

**HETERO HALKA İÇEREN AKSEPTÖR TIPLİ BİLEŞİKLERİN TASARIMI
VE BİLGİSAYAR DESTEKLİ KİMYASAL HESAPLAMALARI**

Abdul Manan ZAHİR

Yüksek Lisans Tezi

Kimya Anabilim Dalı

Organik Kimya Bilim Dalı

Danışman: Dr. Öğr. Üyesi Sultan Funda GÖRKEM

Eskişehir

Eskişehir Teknik Üniversitesi

Lisansüstü Eğitim Enstitüsü

Aralık 2021

ÖZET

HETERO HALKA İÇEREN AKSEPTÖR TIPLİ BİLEŞİKLERİN TASARIMI VE BİLGİSAYAR DESTEKLİ KİMYASAL HESAPLAMALARI

Abdul Manan ZAHİR

Kimya Anabilim Dalı

Organik Kimya Bilim Dalı

Eskişehir Teknik Üniversitesi, Lisansüstü Eğitim Enstitüsü, Aralık 2021

Danışman: Dr. Öğr. Üyesi Sultan Funda GÖRKEM

Günümüzde fosil kaynaklı enerjinin doğayı ve çevreyi kirletmesi, atmosferdeki ozon tabakasının tahrip etmesi ve bu kaynakların belirli bir zaman içerisinde yani gelecek yüzyılda bitme ihtimali nedeniyle bilim adamları yenilenebilir enerji kaynaklarından faydalanmayı düşünmüşlerdir. Gelecekte enerji eksikliğini önlemek için Organik güneş pillerinin büyük güç verimliliği ve düşük maliyetle tasarlama çalışmaları organik kimyacıların araştırma konusu olmuştur.

Hetero halka içeren akseptör tipli moleküller kimya sanayisinde geniş ölçüde farklı alanlarda kullanılmaktadır. Hetero halka içeren akseptör tipli moleküllerin önemli bir türü ise Fulleren içermeyen akseptör (NFA) tipli moleküllerdir. Bu moleküller fotovoltaiik cihazların üretiminde organik katmanlar olarak kullanılmaktadır. Fulleren içermeyen organik güneş pillerinin güç dönüştürme verimliliği (PCE) fulleren içeren güneş pillerine göre daha yüksektir. Bu özellik, fulleren içermeyen organik güneş pilleri üzerine yapılan çalışmaların hızlı bir şekilde artmasına neden olmuştur.

Bu tez çalışmasında daha önce çalışma grubumuz tarafından sentezi ve hesaplama çalışmaları gerçekleştirilen 1,2,4-triazol çekirdek yapısı içeren moleküllere konjuge trifenilamin grupları ile katkılama yapılarak özgün, muz tipli, fulleren içermeyen akseptör moleküller Donör-Akseptör-Donör yapısı ile tasarlanmış ve bilgisayar destekli kimyasal hesaplamaları yapılmıştır. Tasarlanan moleküllerin bilgisayar destekli kimyasal hesaplamasında DFT, B3LYP korelasyonu ve 6-31G(d,p) polarize temel seti bir arada kullanılarak gerçeğe en yakın verilerin elde edilmesi amaçlanmıştır.

Anahtar Sözcükler: NFA, 1,2,4- Triazol, DFT

ABSTRACT

DESIGN AND COMPUTER AIDED CHEMICAL CALCULATIONS OF HETERO RING CONTAINING ACCEPTOR-TYPED COMPOUNDS

Abdul Manan ZAHİR

Department of Chemistry

Programme in Organik Chemistry

Eskişehir Technical University, Institute of Graduate Programs, December 2021

Supervisor: Asst. Prof. Dr. Sultan Funda GÖRKEM

Today, scientists have considered making use of renewable energy sources because of the pollution of nature and the environment by fossil-based energy, the destruction of the ozone layer in the atmosphere, and the possibility that these sources will run out within a certain time, that is, in the next century. In order to prevent energy shortage in the future, the studies of designing organic solar cells with great power efficiency and low cost have been the research subject of organic solar cells.

Acceptor type molecules containing heterocycles are widely used in different fields in the chemical industry. An important type of acceptor-type molecules containing heterocycles is the acceptor-type molecules that do not contain Fullerenes (Non Fullerene Acceptors-NFA). These molecules are used as organic layers in the production of photovoltaic devices. The power conversion efficiency (PCE) of fullerene-free organic solar cells is higher than that of fullerene-containing solar cells. This feature has led to a rapid increase in studies on fullerene-free organic solar cells.

In this thesis study, unique, banana-type, fullerene-free acceptor molecules were designed with Donor-Acceptor-Donor structure by doping with conjugated triphenylamine groups to molecules containing 1,2,4-triazole core structure, whose synthesis and calculation studies were carried out previously by our study group and computer aided. Chemical calculations were made. In the computer aided chemical calculation of the designed molecules, it is aimed to obtain the most realistic data by using Density Function Theory (DFT), B3LYP correlation and 6-31G(d,p) polarized basis set together.

Keywords: NFA , 1,2,4- Triazole, DFT

TEŞEKKÜR

Yüksek lisansım boyunca her zaman bana maddi ve manevi yardım gösteren, sevgi ve saygısını benden esirgemeyen sayın danışman hocam Dr. Öğr. Üy. Sultan Funda GÖRKEM'e, tez çalışmalarım süresince hem deneysel hem, teorik bilgilerini benimle paylaşan değerli hocam Sayın Prof. Dr. İlhami ÇELİK'e, bilgisayar destekli kimyasal hesaplamalar için yardımlarını esirgemeyen arkadaşım Uğur ÖNER'e, yüksek lisans boyunca değerli fikirlerinden ve yardımlarından faydalandığım ve bu tezi hazırlamamda bana büyük destek veren, beni bilgi ve tecrübesiyle destekleyen çalışmamda gösterdiği ilgi ve sabrından dolayı İbrahim DEMİRCİ'ye teşekkürlerimi sunarım.

Maddi-manevi hiçbir desteklerini esirgemeyen, varlıklarını her zaman yanımda hissettiğim canım aileme yanımda oldukları için sevgi ve teşekkürlerimi sunarım.

.....

Abdul Manan ZAHİR

ETİK İLKE VE KURALLARA UYGUNLUK BEYANNAMESİ

Bu tezin bana ait, özgün bir çalışma olduğunu; çalışmamın hazırlık, veri toplama, analiz ve bilgilerin sunumu olmak üzere tüm aşamalarında bilimsel etik ve kurallara uygun davrandığımı; bu çalışma kapsamında elde edilen tüm veri ve bilgiler için kaynak gösterdiğimi ve bu kaynaklara kaynakçada yer verdiğimi; bu çalışmanın Eskişehir Teknik Üniversitesi tarafından kullanılan “bilimsel intihal tespit programı”yla tarandığını ve hiçbir şekilde “intihal içermediğini” beyan ederim. Herhangi bir zamanda, çalışmamla ilgili yaptığım bu beyana aykırı bir durumun saptanması durumunda, ortaya çıkacak tüm ahlaki ve hukuki sonuçları kabul ettiğimi bildiririm.

Abdul Manan ZAHİR

İÇİNDEKİLER

Sayfa

BAŞLIK SAYFASI	i
JÜRİ VE ENSTİTÜ ONAYI.....	ii
ÖZET	iii
ABSTRACT.....	iv
TEŞEKKÜR	v
ETİK İLKE VE KURALLARA UYGUNLUK BEYANNAMESİ.....	vi
İÇİNDEKİLER.....	vii
TABLolar DİZİNİ	ix
ŞEKİLLER DİZİNİ	x
GÖRSELLER DİZİNİ	xiii
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ.....	xiv
1. GİRİŞ	1
2. TEORİK BİLGİ	2
2.1. Fotovoltaik Etki Ve Güneş Pilleri.....	2
2.2. Oled Teknolojisi	5
2.3. Organik Güneş Pilleri	8
2.3.1. Merdiven tipli alkil zinciri içeren küçük akseptör moleküller.....	10
2.3.2. TT(Tiyeno Tiofen) içeren küçük akseptör moleküller.....	12
2.3.3. Fulleren içermeyen polimer güneş pilleri.....	13
2.4. Triazoller.....	22
2.4.1. H-1,2,4-triazol bileşiklerinin sentezi	27
2.4.1.1. Hidrazin türevlerini kullanan yöntemler	27
2.4.1.2. Nitril imin ve triazin ile 1,2,4-triazollerin sentezi.....	29
2.4.1.3. Diğer heterosiklik sistemlerin transformasyonu ile triazollerin sentezi.....	29
2.4.1.4. 1,2,4-Triazollerin mikrodalga ışıması altında sentezi	31
2.5. Bazı Önemli Hesaplama Yöntemleri	32

2.5.1. Moleküler özelliklerin hesaplanması	32
2.5.2. Yoğunluk fonksiyonel teorisi	34
2.5.2.1. Zamana bağlı olan yoğunluk fonksiyonel teorisi	35
2.5.3. Temel setler	36
2.5.3.1. Minimal temel setler	36
2.5.3.2. Ayrılmış-değerlik temel setler	37
2.5.3.3. Polarizasyon temel setler	38
2.5.3.4. Yayılmış temel setler	38
2.5.4. Yarı iletkenler için yoğunluk fonksiyonel teorisi	39
3. HESAPLAM, YÖNTEM VE SONUÇLAR	41
3.1. Donanım Ve Yöntem	41
3.2. Geometri Optimizasyonu	42
3.3. Frekans Hesaplamaları	43
3.4. Uyarılmış Enerji Hesaplamaları	53
4. SONUÇ VE TARTIŞMA	61
KAYNAKÇA	64
EKLER	75
ÖZGEÇMİŞ	

