ν_{28}	1083	1070	0.84	67.06	1060	$\nu_{4,3}(19)+\nu_{9,8}(19)+\nu_{19,3}(8)+\nu_{20,8}(8)$
ν_{29}	1101	1084	0.33	1.51	1079	$\nu_{2,1}(5)+\nu_{4,3}(10)+\nu_{5,1}(6)+\nu_{7,6}(5)+\nu_{9,8}(10)+\nu_{10,6}(6)$
ν_{30}	1151	1143	1.92	0.38	1129	$\nu_{5,4}(11)+\nu_{10,9}(11)+\delta_{5,4,13}(9)+\delta_{14,5,1}(6)+\delta_{14,5,4}(9)+\delta_{10,9,17}(9)+\delta_{18,10,6}(6)+\delta_{18,10,9}(9)$
ν_{31}	1151	1143	12.93	5.82	1130	$\nu_{5,4}(11)+\nu_{10,9}(11)+\delta_{5,4,13}(8)+\delta_{14,5,4}(8)+\delta_{10,9,17}(8)+\delta_{18,10,9}(9)$
ν_{32}	1235	1218	4.28	9.54	1210	$\nu_{19,3}(11)+\nu_{20,8}(11)+\delta_{16,8,20}(8)+\delta_{12,3,19}(8)$
ν_{33}	1241	1223	8.35	7.74	1217	$\nu_{19,2}(6)+\nu_{19,3}(9)+\nu_{20,7}(5)+\nu_{20,8}(9)+\delta_{15,7,20}(6)+\delta_{16,8,20}(9)+\delta_{11,2,19}(6)+\delta_{12,3,19}(9)$
ν_{34}	1315	1292	8.20	1.80	1285	$\nu_{2,1}(14)+\nu_{5,1}(8)+\nu_{7,6}(14)+\nu_{10,6}(8)+\nu_{19,2}(10)+\nu_{20,7}(10)$
ν_{35}	1331	1297	0.47	10.85	1299	$\nu_{2,1}(8)+\nu_{5,1}(6)+\nu_{7,6}(8)+\nu_{10,6}(6)+\nu_{19,2}(14)+\nu_{19,3}(10)+\nu_{20,7}(14)+\nu_{20,8}(10)$
ν_{36}	1336	1309	1.14	164.82	1310	$\nu_{6,1}(31)+\delta_{14,5,4}(8)+\delta_{18,10,9}(8)$
ν_{37}	1371	1340	0.54	1.16	1348	$\delta_{11,2,1}(11)+\delta_{4,3,12}(5)+\delta_{14,5,1}(6)+\delta_{14,5,4}(6)+\delta_{15,7,6}(11)+\delta_{9,8,16}(5)+\delta_{18,10,6}(6)+\delta_{18,10,9}(6)+\delta_{15,7,20}(10)+\delta_{11,2,19}(10)$
ν_{38}	1379	1341	2.42	20.61	1354	$\delta_{11,2,1}(12)+\delta_{15,7,6}(12)+\delta_{15,7,20}(12)+\delta_{11,2,19}(12)$
ν_{39}	1453	1426	11.73	2.13	1424	$\nu_{19,2}(11)+\nu_{20,7}(11)+\delta_{4,3,12}(8)+\delta_{9,8,16}(8)+\delta_{16,8,20}(12)+\delta_{12,3,19}(12)$
ν_{40}	1478	1448	48.63	2.90	1450	$\nu_{2,1}(7)+\nu_{7,6}(7)+\nu_{19,2}(6)+\nu_{20,7}(6)+\delta_{16,8,20}(8)+\delta_{12,3,19}(8)$
ν_{41}	1520	1495	13.88	3.84	1492	$\delta_{11,2,1}(7)+\delta_{4,3,12}(5)+\delta_{13,4,3}(6)+\delta_{15,7,6}(7)+\delta_{9,8,16}(5)+\delta_{17,9,8}(6)+\delta_{15,7,20}(5)+\delta_{11,2,19}(5)$
ν_{42}	1545	1512	0.09	36.66	1514	$\nu_{5,4}(6)+\nu_{6,1}(10)+\nu_{10,9}(6)+\nu_{19,3}(6)+\nu_{20,8}(6)+\delta_{13,4,3}(6)+\delta_{17,9,8}(6)$

EK-18.(Devam) 3,3'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp				SQM	TED > %5
	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}		
ν_{43}	1638	1594	17.31	14.48	1602	$\nu_{2,1}(6)+\nu_{4,3}(13)+\nu_{5,1}(7)+\nu_{7,6}(6)+\nu_{9,8}(13)+\nu_{10,6}(7)+\nu_{19,3}(8)+\nu_{20,8}(8)$
ν_{44}	1654	1618	5.93	2.97	1618	$\nu_{2,1}(7)+\nu_{4,3}(10)+\nu_{5,1}(10)+\nu_{7,6}(7)+\nu_{9,8}(10)+\nu_{10,6}(10)+\nu_{19,3}(8)+\nu_{20,8}(8)$
ν_{45}	1674	1629	10.96	1.65	1637	$\nu_{5,4}(15)+\nu_{10,9}(15)+\nu_{19,2}(10)+\nu_{20,7}(10)$
ν_{46}	1675	1632	0.83	503.05	1639	$\nu_{10,6}(7)+\nu_{10,9}(12)+\nu_{19,2}(7)+\nu_{20,7}(7)$
ν_{47}	3197	3066	25.10	39.19	3069	$\nu_{11,2}(49)+\nu_{15,7}(49)$
ν_{48}	3202	3073	8.32	67.43	3074	$\nu_{11,2}(48)+\nu_{15,7}(48)$
ν_{49}	3210	3076	18.67	23.01	3082	$\nu_{12,3}(43)+\nu_{16,8}(43)$
ν_{50}	3210	3086	0.02	218.74	3082	$\nu_{12,3}(43)+\nu_{16,8}(43)$
ν_{51}	3222	3094	19.45	42.33	3093	$\nu_{14,5}(43)+\nu_{18,10}(43)$
ν_{52}	3224	3096	2.02	48.52	3095	$\nu_{14,5}(42)+\nu_{18,10}(42)$
ν_{53}	3247	3114	17.96	83.95	3117	$\nu_{13,4}(41)+\nu_{14,5}(6)+\nu_{17,9}(41)+\nu_{18,10}(6)$
ν_{54}	3247	3122	12.55	319.52	3117	$\nu_{13,4}(41)+\nu_{14,5}(7)+\nu_{17,9}(41)+\nu_{18,10}(7)$

EK-19. 3,4'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF - 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney[24]
Bağ uzunluğu (Å)						
C ₆ ,C ₇	1,400	1,400	1,396	1,390	1,390	
C ₆ ,C ₁₀	1,400	1,400	1,396	1,390	1,390	
C ₆ ,C ₁	1,481	1,477	1,475	1,487	1,487	
C ₇ ,C ₈	1,392	1,392	1,388	1,384	1,385	
C ₇ ,H ₁₅	1,084	1,085	1,083	1,074	1,074	
C ₈ ,H ₁₆	1,086	1,088	1,086	1,077	1,076	
C ₈ ,N ₂₀	1,336	1,335	1,331	1,319	1,321	
C ₉ ,C ₁₀	1,392	1,391	1,388	1,384	1,385	
C ₉ ,H ₁₇	1,087	1,088	1,086	1,077	1,076	
C ₉ ,N ₂₀	1,337	1,335	1,331	1,320	1,321	
C ₁₀ ,H ₁₈	1,084	1,085	1,084	1,074	1,074	
C ₁ ,C ₂	1,404	1,402	1,399	1,392	1,392	
C ₁ ,C ₅	1,400	1,398	1,395	1,389	1,390	
C ₂ ,H ₁₁	1,086	1,088	1,086	1,076	1,076	1,087
C ₂ ,N ₁₉	1,333	1,331	1,328	1,318	1,319	1,338
C ₃ ,C ₄	1,393	1,393	1,390	1,384	1,385	
C ₃ ,H ₁₂	1,086	1,087	1,086	1,076	1,076	
C ₃ ,N ₁₉	1,336	1,334	1,331	1,319	1,321	
C ₄ ,C ₅	1,390	1,389	1,386	1,382	1,383	1,394
C ₄ ,H ₁₃	1,084	1,085	1,083	1,074	1,074	
C ₅ ,H ₁₄	1,084	1,086	1,084	1,075	1,075	1,083
Bağ açısı (°)						
C ₇ ,C ₆ ,C ₁₀	116,8	116,8	116,9	117,0	117,0	118,4
C ₇ ,C ₆ ,C ₁	121,6	121,6	121,6	121,5	121,6	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₁	121,6	121,6	121,5	121,4	121,4	
C ₆ ,C ₇ ,C ₈	119,3	119,3	119,2	119,0	119,1	
C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	120,9	121,0	120,9	121,2	121,2	
C ₈ ,C ₇ ,H ₁₅	119,8	119,8	120,0	119,8	119,8	
C ₇ ,C ₈ ,H ₁₆	120,0	120,0	120,0	119,9	119,9	
C ₇ ,C ₈ ,N ₂₀	123,9	124,0	124,0	123,9	123,8	123,8
H ₁₆ ,C ₈ ,N ₂₀	116,1	116,0	116,1	116,3	116,3	
C ₁₀ ,C ₉ ,H ₁₇	120,0	120,0	120,0	119,9	119,9	120,2
C ₁₀ ,C ₉ ,N ₂₀	123,8	124,0	124,0	123,8	123,8	
H ₁₇ ,C ₉ ,N ₂₀	116,1	116,0	116,1	116,3	116,3	
C ₆ ,C ₁₀ ,C ₉	119,4	119,3	119,2	119,1	119,1	118,5
C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	120,9	120,9	120,8	121,1	121,1	121,4

EK-19.(Devam) 3,4'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF - 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney[24]
Bağ açısı ($^{\circ}$)						
C ₆ ,C ₁ ,C ₂	121,1	121,1	121,0	121,1	121,1	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅	122,0	121,9	121,9	121,9	121,9	
C ₂ ,C ₁ ,C ₅	116,9	117,0	117,0	117,0	117,0	
C ₁ ,C ₂ ,H ₁₁	119,8	119,8	119,7	119,9	119,9	
C ₁ ,C ₂ ,N ₁₉	124,3	124,4	124,3	124,1	124,1	
H ₁₁ ,C ₂ ,N ₁₉	115,9	115,8	116,0	116,0	115,9	
C ₄ ,C ₃ ,H ₁₂	120,6	120,5	120,5	120,5	120,5	
C ₄ ,C ₃ ,N ₁₉	123,1	123,3	123,3	123,1	123,1	
H ₁₂ ,C ₃ ,N ₁₉	116,2	116,2	116,2	116,4	116,4	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅	118,7	118,6	118,6	118,4	118,4	
C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	120,3	120,3	120,4	120,5	120,5	
C ₅ ,C ₄ ,H ₁₃	121,0	121,0	121,1	121,2	121,2	
C ₁ ,C ₅ ,C ₄	119,4	119,3	119,3	119,3	119,3	
C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	120,2	120,3	120,2	120,4	120,4	
C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	120,4	120,5	120,6	120,3	120,3	
C ₂ ,N ₁₉ ,C ₃	116,8	116,6	116,8	118,1	118,1	
C ₈ ,N ₂₀ ,C ₉	117,7	117,4	117,6	117,2	117,2	116,9
Dihedral açısı ($^{\circ}$)						
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₇ ,C ₈	-0,0	-0,0	-0,0	-0,0	0,0	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	178,5	178,3	178,4	178,7	-178,7	
C ₁ ,C ₆ ,C ₇ ,C ₈	179,9	179,9	179,9	-180,0	-180,0	
C ₁ ,C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	-1,6	-1,7	-1,6	-1,3	1,3	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁₀ ,C ₉	-0,0	-0,0	-0,1	-0,1	0,1	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	178,5	178,3	178,4	178,6	-178,6	
C ₁ ,C ₆ ,C ₁₀ ,C ₉	-180,0	-180,0	-180,0	179,9	-179,9	
C ₁ ,C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	-1,5	-1,6	-1,5	-1,5	1,5	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₂	-39,5	-40,0	-39,6	-44,0	45,4	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₅	140,8	140,4	140,7	136,1	-134,9	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₂	140,4	140,0	140,4	136,0	-134,7	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₅	-39,3	-39,7	-39,4	-43,8	45,1	
C ₆ ,C ₇ ,C ₈ ,H ₁₆	179,7	179,7	179,7	179,7	-179,7	
C ₆ ,C ₇ ,C ₈ ,N ₂₀	0,1	0,1	0,1	0,1	-0,1	
H ₁₅ ,C ₇ ,C ₈ ,H ₁₆	1,1	1,3	1,2	1,0	-1,0	

EK-19.(Devam) 3,4'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF - 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney[24]
Dihedral açısı (°)						
C ₇ ,C ₈ ,N ₂₀ ,C ₉	-0,1	-0,1	-0,1	-0,1	0,1	
H ₁₆ ,C ₈ ,N ₂₀ ,C ₉	-179,7	-179,6	-179,7	-179,7	179,7	
H ₁₇ ,C ₉ ,C ₁₀ ,C ₆	179,7	179,6	179,7	179,7	-179,7	
H ₁₇ ,C ₉ ,C ₁₀ ,H ₁₈	1,1	1,3	1,2	1,0	-1,0	
N ₂₀ ,C ₉ ,C ₁₀ ,C ₆	0,1	0,1	0,1	0,1	-0,1	
N ₂₀ ,C ₉ ,C ₁₀ ,H ₁₈	-178,5	-178,3	-178,4	-178,6	178,6	
C ₁₀ ,C ₉ ,N ₂₀ ,C ₈	-0,0	-0,0	-0,0	-0,0	0,0	
H ₁₇ ,C ₉ ,N ₂₀ ,C ₈	-179,6	-179,6	-179,6	-179,6	179,6	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅ ,H ₁₁	-1,6	-1,6	-1,6	-1,1	1,1	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅ ,N ₁₉	179,8	179,9	179,8	180,0	-180,0	
C ₅ ,C ₁ ,C ₂ ,H ₁₁	178,2	178,0	178,2	178,8	-178,8	
C ₅ ,C ₁ ,C ₂ ,N ₁₉	-0,5	-0,5	-0,5	-0,2	0,2	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅ ,C ₄	-179,9	-179,9	-179,9	-179,8	179,9	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	-1,3	-1,5	-1,3	-1,0	1,0	
C ₂ ,C ₃ ,C ₅ ,C ₄	0,4	0,4	0,4	0,3	-0,3	
C ₂ ,C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	179,0	178,9	179,0	179,2	-179,2	
C ₁ ,C ₂ ,N ₁₉ ,C ₃	0,1	0,1	0,1	-0,1	0,1	
H ₁₁ ,C ₂ ,N ₁₉ ,C ₃	-178,6	-178,5	-178,6	-179,1	179,1	
H ₁₂ ,C ₃ ,C ₄ ,C ₅	179,5	179,5	179,5	179,9	-179,9	
H ₁₂ ,C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	0,2	0,2	0,2	0,3	-0,3	
N ₁₉ ,C ₃ ,C ₄ ,C ₅	-0,5	-0,4	-0,5	-0,2	0,1	
N ₁₉ ,C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	-179,8	-179,8	-179,8	-179,7	179,7	
C ₄ ,C ₃ ,N ₁₉ ,C ₂	0,4	0,4	0,4	0,3	-0,2	
H ₁₂ ,C ₃ ,N ₁₉ ,C ₂	-179,6	-179,6	-179,6	-179,8	179,8	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅ ,C ₁	0,0	0,0	0,1	-0,1	0,1	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	-178,6	-178,5	-178,5	-179,0	179,0	
H ₁₃ ,C ₄ ,C ₅ ,C ₁	179,4	179,4	179,4	179,4	-179,4	
H ₁₃ ,C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	0,8	0,9	0,8	0,6	-0,5	

EK-20. 3,4'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp		
	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}
ν_1	64	1,14	7,19	66	64	1,12	7,68	65	1,15	6,82	64	1,20	5,71	61	1,18	7,07
ν_2	95	0,68	1,40	94	93	0,52	1,58	95	0,62	1,38	105	0,58	1,41	104	0,51	1,75
ν_3	124	1,40	2,27	122	121	1,38	2,40	122	1,41	2,17	131	1,30	2,17	130	1,24	2,59
ν_4	262	1,55	1,60	263	260	1,52	1,82	263	1,55	1,63	293	1,68	1,44	294	1,76	1,68
ν_5	311	0,20	4,01	312	308	0,24	3,91	312	0,23	3,97	328	0,23	4,73	329	0,28	4,38
ν_6	364	2,19	0,75	363	356	2,17	0,83	364	2,17	0,70	391	1,56	0,46	389	1,81	0,51
ν_7	389	0,11	1,26	389	380	0,09	1,11	389	0,11	1,10	438	0,11	0,54	438	0,09	0,57
ν_8	413	2,86	1,71	412	405	2,70	1,93	413	2,79	1,61	456	3,43	1,06	455	3,60	1,32
ν_9	504	5,21	0,32	505	500	6,01	0,48	506	5,51	0,25	556	7,41	0,06	558	8,25	0,27
ν_{10}	578	13,81	2,16	577	572	13,75	2,06	581	14,20	2,21	630	19,90	2,26	628	21,04	2,14
ν_{11}	624	4,10	2,25	620	613	4,12	2,97	621	4,04	2,14	667	4,17	2,18	669	4,22	3,08
ν_{12}	651	13,02	3,31	649	641	12,64	4,28	650	12,45	3,32	697	15,06	3,22	699	15,44	4,12
ν_{13}	684	0,40	4,54	682	675	0,47	6,04	684	0,40	4,52	732	0,40	4,70	734	0,51	6,09
ν_{14}	728	27,38	0,64	730	717	33,83	0,66	732	28,49	0,60	781	33,25	0,55	780	40,07	0,58
ν_{15}	761	0,36	0,09	767	754	0,45	0,34	767	0,39	0,10	826	2,52	3,08	828	2,64	1,05
ν_{16}	776	6,29	13,32	781	771	7,30	11,27	781	6,45	12,73	828	4,50	11,83	830	6,32	10,82
ν_{17}	811	50,91	1,61	812	796	54,39	1,34	816	52,36	1,42	894	56,70	1,05	893	52,89	0,48
ν_{18}	851	11,23	2,99	850	835	11,98	1,54	857	11,31	2,83	837	17,82	2,76	932	17,21	0,90
ν_{19}	884	0,09	5,48	887	865	0,10	5,31	891	0,12	5,03	970	0,02	3,31	967	0,01	2,92