TABLÖLAR DİZİNİ

Sayfa

Tablo 3.1. M1-M5 için hesaplanan dipol moment ve Elektronik ve Termal Serbest Enerjilerinin Toplamı değerleri	43
Tablo 3.2. M1-M5 için hesaplanan dalga boyları (λ),elektron geçiş yüzdeleri (T) ve bant eşik enerjileri (E_{gap})	53



ŞEKİLLER DİZİNİ

Sayfa

Şekil 1.1. Muz tipli akseptör Y6'nın molekül yapısı	2
Şekil 2.1. P-N tipli güneş pili yapısı	3
Şekil 2.2. Tipik OLED yapısı	7
Şekil 2.3. Basitleştirilmiş yan zincirlere sahip BCDT-4X'in moleküler geometrisi.....	10
Şekil 2.4. Y6, N-C11, N3 ve N4'ün Moleküler Yapıları	11
Şekil 2.5. Tiyyeno tiyofen izomerleri	12
Şekil 2.6. NFA (A) PTT-IC ve(B) PTT-2FIC'nin kimyasal yapıları.....	13
Şekil 2.7. (A) TT-4F, (B) IEICO-4F ve (C) PTB7-Th'nin molekül yapıları	14
Şekil 2.8. TT-4F'nin sentetik yolu	15
Şekil 2.9. TPA-BT-C8 ve TPA-3Th moleküllerinin kimyasal yapısı	16
Şekil 2.10. Stilbenoid dedirmelerin dönör-akseptör moleküler yapısı 1-9	18
Şekil 2.11. 12, 13a-c, 14a-b için sentetik yöntemler	21
Şekil 2.12. Triazolun izomerleri	22
Şekil 2.13. 3-([1,1'-bifenil]-4-il)-5-(4-(tert-butil)fenil)-4-fenil-4H-1,2,4-triazol	23
Şekil 2.14. 3,5-bis[4-(difenilfosforil)fenil]-4fenil-4H-1,2,4-triazol	23
Şekil 2.15. Temel moleküler orbitalleri, uyarılmış singlet (S=0) ve triplet (S=1) durumları	24
Şekil 2.16. 3,5-Bis-[3-(9-karbazoil)fenil]-4-(4-bütilfenil)-4H-1,2,4-triazol	25
Şekil 2.17. Bazı 1,2,4-triazol türevlerinin yapıları	25
Şekil 2.18. 3',3'''-(4-fenil-4H-1,2,4-triazol-3,5-di-il)bis(N,N-difenil-[1,1'-bifenil]- 2-amin)	26
Şekil 2.19. 4-aril-3,5-bis(ariletinil)aril-4H-1,2,4-triazollerin yapısı	26
Şekil 2.20. Hidrazin kullanılarak farklı triazol türevlerinin eldesi	27
Şekil 2.21. 2-(1H-benzo[d]imidazol-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-imin molekülünün elde etme reaksiyonu	28
Şekil 2.22. 3-Alkiltiyo-1,2,4-triazol türevlerinin sentez yöntemi.....	28
Şekil 2.23. Simetrik olmayan bazı 1,2,4-triazol türevlerinin sentetik yöntemi	29
Şekil 2.24. Triazollerin 1,3-Dipolar siklo katılma reaksiyonu sonucu eldesi.....	29
Şekil 2.25. Triazol olmayan bir halka sisteminin bir triazole dönüştürülmesi	30
Şekil 2.26. Triazol olmayan bir halka sisteminin bir triazole dönüştürülmesi	30
Şekil 2.27. 3,5-disüstitüe 4-amino-1,2,4 triazol sentezi	31

Şekil 2.28. 3,5-disüstitüe 4-amino-1,2,4 triazolun Mikrodalga Isıması Altında Sentez yöntemi.....	31
Şekil 2.29. 1,2,4-triazollerin amonyum asetat ve silika jel yüzeyi üzerinde yoğunlaştırarak elde etme yöntemi	32
Şekil 2.30. Süstitüe 1,2,4-triazollerin mikrodalga destekli elde edilmesi	32
Şekil 2.31. 3,5-süstitüe 1,2,4-triazolun tek aşamalı ve katalizör varlığında sentezi.....	32
Şekil 2.32. DFT ve Hartree-Fock büyümesinin paralel bir şekilde karşılaştırılması	35
Şekil 2.33. Metan molekülün minimal temel setleri.....	37
Şekil 2.34. Karbon atomunda bölünmüş değerlik temel setlerinin etkisi	37
Şekil 3.1. Daha önce sentezlenen 1-8 bileşikleri	41
Şekil 3.2. M1: 4,4'-((4-fenil-4H-1,2,4-triazol-3,5-di-il))bis(furan-5,2-diyl))bis(N,N-difenilanilin).....	45
Şekil 3.3. M1 molekülünün birinci konformerinin (M11) 3 boyutlu yapısı	45
Şekil 3.4. M11 konformerinin Mulliken yük dağılımı	46
Şekil 3.5. M2: 4,4'-((4-(p-tolil)-4H-1,2,4-triazol-3,5-di-il))bis(furan-5,2-diyl))bis(N,N-difenilanilin).....	46
Şekil 3.6. M2 molekülünün birinci konformerinin (M21) 3 boyutlu yapısı	47
Şekil 3.7. M21 konformerinin Mulliken yük dağılımı	47
Şekil 3.8.M3: 4,4',4'-((4-(4-klorofenil)-4H-1,2,4-triazol-3,5-di-il))bis(furan-5,2-diyl))bis(N, N-difenilanilin).....	48
Şekil 3.9. M3 molekülünün birinci konformerinin (M31) 3 boyutlu yapısı	48
Şekil 3.10. M31 konformerinin Mulliken yük dağılımı	49
Şekil 3.11. M4: 4,4'-((4-(4-florofenil)-4H-1,2,4-triazol-3,5 di-il))bis(furan-5,2-di-il))bis(N,N-difenilanilin).....	49
Şekil 3.12. M4 molekülünün birinci konformerinin (M41) 3 boyutlu yapısı	50
Şekil 3.13. M41 konformerinin Mulliken yük dağılımı	50
Şekil 3.14. M5). 4,4'-((4-(4-bromofenil)-4H-1,2,4-triazol-3,5-di-il))bis(furan-5,2-di-il))bis(N,N-difenilanilin)	51
Şekil 3.15. M5 molekülünün birinci konformerinin (M51) 3 boyutlu yapısı	51
Şekil 3.16. M51 konformerinin Mulliken yük dağılımı	52
Şekil 3.17. M11 konformerinin hesaplanan UV–Vis spektrumları	55
Şekil 3.18. M21 konformerinin hesaplanan UV–Vis spektrumları	55
Şekil 3.19. M31 konformerinin hesaplanan UV–Vis spektrumları	56

Şekil 3.20. M41 konformerinin hesaplanan UV–Vis spektrumları	56
Şekil 3.21. M51 konformerinin hesaplanan UV–Vis spektrumları	57
Şekil 3.22. M11- M51 Konformerlerinin gaz fazındaki HOMO-LUMO sınır orbitalleri ve bant enerji	58
Şekil 3.23. M11- M51 Konformerlerinin CHCl ₃ fazındaki HOMO-LUMO sınır orbitalleri ve bant enerji aralıkları.....	59
Şekil 3.24. M11- M51 Konformerlerinin DMSO fazındaki HOMO-LUMO sınır orbitalleri ve bant enerji aralıkları.....	60
Şekil 4.1. Tez çalışması kapsamında tasarlanan M1-M5 molekülleri.....	61



GÖRSELLER DİZİNİ

Sayfa

Görsel 2.1. OLED tabanlı otomotiv arka lambaları: (a) BMW M4 , (b) Mercedes S-Sınıfı Coupe , (c) Audi A8 ve (d) TT RS Coupe.....	8
---	---



SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

A-D-A:	Akseptör-Donor- Akseptör
ALDA:	Adaptive linear discriminant analysis (Uyarlanabilir Doğrusal Diskriminant Analizi)
AM1 :	Austin model 1
BHJ :	Bulk Heterojunction
BT :	Benzotiyadiazol
B3LYP:	Becke-3-Lee-Yang-Parr
CNDO	: Complete Neglect of Differential Overlap (Diferansiyel Örtüşmenin Tamamen İhmal Edilmesi)
CO ₂ :	Karbon Dioksit
CS :	Charge Separation
CT :	Charge Transfer
DFT :	Density Functional Theory (Yoğunluk Fonksiyon Teorisi)
ETC :	Electron Transport Chain
E _g :	Bant Aralığı
E.N. :	Erime Noktası
eV :	Elektron-Volt
FETs :	Field-Effect Transistors) Alan Etkili Transistörler(
HOMO:	Highest Occupied Molecular Orbital (En yüksek dolu moleküler orbital)
IR :	Infrared (Kızılötesi)
ITO :	Indium Tin Oxide
INDO	: Intermediate Neglect of Differential Overlap (diferansiyel örtüşmenin orta düzeyde ihmal edilmesi)
LUMO:	Lowest Unoccupied Molecular Orbital (En düşük boş moleküler orbital)
LEDs :	Light-emitting diodes (Işık yayıcı diot)
LDA :	Local density approximation) Yerel Yoğunluk Yaklaşımı(
MM :	Moleküler mekanik
NDDO	: Neglect of Diatomic Diferential Overlap (iki atomlu diferansiyel örtüşmenin ihmal edilmesi).
OPV :	Organic Photovoltaic (Organik Fotovoltaik)
OFET :	Organic Field Effect Transistors
PCE :	Power Conversion Efficiency (Güç Dönüşüm Verimi)