EK-20. (Devam) 3,4'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp		
	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}
ν_{20}	948	1,06	7,83	952	931	1,22	7,45	956	1,09	7,07	1061	0,59	5,08	1058	0,54	4,29
ν_{21}	975	0,38	0,12	976	955	0,22	0,08	982	0,36	0,06	1085	6,84	33,33	1082	0,47	0,28
ν_{22}	984	0,05	0,03	983	961	0,11	0,03	991	0,04	0,02	1087	0,81	0,41	1088	6,66	24,80
ν_{23}	1005	0,35	9,64	1005	983	0,01	4,31	1013	0,48	9,75	1092	0,17	0,11	1089	2,95	9,37
ν_{24}	1006	2,31	8,79	1006	984	1,38	4,15	1014	1,34	2,91	1109	6,26	1,39	1113	8,62	1,05
ν_{25}	1011	3,55	28,59	1020	1005	3,50	32,01	1021	2,52	26,83	1114	5,00	53,54	1116	0,55	9,65
ν_{26}	1030	8,22	1,90	1036	1020	13,13	14,84	1035	11,25	17,98	1123	0,19	0,48	1118	0,32	4,49
ν_{27}	1044	3,16	57,63	1060	1042	0,61	33,64	1057	0,71	35,61	1125	0,35	1,01	1122	3,99	32,99
ν_{28}	1081	0,21	22,62	1095	1081	0,31	21,32	1091	0,28	23,84	1153	5,74	19,28	1159	4,95	18,89
ν_{29}	1094	3,16	0,56	1108	1088	4,76	1,25	1103	4,31	1,24	1159	9,49	13,63	1166	9,64	14,63
ν_{30}	1113	0,33	0,41	1124	1105	0,01	0,36	1120	0,12	0,34	1171	7,83	7,69	1181	6,41	6,75
ν_{31}	1142	6,52	4,50	1152	1140	7,50	2,56	1150	6,89	3,38	1177	2,69	1,65	1185	5,22	1,21
ν_{32}	1222	6,77	9,71	1238	1221	7,62	10,57	1234	7,68	9,31	1219	3,31	4,56	1229	5,03	5,76
ν_{33}	1247	6,89	15,27	1259	1240	6,34	12,30	1254	6,42	15,00	1246	3,73	11,35	1255	3,67	15,49
ν_{34}	1265	1,61	7,46	1308	1279	2,83	2,92	1296	2,27	3,07	1329	6,67	4,30	1335	6,74	5,67
ν_{35}	1277	0,64	13,01	1328	1298	0,42	53,82	1312	0,49	29,26	1340	11,26	7,01	1345	10,83	7,04
ν_{36}	1313	0,18	210,50	1340	1312	0,64	136,85	1332	0,49	171,00	1408	0,42	108,67	1417	0,69	95,29

EK-20. (Devam) 3,4'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp		
	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}
ν_{37}	1350	4,03	5,11	1362	1332	0,85	5,28	1358	2,14	6,91	1454	4,20	3,17	1458	3,43	3,48
ν_{38}	1366	1,06	2,24	1375	1341	1,45	9,28	1367	1,06	4,27	1477	1,18	1,77	1482	1,28	2,07
ν_{39}	1432	23,04	0,78	1453	1425	24,38	1,35	1444	25,22	1,20	1545	35,36	0,84	1552	33,55	0,78
ν_{40}	1454	16,24	5,33	1476	1450	16,54	5,10	1469	18,15	5,36	1573	27,66	3,63	1580	25,92	3,49
ν_{41}	1503	20,32	4,24	1522	1491	19,95	2,99	1515	22,37	3,48	1630	36,75	0,99	1637	31,41	1,01
ν_{42}	1529	0,18	30,72	1557	1523	0,96	43,39	1548	0,38	38,83	1668	0,19	9,87	1675	0,16	10,57
ν_{43}	1582	12,60	3,62	1628	1596	11,38	2,33	1615	11,51	2,99	1738	25,02	1,76	1751	25,59	1,68
ν_{44}	1609	22,35	8,55	1654	1612	26,58	5,55	1641	25,09	7,09	1768	36,93	6,70	1780	43,88	4,90
ν_{45}	1628	8,31	248,02	1674	1638	1,16	87,12	1660	0,76	120,01	1786	14,72	24,83	1799	14,93	23,48
ν_{46}	1633	81,12	177,64	1679	1638	95,58	319,04	1664	93,05	286,30	1798	136,88	220,88	1812	148,00	207,20
ν_{47}	3148	27,50	143,10	3200	3066	18,96	58,54	3176	25,41	99,22	3321	24,84	124,30	3362	25,55	127,16
ν_{48}	3150	30,82	81,45	3204	3068	23,65	119,92	3177	21,11	85,87	3324	23,29	76,62	3363	38,30	74,81
ν_{49}	3152	1,14	101,67	3207	3081	12,69	104,62	3179	7,58	113,11	3325	9,80	87,07	3365	8,18	57,74
ν_{50}	3155	4,08	102,09	3211	3086	10,00	119,49	3182	6,82	119,19	3331	8,25	27,88	3367	2,59	53,20
ν_{51}	3173	8,50	62,17	3226	3100	8,27	46,79	3200	6,95	49,92	3337	12,61	55,30	3376	18,52	60,49
ν_{52}	3184	9,54	47,14	3236	3109	12,13	59,80	3212	9,03	54,27	3352	15,51	26,37	3387	25,71	28,72
ν_{53}	3187	5,32	114,50	3239	3110	5,57	120,08	3215	4,06	119,55	3355	5,18	124,57	3390	6,63	155,02
ν_{54}	3192	13,19	245,57	3248	3125	13,80	207,61	3222	11,44	224,76	3359	13,81	218,65	3396	20,36	212,28

EK-21. 3,4'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

MPW1PW91-dgdzvp						TED > %5
	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	SQM	
ν_1	66	64	1,12	7,68	64	$\tau_{7,6,1,2}(24) + \tau_{7,6,1,5}(25) + \tau_{10,6,1,2}(23) + \tau_{10,6,1,5}(24)$
ν_2	94	93	0,52	1,58	92	$\tau_{8,7,6,1}(12) + \tau_{9,10,6,1}(12) + \tau_{2,1,6,10}(6) + \tau_{5,1,6,7}(7) + \tau_{4,5,1,6}(12) + \tau_{11,2,1,6}(5) + \tau_{14,5,1,6}(5) + \tau_{15,7,6,1}(5) + \tau_{18,10,6,1}(6) + \tau_{19,2,1,6}(12)$
ν_3	122	121	1,38	2,40	120	$\delta_{7,6,1}(16) + \delta_{10,6,1}(16) + \delta_{2,1,6}(16) + \delta_{5,1,6}(16)$
ν_4	263	260	1,52	1,82	258	$\delta_{7,6,1}(6) + \delta_{10,6,1}(6) + \delta_{2,1,6}(6) + \delta_{5,1,6}(6) + \tau_{8,7,6,10}(5) + \tau_{9,10,6,7}(5) + \tau_{8,7,6,1}(5) + \tau_{9,10,6,1}(5) + \tau_{4,5,1,2}(5) + \tau_{19,2,1,6}(6) + \tau_{19,2,1,5}(7)$
ν_5	312	308	0,24	3,91	308	$\nu_{6,1}(30) + \delta_{7,6,10}(11) + \delta_{2,1,5}(10)$
ν_6	363	356	2,17	0,83	357	$\delta_{2,1,6}(9) + \delta_{10,6,1}(7) + \delta_{7,6,1}(9) + \delta_{5,1,6}(11) + \tau_{19,2,1,5}(6)$
ν_7	389	380	0,09	1,11	381	$\tau_{16,8,7,6}(8) + \tau_{6,10,9,17}(8) + \tau_{20,8,7,6}(20) + \tau_{9,20,8,7}(5) + \tau_{6,10,9,20}(20) + \tau_{20,8,7,15}(6) + \tau_{18,10,9,20}(6)$
ν_8	412	405	2,70	1,93	404	$\tau_{4,5,1,6}(6) + \tau_{4,5,1,2}(7) + \tau_{1,5,4,3}(20) + \tau_{5,4,3,12}(6) + \tau_{1,5,4,13}(6) + \tau_{14,5,4,3}(6) + \tau_{3,19,2,1}(16) + \tau_{5,4,3,19}(6) + \tau_{3,19,2,11}(6)$
ν_9	505	500	6,01	0,48	497	$\delta_{7,6,1}(10) + \delta_{10,6,1}(9) + \delta_{2,1,6}(7) + \delta_{5,1,6}(7) + \tau_{2,19,3,4}(6)$
ν_{10}	577	572	13,75	2,06	565	$\tau_{7,6,1,2}(8) + \tau_{10,6,1,5}(8) + \tau_{9,20,8,7}(7) + \tau_{8,20,9,10}(7) + \tau_{9,20,8,16}(7) + \tau_{8,20,9,17}(7)$
ν_{11}	620	613	4,12	2,97	615	$\delta_{7,1,5}(6) + \delta_{1,5,4}(15) + \delta_{8,20,9}(6) + \delta_{2,19,3}(20) + \delta_{4,3,19}(6)$
ν_{12}	649	641	12,64	4,28	642	$\delta_{7,6,10}(5) + \delta_{5,4,3}(13) + \delta_{8,20,9}(10) + \delta_{19,2,1}(13)$
ν_{13}	682	675	0,47	6,04	674	$\delta_{8,7,6}(12) + \delta_{6,10,9}(14) + \delta_{20,8,7}(16) + \delta_{10,9,20}(14)$
ν_{14}	730	717	33,83	0,66	715	$\tau_{1,5,4,3}(5) + \tau_{11,2,1,5}(5) + \tau_{5,4,3,12}(10) + \tau_{14,5,1,2}(7) + \tau_{14,5,4,3}(9) + \tau_{3,19,2,1}(8) + \tau_{2,19,3,4}(9) + \tau_{19,2,1,5}(6) + \tau_{5,4,3,19}(8) + \tau_{3,19,2,11}(8) + \tau_{2,19,7,12}(11)$
ν_{15}	767	754	0,45	0,34	751	$\tau_{8,7,6,10}(8) + \tau_{9,10,6,7}(8) + \tau_{20,8,7,6}(10) + \tau_{9,20,8,7}(11) + \tau_{6,10,9,20}(10) + \tau_{8,20,9,10}(11) + \tau_{20,8,7,15}(7) + \tau_{18,10,9,20}(7)$
ν_{16}	781	771	7,30	11,27	770	$\nu_{7,6}(6) + \nu_{10,6}(5) + \nu_{6,1}(14) + \nu_{5,1}(8) + \delta_{5,4,3}(5) + \delta_{8,20,9}(12) + \delta_{4,3,19}(14)$
ν_{17}	812	796	54,39	1,34	795	$\tau_{1,5,4,13}(14) + \tau_{14,5,1,6}(6) + \tau_{20,8,7,15}(5) + \tau_{18,10,9,20}(6) + \tau_{13,4,3,19}(13)$
ν_{18}	850	835	11,98	1,54	833	$\tau_{15,7,6,1}(9) + \tau_{16,8,7,6}(8) + \tau_{1,5,4,13}(8) + \tau_{18,10,6,1}(10) + \tau_{6,10,9,17}(8) + \tau_{18,10,9,20}(5) + \tau_{13,4,3,19}(7)$
ν_{19}	887	865	0,10	5,31	865	$\tau_{15,7,6,10}(13) + \tau_{15,7,6,1}(13) + \tau_{16,8,7,6}(6) + \tau_{6,10,9,17}(5) + \tau_{18,10,6,7}(13) + \tau_{18,10,6,1}(13) + \tau_{20,8,7,15}(13) + \tau_{9,20,8,16}(5) + \tau_{18,10,9,20}(12)$
ν_{20}	952	931	1,22	7,45	932	$\tau_{11,2,1,6}(21) + \tau_{11,2,1,5}(18) + \tau_{5,4,3,12}(7) + \tau_{13,4,3,12}(15) + \tau_{14,5,1,2}(5) + \tau_{3,19,2,11}(12)$
ν_{21}	976	955	0,22	0,08	956	$\tau_{17,8,7,15}(7) + \tau_{18,10,9,17}(7) + \tau_{11,2,1,6}(6) + \tau_{5,4,3,12}(7) + \tau_{14,5,1,6}(7) + \tau_{14,5,4,3}(8) + \tau_{14,5,4,13}(17) + \tau_{3,19,2,11}(6) + \tau_{2,19,3,12}(6)$

EK-21.(Devam) 3,4'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp				SQM	TED > %5
	ν _{har}	ν _{anhar}	I _{IR}	I _R		
ν ₂₂	983	961	0,11	0,03	963	τ _{16,8,7,15} (18)+ τ _{18,10,9,17} (20)+ τ _{14,5,4,13} (6)
ν ₂₃	1005	983	0,01	4,31	984	τ _{16,8,7,6} (8) + τ _{16,8,7,15} (24)+ τ _{6,10,9,17} (7)+ τ _{18,10,9,17} (21)+ τ _{5,20,8,16} (13) + τ _{8,20,9,17} (12)
ν ₂₄	1006	984	1,38	4,15	985	τ _{13,4,2,12} (32)+ τ _{14,5,4,13} (18)+ τ _{2,19,3,12} (10)
ν ₂₅	1020	1005	3,50	32,01	1004	ν _{7,6} (7)+ ν _{8,7} (8)+ ν _{10,6} (7)+ ν _{10,9} (8)+ ν _{20,8} (12) + ν _{20,9} (12)+ δ _{7,6,10} (6)+δ _{8,20,9} (6)
ν ₂₆	1036	1020	13,13	14,84	1024	ν _{4,3} (5)+ ν _{19,3} (8)+ δ _{1,5,4} (9)+ δ _{5,4,3} (7)+ δ _{13,4,3} (6)+ δ _{19,2,1} (8)+ δ _{2,19,3} (10)
ν ₂₇	1060	1042	0,61	33,64	1039	ν _{2,1} (13) + ν _{4,3} (12)+ ν _{5,1} (15)+ ν _{5,4} (14)+ δ _{2,19,3} (5)
ν ₂₈	1095	1081	0,31	21,32	1074	ν _{2,1} (5) + ν _{4,3} (22)+ ν _{5,1} (5)+ ν _{19,3} (6)+ δ _{4,3,12} (6)+ δ _{13,4,3} (8)+ δ _{5,4,13} (7)
ν ₂₉	1108	1088	4,76	1,25	1087	ν _{7,6} (7) + ν _{10,6} (8)+ ν _{20,8} (10)+ ν _{20,9} (11)+ δ _{15,7,6} (15)+ δ _{18,10,6} (16)+ δ _{18,10,9} (5)
ν ₃₀	1124	1105	0,01	0,36	1102	ν _{8,7} (18)+ ν _{10,9} (17)+ δ _{15,7,6} (5)+ δ _{8,7,15} (14) + δ _{16,8,7} (6)+ δ _{10,9,17} (6)+ δ _{18,10,9} (13)
ν ₃₁	1152	1140	7,50	2,56	1130	ν _{5,4} (22)+ ν _{19,2} (6)+ δ _{13,4,3} (8)+ δ _{5,4,13} (18)+ δ _{14,5,1} (11)+ δ _{14,5,4} (18)
ν ₃₂	1238	1221	7,62	10,57	1213	ν _{4,3} (8)+ ν _{19,2} (10)+ ν _{19,3} (19)+ δ _{4,3,12} (8) + δ _{13,4,3} (8)+ δ _{11,3,19} (7)+ δ _{12,3,19} (17)
ν ₃₃	1259	1240	6,34	12,30	1235	ν _{20,8} (10)+ ν _{20,9} (11)+ δ _{8,7,15} (7)+ δ _{16,8,7} (8)+ δ _{10,9,17} (7)+ δ _{18,10,9} (7)+ δ _{16,8,20} (15)+ δ _{17,9,20} (15)
ν ₃₄	1308	1279	2,83	2,92	1279	ν _{7,6} (14) + ν _{10,6} (14)+ ν _{2,1} (10)+ ν _{5,1} (7) + ν _{20,8} (11)+ ν _{20,9} (11)+ ν _{19,2} (7)
ν ₃₅	1328	1298	0,42	53,82	1299	ν _{8,7} (6) + ν _{10,6} (5)+ ν _{2,1} (12) + ν _{5,4} (7)+ ν _{20,8} (8)+ ν _{20,9} (9)+ ν _{19,2} (13)+ ν _{19,3} (11)
ν ₃₆	1340	1312	0,64	136,85	1313	ν _{10,9} (9)+ ν _{1,6} (30)+ δ _{14,5,4} (6)
ν ₃₇	1362	1332	0,85	5,28	1337	δ _{15,7,6} (12)+ δ _{8,7,15} (10)+ δ _{6,8,7} (10)+ δ _{10,9,17} (8)+ δ _{18,10,6} (10)+ δ _{18,10,9} (7)+ δ _{16,8,20} (8)+ δ _{17,9,20} (7)
ν ₃₈	1375	1341	1,45	9,28	1350	δ _{11,2,1} (22) + δ _{4,3,12} (9) + δ _{14,5,1} (11)+ δ _{14,5,4} (9)+ δ _{11,2,19} (21)+ δ _{12,3,19} (8)
ν ₃₉	1453	1425	24,38	1,35	1424	ν _{8,7} (10) + ν _{10,9} (8)+ ν _{19,2} (7)+ δ _{16,8,7} (5) + δ _{10,9,17} (7)+ δ _{4,3,12} (5) +δ _{16,8,20} (12) +δ _{17,9,20} (13) +δ _{12,3,19} (8)
ν ₄₀	1476	1450	16,54	5,10	1449	ν _{10,9} (6)+ ν _{2,1} (7)+ ν _{19,2} (10)+ δ _{4,3,12} (7)+ δ _{16,8,20} (6)+ δ _{12,3,19} (12)
ν ₄₁	1522	1491	19,95	2,99	1492	ν _{5,1} (6)+ ν _{5,4} (6)+ ν _{19,3} (8)+ δ _{11,2,1} (9)+ δ _{13,4,3} (10)+ δ _{5,4,13} (9)+ δ _{112,19} (8)
ν ₄₂	1557	1522	0,96	43,39	1526	ν _{10,6} (5) + ν _{1,6} (9)+ ν _{20,8} (6)+ ν _{20,9} (7)+ δ _{16,8,7} (8)+ δ _{10,9,17} (8)+ δ _{16,8,20} (6) + δ _{17,9,20} (6)

EK-21.(Devam) 3,4'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp				TED > %5	
	ν _{har}	ν _{anhar}	I _{IR}	I _R	SQM	
ν ₄₃	1628	1596	11,38	2,33	1593	ν _{7,6} (15) + ν _{10,6} (15)+ ν _{4,3} (7)+ ν _{20,8} (13)+ ν _{20,9} (13)
ν ₄₄	1654	1612	26,58	5,55	1619	ν _{7,6} (6)+ ν _{10,6} (7)+ ν _{2,1} (11) + ν _{4,3} (16) + ν _{5,1} (13) + ν _{19,3} (11)
ν ₄₅	1674	1638	1,16	87,12	1638	ν _{2,1} (5)+ ν _{5,1} (9)+ ν _{5,4} (23)+ ν _{19,2} (15)
ν ₄₆	1679	1638	95,58	319,04	1643	ν _{7,6} (8) + ν _{8,7} (16)+ ν _{10,6} (7)+ ν _{10,9} (17)+ ν _{6,1} (6)
ν ₄₇	3200	3066	18,96	58,54	3072	ν _{11,2} (96)
ν ₄₈	3204	3068	23,65	119,92	3077	ν _{16,8} (24) + ν _{17,9} (69)+ ν _{18,10} (6)
ν ₄₉	3207	3081	12,69	104,62	3079	ν _{15,7} (6)+ ν _{16,8} (68)+ ν _{17,9} (22)
ν ₅₀	3211	3086	10,00	119,49	3083	ν _{12,3} (88) + ν _{13,4} (8)
ν ₅₁	3226	3100	8,27	46,79	3098	ν _{12,4} (10) +ν _{14,5} (82)
ν ₅₂	3236	3109	12,13	59,80	3107	ν _{17,9} (8) + ν _{18,4} (86)
ν ₅₃	3239	3110	5,57	120,08	3110	ν _{15,7} (89)+ ν _{16,8} (7)
ν ₅₄	3248	3125	13,80	207,61	3119	ν _{13,4} (80) + ν _{14,5} (14)

EK-22. 3,5'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF - 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney[24]
Bağ uzunluğu (Å)						
C ₆ ,C ₇	1,400	1,399	1,395	1,389	1,390	
C ₆ ,C ₁₀	1,404	1,402	1,399	1,392	1,393	
C ₆ ,C ₁	1,480	1,476	1,474	1,487	1,487	
C ₇ ,C ₈		1,389	1,386	1,382	1,383	
C ₇ ,H ₁₅	1,084	1,086	1,084	1,076	1,075	
C ₈ ,C ₉	1,393	1,393	1,389	1,384	1,385	
C ₈ ,H ₁₆	1,084	1,085	1,083	1,074	1,074	
C ₉ ,H ₁₇	1,086	1,087	1,086	1,076	1,076	
C ₉ ,N ₂₀	1,337	1,335	1,331	1,319	1,321	
C ₁₀ ,H ₁₈	1,087	1,088	1,087	1,077	1,076	
C ₁₀ ,N ₂₀	1,333	1,331	1,328	1,318	1,319	
C ₁ ,C ₂	1,404	1,402	1,399	1,392	1,393	
C ₁ ,C ₅	1,400	1,399	1,395	1,389	1,390	
C ₂ ,H ₁₁	1,087	1,088	1,087	1,077	1,076	1,087
C ₂ ,N ₁₉	1,333	1,331	1,328	1,318	1,319	1,338
C ₃ ,C ₄	1,393	1,393	1,389	1,384	1,385	
C ₃ ,H ₁₂	1,086	1,087	1,086	1,076	1,076	
C ₃ ,N ₁₉	1,337	1,335	1,331	1,319	1,321	
C ₄ ,C ₅	1,390	1,389	1,386	1,382	1,383	1,394
C ₄ ,H ₁₃	1,084	1,085	1,083	1,074	1,074	
C ₅ ,H ₁₄	1,084	1,086	1,084	1,076	1,075	1,083
Bağ açısı (°)						
C ₇ ,C ₆ ,C ₁₀	116,9	116,9	116,9	116,8	116,8	118,4
C ₇ ,C ₆ ,C ₁	122,0	122,1	122,0	122,1	122,01	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₁	121,1	121,1	121,1	121,1	121,1	
C ₆ ,C ₇ ,C ₈	119,4	119,3	119,3	119,4	119,4	
C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	120,2	120,3	120,2	120,3	120,3	
C ₈ ,C ₇ ,H ₁₅	120,4	120,4	120,5	120,3	120,2	
C ₇ ,C ₈ ,C ₉	118,7	118,6	118,6	118,4	118,4	
C ₇ ,C ₈ ,H ₁₆	121,0	121,0	121,0	121,2	121,1	
C ₉ ,C ₈ ,H ₁₆	120,3	120,3	120,4	120,4	120,5	
C ₈ ,C ₉ ,H ₁₇	120,6	120,6	120,6	120,5	120,5	
C ₈ ,C ₉ ,N ₂₀	123,1	123,3	123,2	123,2	123,1	
H ₁₇ ,C ₉ ,N ₂₀	116,3	116,2	116,2	116,4	116,4	
C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	119,8	119,7	119,7	119,8	119,8	
C ₆ ,C ₁₀ ,N ₂₀	124,3	124,5	124,4	124,2	124,2	

EK-22.(Devam) 3,5'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- dgdzvp	HF - 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deneysel[24]
Bağ açısı (°)						
H ₁₈ ,C ₁₀ ,N ₂₀	115,9	115,8	116,0	116,0	115,9	
C ₆ ,C ₁ ,C ₂	121,1	121,1	121,1	121,1	121,1	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅	122,0	122,1	122,0	122,1	122,1	
C ₂ ,C ₁ ,C ₅	116,9	116,9	116,9	116,8	116,8	
C ₁ ,C ₂ ,H ₁₁	119,8	119,7	119,7	119,8	119,8	
C ₁ ,C ₂ ,N ₁₉	124,3	124,5	124,4	124,2	124,2	123,8
H ₁₁ ,C ₂ ,N ₁₉	115,9	115,8	116,0	116,0	115,9	
C ₄ ,C ₃ ,H ₁₂	120,6	120,6	120,6	120,5	120,5	
C ₄ ,C ₃ ,N ₁₉	123,1	123,3	123,2	123,1	123,1	
H ₁₂ ,C ₃ ,N ₁₉	116,3	116,2	116,2	116,4	116,4	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅	118,7	118,6	118,6	118,4	118,4	
C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	120,3	120,3	120,4	120,4	120,5	120,2
C ₅ ,C ₄ ,H ₁₃	121,0	121,0	121,0	121,2	121,1	120,1
C ₁ ,C ₅ ,C ₄	119,4	119,3	119,3	119,4	119,4	118,5
C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	120,2	120,3	120,2	120,3	120,3	121,4
C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	120,4	120,4	120,5	120,3	120,2	
C ₂ ,N ₁₉ ,C ₃	117,6	117,4	117,6	118,1	118,1	
C ₉ ,N ₂₀ ,C ₁₀	117,6	117,4	117,6	118,1	118,1	116,9
Dihedral açısı (°)						
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₇ ,C ₈	0,2	0,2	0,2	0,1	0,1	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	178,9	178,8	178,9	179,1	179,1	
C ₁ ,C ₆ ,C ₇ ,C ₈	180,0	179,8	180,0	-180,0	179,9	
C ₁ ,C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	-1,4	-1,6	-1,4	-0,9	-1,0	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	178,2	178,1	178,2	178,8	178,7	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁₀ ,N ₂₀	-0,6	-0,7	-0,7	-0,4	-0,5	
C ₁ ,C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	-1,5	-1,5	-1,5	-1,2	-1,1	
C ₁ ,C ₆ ,C ₁₀ ,N ₂₀	179,6	179,8	179,6	179,6	179,7	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₂	-41,2	-41,5	-41,2	-46,8	-48,6	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₅	139,0	138,9	139,0	133,3	131,6	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₂	138,5	138,0	138,5	133,2	131,2	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₅	-41,2	-41,5	-41,2	-46,8	-48,6	
C ₆ ,C ₇ ,C ₈ ,C ₉	0,3	0,3	0,4	0,3	0,3	
C ₆ ,C ₇ ,C ₈ ,H ₁₆	179,6	179,6	179,6	179,7	179,7	
H ₁₅ ,C ₇ ,C ₈ ,C ₉	-178,3	-178,2	-178,3	-178,7	-178,8	

EK-22.(Devam) 3,5'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,n)	MPW1PW91 - dodzyu	MPW1PW91- dodzyu	HF - 6-311+g(d,n)	HF - dodzyu	Deney[24]
Dihedral açısı (°)						
H ₁₅ ,C ₇ ,C ₈ ,H ₁₆	0,9	1,0	0,9	0,7	0,6	
C ₇ ,C ₈ ,C ₉ ,H ₁₇	179,4	179,4	179,4	179,7	179,7	
C ₇ ,C ₈ ,C ₉ ,N ₂₀	-0,6	-0,6	-0,6	-0,4	-0,3	
H ₁₆ ,C ₈ ,C ₉ ,H ₁₇	0,1	0,2	0,2	0,3	0,3	
H ₁₆ ,C ₈ ,C ₉ ,N ₂₀	-179,8	-179,8	-179,8	-179,8	-179,8	
C ₈ ,C ₉ ,N ₂₀ ,C ₁₀	0,2	0,2	0,2	0,0	0,0	
H ₁₇ ,C ₉ ,N ₂₀ ,C ₁₀	-179,8	-179,8	-179,8	-180,0	180,0	
C ₆ ,C ₁₀ ,N ₂₀ ,C ₉	0,4	0,4	0,5	0,4	0,4	
H ₁₈ ,C ₁₀ ,N ₂₀ ,C ₉	-178,5	-178,3	-178,5	-178,9	-178,8	
C ₆ ,C ₁ ,C ₂ ,H ₁₁	-1,5	-1,5	-1,5	-1,2	-1,1	
C ₆ ,C ₁ ,C ₂ ,N ₁₉	179,6	179,8	179,6	179,6	179,7	
C ₅ ,C ₁ ,C ₂ ,H ₁₁	178,2	178,1	178,2	178,8	178,7	
C ₅ ,C ₁ ,C ₂ ,N ₁₉	-0,6	-0,7	-0,7	-0,4	-0,5	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅ ,C ₄	180,0	179,8	180,0	-180,0	179,9	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	-1,4	-1,6	-1,4	-0,9	-1,0	
C ₂ ,C ₁ ,C ₅ ,C ₄	0,2	0,2	0,2	0,1	0,1	
C ₂ ,C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	178,9	178,8	178,9	179,1	179,1	
C ₁ ,C ₂ ,N ₁₉ ,C ₃	0,4	0,4	0,5	0,4	0,4	
H ₁₁ ,C ₂ ,N ₁₉ ,C ₃	-178,5	-178,3	-178,5	-178,9	-178,8	
H ₁₂ ,C ₃ ,C ₄ ,C ₅	179,4	179,4	179,4	179,7	179,7	
H ₁₂ ,C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	0,2	0,2	0,2	0,3	0,3	
N ₁₉ ,C ₃ ,C ₄ ,C ₅	-0,6	-0,6	-0,6	-0,4	-0,3	
N ₁₉ ,C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	-179,8	-179,8	-179,8	-179,8	-179,8	
C ₄ ,C ₃ ,N ₁₉ ,C ₂	0,2	0,2	0,2	0,0	0,0	
H ₁₂ ,C ₃ ,N ₁₉ ,C ₂	-179,8	-179,8	-179,8	-180,0	180,0	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅ ,C ₁	0,3	0,3	0,4	0,3	0,3	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	-178,3	-178,2	-178,3	-178,7	-178,8	
H ₁₃ ,C ₄ ,C ₅ ,C ₁	179,6	179,6	179,6	179,7	179,7	
H ₁₃ ,C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	0,9	1,0	0,9	0,7	0,6	

EK-23. 3,5'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp		
	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	V_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}
ν_1	65	3,83	7,04	66	61	3,70	7,53	66	3,82	6,63	62	3,73	5,69	58	3,57	7,20
ν_2	96	0,01	1,71	95	92	0,04	1,94	96	0,02	1,69	106	0,01	1,77	105	0,03	2,26
ν_3	121	1,87	2,54	119	117	1,88	2,65	119	1,89	2,41	127	1,69	2,41	125	1,64	2,82
ν_4	261	0,41	2,47	263	258	0,50	3,13	262	0,42	2,51	295	0,47	2,16	297	0,57	2,74
ν_5	314	0,00	3,49	315	311	0,00	3,22	316	0,00	3,43	332	0,01	4,27	332	0,01	3,88
ν_6	354	0,00	1,33	353	345	0,01	1,43	354	0,00	1,30	382	0,03	0,60	380	0,01	0,64
ν_7	410	0,74	0,25	409	400	0,73	0,66	410	0,73	0,25	453	1,16	0,15	453	1,36	0,53
ν_8	417	4,91	2,32	416	408	4,65	2,42	417	4,80	2,18	460	5,20	1,57	459	5,32	1,78
ν_9	498	0,14	0,60	498	492	0,43	0,76	499	0,23	0,47	552	0,33	0,10	555	0,43	0,45
ν_{10}	569	1,00	0,97	567	558	1,25	0,80	570	1,16	1,05	621	1,49	1,32	620	1,57	0,88
ν_{11}	629	4,71	0,70	625	618	4,64	1,32	627	4,53	0,67	673	5,44	0,87	675	6,21	1,86
ν_{12}	631	0,97	6,71	628	621	1,10	8,78	630	0,96	6,72	676	1,50	6,61	678	2,01	8,43
ν_{13}	675	3,93	0,95	673	666	3,76	1,36	675	3,75	0,94	723	5,07	1,24	725	4,62	1,76
ν_{14}	727	8,04	0,51	730	716	8,53	0,41	731	8,29	0,50	781	13,23	0,72	780	14,68	0,53
ν_{15}	731	52,41	1,09	734	720	63,67	1,17	736	54,44	1,01	785	62,41	0,48	784	74,38	0,61
ν_{16}	782	0,05	13,72	787	776	0,02	13,64	787	0,07	13,20	734	0,20	16,69	836	0,22	14,61
ν_{17}	808	39,51	3,16	811	797	37,92	3,09	814	40,03	2,77	891	44,87	0,90	891	37,98	0,74
ν_{18}	836	5,72	2,97	839	824	6,23	0,59	842	5,78	2,80	916	7,29	4,13	915	6,94	0,68
ν_{19}	946	0,74	15,07	950	828	1,22	14,30	954	0,80	13,49	1056	0,55	6,96	1055	0,27	6,66

EK-23.(Devam) 3,5'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp		
	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	V_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}
ν_{20}	947	0,65	0,61	951	829	0,74	0,29	955	0,69	0,60	1060	0,24	1,34	1058	0,20	0,51
ν_{21}	968	0,64	0,04	970	948	0,45	0,24	976	0,60	0,13	1082	0,34	1,03	1079	0,18	1,14
ν_{22}	978	0,34	0,00	982	959	0,51	0,04	987	0,35	0,00	1092	5,88	0,22	1090	1,83	0,10
ν_{23}	1005	0,01	7,44	1005	983	0,99	0,07	1013	0,99	0,08	1096	12,90	2,22	1099	23,39	4,01
ν_{24}	1006	0,96	0,09	1006	983	0,00	6,45	1014	0,00	7,09	1112	12,01	1,53	1114	1,01	19,56
ν_{25}	1017	22,04	1,47	1024	1009	29,76	0,81	1025	25,62	0,50	1113	2,36	70,94	1115	0,42	0,01
ν_{26}	1040	1,81	69,29	1046	1030	1,84	50,98	1045	1,71	63,90	1122	0,20	0,26	1118	10,82	4,70
ν_{27}	1040	6,17	2,48	1056	1035	1,59	6,00	1052	1,54	3,36	1122	0,10	0,53	1120	2,04	34,33
ν_{28}	1067	0,19	80,96	1083	1070	0,17	67,28	1080	0,19	71,42	1141	0,65	60,69	1147	0,61	56,94
ν_{29}	1087	1,38	0,21	1101	1084	0,56	0,23	1097	0,67	0,21	1154	32,34	2,41	1162	30,74	2,95
ν_{30}	1041	10,83	0,40	1151	1141	13,33	0,31	1148	11,98	0,44	1169	0,41	11,41	1179	0,44	11,62
ν_{31}	1144	1,32	8,59	1153	1144	1,39	5,76	1150	1,35	6,83	1175	5,00	0,33	1184	7,22	0,65
ν_{32}	1218	11,31	1,11	1234	1217	13,37	1,31	1230	13,83	0,96	1230	8,44	0,76	1237	9,22	1,08
ν_{33}	1226	0,82	18,58	1242	1224	1,11	18,85	1238	0,99	16,12	1247	1,52	14,25	1255	1,59	16,28
ν_{34}	1274	5,42	0,35	1316	1290	9,04	0,50	1304	7,48	0,32	1328	1,34	6,32	1334	1,52	8,59
ν_{35}	1276	0,02	19,87	1325	1296	0,00	69,74	1310	0,00	45,06	1329	12,04	0,80	1336	11,91	1,41
ν_{36}	1317	0,00	198,13	1345	1317	0,06	111,65	1338	0,02	151,31	1413	0,05	97,38	1421	0,12	83,96