PPP	:	Pariser-Parr-Pople
PM3	:	Parametrik yöntem 3
PM6	:	Parametrik yöntem 6
QM	:	Kuantum mekaniK
RPA	:	Random-phase approximation(Rastgele faz yaklaşımı)
SCF	:	Self-Consistant Field
TT	:	Tiyenotiyofen
UV	:	Ultraviolet



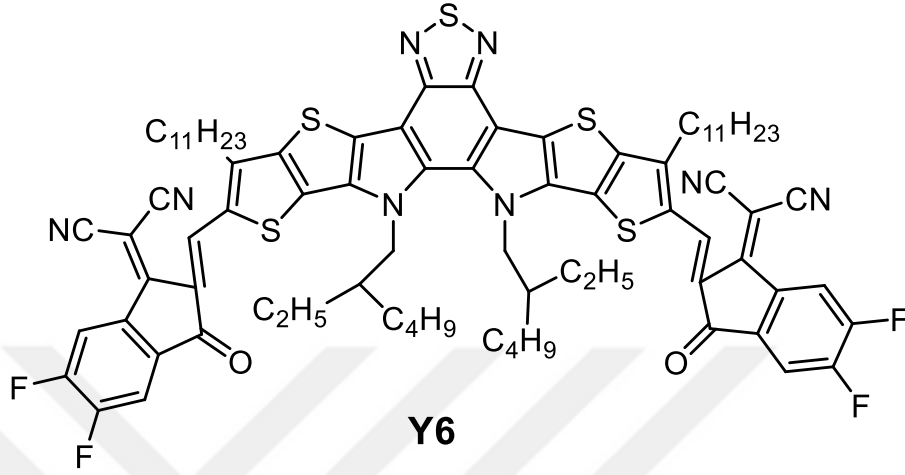
1. GİRİŞ

Bir elektron alıcı (elektron akseptör), kendisine başka bir bileşikten aktarılan elektronları kabul eden kimyasal bir yapıdır. Donör (D) ve akseptör (A) gruplarını içeren bir molekülde, molekül boyunca yük taşımaya yardımcı elektron taşıyıcı zincir (ETC) ve halkalar yer alabilir. Elektronları, elektron donör bir molekül veya halkadan elektron akseptöre aktaran, elektron taşıyıcı halkalara (π köprüleri) fulleren veya fulleren içermeyen gruplar örnek olarak verilebilir. Elektronların donörden akseptöre aktarılması sonucunda bir redoks reaksiyonu meydana gelmektedir [1]. Son yıllarda, fulleren olmayan küçük moleküllü akseptörler (SMAs), ayarlanabilir enerji seviyeleri ve geniş ışık absorpsiyon avantajı nedeniyle organik güneş pilleri çalışmalarında araştırmacıların ilgisini çekmiştir. Günümüzde organik fotovoltaiiklerde (ışığı elektrik enerjisine çeviren organik yarı iletken malzemeler) kullanılan geleneksel fulleren bazlı akseptörlere kıyasla fulleren içermeyen küçük akseptör tipli bileşiklerin katkılarının daha fazla olduğu anlaşılmaktadır [2].

Böylelikle fulleren içermeyen organik akseptör tipli moleküller esas olarak geleneksel fulleren bazlı organik güneş pillerin dezavantajlarını ortaya çıkarmaktadır. Şimdiye kadar aralıksız çabalarla organik güneş pillerinde kullanılmak üzere küçük akseptör molekülleri tasarlanmış ve sentezlenmiştir. Bu küçük molekül akseptörlerinin enerji dönüştürme verimlilikleri heyecan verici bir şekilde %16'nın üzerine çıkmaya başlamıştır. Fulleren yapısı bulunmayan organik güneş pillerinde %17'lik bir PCE (Power Conversion Efficiency) elde edilmiştir. Fulleren içermeyen küçük akseptör molekül için en çok umut verici strateji ise bu molekülün A-D-A yapısı olarak tasarlanmasıdır. A-D-A stratejisi çoğunlukla molekülün geometrisinin eş düzlemli olması, düşük bant aralığına sahip olması ve kırmızıya kaymış absorpsiyon vermesine yol açmaktadır. Elektronca zengin (donör) ve fakir (akseptör) π -konjuge moleküllerden, var olan elverişli elektrostatik etkileşimleri nedeniyle kompleksler de elde edilmektedir. Elektron açısından zengin ve fakir dönüşümlü hetero yığınlı topluluklar, en çok katılarda ve çözeltide yaygındır. Ancak ayrılmış donör ve akseptörler topluluğu yüksek elektrik iletkenliğinden dolayı organik molekül ve organik fotovoltaiik hücrelerin verimliliğini artırmak için önemlidir.

Zou ve arkadaşları Y6 (BTP-4F) olarak kodladıkları yeni bir akseptör madde ve elektron eksikliği içeren bir kaynaşmış benzotiyadiazol çekirdeği yapısı sentezlemiştir. Benzotriazol yerine Benzotiyadiazol (BT) molekülü kullanılarak tasarlanan bileşikte

daha güçlü elektron çekimi elde edilmiştir. Bunun yanı sıra azot atomlarına alkil grubu bağlanarak elektronların yan zincirlerin olduğu kısımlarda aşırı toplanması önlenmiştir. Böylelikle molekül boyunca yük taşınırken etkili bir moleküller arası temas sağlanmıştır. Muz tipli bu bileşiğin %15,7 güç dönüşüm verimliliği sağladığı görülmüştür [3][4].



Şekil 1.1. Muz tipli akseptör Y6'nın molekül yapısı

2. TEORİK BİLGİ

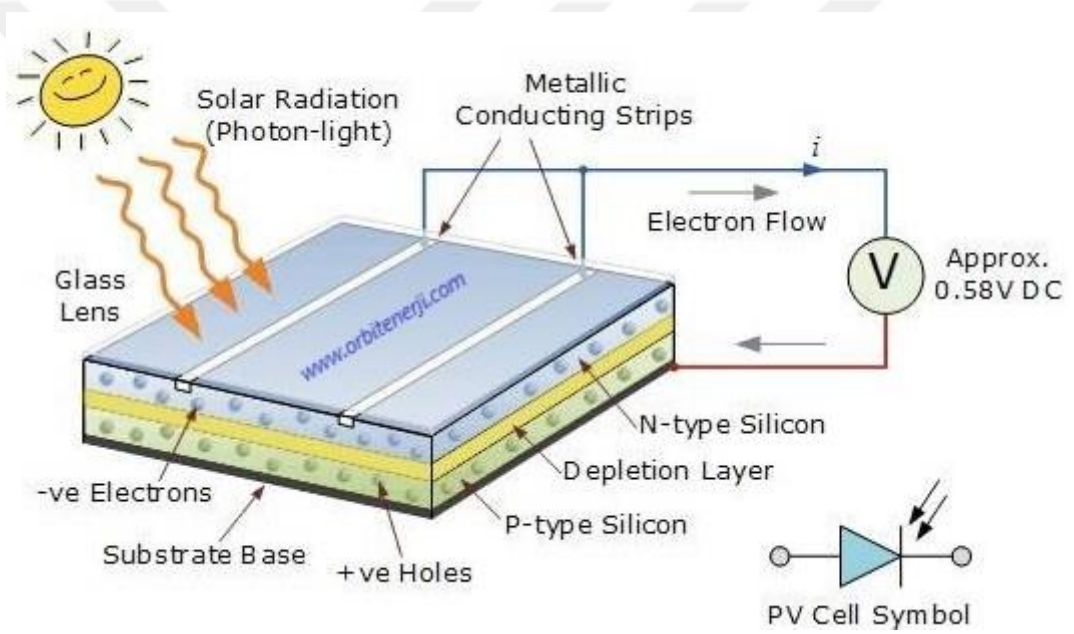
2.1. Fotovoltaik Etki Ve Güneş Pilleri

1839'da Becquerel, ilk fotovoltaik hücre olan foto elektrokimyasal güneş pilini bulduğu sistemi kullanarak yapmış olduğu deneyde fotovoltaik etkiyi keşfetti. Foto-elektrokimyasal güneş pilinde, foto aktif tabaka olarak yarı iletken-elektrolit sistemi kullanılır. Bu tür sistemlerle ilgili ilk raporlar 1960'ların sonunda yayınlandı. Ne yazık ki, uygun bant aralığına sahip yarı iletkenlerin kararlı olmadığı ve korozyona uğradığı gözlemlenmiştir. Beklenen kararlılığı gösteren sistemlerinse PCE veriminin düşük çıktığı görülmüştür. Bu nedenle güneş pilleri üzerindeki çalışmalar geniş bant aralıklı yarı iletkenlerle sınırlı kalmıştır [4][5].

Silikon içeren moleküllerin yüksek absorpsiyon özellikleri, güneş ışığını kullanmadaki etkinliklerini artırmaktadır. Kullanım ve üretim kolaylığının yanı sıra yüksek esnekliği silikon içeren molekülleri avantajlı kılmaktadır. Organik moleküller ve polimerler ürettiği ışığı ve yükleri elektrotlara taşır. İlk olarak 1986 yılında Tang silikon içeren güneş pilinde bakır ftalosiyanın (CuPc) bileşiği kullanmış ve % 0,9 verim elde etmiştir. Bundan sonra, kullanılan yeni silikon malzemeler % 6,5'lik verime ulaşmıştır [6]. 1991 yılında O'Regan ve Grätzel, rutenyum bipiridil kompleks boyalarla

duyarlılaştırılmış nanokristalin TiO filmi oluşturdıkları fotoelektrokimyasal pil sistemiyle % 7 verim elde etmişlerdir. Sıvı elektrolit kullanımı ile bu verim % 11 değerlerine ulaştı ancak yapıda sıvı elektrolit kullanılması ve elektrolit çözeltilerinin uçuculuğu güneş pillerinin dezavantajları arasında yer almıştır. Günümüzde silikon içeren güneş pilleri üzerinde birçok çalışma yapılmakta ancak henüz PCE değerleri istenen seviyeye ulaşmamıştır. En yüksek PCE değeri inorganik güneş pillerinde % 25'i bulmuştur. Bunlar galyum silikon bazlı, silikon güneş pilleri ve silikon bazlı tek bağlantılı güneş hücreleridir [6].

Güneş pilleri, güneş ışığını absorplayan ve absorpladığı enerjiyi elektrik enerjisine dönüştüren yarı iletken malzemelerdir. Şekil 2.1'de bir güneş pilinin yapısı gösterilmiştir.



Şekil 2.1. P-N tipli güneş pili yapısı

Eski zamanlarda enerji sadece ısınmak ve ısı üretmek için kullanılırken, günümüzde elektrik ve sanayinin gelişmesiyle birlikte enerji neredeyse günlük hayatımızın temel ihtiyacı haline gelmiştir. Yaşam boyunca yeme, içme, sosyal yaşam, iletişim, ulaşımda vazgeçilmez hale geldi ve bu da büyük enerji ihtiyacına yol açmıştır. Her ne kadar enerji ihtiyacı başlangıçta daha basit yollarla karşılanırsa da, nüfus arttıkça ve hayat elektronik hale geldikçe, dünya da insanların enerji ihtiyacını karşılamak gerçekten zor hale geldi ayrıca Enerjiye duyulan ihtiyaç dünyadaki savaşların bir nedeni haline döndü. Fosil yakıt kaynaklarının doğayı kirletmeleri ve tükenmeleri, daha temiz yenilenebilir enerji kaynaklarının eksikliğine yol açmıştır. Neyse ki Güneş'ten gelen

enerji miktarı şu anki tükettiğimiz fosil kaynaklı enerjilerden 10000 kat daha fazladır. Bu nedenle; Dünyanın %0,1'i güneş pilleriyle çalışıyor ve %10 enerji verimliliğini karşılayabiliyor [8][9][10]. Güneş enerjisi, yenilenebilir enerji için en iyi seçimdir ve araştırma için büyük bir potansiyele sahiptir. Güneş pilleri, güneşten gelen enerjiyi elektrik enerjisine dönüştürebilir. Güneş pilinde kullanılan malzemeler ve tasarımları performansı etkiler. Işık, bir foton seli olarak tanımlanabilir ve renkleri veya frekansları nedeniyle enerjileri kuantumlanır. Işığın ışığı absorbe edici bir madde tarafından absorbelenmesi, fotonların enerji aktarımı ile yapılır, ve elektronlar enerji seviyelerini yükseltir. Burada bu enerji, haricî bir devre tarafından bir elektrik işine iletilir [14][8].

Hücrenin verdiği elektrik enerjisi kaynağı, yüzeyine gelen güneş enerjisidir. Bağlantı bölgesindeki fotovoltaiik dönüşüm, bunların bir fotovoltaiik hücre olarak çalışmasını sağlar. Bu çalışma iki aşamada gerçekleşir. Öncelikle bağlantı bölgesine gelen ışık azaltılarak elektron deliği çiftleri oluşturulur, ikincisi ise bölgedeki elektrik alan yardımı ile birbirinden ayrılır. Yarı iletkenler, Değerlik bandı ve iletkenlik bandından oluşur. Bu aralığa eşit veya daha büyük enerjiye sahip bir foton bir yarı iletken tarafından absorbe edildiğinde, enerjisini değerlik bandındaki bir elektrona ileterek elektronların iletim bandına ulaşmasını sağlar. Böylece bir elektron-boşluk çifti oluşur. Bu yapı, iki farklı katman halindedir. N-katmanı, fosfor atomları eklenmiş silisyumdan oluşan ve pilin negatif bölgesini oluşturan katmandır. P-katmanı ise, bor atomları eklenmiş silisyumdan oluşmuş, pilin pozitif bölgesidir. Bu tip Silikon içeren P-N bağlantılı fotovoltaiik hücrenin elektron-boşluk çiftleri hücrenin arayüzeyinde meydana gelirse, elektron-boşluk çiftleri elektron alanı ile birbirinden ayrılır. Bu şekilde, fotovoltaiik hücresi bir pompa gibi çalışır, elektronları n (negatif) bölgesine ve delikleri p (pozitif) bölgesine yönlendirir. Birbirinden ayrılan elektron deliği çiftleri, fotovoltaiik hücrenin uçlarında faydalı bir güç çıkışı oluşturur. Bu süreç hücre yüzeyine bir fotonun çarpmasıyla tekrar devam eder. Yarı iletkenin iç kısımlarında, elektron deliği çiftleri gelen fotonlar tarafından oluşturulur [14][9].

2.2. Oled Teknolojisi

Organik ışık yayan diyotların (OLED) yeni nesil görüntüleme ve aydınlatma teknolojilerinde önemli bir yeri vardır [11][12]. OLED'lerin düşük maliyetli olması, kolay üretilmesi, daha geniş görüş açısına sahip olması, düşük güç tüketimine yardımcı olması, hafifliği, esnekliği gibi çekici özellikleri bu teknolojiyi gelecek vaat eden bir ekran ve aydınlatma teknolojisi haline getirmiştir [13][14].

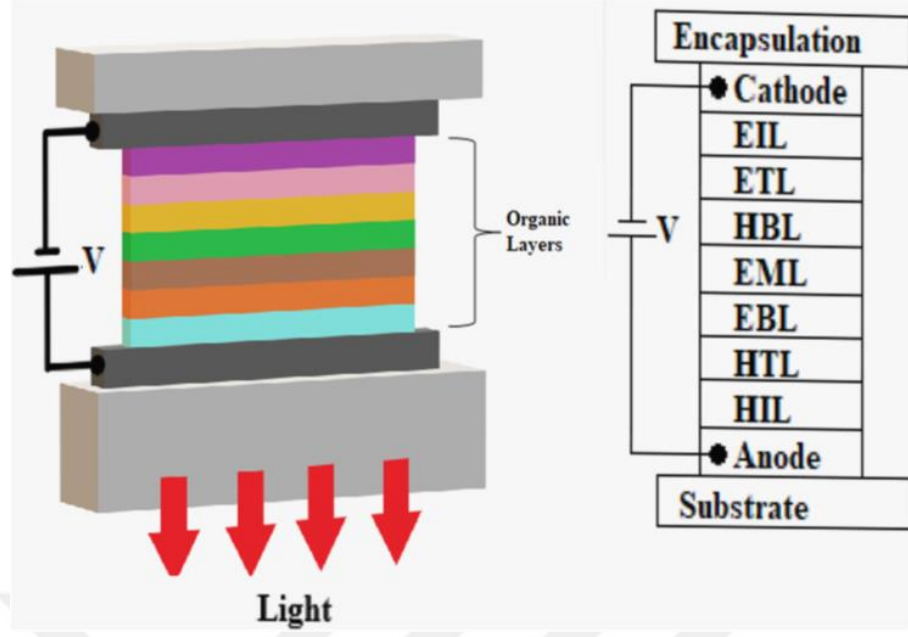
Geçtiğimiz birkaç on yılda, Eastman Kodak'ın [15][16] başarısının ardından, 1987'den itibaren, ışık yayan diyot (OLED) cihazlarının özelliğinde önemli bir artış olmuştur.

Organik ışık yayan diyotlar (OLEDs) katı hal aydınlatması ve düz panel ekranda büyük gelişme olanaklarına sahiptir. Günümüzde yapılan araştırmalar daha çok OLED teknolojisinde karşılaşılan iki büyük sorun üzerine yoğunlaşmıştır: Cihaz ömrü ve cihaz veriminin düşük olmasıdır [8]. Bu teknolojide karşılaşılan iki sorunun çözümü ve cihaz performanslarını arttırabilmek için yüzlerce rapor literatürde yayınlanmıştır [11][12][17][18][19][20][21]. Araştırmacılar, yeni malzemeler geliştirmek, taşıyıcı katmanın dağılımını stabilize etmek, cihaz yapısını optimize etmek, cihaz verimini arttırmak [22] ve yayımlayıcı katmandaki eksitonları kontrol etmek için çeşitli önlemler almıştır [17].

Önde gelen elektronik şirketlerinin çoğu (Samsung, LG, Apple, Google vb.) OLED tabanlı ekranların ve aydınlatma panellerinin geliştirilmesine çaba göstermektedir. Ne yazık ki, vakum biriktirme işlemi, zayıf ölçeklenebilirlik, büyük malzeme tüketimi ve geniş alanlı imalat için karşılaşılan zorluklar OLED'lerin dezavantajları olarak belirtiliyor. Çözüm süreciyle karşılaştırıldığında (kolay işleme, düşük malzeme israfı, geniş alan üretimi, vb.), vakum teknolojisi, bu tür ekran ürünlerinin çoğunu imal etmek için hâlâ kullanılmaktadır. Çözelti ile işlenmiş filmlerde daha az yoğun filmler ve serbest hacimlerin varlığı nedeniyle, cihazlar yüksek güç verimliliğinden ve uzun ömürlerden yoksundur. Bununla birlikte, çözelti ile işlenmiş cihazların ömrü, yoğunluğun arttırılması ve film morfolojisinin iyileştirilmesiyle uzatılabilir [22]. Bu nedenle, yayımlama ve taşıma katmanlarının üretilmesini sağlayan kolay bir çözüm süreci geliştirmek mümkündür [23]. OLED'ler genellikle çok katmanlı bir yapıya sahip ve her katmanda önemlidirler. Bu nedenle, her katmanın moleküler yapısı, film morfolojisi, termal stabilitesi, katmanlarda kullanılan kimyasal içeriğin

moleküler orbital (MO) enerji seviyeleri ve taşıyıcı hareketliliği, verimli ve uzun ömürlü OLED’lerde çok önemlidir. Çok katmanlı verimli OLED cihazlarında, genel olarak, yayımlayıcı katman (EML) ve elektrotlar arasındaki enerji bariyerini azaltmak için delik ve elektron taşıma malzemeleri (HTM’ler ve ETM’ler) kullanılır. Elektron ve delik taşıma katmanları (ETL ve HTL), taşıyıcıların verimli bir şekilde taşınmasını kolaylaştırır ve EML içindeki yük taşıyıcı dengesinin artmasına yardımcı olur, bu da ara yüzlerde rekombinasyon kaybında bir azalmaya neden olur [15]. Şu anda, geniş bir yelpazede verimli ETM’ler geliştirilmiş olsa da, işlenebilir organik HTM’lere ilişkin nispeten az sayıda araştırma yapılmıştır.