EK-23.(Devam) 3,5'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp		
	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}
ν_{37}	1357	11,12	0,92	1374	1335	0,07	15,38	1363	5,80	0,87	1462	11,72	0,96	1469	10,12	0,81
ν_{38}	1367	0,21	3,08	1375	1341	4,49	0,88	1367	0,15	5,94	1478	0,16	2,30	1484	0,08	2,44
ν_{39}	1427	32,70	1,03	1448	1422	34,83	1,31	1441	37,68	1,18	1544	55,12	0,72	1551	52,84	0,78
ν_{40}	1465	1,86	5,67	1488	1460	1,48	5,84	1481	1,84	6,05	1586	3,49	3,14	1592	2,94	3,46
ν_{41}	1496	32,76	0,45	1514	1480	32,54	0,48	1507	35,09	0,41	1621	52,69	0,28	1628	46,55	0,41
ν_{42}	1519	0,01	32,24	1546	1513	0,07	39,72	1537	0,01	37,04	1648	0,04	3,59	1656	0,01	4,06
ν_{43}	1594	17,52	0,70	1638	1593	21,29	0,45	1625	18,78	0,55	1755	26,09	1,28	1767	35,53	1,52
ν_{44}	1609	3,21	15,16	1654	1615	3,91	9,52	1641	3,59	13,32	1769	7,05	10,31	1781	9,90	6,86
ν_{45}	1626	0,11	533,21	1674	1630	11,62	1,28	1660	10,54	1,07	1784	24,55	1,74	1797	31,91	1,93
ν_{46}	1629	8,00	1,15	1675	1632	0,11	516,19	1660	0,10	513,58	1796	0,53	315,87	1810	0,66	295,18
ν_{47}	3146	2,57	78,46	3195	3059	3,01	79,49	3171	2,37	75,30	3322	2,73	102,59	3358	5,55	78,95
ν_{48}	3147	38,97	24,71	3195	3061	33,97	25,84	3172	34,85	23,56	3323	52,68	28,55	3359	46,20	32,42
ν_{49}	3154	14,30	1,35	3210	3081	21,62	2,93	3182	16,55	1,39	3325	1,75	6,83	3365	10,29	11,85
ν_{50}	3154	0,03	249,54	3210	3091	0,00	237,61	3182	0,00	250,23	3326	1,17	131,73	3366	0,16	153,44
ν_{51}	3173	0,07	106,10	3226	3098	0,34	83,59	3201	0,15	88,40	3335	0,25	91,15	3375	0,93	102,52
ν_{52}	3174	15,96	13,08	3227	3099	17,12	11,90	3201	13,63	12,86	3336	24,45	10,56	3375	41,01	9,34
ν_{53}	3191	24,44	41,35	3247	3122	26,30	35,83	3221	21,74	38,71	3357	29,43	39,74	3395	41,35	39,20
ν_{54}	3191	2,01	393,90	3248	3123	2,07	363,50	3222	1,59	384,82	3358	2,26	339,60	3395	3,63	351,17

EK-24. 3,5'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

MPW1PW91-dgdzvp						TED > %5
	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	SQM	
ν_1	66	61	3,70	7,53	65	$\tau_{2,1,6,7}(24)+\tau_{2,1,6,10}(26)+\tau_{5,1,6,7}(23)+\tau_{5,1,6,10}(24)$
ν_2	95	92	0,04	1,94	93	$\tau_{8,7,6,1}(12)+\tau_{5,1,6,7}(9)+\tau_{4,5,1,6}(12)+\tau_{11,2,1,6}(6)+\tau_{14,5,1,6}(6)+\tau_{15,7,6,1}(5)+\tau_{18,10,6,1}(6)+\tau_{19,7,6,1}(12)+\tau_{20,5,1,6}(12)$
ν_3	119	117	1,88	2,65	117	$\delta_{2,1,6}(16)+\delta_{5,1,6}(16)+\delta_{7,6,1}(16)+\delta_{10,6,1}(16)$
ν_4	263	258	0,50	3,13	258	$\delta_{2,1,6}(5)+\delta_{5,1,6}(6)+\delta_{7,6,1}(6)+\delta_{10,6,1}(5)+\tau_{8,7,6,10}(5)+\tau_{4,5,1,2}(5)+\tau_{19,2,1,6}(5)+\tau_{19,2,1,5}(69)+\tau_{20,10,6,7}(6)+\tau_{20,10,6,1}(5)$
ν_5	315	311	0,00	3,22	310	$\nu_{6,1}(30)+\delta_{2,1,5}(10)+\delta_{7,6,10}(10)$
ν_6	353	345	0,01	1,43	347	$\delta_{2,1,6}(10)+\delta_{5,1,6}(6)+\delta_{7,6,1}(6)+\delta_{10,6,1}(10)+\tau_{19,2,1,5}(5)+\tau_{20,5,1,2}(5)$
ν_7	409	400	0,73	0,66	400	$\tau_{9,8,7,6}(11)+\tau_{1,5,4,3}(11)+\tau_{3,19,2,1}(9)+\tau_{9,20,10,6}(9)$
ν_8	416	408	4,65	2,42	407	$\tau_{9,8,7,6}(10)+\tau_{1,5,4,3}(10)+\tau_{3,19,2,1}(8)+\tau_{9,20,10,6}(8)$
ν_9	498	492	0,43	0,76	491	$\delta_{7,6,1}(9)+\delta_{10,6,1}(9)+\delta_{2,1,6}(9)+\delta_{5,1,6}(9)$
ν_{10}	567	558	1,25	0,80	556	$\tau_{7,6,1,2}(9)+\tau_{10,6,1,5}(9)+\tau_{19,2,1,6}(5)+\tau_{2,19,3,4}(6)+\tau_{10,20,9,8}(6)+\tau_{20,10,6,1}(5)$
ν_{11}	625	618	4,64	1,32	619	$\delta_{8,7,6}(9)+\delta_{1,5,4}(9)+\delta_{2,19,3}(13)+\delta_{9,20,10}(13)$
ν_{12}	628	621	1,10	8,78	622	$\delta_{8,7,6}(7)+\delta_{9,8,7}(7)+\delta_{1,5,4}(7)+\delta_{5,4,3}(7)+\delta_{19,2,1}(7)+\delta_{2,19,3}(11)+\delta_{20,10,6}(7)+\delta_{9,20,10}(11)$
ν_{13}	673	666	3,76	1,36	666	$\delta_{9,8,7}(9)+\delta_{7,6,10}(6)+\delta_{2,1,5}(6)+\delta_{5,4,3}(9)+\delta_{19,2,1}(8)+\delta_{4,3,19}(6)+\delta_{20,9,8}(6)+\delta_{20,10,6}(8)$
ν_{14}	730	716	8,53	0,41	714	$\tau_{2,19,3,12}(5)+\tau_{10,20,9,17}(5)$
ν_{15}	734	720	63,67	1,17	718	$\tau_{2,19,3,12}(6)+\tau_{10,20,9,17}(6)$
ν_{16}	787	776	0,02	13,64	774	$\nu_{2,1}(7)+\nu_{6,1}(12)+\nu_{5,1}(7)+\delta_{4,3,19}(11)+\delta_{20,9,8}(11)$
ν_{17}	811	797	37,92	3,09	794	$\tau_{16,8,7,6}(11)+\tau_{1,5,4,13}(11)+\tau_{13,4,3,19}(11)+\tau_{20,9,8,16}(11)$
ν_{18}	839	824	6,23	0,59	821	$\tau_{15,7,6,1}(6)+\tau_{16,8,7,6}(11)+\tau_{1,5,4,13}(11)+\tau_{14,5,1,6}(6)+\tau_{13,4,3,19}(10)+\tau_{20,9,8,16}(10)$
ν_{19}	950	828	1,22	14,30	929	$\tau_{17,9,8,16}(7)+\tau_{18,10,6,7}(10)+\tau_{18,10,6,1}(12)+\tau_{11,2,1,6}(12)+\tau_{11,2,1,5}(10)+\tau_{13,4,3,12}(7)+\tau_{3,19,2,11}(8)+\tau_{9,20,10,18}(8)$
ν_{20}	951	829	0,74	0,29	930	$\tau_{13,4,3,12}(8)+\tau_{18,10,6,7}(8)+\tau_{18,10,6,1}(10)+\tau_{11,2,1,6}(10)+\tau_{11,2,1,5}(8)+\tau_{17,9,8,16}(8)+\tau_{3,19,2,11}(5)+\tau_{9,20,10,18}(5)$
ν_{21}	970	948	0,45	0,24	950	$\tau_{9,8,7,15}(6)+\tau_{16,8,7,15}(11)+\tau_{18,9,8,7}(6)+\tau_{5,4,3,12}(6)+\tau_{4,5,4,3}(6)+\tau_{14,5,4,13}(11)$

EK-24.(Devam) 3,5'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp				SQM	TED > %5
	ν _{har}	ν _{anhar}	I _{IR}	I _R		
ν ₂₂	982	959	0,51	0,04	961	τ _{16,8,7,15} (9)+τ _{18,10,6,1} (6)+τ _{11,2,1,6} (6)+τ _{14,5,4,13} (9)+τ _{3,19,2,11} (5)+τ _{9,20,10,18} (5)
ν ₂₃	1005	983	0,99	0,07	983	τ _{16,8,7,15} (10)+τ _{18,9,8,16} (16)+τ _{13,4,3,12} (16)+τ _{14,5,4,13} (10)
ν ₂₄	1006	983	0,00	6,45	984	τ _{16,7,2,15} (10)+τ _{13,4,3,12} (16)+τ _{17,9,8,16} (15)+τ _{14,5,4,13} (10)
ν ₂₅	1024	1009	29,76	0,81	1009	ν _{19,2} (5)+ν _{19,3} (7)+ν _{20,9} (7)+ν _{20,10} (5)
ν ₂₆	1046	1030	1,84	50,98	1032	ν _{2,1} (5)+ν _{5,1} (5)+ν _{7,6} (5)+ν _{10,6} (5)+δ _{19,2,1} (5)+δ _{2,19,3} (7)+δ _{20,10,6} (5)+δ _{9,20,10} (7)
ν ₂₇	1056	1035	1,59	6,00	1034	ν _{7,6} (9)+ν _{8,7} (7)+ν _{10,6} (8)+ν _{2,1} (8)+ν _{5,1} (9)+ν _{5,4} (7)
ν ₂₈	1083	1070	0,17	67,28	1059	ν _{4,3} (19)+ν _{9,8} (19)+ν _{19,3} (8)+ν _{20,9} (8)
ν ₂₉	1101	1084	0,56	0,23	1079	ν _{2,1} (5)+ν _{4,3} (10)+ν _{5,1} (5)+ν _{7,6} (5)+ν _{9,8} (10)+ν _{10,6} (5)
ν ₃₀	1151	1141	13,33	0,31	1128	ν _{8,7} (11)+ν _{5,4} (11)+δ _{8,7,15} (8)+δ _{16,8,7} (10)+δ _{5,4,13} (10)+δ _{14,5,4} (8)
ν ₃₁	1153	1144	1,39	5,76	1130	ν _{8,7} (10)+ν _{4,9} (10)+δ _{15,7,6} (7)+δ _{8,7,15} (10)+δ _{16,8,7} (8)+δ _{5,4,13} (8)+δ _{14,5,1} (7)+δ _{14,5,4} (10)
ν ₃₂	1234	1217	13,37	1,31	1209	ν _{19,3} (10)+ν _{20,4} (10)+δ _{12,3,19} (8)+δ _{17,9,20} (8)
ν ₃₃	1242	1224	1,11	18,85	1217	ν _{19,2} (6)+ν _{19,3} (10)+ν _{20,9} (10)+ν _{20,10} (6)+δ _{12,3,19} (9)+δ _{17,9,20} (9)
ν ₃₄	1316	1290	9,04	0,50	1285	ν _{7,6} (9)+ν _{10,6} (14)+ν _{2,1} (14)+ν _{5,1} (9)+ν _{19,2} (10)+ν _{20,10} (10)
ν ₃₅	1325	1296	0,00	69,74	1295	ν _{8,7} (6)+ν _{10,6} (9)+ν _{1,6} (7)+ν _{2,1} (9)+ν _{5,4} (6)+ν _{19,2} (8)+ν _{19,3} (8)+ν _{20,9} (8)+ν _{20,10} (8)
ν ₃₆	1345	1317	0,06	111,65	1317	ν _{6,1} (26)+ν _{19,2} (7)+ν _{20,10} (7)
ν ₃₇	1374	1335	0,07	15,38	1348	δ _{15,7,6} (8)+δ _{8,7,15} (7)+δ _{18,10,6} (9)+δ _{11,2,1} (9)+δ _{14,5,1} (8)+δ _{14,5,4} (7)+δ _{11,2,19} (7)+δ _{18,10,20} (7)
ν ₃₈	1375	1341	4,49	0,88	1349	δ _{17,9,8} (5)+δ _{18,10,6} (13)+δ _{11,2,1} (13)+δ _{4,3,12} (5)+δ _{11,2,19} (14)+δ _{18,10,20} (14)
ν ₃₉	1448	1422	34,83	1,31	1418	ν _{19,2} (8)+ν _{20,10} (8)+δ _{17,9,8} (8)+δ _{4,3,12} (8)+δ _{12,3,19} (12)+δ _{17,9,20} (12)
ν ₄₀	1488	1460	1,48	5,84	1459	ν _{10,6} (5)+ν _{2,1} (5)+ν _{19,2} (10)+ν _{20,10} (10)+δ _{17,9,8} (6)+δ _{4,3,12} (6)+δ _{12,3,19} (10)+δ _{17,9,20} (10)
ν ₄₁	1514	1480	32,54	0,48	1484	δ _{16,8,7} (7)+δ _{9,8,16} (7)+δ _{18,10,6} (6)+δ _{11,2,1} (6)+δ _{13,4,3} (7)+δ _{5,4,13} (7)+δ _{11,2,19} (6)+δ _{18,10,20} (6)
ν ₄₂	1546	1513	0,07	39,72	1514	ν _{8,7} (6)+ν _{6,1} (10)+ν _{5,4} (6)+ν _{19,3} (7)+ν _{20,9} (7)+δ _{9,8,16} (6)+δ _{13,4,3} (6)

EK-24.(Devam) 3,5'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp				SQM	TED > %5
	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}		
ν_{43}	1638	1593	21,29	0,45	1602	$\nu_{7,6}(7)+\nu_{4,3}(12)+\nu_{10,6}(6)+\nu_{2,1}(6)+\nu_{9,8}(12)+\nu_{5,1}(7)+\nu_{19,3}(8)+\nu_{20,9}(8)$
ν_{44}	1654	1615	3,91	9,52	1618	$\nu_{7,6}(9)+\nu_{9,8}(11)+\nu_{10,6}(8)+\nu_{2,1}(8)+\nu_{4,3}(11)+\nu_{5,1}(9)+\nu_{19,3}(7)+\nu_{20,9}(7)$
ν_{45}	1674	1630	11,62	1,28	1636	$\nu_{7,6}(5)+\nu_{8,7}(15)+\nu_{5,1}(5)+\nu_{5,4}(15)+\nu_{19,2}(10)+\nu_{20,10}(10)$
ν_{46}	1675	1632	0,11	516,19	1638	$\nu_{7,6}(7)+\nu_{8,7}(12)+\nu_{6,1}(7)+\nu_{5,1}(7)+\nu_{5,4}(12)+\nu_{19,2}(8)+\nu_{20,10}(8)$
ν_{47}	3195	3059	3,01	79,49	3068	$\nu_{18,10}(49)+\nu_{11,2}(49)$
ν_{48}	3195	3061	33,97	25,84	3068	$\nu_{18,10}(49)+\nu_{11,2}(49)$
ν_{49}	3210	3081	21,62	2,93	3082	$\nu_{17,9}(44)+\nu_{12,3}(44)$
ν_{50}	3210	3091	0,00	237,61	3083	$\nu_{17,9}(44)+\nu_{12,3}(44)$
ν_{51}	3226	3098	0,34	83,59	3098	$\nu_{15,7}(41)+\nu_{16,8}(6)+\nu_{13,4}(6)+\nu_{14,5}(41)$
ν_{52}	3227	3099	17,12	11,90	3098	$\nu_{15,7}(41)+\nu_{16,8}(6)+\nu_{13,4}(6)+\nu_{14,5}(41)$
ν_{53}	3247	3122	26,30	35,83	3118	$\nu_{15,7}(7)+\nu_{17,8}(40)+\nu_{13,4}(40)+\nu_{14,5}(7)$
ν_{54}	3248	3123	2,07	363,50	3119	$\nu_{15,7}(8)+\nu_{12,3}(40)+\nu_{13,4}(40)+\nu_{14,5}(8)$