Son yıllarda ilgi odağı haline gelen OLED teknolojisi, genel aydınlatmada, düz ekranlarda, TV ekranlarında, mobil cihazlarda, yerleşik antenlerde ve görünür ışık iletiminde kullanılmaktadır [12]. Şekil 3.1’de gösterildiği gibi, tipik bir OLED cihazı, iki iletken elektrot arasında birkaç ince organik yarı iletken malzeme katmanından oluşur. Organik katmanların toplam kalınlığı birkaç yüz nanometredir ve her katmanın belirli bir amacı vardır. Bir OLED’e doğru akım (Direct Current-DC) voltajı uygulandığında, elektrik alanının etkisiyle, delikler ve elektronlar, birbirleriyle buluşana kadar elektrotlardan EML’ye hareket eder. Eksitonun (bağlı bir çift delik ve elektron) ışımsal rekombinasyonu sayesinde, elektrik enerjisi bu katmanda doğrudan ışığa dönüştürülür [21]. Engelleme katmanları, kaçak akımları azaltmak ve elektronları yayımlayıcı katmanla sınırlayarak OLED’in verimliliğini artırmak için kullanılır. LED teknolojisinin organik malzemelerle ilgili temel sorunlarından biri nem ve sıcaklık gibi dış etkenlere karşı aşırı duyarlı olmalarıdır. Cihazı bu dış etkenlere karşı korumak ve gerekli kullanım ömrünü sağlamak için bir kapsülleme tabakası kullanılmaktadır. Cihazda üretilen ışığın cam alt tabakadan yayılması gerektiğinden, şeffaf iletken bir oksit olan indiyum kalay oksit (Indium Thin Oxide-ITO) kullanılır.



Şekil 2.2. Tipik OLED yapısı [19]

Otomotiv aydınlatma pazarı, OLED'ler için en cazip pazarlardan biridir ve LED teknolojisinden sonraki teknolojik gelişme bu pazar için OLED'lerdir [23]. Nokta kaynaklı LED teknolojisi gibi, ışık cihazdan geçen akımın bir fonksiyonu olarak yayılır. OLED'in akım-voltaj davranışı LED'lere çok benzer. Bununla birlikte, çok katmanlı organik yapı ve daha büyük ışık yayan alan, inorganik muadillerine göre çok büyük bir kapasitif davranış üretir [19][24].



Görsel 2.1. OLED tabanlı otomotiv arka lambaları: (a) BMW M4 , (b) Mercedes S-Sınıfı Coupe , (c) Audi A8 ve (d) TT RS Coupe

Dünyanın en tanınmış otomobil üreticilerinden bazıları, Görsel 2.1'de gösterildiği gibi, arka stop lambalarında OLED'leri kullanan araç tasarımları geliştirmektedirler. Arka lamba başına 15 cam tabanlı bükülmez OLED ve 1200 cd/m² parlaklık ile, konum işlevini gerçekleştirmek için uygundur. Arka lambanın ömrü, esas olarak otomobilin ömrü boyunca kullanılan lamba miktarına bağlıdır. Otomotiv arka aydınlatma sistemi için artan aydınlatma akısı talebi ile OLED'lerin elektriksel, optik, termal davranışları sistemin ömrü ve güvenilirliği için çok önemlidir [25][26].

2.3. Organik Güneş Pilleri

Organik güneş pilleri güneş enerjisini absorbe ederek elektrik enerjisine çeviren düzeneklerdir. Bu hücreler sessiz, hareketsiz, dayanıklı, uzun ömürlü, ucuz, devamlı, temiz ve güvenli olduğundan dolayı fosil, rüzgar ve başka yenilenebilir enerji kaynaklarına göre bir adım öndedir.

Elektromanyetik radyasyondan oluşan güneş ışınları elektromanyetik spektrum ışınının belli bir kısmıdır. Solar spektrum dünyanın kendi ve güneş etrafında dönmesinden dolayı gün boyunca sürekli değişim halindedir. Güneş ışını atmosferden geçerken, foton enerjileri ile atmosferdeki gazların enerjilerinin benzer olması sebebiyle

absorplanarak spektral içeriği deęiřtirmektedir. Gerçekleřen bu absorpsiyon, foton gücünün azalmasına neden olmaktadır. Bulutlar da atmosferde gerçekleştięi gibi Absorpsiyon, saçılma, daęılma gerçekleşir ve ışınlar yansıtır. Bu yansıyan ışınlar solar cihazlarına gelir ve elektrik elde edilmeyi sağlar [27].

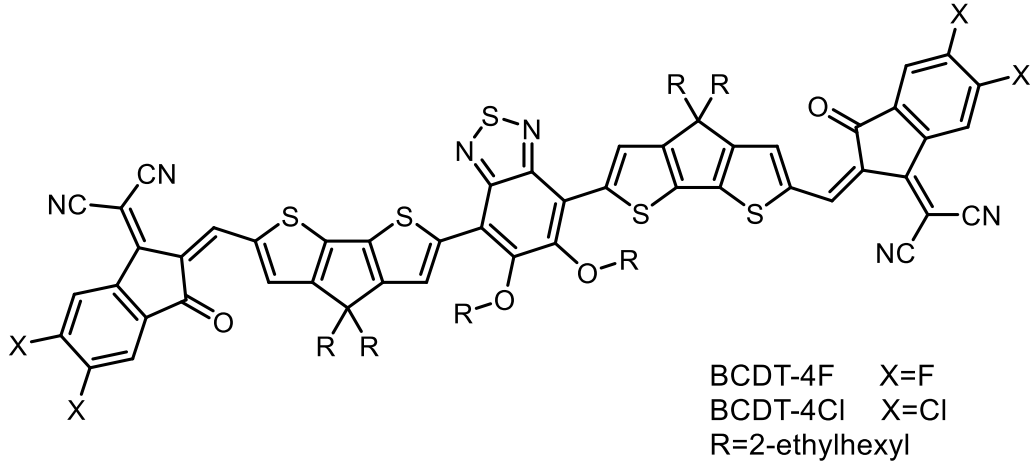
Geleneksel organik güneř pillerinde (OSCs) elektron akseptör malzemeler olarak fulleren türevleri kullanılmaktadır [28][26]. Organik güneř pillerinde fullerenlerin kullanımı bazı dezavantajları da beraberinde getirmiřtir. Bunlar: zayıf absorpsiyon, kararsızlık, enerji seviyelerinin sınırlı ayarlanabilirlięi ve büyük voltaj kayıplarıdır.

Son yıllarda, moleküler tasarımı çok önemli bir araştırma konusu olan fulleren içermeyen küçük akseptör moleküllerin (SMA) ortaya çıkması sayesinde organik güneř pilleri hızla gelişmektedir. Fulleren içermeyen organik güneř pilleri; hafiflięi, mekanik esneklięi ve düşük maliyetle üretilmesinden dolayı arařtırmacıların dikkatini çekmiřtir. Bu özelliklerin yanı sıra fullerensiz akseptör moleküllerin (NFA) güç dönüřtürme etki (PCE) deęeri fullerenli moleküllere göre yüksek olduęu görülmüřtür [26][29][30][31].

NFA'lara bazı katmanlar eklenerek, yakın kırmızı ötesi (Near Infra Red-NIR) akseptörler tasarlamak da mümkündür. Örneęin moleküler omurganın halojenasyonu ile sadece moleköl içi yük transfer etkileri deęil, aynı zamanda moleküller arası etkileřimi de artırabilir [12][17][18][19].

Organik güneř pillerinde, F veya Cl atomlarının omurgaya dahil edilmesiyle yüksek performansa sahip birkaç NIR akseptörleri oluşturulmuřtur. Ayrıca, F...H ve F...S gibi kovalent olmayan etkileřimler, moleküller arası paketlemenin güçlendirilmesine ve böylece yük taşıyıcı hareketlilięinin iyileřtirilmesine yardımcı olmaktadır.

Fulleren içermeyen akseptör (NFA) omurgalarının eř düzlemlilięini güçlendirmek için moleköl içi kovalent olmayan etkileřimler önemlidir [32][1].



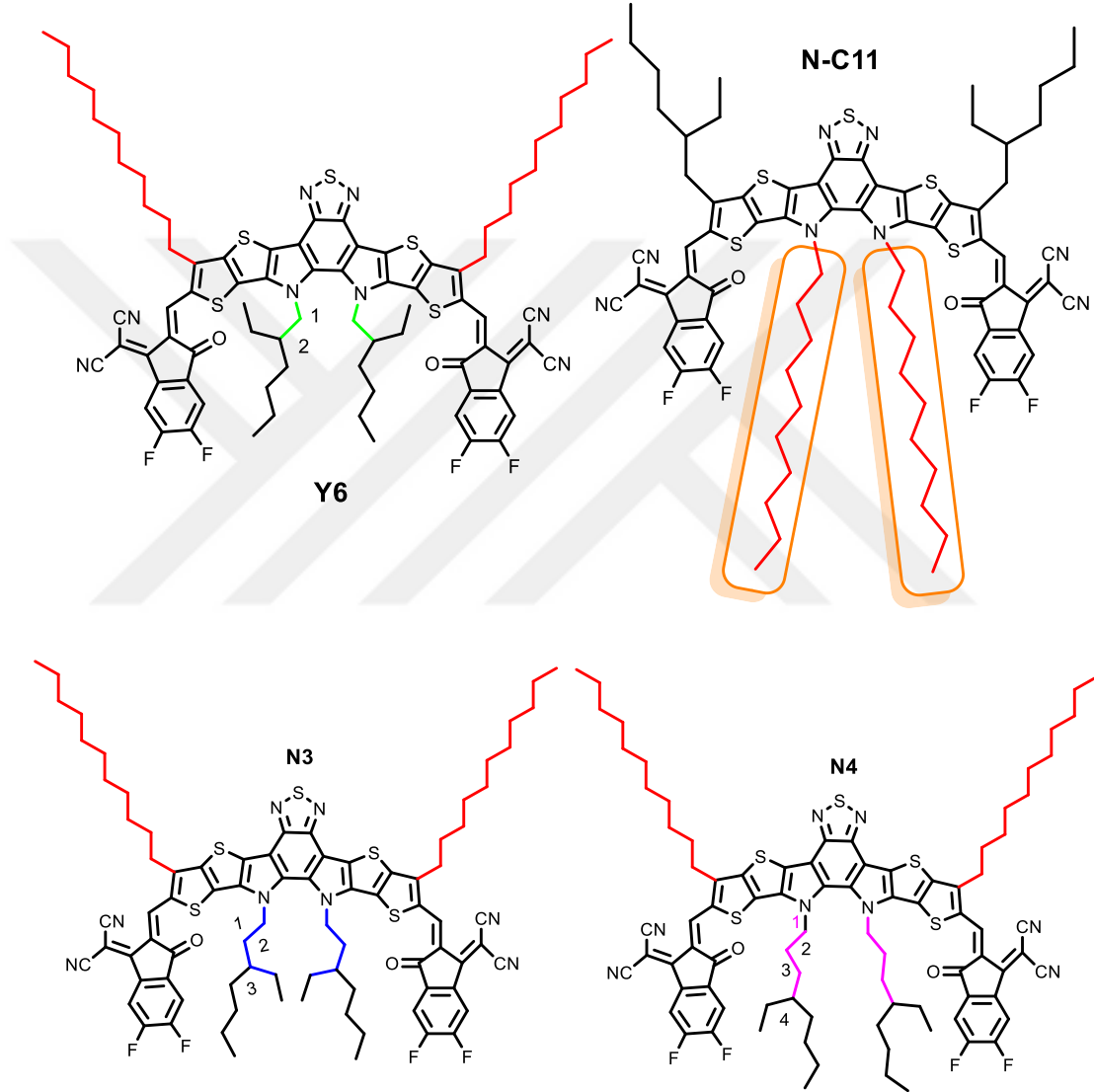
Şekil 2.3. Basitleştirilmiş yan zincirlere sahip BCDT-4X'in moleküler geometrisi

Şekil 2.3 siklopentaditiofen (CPDT)'den bir dizi reaksiyonla (Stille eşleşmesini, Vilsmeier-Haack reaksiyonunu ve Knoevenagel yoğunlaşması) yoluyla elde edilen, A-D-C-D-A (akseptör-donör-çekirdek-donör-akseptör) tipi yapıya sahip iki NIR akseptör (BCDT-4F ve BCDT-4Cl) görülmektedir. Bu moleküller tasarlanırken moleküler geometriyi kilitlemek için kaynaşmamış yapı içeren gruplarda, molekül içi kovalent olmayan etkileşimlerden yararlanılmıştır. Benzotiadiazol, D ve A birimleri birleştirildiğinde HOMO seviyesini korumak için bir çekirdek ya da π köprüsü elde edilmiş olur. Bu büyük grup, molekül içi yük transferi etkisini artırır. BT ünitesinde sp^2 hibritleşmiş azot atomları elektron çeken karaktere sahiptir. Bu durum optik bant aralıklarını daraltırken nispeten derin enerji seviyelerini korumaya yarar sağlar. Sonuç olarak, PBDB-T: BCDT-4Cl (%12.10) tabanlı OSC'ler daha yüksek akım yoğunluğu sergilediği, böylece BCDT-4F (%9.65) tabanlı olanlardan daha yüksek verim elde ettiği rapor edilmiştir [33].

2.3.1. Merdiven tipli alkil zinciri içeren küçük akseptör moleküller

Alkil zincirlerinin elektronik ve fotonik üzerindeki etkisini incelemek için aromatik omurgaya sahip pirol motifinin azot atomları üzerindeki alkil zincirleri içeren Y6 maddesi sentezlenerek literatüre kazandırılmıştır. Dallı alkil zincirlerine sahip bu küçük akseptörler %16.42 sertifikalı güç dönüşüm verimliliği ile en iyi performansı göstermiştir. Şekil 2.4'te Y6 numaralı molekülde görüldüğü gibi moleküler yapı üzerinde iki tip alkil zinciri vardır. Biri, molekülün pirol motifindeki iki sp^2 hibritleşmiş azot atomuna bağlı olan 2. konum dallı alkil zinciri, 2-etilheksildir. Diğer tip, çekirdeğin dış tarafında tiyofen biriminin b pozisyonuna bağlı iki düz alkil zinciri, n-undekildir. Y6

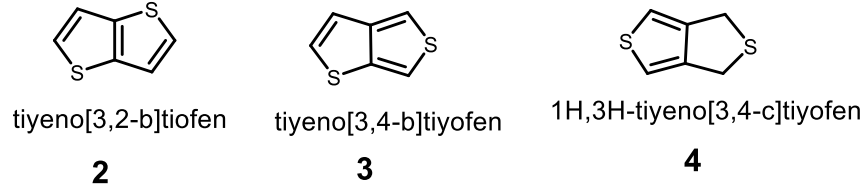
molekölü üzerindeki n-undekil ve 2-etilheksil alkil zincirlerinin pozisyonu değiştirildiğinde ortaya çıkan moleküllerin iki katmanlı cihaz performansları incelenmiştir. Buna göre, 3. pozisyonda dallanmış bir alkil zinciri olan N3 molekülünün, alan boyutu, kristallik ve π - π istifinin yüz yüze yönlenmesinin daha baskın olması açısından optimum özellik sergilediği görülmüştür. Sonuç olarak en iyi performans N3 molekülünde %16,0 PCE ile elde edilmiştir [37][32][1].



Şekil 2.4. Y6, N-C11, N3 ve N4'ün Moleküler Yapıları

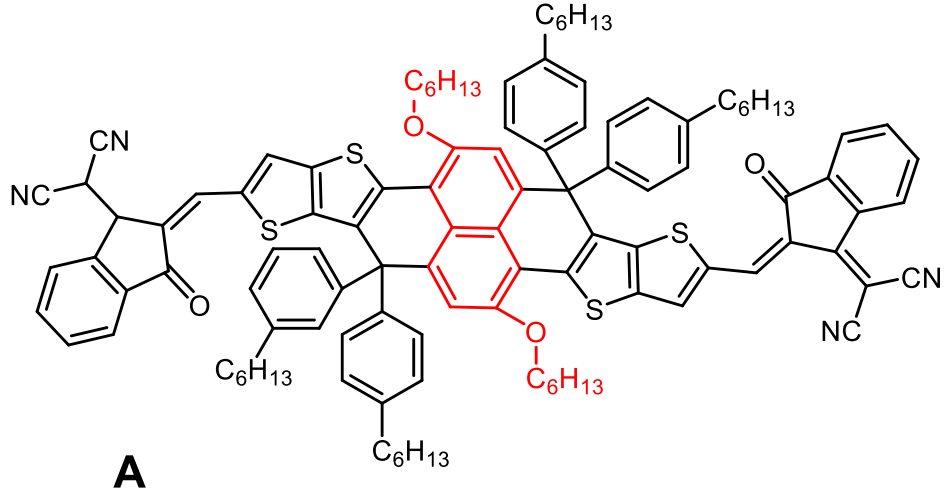
2.3.2. TT(Tiyeno Tiofen) içeren küçük akseptör moleküller

İki tane beş atomlu halkalı yapının birleşimi ile oluşan tiyeno tiyofen (TT), tiyeno[2,3-b]tiyofen (1), tiyeno[3,2-b]tiyofen (2), tiyeno[3,4-b]tiyofen (3), tiyeno[3,4-c]tiyofen (4) olmak üzere 4 farklı izomeri vardır.