EK-25. 3,6'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF - 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney[24]
Bağ uzunluğu (Å)						
C ₆ ,C ₇	1,403	1,401	1,398	1,393	1,394	
C ₆ ,C ₁	1,485	1,481	1,479	1,489	1,489	
C ₆ ,N ₂₀	1,344	1,342	1,338	1,324	1,326	
C ₇ ,C ₈	1,390	1,389	1,386	1,381	1,382	
C ₇ ,H ₁₅	1,082	1,084	1,082	1,073	1,072	
C ₈ ,C ₉	1,392	1,391	1,388	1,384	1,384	
C ₈ ,H ₁₆	1,084	1,085	1,084	1,076	1,075	
C ₉ ,C ₁₀	1,393	1,393	1,389	1,383	1,384	
C ₉ ,H ₁₇	1,083	1,084	1,083	1,074	1,074	
C ₁₀ ,H ₁₈	1,087	1,088	1,086	1,077	1,076	
C ₁₀ ,N ₂₀	1,333	1,331	1,328	1,318	1,32	
C ₁ ,C ₂	1,402	1,401	1,397	1,390	1,391	
C ₁ ,C ₅	1,4	1,398	1,395	1,390	1,391	
C ₂ ,H ₁₁	1,086	1,088	1,086	1,076	1,075	1,087
C ₂ ,N ₁₉	1,334	1,333	1,329	1,319	1,321	1,338
C ₃ ,C ₄	1,394	1,394	1,390	1,386	1,386	
C ₃ ,H ₁₂	1,086	1,087	1,086	1,077	1,076	
C ₃ ,N ₁₉	1,336	1,334	1,331	1,318	1,320	
C ₄ ,C ₅	1,388	1,388	1,384	1,38	1,381	1,394
C ₄ ,H ₁₃	1,084	1,085	1,083	1,074	1,074	
C ₅ ,H ₁₄	1,083	1,084	1,083	1,073	1,073	1,083
Bağ açısı (°)						
C ₇ ,C ₆ ,C ₁	122,0	122,0	121,9	121,8	121,9	
C ₇ ,C ₆ ,N ₂₀	121,6	121,8	121,8	121,7	121,7	
C ₁ ,C ₆ ,N ₂₀	116,4	116,2	116,3	116,4	116,4	
C ₆ ,C ₇ ,C ₈	119,2	119,2	119,1	118,9	118,9	
C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	120,6	120,7	120,6	120,8	120,9	
C ₈ ,C ₇ ,H ₁₅	120,2	120,1	120,3	120,3	120,2	
C ₇ ,C ₈ ,C ₉	119,0	119,0	119,0	119,2	119,2	
C ₇ ,C ₈ ,H ₁₆	120,2	120,3	120,3	120,2	120,2	
C ₉ ,C ₈ ,H ₁₆	120,7	120,8	120,8	120,7	120,7	
C ₈ ,C ₉ ,C ₁₀	117,9	117,8	117,9	117,6	117,6	
C ₈ ,C ₉ ,H ₁₇	121,6	121,7	121,6	121,8	121,8	
C ₁₀ ,C ₉ ,H ₁₇	120,5	120,5	120,6	120,7	120,7	
C ₉ ,C ₁₀ ,H ₁₈	120,4	120,3	120,3	120,3	120,4	
C ₉ ,C ₁₀ ,N ₂₀	123,7	123,8	123,7	123,6	123,6	

EK-25.(Devam) 3,6'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,n)	MPW1PW91 - dødzyn	MPW1PW91- 6-311+g(d,n)	HF - 6-311+g(d,n)	HF - dødzyn	Deney[24]
Bağ açısı (°)						
H ₁₈ ,C ₁₀ ,N ₂₀	115,9	115,9	115,9	116,0	116,0	
C ₆ ,C ₁ ,C ₂	122,3	122,5	122,3	122,1	122,3	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅	120,7	120,4	120,6	120,8	120,7	
C ₂ ,C ₁ ,C ₅	117,0	117,1	117,1	117,0	117,0	118,4
C ₁ ,C ₂ ,H ₁₁	120,4	120,4	120,3	120,4	120,5	
C ₁ ,C ₂ ,N ₁₉	124,3	124,4	124,3	124,2	124,2	123,8
H ₁₁ ,C ₂ ,N ₁₉	115,3	115,1	115,4	115,4	115,3	
C ₄ ,C ₃ ,H ₁₂	120,7	120,6	120,6	120,5	120,5	
C ₄ ,C ₃ ,N ₁₉	123,1	123,3	123,3	123,2	123,1	
H ₁₂ ,C ₃ ,N ₁₉	116,2	116,1	116,1	116,4	116,3	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅	118,7	118,7	118,7	118,5	118,5	
C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	120,3	120,2	120,3	120,4	120,4	120,2
C ₅ ,C ₄ ,H ₁₃	121,0	121,1	121,1	121,2	121,2	120,1
C ₁ ,C ₅ ,C ₄	119,2	119,1	119,2	119,2	119,2	118,5
C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	119,2	119,2	119,1	119,7	119,7	121,4
C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	121,6	121,7	121,8	121,2	121,1	
C ₂ ,N ₁₉ ,C ₃	117,6	117,4	117,5	118,0	118,0	
C ₆ ,N ₂₀ ,C ₁₀	118,6	118,5	118,5	119,0	119,1	116,9
Dihedral açı (°)						
C ₁ ,C ₆ ,C ₇ ,C ₈	179,6	179,7	179,6	179,7	179,8	
C ₁ ,C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	-1,6	-1,8	-1,7	-1,5	-1,5	
N ₂₀ ,C ₆ ,C ₇ ,C ₈	-1,3	-1,3	-1,4	-1,2	-1,2	
N ₂₀ ,C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	177,5	177,3	177,4	177,5	177,5	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₂	-24,2	-23,3	-24,1	-28,5	-28,1	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₅	156,5	157,6	156,7	152,2	152,7	
N ₂₀ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₂	156,6	157,6	156,8	152,4	152,8	
N ₂₀ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₅	-22,7	-21,5	-22,4	-26,9	-26,4	
C ₇ ,C ₆ ,N ₂₀ ,C ₁₀	1,0	1,0	1,1	0,9	0,9	
C ₁ ,C ₆ ,N ₂₀ ,C ₁₀	-179,8	-179,9	-179,8	-180,0	180,0	
C ₆ ,C ₇ ,C ₈ ,C ₉	0,5	0,5	0,6	0,5	0,5	
C ₆ ,C ₇ ,C ₈ ,H ₁₆	179,9	179,9	179,9	179,9	179,9	
H ₁₅ ,C ₇ ,C ₈ ,C ₉	-178,3	-178,1	-178,2	-178,2	-178,2	
H ₁₅ ,C ₇ ,C ₈ ,H ₁₆	1,1	1,3	1,2	1,2	1,2	
C ₇ ,C ₈ ,C ₉ ,C ₁₀	0,4	0,5	0,5	0,4	0,4	

EK-25.(Devam) 3,6'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF - 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney[24]
Dihedral açısı (°)						
C ₇ ,C ₈ ,C ₉ ,H ₁₇	180,0	180,0	180,0	179,9	179,9	
H ₁₆ ,C ₈ ,C ₉ ,C ₁₀	-179,0	-178,9	-178,9	-179,0	-179,0	
H ₁₆ ,C ₈ ,C ₉ ,H ₁₇	0,6	0,6	0,6	0,5	0,5	
C ₈ ,C ₉ ,C ₁₀ ,H ₁₈	179,4	179,3	179,3	179,5	179,5	
C ₈ ,C ₉ ,C ₁₀ ,N ₂₀	-0,8	-0,8	-0,8	-0,7	-0,7	
H ₁₇ ,C ₉ ,C ₁₀ ,H ₁₈	-0,2	-0,1	-0,2	-0,1	-0,1	
H ₁₇ ,C ₉ ,C ₁₀ ,N ₂₀	179,7	179,7	179,7	179,8	179,8	
C ₉ ,C ₁₀ ,N ₂₀ ,C ₆	0,0	0,1	0,0	0,0	0,1	
H ₁₈ ,C ₁₀ ,N ₂₀ ,C ₆	179,9	179,9	179,9	179,9	179,9	
C ₆ ,C ₁ ,C ₂ ,H ₁₁	-1,9	-1,9	-1,9	-1,5	-1,5	
C ₆ ,C ₁ ,C ₂ ,N ₁₉	179,5	179,6	179,5	179,8	179,9	
C ₅ ,C ₁ ,C ₂ ,H ₁₁	177,4	177,2	177,3	177,8	177,7	
C ₅ ,C ₁ ,C ₂ ,N ₁₉	-1,2	-1,2	-1,3	-0,9	-0,9	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅ ,C ₄	-179,5	-179,6	-179,5	-179,6	-179,7	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	0,5	0,4	0,6	0,4	0,3	
C ₂ ,C ₁ ,C ₅ ,C ₄	1,2	1,2	1,2	1,1	1,1	
C ₂ ,C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	-178,8	-178,7	-178,7	-178,9	-179,0	
C ₁ ,C ₂ ,N ₁₉ ,C ₃	0,2	0,2	0,3	0,1	0,1	
H ₁₁ ,C ₂ ,N ₁₉ ,C ₃	-178,4	-178,3	-178,4	-178,7	-178,6	
H ₁₂ ,C ₃ ,C ₄ ,C ₅	179,6	179,6	179,6	179,9	180,0	
H ₁₂ ,C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	-0,3	-0,3	-0,3	-0,1	-0,1	
N ₁₉ ,C ₃ ,C ₄ ,C ₅	-0,7	-0,7	-0,8	-0,4	-0,4	
N ₁₉ ,C ₃ ,C ₄ ,H ₁₃	179,4	179,4	179,4	179,6	179,6	
C ₄ ,C ₃ ,N ₁₉ ,C ₂	0,7	0,8	0,8	0,6	0,6	
H ₁₂ ,C ₃ ,N ₁₉ ,C ₂	-179,6	-179,6	-179,5	-179,7	-179,7	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅ ,C ₁	0,3	-0,3	-0,3	-0,5	-0,5	
C ₃ ,C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	179,6	179,6	179,6	179,6	179,5	
H ₁₃ ,C ₄ ,C ₅ ,C ₁	179,6	179,6	179,5	179,5	179,5	
H ₁₃ ,C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	-0,5	-0,5	-0,5	-0,4	-0,4	

EK-26. 3,6'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp		
	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}
ν_1	49	3,70	2,88	49	45	3,72	2,95	49	3,70	2,68	55	3,72	2,54	54	3,79	3,09
ν_2	95	0,92	0,57	95	93	1,08	0,63	95	0,97	0,56	106	1,18	0,66	105	1,24	0,82
ν_3	146	2,79	1,74	147	142	2,73	1,88	145	2,82	1,65	153	2,89	1,65	154	2,82	2,03
ν_4	242	0,93	3,54	242	236	0,85	4,61	243	0,91	3,58	275	1,12	3,30	275	1,07	4,59
ν_5	326	0,04	2,58	328	324	0,07	2,69	328	0,06	2,67	344	0,04	3,23	346	0,05	3,18
ν_6	385	1,46	0,39	387	378	1,66	0,43	385	1,54	0,35	417	1,37	0,29	418	1,43	0,35
ν_7	410	0,20	0,90	409	400	0,04	1,45	410	0,16	0,83	453	2,09	0,37	453	1,73	0,84
ν_8	417	5,05	0,50	416	407	4,70	0,69	417	4,86	0,45	459	4,08	0,57	458	4,67	0,94
ν_9	474	1,98	0,48	473	466	2,51	0,52	475	2,19	0,42	524	3,08	0,08	524	3,39	0,17
ν_{10}	568	3,95	1,52	567	557	4,13	1,21	570	4,03	1,56	619	5,90	1,28	618	6,25	0,93
ν_{11}	622	4,72	6,28	618	610	4,82	8,15	620	4,56	6,22	665	5,59	5,68	667	6,42	7,78
ν_{12}	644	1,50	0,99	640	633	1,44	1,24	642	1,44	0,93	688	1,80	1,58	690	1,95	1,69
ν_{13}	670	6,59	2,27	667	662	7,02	3,07	670	6,65	2,25	718	7,60	2,69	719	7,56	3,10
ν_{14}	722	20,29	0,36	725	712	24,39	0,34	726	20,99	0,33	775	30,54	0,49	775	36,94	0,60
ν_{15}	758	27,24	0,95	760	747	40,06	0,76	763	30,03	0,87	833	18,16	0,51	833	19,50	0,80
ν_{16}	783	2,54	13,45	788	776	17,59	10,19	789	2,99	12,67	836	1,81	15,55	839	2,20	13,69
ν_{17}	789	60,83	0,58	789	777	41,89	3,82	794	60,18	0,63	863	84,35	0,97	859	85,04	1,03
ν_{18}	839	2,89	6,01	842	827	3,09	3,08	845	2,81	5,67	918	4,33	6,89	917	3,36	2,96
ν_{19}	906	0,20	0,84	903	885	0,20	0,89	912	0,21	0,70	993	0,71	0,75	987	0,80	0,86

EK-26.(Devam) 3,6'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp		
	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	V_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}
ν_{20}	945	0,90	5,11	947	927	1,03	4,57	952	0,91	4,53	1057	0,33	4,76	1056	0,23	4,02
ν_{21}	979	0,61	0,18	983	962	0,74	0,45	988	0,61	0,14	1084	4,28	39,38	1087	5,26	38,22
ν_{22}	985	0,04	0,12	987	966	0,04	0,56	993	0,04	0,10	1095	0,43	0,09	1092	0,34	0,79
ν_{23}	1007	3,80	51,52	1009	987	1,01	9,72	1015	1,77	26,90	1101	0,33	0,18	1097	0,20	0,46
ν_{24}	1011	1,20	5,89	1010	989	0,08	1,46	1019	2,26	16,80	1111	10,62	1,19	1114	12,20	1,50
ν_{25}	1013	0,07	0,55	1016	1000	4,09	38,55	1020	0,71	6,12	1115	3,35	53,88	1116	0,25	5,88
ν_{26}	1033	13,83	5,27	1037	1020	16,28	17,32	1037	14,26	20,87	1123	0,54	0,65	1117	1,51	2,96
ν_{27}	1045	2,34	51,04	1061	1048	5,58	22,41	1058	2,23	23,06	1124	0,96	0,31	1121	3,85	38,30
ν_{28}	1069	2,72	62,49	1085	1067	1,80	60,22	1081	2,00	63,73	1142	4,52	49,55	1149	4,73	44,56
ν_{29}	1090	1,58	1,28	1103	1081	2,27	2,47	1099	1,93	2,36	1162	38,36	13,50	1170	38,53	12,63
ν_{30}	1120	4,41	1,83	1130	1109	4,29	2,30	1129	3,87	2,27	1169	0,18	1,11	1176	0,36	10,71
ν_{31}	1137	8,12	10,75	1145	1138	10,74	7,64	1143	9,61	9,15	1176	2,26	5,25	1185	2,37	5,64
ν_{32}	1179	3,68	4,83	1181	1165	3,63	3,91	1181	3,25	4,77	1206	3,09	1,42	1212	3,74	1,70
ν_{33}	1222	8,96	13,16	1238	1219	10,37	13,97	1234	10,40	11,91	1242	7,28	22,49	1251	7,94	24,23
ν_{34}	1277	0,89	86,61	1315	1289	4,60	28,43	1306	4,06	42,52	1305	0,27	6,08	1312	0,33	5,49
ν_{35}	1282	3,17	5,26	1325	1304	2,01	153,11	1312	1,33	96,94	1329	10,02	2,17	1336	10,07	3,10
ν_{36}	1316	7,34	175,55	1344	1315	2,00	23,57	1334	3,09	66,63	1416	11,63	150,43	1423	13,21	98,21

EK-26.(Devam) 3,6'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp		
	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	V_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}	V_{har}	I_{IR}	I_{R}
ν_{37}	1324	1,95	60,58	1355	1330	3,21	54,81	1345	3,82	73,00	1419	3,51	5,31	1425	1,34	45,89
ν_{38}	1364	3,72	11,72	1375	1345	2,49	29,85	1366	2,55	21,81	1475	3,07	5,42	1481	2,71	6,94
ν_{39}	1441	14,25	2,17	1460	1436	8,77	7,00	1454	12,82	4,85	1559	27,52	1,15	1566	20,76	1,51
ν_{40}	1463	65,19	31,77	1480	1452	69,14	20,05	1474	71,69	22,35	1582	82,70	16,01	1588	82,35	15,98
ν_{41}	1500	26,50	7,62	1520	1493	51,56	3,41	1513	23,02	3,69	1631	32,21	2,85	1638	28,08	2,71
ν_{42}	1515	1,53	72,96	1544	1509	4,00	94,60	1534	3,42	85,35	1648	4,47	19,80	1657	4,43	25,26
ν_{43}	1598	2,09	6,65	1641	1600	2,85	5,50	1627	2,85	5,43	1750	14,03	13,73	1763	12,90	11,46
ν_{44}	1615	41,48	130,26	1660	1619	44,47	84,39	1646	44,22	111,16	1773	56,63	26,92	1785	64,05	19,14
ν_{45}	1625	61,07	532,44	1670	1628	78,71	525,72	1657	74,83	504,84	1784	89,26	81,72	1797	97,48	100,65
ν_{46}	1631	10,19	16,16	1676	1632	3,41	57,38	1662	4,28	47,56	1791	66,94	282,90	1804	69,83	269,29
ν_{47}	3147	23,32	123,69	3200	3066	23,25	47,38	3175	22,37	118,83	3321	19,41	83,35	3362	24,95	85,17
ν_{48}	2150	28,73	97,60	3204	3071	24,02	107,86	3176	26,73	57,16	3322	16,34	100,27	3364	19,74	100,29
ν_{49}	3153	3,24	78,69	3208	3090	10,91	123,05	3180	4,37	117,75	3331	25,54	82,81	3367	21,18	39,94
ν_{50}	3172	5,34	90,50	3229	3105	5,24	80,14	3202	5,07	86,45	3334	5,92	34,99	3373	11,55	74,94
ν_{51}	3182	16,56	179,06	3238	3107	14,35	132,12	3212	12,40	144,90	3350	18,96	147,52	3388	27,60	155,40
ν_{52}	3193	15,57	150,17	3248	3117	13,98	59,70	3222	12,25	97,92	3358	18,85	145,04	3396	27,48	128,68
ν_{53}	3200	5,81	175,53	3254	3118	10,04	212,96	3229	6,63	185,12	3369	4,69	119,77	3404	8,07	149,07
ν_{54}	3204	3,61	99,44	3255	3125	5,03	131,64	3230	4,08	146,36	3373	3,70	87,67	3411	5,03	78,09