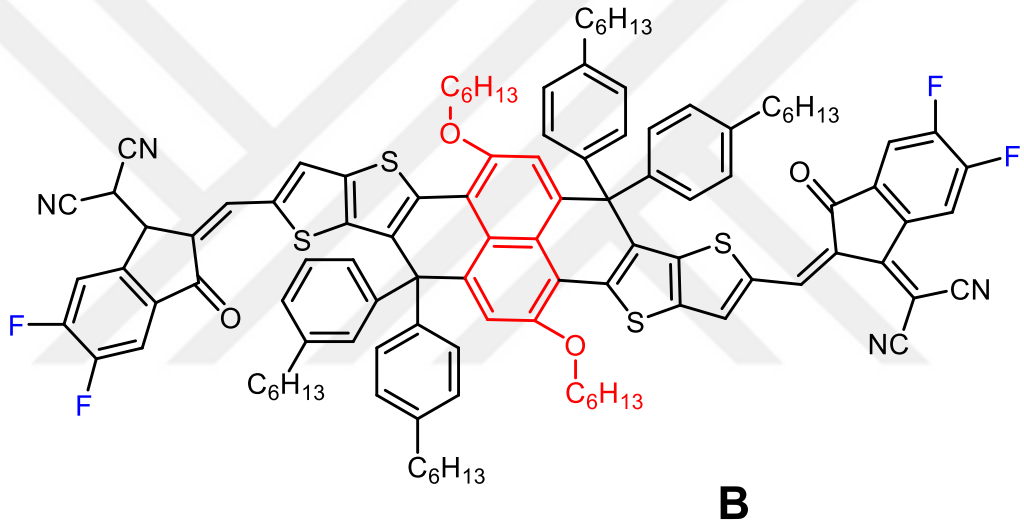


Şekil 2.5. Tiyeno tiyofen izomerleri

TT'lerin güncel çalışmaları arasında, fullerensiz akseptörlerdeki farklı yapıları A-D-A tipi çekirdekler arasındaki donör grupları için, klasik ITIC'daki benzen çekirdeğinin yerine naftalin kullanılmıştır. Naftalin çekirdeğine dayalı bir dizi fulleren içermeyen akseptörler %5-11 arasında PCE sergilemiştir [34][35][36][37]. Flor süstituentinin yan yana veya ayrı, iki 1,1-disiyanometilen-3-indanon (IC) akseptör motifi ile çevrili olan yeni A-D-A kaynaşmış halka elektron akseptörleri sırasıyla PTT-IC ve PTT-2FIC şeklinde kodlandırılarak tasarlanmıştır (Şekil 2.6). Bu iki molekül birbirleriyle karşılaştırıldığında, florlu PTT-2FIC, 1.48 eV'lik daha dar optik bant aralığına ve daha iyi π - π istiflemeye sahiptir. PBDB-T:PTT-2FIC karışım filmi hazırlandığında ise daha iyi morfoloji, delik ve elektron hareketliliği sergilediği görülmüştür. Cihazlardaki PCE değerini yükseltmek için, güçlü moleküller arası etkileşimleri indüklemek gerekir. Bu sebeple organik güneş pilleri için molekül tasarlarken ilgili moleküllerin türevleri π -konjugasyonu ile donatılır [34][38].



PTT-IC



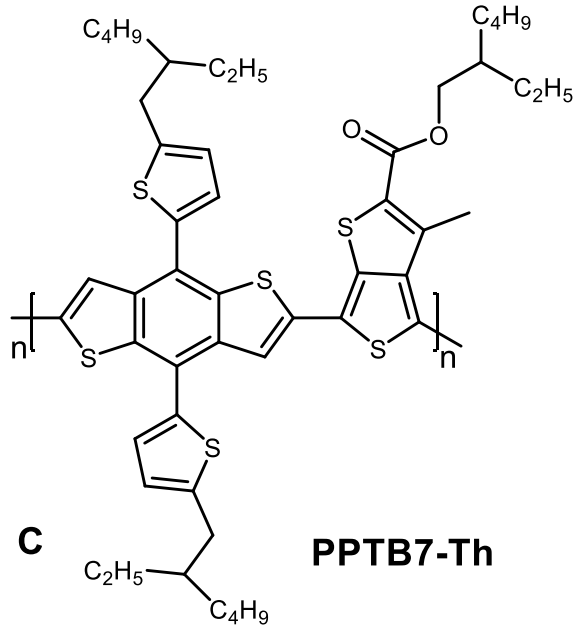
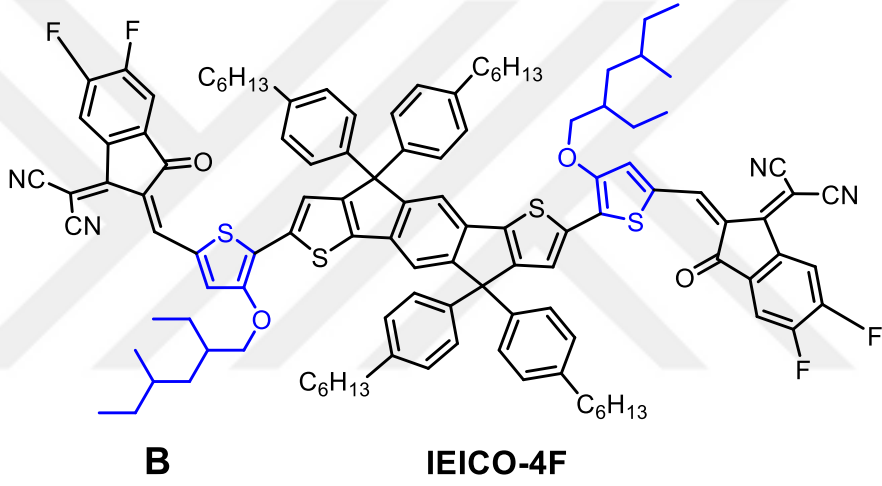
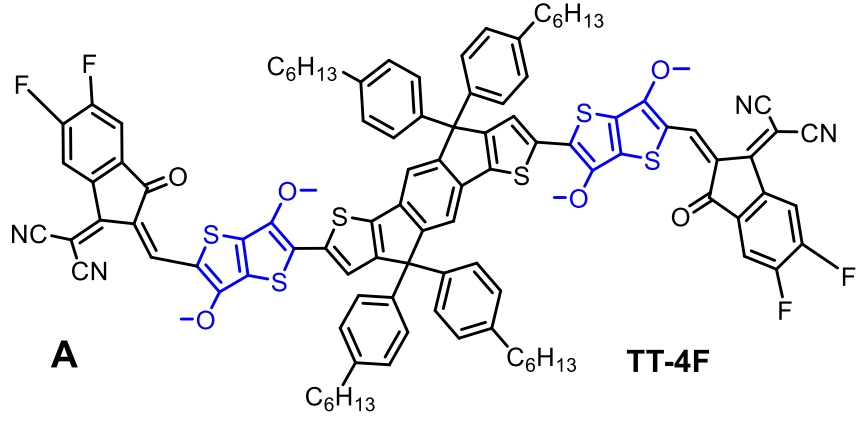
PTT-2FIC

Şekil 2.6. NFA (A) PTT-IC ve(B) PTT-2FIC'nin kimyasal yapıları

2.3.3. Fulleren içermeyen polimer güneş pilleri

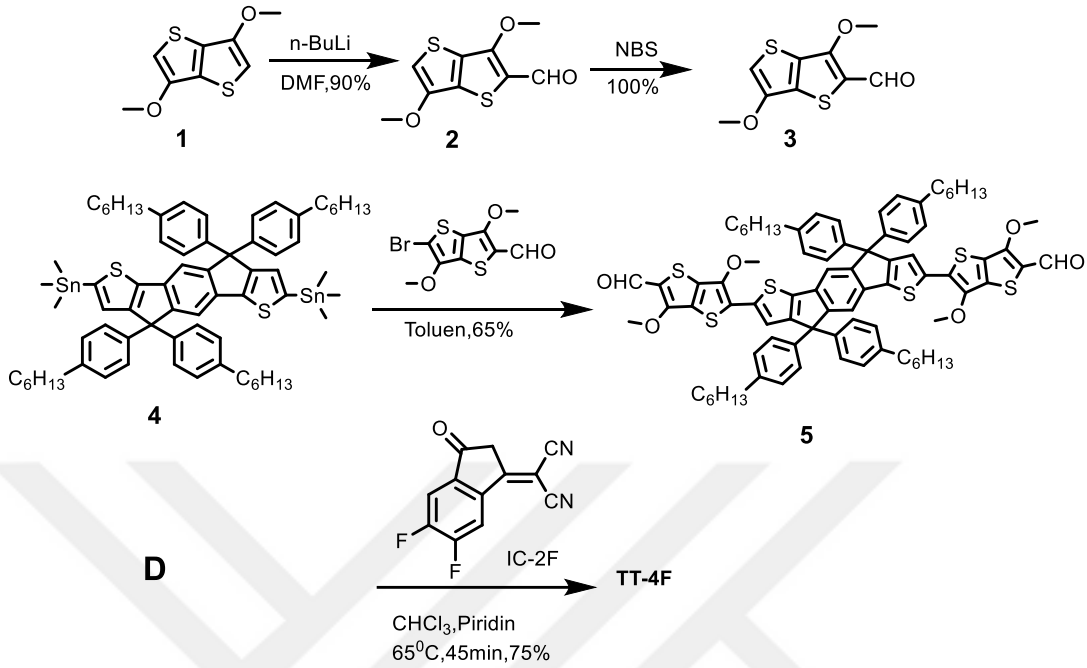
Son yıllarda araştırmacılar dikkatlerini bir polimer donörü ve iki fullerensiz akseptör içeren üçlü harmanlanmış malzeme sistemlerine çevirmeye başlamışlardır. Bu üçlü harmanlanmış sisteme örnek olarak, ikinci akseptör (misafir), konak ikili harmanının film morfolojisini korumak için birinci konak akseptör kümelenmesine uymak zorundadır [29][38][39]. Xiaofang Li ve arkadaşları, PTB7-Th:IEICO-4F konağının akseptör konuğu olarak TT-4F adlı yeni bir fullerensiz küçük akseptör molekülü tasarlamış ve sentezlemişler (Şekil 4.6). HOMO- LUMO enerji aralığını daraltmak için, IEICO-4F üzerindeki tiyofeni daha büyük π -sistemi, tiyeno[3,2b] tiyofen (TT) ile değiştirmişler ve TT-3,6 konumlarını iki metoksi grubu ile işlevsel hale

getirmişler [40][41][42]. Ortaya çıkan üçlü sistem, açık devre voltajında, kısa devre akımı yoğunluğunda ve Dolum Faktöründe eş zamanlı artış göstermiştir.