EK-27. 3,6'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp				SQM	TED > %5
	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}		
ν_1	49	45	3,72	2,95	48	$\tau_{7,6,1,2}(24)+\tau_{5,1,6,7}(24)+\tau_{2,1,6,20}(24)+\tau_{5,1,6,20}(25)$
ν_2	95	93	1,08	0,63	93	$\tau_{8,7,6,1}(17)+\tau_{5,1,6,7}(7)+\tau_{4,5,1,6}(12)+\tau_{15,7,6,1}(8)+\tau_{11,2,1,6}(6)+\tau_{14,5,1,6}(6)+\tau_{19,2,1,6}(12)+\tau_{10,20,6,1}(14)+\tau_{2,1,6,20}(7)$
ν_3	147	142	2,73	1,88	145	$\delta_{7,6,1}(17)+\delta_{2,1,6}(18)+\delta_{5,1,6}(19)+\delta_{1,6,20}(16)$
ν_4	242	236	0,85	4,61	238	$\delta_{2,1,6}(5)+\delta_{5,1,6}(6)+\tau_{8,7,6,1}(6)+\tau_{4,5,1,6}(6)+\tau_{4,5,1,2}(5)+\tau_{19,2,1,6}(7)+\tau_{19,2,1,5}(6)+\tau_{8,7,1,20}(7)+\tau_{10,20,6,1}(5)$
ν_5	328	324	0,07	2,69	323	$\nu_{6,1}(33)+\delta_{2,1,5}(10)+\delta_{7,6,20}(10)$
ν_6	387	378	1,66	0,43	380	$\delta_{7,6,1}(7)+\delta_{2,1,6}(6)+\delta_{5,1,6}(6)+\delta_{1,6,20}(6)+\tau_{19,2,1,5}(8)+\tau_{5,4,3,19}(8)$
ν_7	409	400	0,04	1,45	401	$\tau_{4,5,1,6}(6)+\tau_{1,5,4,3}(15)+\tau_{3,19,2,1}(11)+\tau_{3,19,2,11}(5)$
ν_8	416	407	4,70	0,69	407	$\tau_{9,8,7,6}(15)+\tau_{10,9,8,7}(8)+\tau_{9,8,7,15}(5)+\tau_{10,20,9,8}(6)+\tau_{6,20,10,9}(13)+\tau_{6,20,10,18}(5)$
ν_9	473	466	2,51	0,52	465	$\delta_{7,6,1}(11)+\delta_{2,1,6}(10)+\delta_{5,1,6}(8)+\delta_{1,6,20}(9)$
ν_{10}	567	557	4,13	1,21	456	$\tau_{10,9,8,7}(6)+\tau_{8,7,6,1}(6)+\tau_{2,1,6,7}(7)+\tau_{10,9,8,16}(7)+\tau_{18,10,9,8}(7)+\tau_{19,2,1,6}(5)+\tau_{2,19,3,4}(5)+\tau_{20,10,9,8}(8)+\tau_{10,20,6,1}(6)+\tau_{5,1,6,20}(8)$
ν_{11}	618	610	4,82	8,15	611	$\delta_{9,8,7}(10)+\delta_{1,5,4}(10)+\delta_{2,19,3}(15)+\delta_{6,20,8}(10)$
ν_{12}	640	633	1,44	1,24	633	$\delta_{8,7,6}(8)+\delta_{9,8,7}(11)+\delta_{1,5,4}(6)+\delta_{5,4,3}(5)+\delta_{2,19,3}(10)+\delta_{6,20,10}(10)+\delta_{20,10,9}(8)$
ν_{13}	667	662	7,02	3,07	660	$\delta_{8,7,6}(7)+\delta_{10,9,8}(9)+\delta_{2,1,5}(7)+\delta_{5,4,3}(8)+\delta_{19,2,1}(8)+\delta_{4,3,19}(7)+\delta_{7,6,20}(8)+\delta_{20,5,9}(7)$
ν_{14}	725	712	24,39	0,34	710	$\tau_{1,5,4,3}(5)+\tau_{11,2,1,5}(5)+\tau_{5,4,3,12}(10)+\tau_{14,5,1,2}(6)+\tau_{14,5,4,3}(8)+\tau_{3,19,2,1}(8)+\tau_{2,19,3,4}(10)+\tau_{19,2,1,5}(5)+\tau_{5,4,3,19}(9)+\tau_{3,19,2,11}(8)+\tau_{2,19,3,12}(11)$
ν_{15}	760	747	40,06	0,76	745	$\tau_{9,8,7,15}(11)+\tau_{17,9,8,7}(15)+\tau_{6,20,10,9}(6)+\tau_{20,10,9,8}(6)+\tau_{15,7,6,20}(11)+\tau_{20,10,9,17}(19)$
ν_{16}	788	776	17,59	10,19	773	$\tau_{15,7,6,1}(5)+\tau_{16,8,7,6}(7)+\tau_{1,5,4,13}(6)+\tau_{13,4,3,19}(6)+\tau_{8,7,6,20}(7)+\tau_{10,20,6,7}(7)+\tau_{6,20,10,18}(6)$
ν_{17}	789	777	41,89	3,82	775	$\nu_{7,6}(6)+\nu_{6,1}(12)+\nu_{5,1}(7)+\delta_{10,9,8}(9)+\delta_{4,3,19}(11)$
ν_{18}	842	827	3,09	3,08	825	$\tau_{1,5,4,13}(17)+\tau_{14,5,1,6}(8)+\tau_{13,4,3,19}(16)$
ν_{19}	903	885	0,20	0,89	885	$\tau_{9,8,7,15}(14)+\tau_{15,7,6,1}(16)+\tau_{16,8,7,15}(8)+\tau_{17,9,8,7}(8)+\tau_{17,9,8,16}(15)+\tau_{18,10,9,8}(7)+\tau_{15,7,6,20}(9)+\tau_{20,10,9,17}(8)$
ν_{20}	947	927	1,03	4,57	928	$\tau_{11,2,1,6}(26)+\tau_{11,2,1,5}(20)+\tau_{13,4,3,12}(12)+\tau_{3,19,2,11}(15)$
ν_{21}	983	962	0,74	0,45	963	$\tau_{18,10,9,8}(9)+\tau_{18,10,9,17}(19)+\tau_{5,4,3,12}(7)+\tau_{13,4,3,12}(7)+\tau_{14,5,4,3}(5)+\tau_{14,5,4,13}(6)+\tau_{2,19,3,12}(7)+\tau_{6,20,10,18}(8)$

EK-27.(Devam) 3,6'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp				SQM	TED > %5
	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}		
ν_{22}	987	966	0,04	0,56	967	$\tau_{16,8,7,15}(6)+\tau_{18,10,9,8}(8)+\tau_{18,10,9,17}(16)+\tau_{5,4,3,12}(7)+\tau_{13,4,3,12}(8)+\tau_{2,19,3,12}(7)+\tau_{6,20,10,18}(8)$
ν_{23}	1009	987	1,01	9,72	988	$\tau_{13,4,3,12}(23)+\tau_{14,5,1,6}(9)+\tau_{14,5,1,2}(8)+\tau_{14,5,4,13}(30)$
ν_{24}	1010	989	0,08	1,46	989	$\tau_{16,8,7,6}(8)+\tau_{10,9,8,16}(6)+\tau_{16,8,7,15}(25)+\tau_{17,9,8,16}(28)+\tau_{18,10,6,17}(14)$
ν_{25}	1016	1000	4,09	38,55	999	$\nu_{7,6}(10)+\nu_{10,9}(6)+\nu_{20,6}(14)+\nu_{20,10}(10)+\delta_{9,8,7}(7)+\delta_{6,20,10}(7)+\delta_{20,10,9}(5)$
ν_{26}	1037	1020	16,28	17,32	1023	$\nu_{9,3}(6)+\delta_{5,4}(10)+\delta_{10,9,8}(7)+\delta_{11,2,1}(6)+\delta_{13,4,3}(6)+\delta_{19,2,1}(9)+\delta_{2,19,3}(12)$
ν_{27}	1061	1048	5,58	22,41	1038	$\nu_{2,1}(11)+\nu_{4,3}(13)+\nu_{5,1}(13)+\nu_{5,4}(12)$
ν_{28}	1085	1067	1,80	60,22	1062	$\nu_{9,8}(16)+\nu_{10,9}(16)+\nu_{4,3}(17)+\nu_{19,3}(5)$
ν_{29}	1103	1081	2,27	2,47	1082	$\nu_{2,1}(6)+\nu_{4,3}(10)+\nu_{7,6}(6)+\nu_{9,8}(6)+\nu_{5,1}(7)+\nu_{20,6}(6)+\delta_{8,7,15}(6)$
ν_{30}	1130	1109	4,29	2,30	1109	$\nu_{8,7}(14)+\nu_{9,8}(5)+\nu_{10,9}(15)+\delta_{8,7,15}(5)+\delta_{17,9,8}(18)+\delta_{10,9,17}(18)$
ν_{31}	1145	1138	10,74	7,64	1125	$\nu_{5,4}(20)+\nu_{19,2}(6)+\delta_{13,4,3}(9)+\delta_{5,4,13}(18)+\delta_{14,5,1}(12)+\delta_{14,5,4}(18)$
ν_{32}	1181	1165	3,63	3,91	1162	$\nu_{8,7}(12)+\nu_{9,8}(6)+\delta_{15,7,6}(10)+\delta_{8,7,15}(11)+\delta_{16,8,7}(20)+\delta_{9,8,16}(18)+\delta_{17,9,8}(7)+\delta_{10,9,17}(9)$
ν_{33}	1238	1219	10,37	13,97	1214	$\nu_{4,5}(8)+\nu_{19,2}(11)+\nu_{19,3}(19)+\delta_{4,3,12}(9)+\delta_{13,4,3}(7)+\delta_{11,2,19}(5)+\delta_{12,3,19}(17)$
ν_{34}	1315	1286	4,60	28,43	1289	$\nu_{7,6}(8)+\nu_{2,1}(16)+\nu_{5,1}(7)+\nu_{19,2}(11)+\delta_{15,6,1}(8)+\delta_{8,7,15}(6)+\delta_{18,10,9}(6)+\delta_{18,10,20}(10)$
ν_{35}	1325	1304	2,01	153,11	1296	$\nu_{7,6}(6)+\nu_{8,7}(12)+\nu_{10,9}(5)+\nu_{6,1}(11)+\nu_{20,6}(24)$
ν_{36}	1344	1315	2,00	23,57	1316	$\nu_{6,1}(8)+\nu_{4,3}(6)+\nu_{5,1}(7)+\nu_{19,2}(16)+\nu_{19,3}(10)+\delta_{15,7,6}(5)+\delta_{8,7,15}(6)+\delta_{16,8,7}(5)$
ν_{37}	1355	1330	3,21	54,81	1325	$\nu_{6,1}(12)+\nu_{20,10}(33)+\delta_{18,10,20}(11)$
ν_{38}	1375	1345	2,49	29,85	1353	$\delta_{11,2,1}(21)+\delta_{4,3,12}(7)+\delta_{14,5,1}(11)+\delta_{14,5,4}(8)+\delta_{11,2,19}(21)+\delta_{12,3,19}(5)$
ν_{39}	1460	1436	8,77	7,00	1434	$\nu_{2,1}(6)+\nu_{19,2}(12)+\nu_{9,8,16}(5)+\delta_{17,9,8}(6)+\delta_{18,10,9}(6)+\delta_{4,3,12}(10)+\delta_{12,3,19}(14)$
ν_{40}	1480	1452	69,14	20,05	1453	$\nu_{7,6}(8)+\nu_{10,9}(5)+\nu_{20,4}(7)+\delta_{16,8,7}(6)+\delta_{9,8,16}(9)+\delta_{17,9,8}(9)+\delta_{10,9,17}(6)+\delta_{12,3,19}(6)$
ν_{41}	1520	1493	51,56	3,41	1494	$\nu_{20,6}(8)+\delta_{15,7,6}(6)+\delta_{18,10,9}(10)+\delta_{11,2,1}(5)+\delta_{4,3,12}(5)+\delta_{13,4,3}(5)+\delta_{18,10,20}(8)$
ν_{42}	1544	1509	4,00	94,60	1513	$\nu_{10,9}(6)+\nu_{6,1}(11)+\nu_{4,3}(5)+\nu_{5,4}(6)+\nu_{19,3}(5)+\nu_{20,6}(6)+\delta_{11,2,1}(5)+\delta_{13,4,3}(6)+\delta_{5,4,13}(6)+\delta_{11,2,19}(6)+\delta_{18,10,20}(5)$

EK-27.(Devam) 3,6'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp				SQM	TED > %5
	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}		
ν_{43}	1641	1600	2,85	5,50	1604	$\nu_{7,6}(5)+\nu_{9,8}(17)+\nu_{10,9}(6)+\nu_{2,1}(5)+\nu_{4,3}(9)+\nu_{5,1}(9)+\nu_{19,3}(11)+\nu_{20,6}(6)$
ν_{44}	1660	1619	44,47	84,39	1623	$\nu_{8,7}(5)+\nu_{9,8}(16)+\nu_{2,1}(10)+\nu_{4,3}(11)+\nu_{5,1}(7)+\nu_{19,3}(6)+\nu_{20,6}(9)$
ν_{45}	1670	1628	78,71	525,72	1634	$\nu_{7,6}(13)+\nu_{8,7}(15)+\nu_{10,9}(12)+\nu_{5,1}(6)+\nu_{5,4}(5)+\nu_{20,10}(10)$
ν_{46}	1676	1632	3,41	57,38	1638	$\nu_{8,7}(7)+\nu_{2,1}(7)+\nu_{5,1}(6)+\nu_{5,4}(21)+\nu_{19,2}(13)+\nu_{20,10}(6)$
ν_{47}	3200	3066	23,25	47,38	3071	$\nu_{11,2}(95)$
ν_{48}	3204	3071	24,02	107,86	3075	$\nu_{18,10}(95)$
ν_{49}	3208	3090	10,91	123,05	3079	$\nu_{12,3}(88)+\nu_{13,4}(7)$
ν_{50}	3229	3105	5,24	80,14	3099	$\nu_{15,7}(13)+\nu_{16,8}(74)+\nu_{17,9}(10)$
ν_{51}	3238	3107	14,35	132,12	3108	$\nu_{12,3}(7)+\nu_{13,4}(71)+\nu_{14,5}(21)$
ν_{52}	3248	3117	13,98	59,70	3118	$\nu_{15,7}(53)+\nu_{17,9}(44)$
ν_{53}	3254	3118	10,04	212,96	3123	$\nu_{15,7}(32)+\nu_{16,8}(24)+\nu_{17,9}(40)$
ν_{54}	3255	3125	5,03	131,64	3124	$\nu_{13,4}(21)+\nu_{14,5}(77)$

EK-28. 4,4'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF - 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deneysel[24]
Bağ uzunluğu (Å)						
C ₆ ,C ₇	1,400	1,398	1,395	1,389	1,389	
C ₆ ,C ₁₀	1,400	1,398	1,395	1,389	1,389	
C ₆ ,C ₁	1,483	1,479	1,477	1,489	1,489	
C ₇ ,C ₈	1,392	1,392	1,388	1,384	1,385	
C ₇ ,H ₁₅	1,084	1,085	1,083	1,074	1,077	
C ₈ ,H ₁₆	1,086	1,088	1,086	1,076	1,076	
C ₈ ,N ₂₀	1,336	1,335	1,331	1,319	1,321	
C ₉ ,C ₁₀	1,392	1,392	1,388	1,384	1,385	
C ₉ ,H ₁₇	1,086	1,088	1,086	1,076	1,076	
C ₉ ,N ₂₀	1,336	1,335	1,331	1,319	1,321	
C ₁₀ ,H ₁₈	1,083	1,085	1,083	1,074	1,074	
C ₁ ,C ₂	1,400	1,398	1,395	1,389	1,389	
C ₁ ,C ₅	1,400	1,398	1,395	1,389	1,389	
C ₂ ,C ₃	1,392	1,392	1,388	1,384	1,385	
C ₂ ,H ₁₁	1,084	1,085	1,083	1,074	1,074	1,087
C ₃ ,H ₁₂	1,086	1,088	1,086	1,076	1,076	
C ₃ ,N ₁₉	1,336	1,336	1,331	1,319	1,321	1,338
C ₄ ,C ₅	1,392	1,392	1,388	1,384	1,385	1,394
C ₄ ,H ₁₃	1,086	1,088	1,086	1,076	1,076	
C ₄ ,N ₁₉	1,336	1,335	1,331	1,319	1,321	
C ₅ ,H ₁₄	1,083	1,085	1,083	1,074	1,074	1,083
Bağ açısı (°)						
C ₇ ,C ₆ ,C ₁₀	116,9	117,0	117,1	117,3	117,3	118,4
C ₇ ,C ₆ ,C ₁	121,5	121,5	121,5	121,3	121,3	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₁	121,5	121,5	121,5	121,3	121,3	
C ₆ ,C ₇ ,C ₈	119,3	119,2	119,2	118,9	118,9	
C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	120,9	120,9	120,8	121,2	121,2	
C ₈ ,C ₇ ,H ₁₅	119,8	119,8	120,0	119,9	119,9	
C ₇ ,C ₈ ,H ₁₆	120,1	120,0	120,0	119,9	119,9	
C ₇ ,C ₈ ,N ₂₀	123,8	124,0	123,9	123,8	123,8	123,8
H ₁₆ ,C ₈ ,N ₂₀	116,1	116,1	116,1	116,3	116,3	
C ₁₀ ,C ₉ ,H ₁₇	120,1	120,0	120,0	119,9	119,9	120,2
C ₁₀ ,C ₉ ,N ₂₀	123,8	124,0	123,9	123,8	123,8	
H ₁₇ ,C ₉ ,N ₂₀	116,1	116,1	116,1	116,3	116,3	
C ₆ ,C ₁₀ ,C ₉	119,3	119,2	119,2	118,9	118,9	118,5
C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	120,9	120,9	120,8	121,2	121,2	121,4
C ₉ ,C ₁₀ ,H ₁₈	119,8	119,8	120,0	119,9	119,9	120,1

EK-28.(Devam) 4,4'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF - 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney[24]
Bağ açısı ($^{\circ}$)						
C ₆ ,C ₁ ,C ₂	121,5	121,5	121,5	121,3	121,3	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅	121,5	121,5	121,5	121,3	121,3	
C ₂ ,C ₁ ,C ₅	116,9	117,0	117,1	117,3	117,3	
C ₁ ,C ₂ ,C ₃	119,3	119,2	119,2	118,9	118,9	
C ₁ ,C ₂ ,H ₁₁	120,9	120,9	120,8	121,2	121,2	
C ₃ ,C ₂ ,H ₁₁	119,8	119,8	120,0	119,9	119,9	
C ₂ ,C ₃ ,H ₁₂	120,1	120,0	120,0	119,9	119,9	
C ₂ ,C ₃ ,N ₁₉	123,8	124,0	123,9	123,8	123,8	
H ₁₂ ,C ₃ ,N ₁₉	116,1	116,1	116,1	116,3	116,3	
C ₅ ,C ₄ ,H ₁₃	120,1	120,0	120,0	119,9	119,9	
C ₅ ,C ₄ ,N ₁₉	123,8	124,0	123,9	123,8	123,8	
H ₁₃ ,C ₄ ,N ₁₉	116,1	116,1	116,1	116,3	116,3	
C ₁ ,C ₅ ,C ₄	119,3	119,2	119,2	118,9	118,9	
C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	120,9	120,9	120,8	121,2	121,2	
C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	119,8	119,8	120,0	119,9	119,9	
C ₃ ,N ₁₉ ,C ₄	116,9	116,7	116,8	117,4	117,3	
C ₈ ,N ₂₀ ,C ₉	116,9	116,7	116,8	117,4	117,3	116,9
Dihedral açısı ($^{\circ}$)						
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₇ ,C ₈	0,1	0,1	0,1	-0,1	-0,1	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	178,6	178,4	178,5	-178,9	-178,8	
C ₁ ,C ₆ ,C ₇ ,C ₈	-179,9	-179,9	-179,9	179,9	179,9	
C ₁ ,C ₆ ,C ₇ ,H ₁₅	-1,4	-1,6	-1,5	1,2	1,2	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁₀ ,C ₉	0,1	0,1	0,1	-0,1	-0,1	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	178,6	178,4	178,5	-178,9	-178,8	
C ₁ ,C ₆ ,C ₁₀ ,C ₉	-179,9	-179,9	-179,9	179,9	179,9	
C ₁ ,C ₆ ,C ₁₀ ,H ₁₈	-1,4	-1,6	-1,5	1,2	1,2	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₂	-38,4	-39,2	-38,7	44,6	45,8	
C ₇ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₅	141,6	140,8	141,3	-135,4	-134,2	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₂	141,6	140,8	141,3	-135,4	-134,2	
C ₁₀ ,C ₆ ,C ₁ ,C ₅	-38,4	-39,2	-38,7	44,6	45,8	
C ₆ ,C ₇ ,C ₈ ,H ₁₆	179,5	179,5	179,5	-179,5	-179,5	
C ₆ ,C ₇ ,C ₈ ,N ₂₀	-0,2	-0,2	-0,2	0,3	0,3	
H ₁₅ ,C ₇ ,C ₈ ,H ₁₆	1,0	1,1	1,0	-0,8	-0,8	
H ₁₅ ,C ₇ ,C ₈ ,N ₂₀	-178,7	-178,6	-178,7	179,0	179,0	
C ₇ ,C ₈ ,N ₂₀ ,C ₉	0,1	0,1	0,1	-0,1	-0,1	
H ₁₆ ,C ₈ ,N ₂₀ ,C ₉	-179,6	-179,6	-179,6	179,6	179,6	

EK-28.(Devam) 4,4'-Bpy molekülünün hesaplanan yapı parametrelerinin deneysel sonuçlarla karşılaştırılması

	B3LYP - 6-311+g(d,p)	MPW1PW91 - dgdzvp	MPW1PW91- 6-311+g(d,p)	HF - 6-311+g(d,p)	HF - dgdzvp	Deney[24]
Dihedral açısı (°)						
H ₁₇ ,C ₉ ,C ₁₀ ,C ₆	179,5	179,5	179,5	-179,5	-179,5	
H ₁₇ ,C ₈ ,C ₉ ,H ₁₈	1,0	1,1	1,0	-0,8	-0,8	
N ₂₀ ,C ₉ ,C ₁₀ ,C ₆	-0,2	-0,2	-0,2	0,3	0,3	
N ₂₀ ,C ₉ ,C ₁₀ ,H ₁₈	-178,7	-178,6	-178,7	179,0	179,0	
C ₁₀ ,C ₉ ,N ₂₀ ,C ₈	0,1	0,1	0,1	-0,1	-0,1	
H ₁₇ ,C ₉ ,N ₂₀ ,C ₈	-179,6	-179,6	-179,6	179,6	179,6	
C ₆ ,C ₁ ,C ₂ ,C ₃	-179,9	-179,9	-179,9	179,9	179,9	
C ₆ ,C ₁ ,C ₂ ,H ₁₁	-1,4	-1,6	-1,5	1,2	1,2	
C ₁₀ ,C ₁ ,C ₂ ,C ₃	0,1	0,1	0,1	-0,1	-0,1	
C ₁₀ ,C ₁ ,C ₂ ,H ₁₁	178,6	178,4	178,5	-178,9	-178,8	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅ ,C ₄	-179,9	-179,9	-179,9	179,9	179,9	
C ₆ ,C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	-1,4	-1,6	-1,5	1,2	1,2	
C ₂ ,C ₁ ,C ₅ ,C ₄	0,1	0,1	0,1	-0,1	-0,1	
C ₂ ,C ₁ ,C ₅ ,H ₁₄	178,6	178,4	178,5	-178,9	-178,8	
C ₁ ,C ₂ ,C ₃ ,H ₁₂	179,5	179,5	179,5	-179,5	-179,5	
C ₁ ,C ₂ ,C ₃ ,N ₁₉	-0,2	-0,2	-0,2	0,3	0,3	
H ₁₁ ,C ₂ ,C ₃ ,H ₁₂	1,0	1,1	1,0	-0,8	-0,8	
H ₁₁ ,C ₂ ,C ₃ ,N ₁₉	-178,7	-178,6	-178,7	179,0	179,0	
C ₂ ,C ₃ ,N ₁₉ ,C ₄	0,1	0,1	0,1	-0,1	-0,1	
H ₁₂ ,C ₃ ,N ₁₉ ,C ₄	-179,6	-179,6	-179,6	179,6	179,6	
H ₁₃ ,C ₄ ,C ₅ ,C ₁	179,5	179,5	179,5	-179,5	-179,5	
H ₁₃ ,C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	1,0	1,1	1,0	-0,8	-0,8	
N ₁₉ ,C ₄ ,C ₅ ,C ₁	-0,2	-0,2	-0,2	0,3	0,3	
N ₁₉ ,C ₄ ,C ₅ ,H ₁₄	-178,7	-178,6	-178,7	179,0	179,0	
C ₅ ,C ₄ ,N ₁₉ ,C ₃	0,1	0,1	0,1	-0,1	-0,1	
H ₁₃ ,C ₄ ,N ₁₉ ,C ₃	-179,6	-179,6	-179,6	179,6	179,6	

EK-29. 4,4'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp			Deney[30]
	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	
ν_1	62	0,00	7,31	64	65	0,00	7,85	64	0,00	6,98	62	0,00	6,18	60	0,00	7,62	
ν_2	94	2,41	1,10	93	95	2,04	1,23	94	2,29	1,09	104	2,05	1,19	103	1,86	1,49	
ν_3	127	2,17	1,86	124	124	2,13	1,90	125	2,17	1,79	131	2,16	1,90	130	2,06	2,24	
ν_4	263	0,01	0,85	264	262	0,00	0,79	264	0,01	0,88	293	0,03	0,76	294	0,02	0,80	262
ν_5	307	0,00	4,19	308	305	0,00	4,16	308	0,00	4,14	323	0,00	5,20	324	0,00	4,90	315
ν_6	375	4,82	0,66	373	367	4,78	0,70	375	4,85	0,59	395	4,41	0,35	394	5,09	0,35	324
ν_7	386	0,22	0,04	386	377	0,18	0,00	386	0,22	0,04	435	0,23	0,02	435	0,25	0,01	377
ν_8	392	0,00	3,51	392	385	0,00	3,16	392	0,00	3,12	440	0,00	1,33	439	0,00	1,30	387
ν_9	517	24,52	0,00	518	512	25,26	0,01	519	25,02	0,01	572	31,27	0,29	573	33,58	0,35	499
ν_{10}	584	5,57	2,89	583	576	5,91	3,31	587	5,83	22,89	636	9,31	2,96	632	10,24	3,43	573
ν_{11}	620	29,91	0,54	616	609	29,85	0,78	617	29,17	0,54	662	32,56	0,61	665	34,22	0,99	607
ν_{12}	677	0,21	9,64	675	668	0,29	12,55	677	0,29	9,52	725	0,24	8,94	727	0,30	11,26	660
ν_{13}	689	1,45	1,22	686	679	1,76	1,59	689	1,54	1,20	737	1,31	1,75	738	1,67	2,27	673
ν_{14}	765	2,32	0,09	761	750	4,17	0,32	761	2,61	0,10	816	4,41	0,00	817	6,76	0,11	734
ν_{15}	767	0,55	0,00	769	757	0,35	0,25	770	0,58	0,10	817	0,00	13,36	820	0,00	9,19	756
ν_{16}	775	0,00	13,52	772	762	0,00	9,21	772	0,00	12,82	833	0,41	0,24	834	0,10	0,01	
ν_{17}	818	69,41	0,16	816	801	75,75	0,33	823	71,24	0,16	904	81,70	0,02	900	78,22	0,18	807
ν_{18}	865	5,74	1,67	862	848	7,71	0,31	871	5,94	1,58	954	10,74	1,91	948	11,77	0,31	854
ν_{19}	885	0,00	10,17	887	868	0,71	0,07	891	0,00	9,34	972	0,26	0,62	968	0,24	0,49	882

EK-29.(Devam) 4,4'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp			Deney[30]
	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	IR,R
ν_{20}	886	0,66	0,12	888	869	0,00	10,21	892	0,76	0,12	973	0,00	5,36	970	0,00	4,60	
ν_{21}	983	0,17	0,02	981	961	0,01	0,04	990	0,15	0,02	1084	7,67	1,95	1083	0,61	0,03	978
ν_{22}	985	0,00	0,01	984	964	0,01	0,02	992	0,00	0,01	1089	0,00	73,30	1085	0,08	1,15	983
ν_{23}	1004	0,00	12,53	1005	986	0,00	6,22	1013	0,00	9,71	1089	0,91	0,01	1088	11,86	4,37	989
ν_{24}	1005	1,38	0,07	1006	987	0,60	0,94	1014	0,99	0,04	1091	0,01	0,25	1091	0,00	69,60	1000
ν_{25}	1008	6,66	0,93	1017	1002	10,26	1,63	1018	7,42	0,60	1125	0,09	0,00	1118	0,22	0,86	1038
ν_{26}	1058	0,00	80,61	1023	1006	0,00	73,90	1024	0,00	72,51	1126	0,00	0,01	1119	0,00	0,90	1041
ν_{27}	1092	2,78	1,80	1069	1050	0,65	3,45	1066	1,18	2,14	1131	3,44	1,41	1136	3,77	2,59	1075
ν_{28}	1096	10,89	1,19	1106	1085	14,42	0,38	1101	13,24	0,21	1153	3,96	18,09	1160	4,42	19,93	1075
ν_{29}	1112	0,00	4,30	1109	1090	0,00	6,86	1105	0,00	6,86	1158	18,36	3,09	1166	18,34	3,99	1082
ν_{30}	1113	0,25	0,93	1121	1104	0,10	0,72	1117	0,14	0,72	1176	7,23	0,09	1183	0,00	9,73	1088
ν_{31}	1114	0,41	0,08	1125	1105	0,01	0,08	1121	0,09	0,07	1176	0,00	10,82	1184	7,83	0,28	1099
ν_{32}	1245	9,61	1,86	1257	1240	8,62	1,87	1253	8,71	1,88	1213	2,33	0,93	1224	4,25	2,14	1101
ν_{33}	1247	0,00	28,78	1260	1241	0,00	23,34	1254	0,00	28,46	1239	0,64	11,96	1251	0,93	18,12	1218
ν_{34}	1258	0,02	1,06	1301	1275	0,03	0,75	1289	0,01	0,59	1338	15,71	1,91	1344	15,20	2,04	1219
ν_{35}	1274	0,15	19,04	1329	1293	0,21	24,35	1312	0,23	18,97	1340	0,00	12,54	1346	0,00	12,60	1297
ν_{36}	1310	0,00	216,24	1337	1312	0,00	176,08	1329	0,00	190,46	1404	0,00	108,20	1414	0,00	94,61	

EK-29.(Devam) 4,4'-Bpy molekülünün hesaplanan titreşim frekanslarının (cm^{-1}) deneysel değerlerle karşılaştırılması

	B3LYP-6-311+g(d,p)			MPW1PW91-dgdzvp				MPW1PW91- 6-311+g(d,p)			HF - 6-311+g(d,p)			HF - dgdzvp			Deney[30]
	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	ν_{har}	I_{IR}	I_{R}	IR,R
ν_{37}	1345	1,85	1,97	1360	1327	1,89	2,70	1353	2,28	2,29	1447	1,41	1,54	1451	1,26	1,59	1344
ν_{38}	1362	0,13	3,66	1365	1338	0,08	4,02	1363	0,14	3,39	1472	0,01	2,45	1455	0,00	3,13	1406
ν_{39}	1434	24,53	0,65	1454	1429	27,65	0,85	1445	27,82	0,79	1545	37,72	0,61	1553	36,15	0,53	1421
ν_{40}	1446	5,09	4,67	1467	1438	4,87	4,62	1458	5,50	4,70	1561	9,36	4,30	1569	8,49	3,63	1487
ν_{41}	1513	9,34	0,59	1532	1503	8,92	0,77	1525	11,94	0,46	1647	25,44	0,04	1653	16,28	0,34	1511
ν_{42}	1534	0,00	36,14	1563	1526	0,00	48,19	1554	0,00	44,08	1677	0,00	17,13	1684	0,00	16,67	1531
ν_{43}	1574	43,72	0,23	1621	1585	43,53	0,18	1608	44,74	0,20	1729	71,59	0,98	1742	72,75	0,98	1589
ν_{44}	1605	3,77	1,34	1651	1611	4,37	1,31	1638	4,07	1,30	1760	10,33	5,18	1772	11,56	4,64	1596
ν_{45}	1630	135,42	3,03	1673	1630	143,43	2,81	1660	139,02	2,86	1784	213,83	4,72	1797	231,26	5,16	1607
ν_{46}	1636	0,00	212,94	1683	1640	0,00	289,51	1668	0,00	292,01	1805	0,00	134,83	1819	0,00	121,03	
ν_{47}	3149	5,53	230,51	3205	3065	5,58	214,98	3178	5,39	220,20	3323	6,98	192,05	3363	7,64	196,73	3008
ν_{48}	3150	47,55	30,03	3206	3069	44,34	29,35	3178	44,86	29,22	3324	44,49	34,59	3364	47,23	37,79	3024
ν_{49}	3152	21,71	19,45	3207	3081	24,78	13,61	3180	20,37	18,35	3325	29,09	13,17	3365	38,31	8,42	3024
ν_{50}	3153	0,00	228,80	3208	3088	0,00	204,76	3180	0,00	217,92	3326	0,00	142,60	3366	0,00	132,40	3029
ν_{51}	3184	4,22	4,26	3237	3103	5,10	2,14	3213	3,62	3,79	3353	6,04	0,61	3388	10,31	0,05	3054
ν_{52}	3185	0,16	61,69	3238	3111	0,00	59,23	3213	0,07	59,04	3354	0,12	70,62	3390	0,56	75,31	3068
ν_{53}	3188	22,28	1,11	3240	3117	25,36	0,58	3216	19,32	0,96	3357	24,99	0,54	3391	38,17	0,30	3072
ν_{54}	3190	0,00	301,94	3241	3117	0,00	300,75	3217	0,00	298,74	3359	0,00	275,81	3393	0,00	309,74	3072

EK-30. 4,4'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp					Deney[30]		TED > %5
	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	SQM	IR,R		
ν_1	64	65	0,00	7,85	63		$\tau_{7,6,1,2}(24)+\tau_{7,6,1,5}(24)+\tau_{10,6,1,2}(24)+\tau_{10,6,1,5}(24)$	
ν_2	93	95	2,04	1,23	91		$\tau_{3,2,1,6}(12)+\tau_{4,5,1,6}(12)+\tau_{7,6,1,5}(6)+\tau_{8,7,6,1}(12)+\tau_{10,6,1,2}(6)+\tau_{9,10,6,1}(12)+\tau_{11,2,1,6}(5)+\tau_{14,5,1,6}(5)+\tau_{15,7,6,1}(5)+\tau_{18,10,6,1}(5)$	
ν_3	124	124	2,13	1,90	123		$\delta_{2,1,6}(16)+\delta_{5,1,6}(16)+\delta_{7,6,1}(16)+\delta_{10,6,1}(16)$	
ν_4	264	262	0,00	0,79	260	262	$\delta_{2,1,6}(6)+\delta_{5,1,6}(6)+\delta_{7,6,1}(6)+\delta_{10,6,1}(6)+\tau_{3,2,1,5}(6)+\tau_{4,5,1,2}(6)+\tau_{3,2,1,6}(6)+\tau_{4,5,1,6}(6)+\tau_{8,7,6,1}(6)+\tau_{8,7,6,10}(6)+\tau_{9,10,6,1}(6)+\tau_{9,10,6,7}(6)$	
ν_5	308	305	0,00	4,16	303	315	$\nu_{6,1}(29)+\delta_{2,1,5}(10)+\delta_{7,6,10}(10)$	
ν_6	273	367	4,78	0,70	368	324	$\delta_{2,1,6}(11)+\delta_{5,1,6}(11)+\delta_{7,6,1}(11)+\delta_{10,6,1}(11)$	
ν_7	386	377	0,18	0,00	379	377	$\tau_{20,8,7,6}(10)+\tau_{6,10,9,19}(10)+\tau_{19,3,2,1}(10)+\tau_{1,5,4,19}(10)$	
ν_8	392	385	0,00	3,16	384	387	$\tau_{19,8,7,6}(10)+\tau_{6,10,9,20}(10)+\tau_{20,8,7,6}(10)+\tau_{1,5,4,19}(10)$	
ν_9	518	512	25,26	0,01	510	499	$\delta_{2,1,6}(7)+\delta_{5,1,6}(7)+\delta_{7,6,1}(7)+\delta_{10,6,1}(7)$	
ν_{10}	583	576	5,91	3,31	572	573	$\tau_{7,6,1,2}(7)+\tau_{10,6,1,5}(7)+\tau_{9,20,8,7}(6)+\tau_{8,20,9,10}(6)+\tau_{9,20,8,16}(5)+\tau_{8,20,9,17}(5)+\tau_{4,19,3,2}(6)+\tau_{3,19,4,5}(6)+\tau_{4,19,3,12}(5)+\tau_{3,19,4,13}(5)$	
ν_{11}	616	609	29,85	0,78	612	607	$\delta_{2,1,5}(10)+\delta_{7,6,10}(10)+\delta_{8,20,9}(13)+\delta_{3,19,4}(13)$	
ν_{12}	675	668	0,29	12,55	668	660	$\delta_{3,2,1}(7)+\delta_{1,5,4}(7)+\delta_{8,7,6}(7)+\delta_{6,10,9}(7)+\delta_{20,8,7}(8)+\delta_{10,9,20}(8)+\delta_{19,3,2}(8)+\delta_{5,4,19}(8)$	
ν_{13}	686	679	1,76	1,59	679	673	$\delta_{3,2,1}(7)+\delta_{1,5,4}(7)+\delta_{8,7,6}(7)+\delta_{6,10,9}(7)+\delta_{20,8,7}(8)+\delta_{10,9,19}(8)+\delta_{19,3,2}(8)+\delta_{5,4,20}(8)$	
ν_{14}	761	750	4,17	0,32	747	734	$\tau_{20,8,7,6}(6)+\tau_{9,20,8,7}(6)+\tau_{6,10,9,20}(6)+\tau_{8,20,9,10}(6)+\tau_{19,3,2,1}(6)+\tau_{4,19,3,2}(6)+\tau_{1,5,4,19}(6)+\tau_{3,19,4,5}(6)$	
ν_{15}	769	757	0,35	0,25	755	756	$\tau_{9,20,8,7}(5)+\tau_{8,20,9,10}(5)+\tau_{20,8,7,15}(5)+\tau_{18,10,9,20}(5)+\tau_{4,19,3,2}(5)+\tau_{3,19,4,5}(5)+\tau_{19,3,2,11}(5)+\tau_{14,5,4,19}(5)$	
ν_{16}	772	762	0,00	9,21	761		$\nu_{2,1}(7)+\nu_{5,1}(7)+\nu_{6,1}(17)+\nu_{7,6}(7)+\nu_{10,6}(6)+\delta_{8,20,9}(15)+\delta_{3,19,4}(15)$	
ν_{17}	816	801	75,75	0,33	801	807	$\tau_{11,2,1,6}(5)+\tau_{12,3,2,1}(5)+\tau_{1,5,4,13}(5)+\tau_{14,5,1,6}(5)+\tau_{15,7,6,1}(5)+\tau_{16,8,7,6}(5)+\tau_{6,10,9,17}(5)+\tau_{18,10,6,1}(5)+\tau_{20,8,7,15}(7)+\tau_{18,10,9,20}(7)+\tau_{19,3,2,11}(7)+\tau_{14,5,4,19}(7)$	
ν_{18}	862	848	7,71	0,31	847	854	$\tau_{11,2,1,6}(7)+\tau_{12,3,2,1}(7)+\tau_{1,5,4,13}(7)+\tau_{14,5,1,6}(7)+\tau_{15,7,6,1}(7)+\tau_{16,8,7,6}(7)+\tau_{6,10,9,17}(7)+\tau_{6,10,9,17}(7)+\tau_{18,10,6,1}(7)$	
ν_{19}	887	868	0,71	0,07	870	882	$\tau_{11,2,1,5}(6)+\tau_{11,2,1,6}(6)+\tau_{14,5,1,2}(6)+\tau_{14,5,1,6}(6)+\tau_{15,7,6,1}(6)+\tau_{15,7,6,10}(6)+\tau_{18,10,6,1}(6)+\tau_{18,10,6,7}(6)+\tau_{20,8,7,15}(6)+\tau_{18,10,9,20}(6)+\tau_{19,3,2,11}(6)+\tau_{14,5,4,19}(6)$	
ν_{20}	888	869	0,00	10,21	872		$\tau_{11,2,1,5}(6)+\tau_{11,2,1,6}(6)+\tau_{14,5,1,2}(6)+\tau_{14,5,1,6}(6)+\tau_{15,7,6,1}(6)+\tau_{15,7,6,10}(6)+\tau_{18,10,6,1}(6)+\tau_{18,10,6,7}(6)+\tau_{20,8,7,15}(6)+\tau_{18,10,9,20}(6)+\tau_{19,3,2,11}(6)+\tau_{14,5,4,19}(6)$	
ν_{21}	981	961	0,01	0,04	963	978	$\tau_{12,3,2,11}(13)+\tau_{14,5,4,13}(13)+\tau_{16,8,7,15}(13)+\tau_{18,10,9,17}(13)$	

EK-30.(Devam) 4,4'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp				Deney[30]		TED > %5
	ν _{har}	ν _{anhar}	I _{IR}	I _R	SQM	IR,R	
ν ₂₂	984	964	0,01	0,02	966	983	τ _{12,3,2,11} (13)+τ _{14,5,4,13} (13)+τ _{16,8,7,15} (13)+τ _{18,10,9,17} (13)
ν ₂₃	1005	986	0,00	6,22	987	989	τ _{12,3,2,11} (11)+τ _{14,5,4,13} (11)+τ _{16,8,7,15} (11)+τ _{18,10,9,17} (11)+τ _{9,20,8,16} (6)+τ _{8,20,9,17} (6)+τ _{4,19,3,12} (6)+τ _{3,19,4,13} (6)
ν ₂₄	1006	987	0,60	0,94	987	1000	τ _{12,3,2,11} (12)+τ _{14,5,4,13} (12)+τ _{16,8,7,15} (12)+τ _{18,10,9,17} (12)+τ _{9,20,8,16} (6)+τ _{8,20,9,17} (6)+τ _{4,19,3,12} (6)+τ _{3,19,4,13} (6)
ν ₂₅	1017	1002	10,26	1,63	1000	1038	ν _{19,3} (6)+ν _{19,4} (6)+ν _{20,8} (6)+ν _{20,9} (6)
ν ₂₆	1023	1006	0,00	73,90	1005	1041	ν _{19,3} (6)+ν _{19,4} (6)+ν _{20,8} (6)+ν _{20,9} (6)
ν ₂₇	1069	1050	0,65	3,45	1050	1075	ν _{2,1} (6)+ν _{5,1} (6)+ν _{7,6} (6)+ν _{10,6} (6)+δ _{8,20,9} (6)+δ _{3,19,4} (6)
ν ₂₈	1106	1085	14,42	0,38	1084	1075	ν _{2,1} (6)+ν _{5,1} (6)+ν _{7,6} (5)+ν _{10,6} (5)+δ _{11,2,1} (8)+δ _{14,5,1} (8)+δ _{15,7,6} (8)+δ _{18,10,6} (8)
ν ₂₉	1109	1090	0,00	6,86	1088	1082	ν _{19,3} (6)+ν _{19,4} (6)+ν _{20,8} (6)+ν _{20,9} (6)+δ _{11,2,1} (7)+δ _{14,5,1} (7)+δ _{15,7,6} (7)+δ _{18,10,6} (7)
ν ₃₀	1121	1104	0,10	0,72	1099	1088	ν _{3,2} (9)+ν _{5,4} (9)+ν _{8,7} (9)+ν _{10,9} (9)+δ _{3,2,11} (7)+δ _{14,5,4} (7)+δ _{8,7,15} (7)+δ _{18,10,9} (7)
ν ₃₁	1125	1105	0,01	0,08	1103	1099	ν _{3,2} (9)+ν _{5,4} (9)+ν _{8,7} (9)+ν _{10,9} (9)+δ _{3,2,11} (6)+δ _{14,5,4} (6)+δ _{8,7,15} (6)+δ _{18,10,9} (6)
ν ₃₂	1257	1240	8,62	1,87	1233	1101	ν _{19,3} (6)+ν _{19,4} (6)+ν _{20,8} (6)+ν _{20,9} (6)+δ _{16,8,20} (8)+δ _{17,9,20} (8)+δ _{12,3,19} (8)+δ _{13,4,19} (8)
ν ₃₃	1260	1241	0,00	23,34	1236	1218	ν _{19,3} (5)+ν _{19,4} (5)+ν _{20,8} (5)+ν _{20,9} (5)+δ _{16,8,20} (7)+δ _{17,9,20} (7)+δ _{12,3,19} (7)+δ _{13,4,19} (7)
ν ₃₄	1301	1275	0,03	0,75	1269	1219	ν _{2,1} (12)+ν _{5,1} (12)+ν _{7,6} (12)+ν _{10,6} (12)+ν _{19,3} (8)+ν _{19,4} (8)+ν _{20,8} (8)+ν _{20,9} (8)
ν ₃₅	1329	1293	0,21	24,35	1295	1297	ν _{2,1} (6)+ν _{5,1} (6)+ν _{7,6} (6)+ν _{10,6} (6)+ν _{19,3} (13)+ν _{19,4} (13)+ν _{20,8} (13)+ν _{20,9} (13)
ν ₃₆	1337	1312	0,00	176,08	1308		ν _{6,1} (37)
ν ₃₇	1360	1327	1,89	2,70	1333	1344	δ _{11,2,1} (6)+δ _{14,5,1} (6)+δ _{15,7,6} (6)+δ _{18,10,6} (6)
ν ₃₈	1365	1338	0,08	4,02	1343	1406	δ _{11,2,1} (6)+δ _{12,3,2} (7)+δ _{5,4,13} (7)+δ _{14,5,1} (6)+δ _{15,7,6} (6)+δ _{16,8,7} (7)+δ _{10,9,17} (7)+δ _{18,10,6} (6)+δ _{16,8,20} (5)+δ _{17,9,20} (5)+δ _{12,3,19} (5)+δ _{13,4,19} (5)
ν ₃₉	1454	1429	27,65	0,85	1427	1421	ν _{3,2} (7)+ν _{5,4} (7)+ν _{8,7} (7)+ν _{10,9} (7)+δ _{16,8,20} (10)+δ _{17,9,20} (10)+δ _{12,3,19} (10)+δ _{13,4,19} (10)
ν ₄₀	1467	1438	4,87	4,62	1439	1487	ν _{3,2} (7)+ν _{5,4} (7)+ν _{8,7} (7)+ν _{10,9} (7)+δ _{16,8,20} (7)+δ _{17,9,20} (7)+δ _{12,3,19} (7)+δ _{13,4,19} (7)
ν ₄₁	1532	1503	8,92	0,77	1503	1511	δ _{12,3,2} (6)+δ _{5,4,13} (6)+δ _{16,8,7} (6)+δ _{10,9,17} (6)
ν ₄₂	1563	1526	0,00	48,19	1531	1531	ν _{6,1} (10)+δ _{12,3,2} (5)+δ _{5,4,13} (5)+δ _{16,8,7} (5)+δ _{10,9,17} (5)

EK-30.(Devam) 4,4'-Bpy molekülünün titreşim frekansları (cm⁻¹)

	MPW1PW91-dgdzvp				Deney[30]		TED > %5
	ν_{har}	ν_{anhar}	I_{IR}	I_{R}	SQM	IR,R	
ν_{43}	1621	1585	43,53	0,18	1583	1589	$\nu_{2,1}(10)+\nu_{5,1}(10)+\nu_{7,6}(10)+\nu_{10,6}(10)+\nu_{19,8}(10)+\nu_{19,9}(10)+\nu_{20,3}(10)+\nu_{20,4}(10)$
ν_{44}	1651	1611	4,37	1,31	1613	1596	$\nu_{2,1}(11)+\nu_{5,1}(11)+\nu_{7,6}(11)+\nu_{10,6}(11)+\nu_{19,3}(8)+\nu_{19,4}(8)+\nu_{20,8}(8)+\nu_{20,9}(8)$
ν_{45}	1673	1630	143,43	2,81	1635	1607	$\nu_{3,2}(11)+\nu_{5,4}(11)+\nu_{8,7}(11)+\nu_{10,9}(11)$
ν_{46}	1683	1640	0,00	289,51	1645		$\nu_{3,2}(9)+\nu_{5,4}(9)+\nu_{6,1}(7)+\nu_{8,7}(9)+\nu_{10,9}(9)$
ν_{47}	3205	3068	5,58	214,98	3078	3008	$\nu_{12,3}(23)+\nu_{13,4}(23)+\nu_{16,8}(23)+\nu_{17,9}(23)$
ν_{48}	3206	3069	44,34	29,35	3078	3024	$\nu_{12,3}(23)+\nu_{13,4}(23)+\nu_{16,8}(23)+\nu_{17,9}(23)$
ν_{49}	3207	3081	24,78	13,61	3079	3024	$\nu_{12,3}(22)+\nu_{13,4}(22)+\nu_{16,8}(22)+\nu_{17,9}(22)$
ν_{50}	3208	3088	0,00	204,76	3080	3029	$\nu_{12,3}(23)+\nu_{13,4}(23)+\nu_{16,8}(23)+\nu_{17,9}(23)$
ν_{51}	3237	3103	5,10	2,14	3108	3054	$\nu_{11,2}(23)+\nu_{14,5}(23)+\nu_{15,7}(23)+\nu_{18,10}(23)$
ν_{52}	3238	3111	0,00	59,23	3109	3068	$\nu_{11,2}(22)+\nu_{14,5}(22)+\nu_{15,7}(22)+\nu_{18,10}(22)$
ν_{53}	3240	3117	25,36	0,58	3111	3072	$\nu_{11,2}(24)+\nu_{14,5}(24)+\nu_{15,7}(24)+\nu_{18,10}(24)$
ν_{54}	3241	3117	0,00	300,75	3112	3072	$\nu_{11,2}(23)+\nu_{14,5}(23)+\nu_{15,7}(23)+\nu_{18,10}(23)$

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Soyadı Adı : ERTUĞRUL Raziye
 Uyruğu : T.C.
 Doğum Yeri : Karaman
 Doğum Tarihi : 20.09.1981
 Medeni Durumu : Bekar

Eğitim

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet tarihi
Yüksek Lisans	Gazi Üniversitesi / Fizik Bölümü	2011
Yüksek Lisans	Gazi Üniversitesi / Orta Öğretim Fizik Öğretmenliği	2006
Lisans	Gazi Üniversitesi / Fizik Bölümü	2004
Lise	Karaman Yabancı Dil Ağırlıklı Lise	1999

Yabancı Dil

- İngilizce

Bilgisayar

- Gaussian 03W
- SciFinder
- Fortran