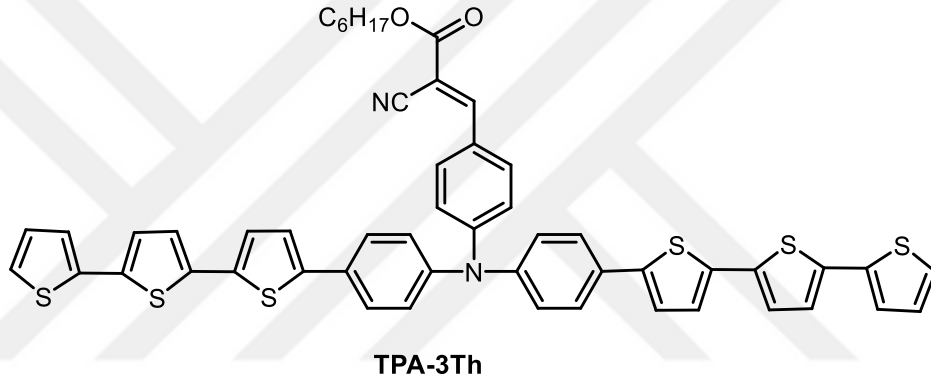
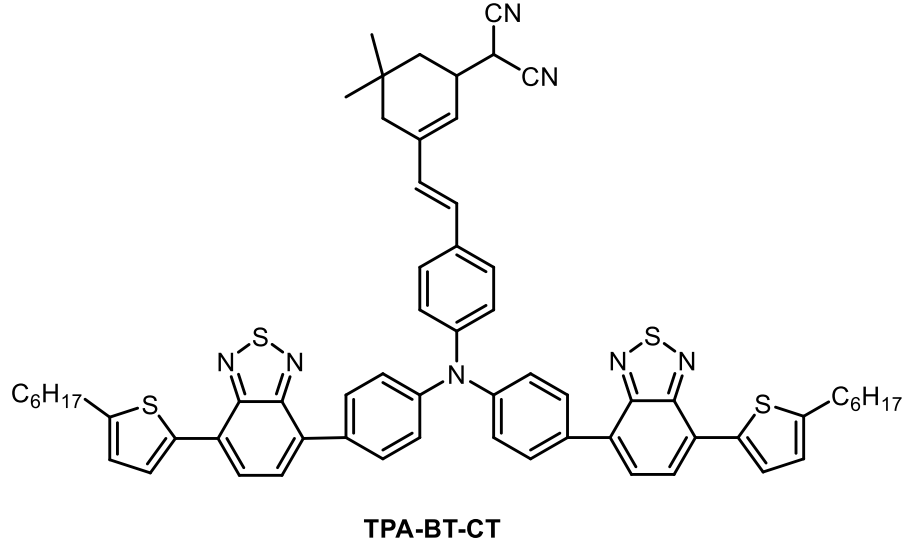
Şekil 2.7. (A) TT-4F, (B) IEICO-4F ve (C) PTB7-Th'nin molekül yapıları

Xiaofang Li ve arkadaşları tarafından gerçekleştirilen TT-4F'nin sentezi, (Şekil 2.8 D)'de reaksiyon akım şeması olarak gösterilmektedir.



Şekil 2.8. TT-4F'nin sentetik yolu

Trifenilamin (TPA) çekirdeği içeren D- π -A yapılı moleküllerin cihaz fabrikasyonu için iyi bir elektron verici grup olduğu bilinmektedir. Trifenilamin bileşiğinin donör özelliğinden yararlanılarak literatürde sayısız molekül tasarlandığı görülmektedir. Molekül tasarımı ve sentezi çalışmalarından en göze çarpanı TPA-BT-C8 ve TPA-3Th içeren küçük, iki boyutlu işlenebilir konjuge organik moleküllerdir. Araştırmaların sonucu TPA-BT-C8'deki güçlü moleküller arası yük aktarım etkisine bağlı olarak TPA-3Th molekülüne göre TPA-BT-C8'in daha düşük HOMO-LUMO enerji aralığına ve daha yüksek adsorpsiyona sahip olduğunu göstermiştir. Her iki molekül de en yüksek (HOMO) enerji seviyesine sahiptir. Yığın hetero-ekelemlili fotovoltaiik cihazların üretiminde TPA-BT-C8 veya TPA-3Th elektron donör olarak ve (6,6) -fenil C61-butirik asit metil ester (PCBM) ise elektron akseptör olarak kullanılmıştır. TPA-BT-C8 molekülünden yapılan cihazlar, yüksek gücü (8.47 mA/cm^2) dönüştürme kabiliyetine sahiptir ve TPA-3Th molekülünden % 2.6 daha yüksek PCE değerine sahiptir. Sonuç olarak, TPA-BT-C8 tabanlı cihazların fotondan elektrona dönüşüm verimliliği (IPCE) ve kırmızıya kaymış yanıt aralığı TPA-3Th moleküllerininkinden daha çok ve geniştir. Bu önceki cihazların iyileştirme çalışmaları için iyi bir alternatif oluşturmuştur [42][43][44].



Şekil 2.9. TPA-BT-C8 ve TPA-3Th moleküllerinin kimyasal yapısı

Dendrimeler, çok dallı, monodispers, sentetik makromolekülerin iyi tanımlanmış kimyasal yapıya sahip bir sınıfıdır. π konjuge stilbenoid dendrimeler, doğrusal olmayan optik cihazlar, organik ışık yayan diyotlar, ve güneş pilleri gibi optoelektronik ve fotonik cihazlarda potansiyel uygulamaları nedeniyle çok dikkat çekmiştir [45][46].

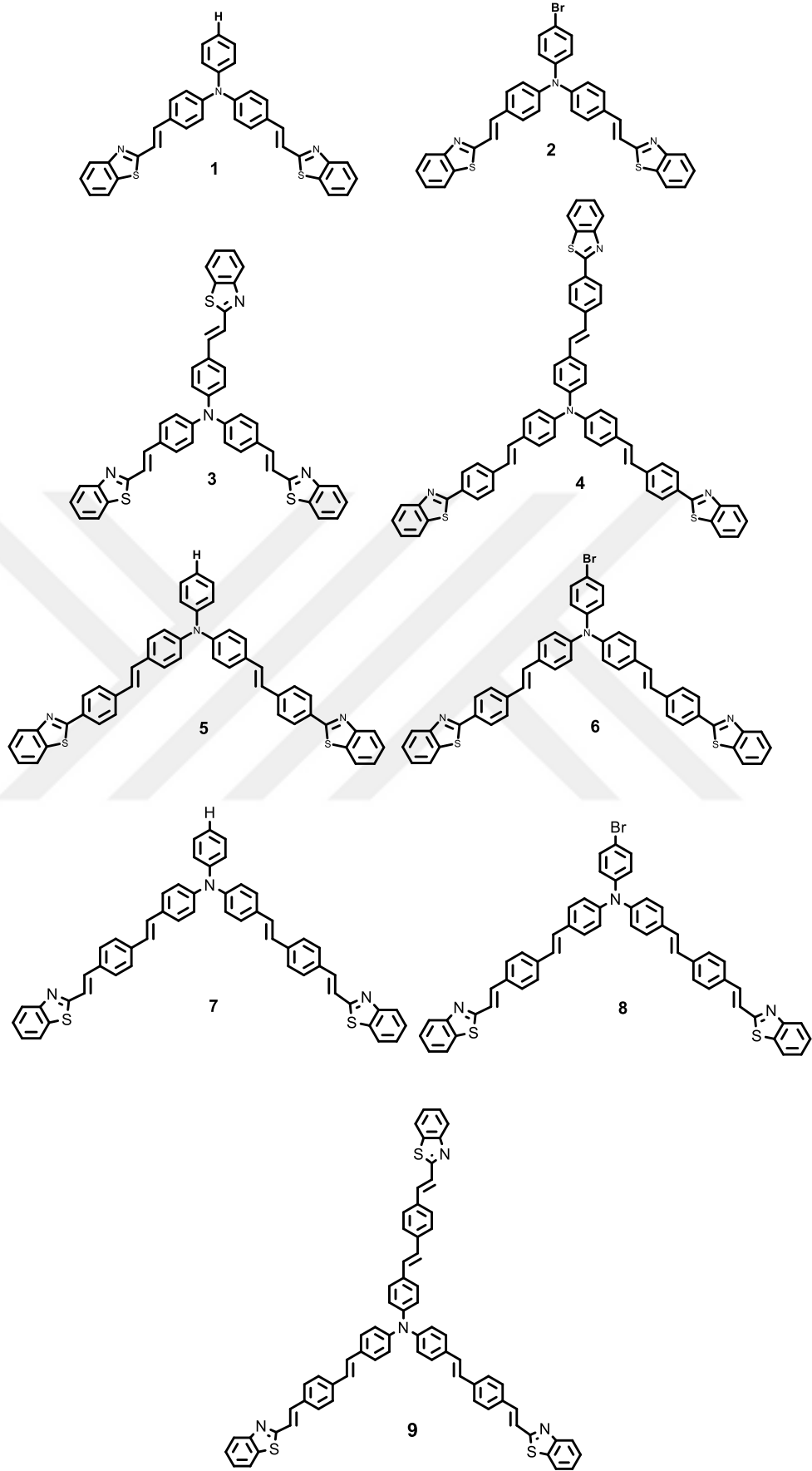
Aldol tipi yoğunlaştırma ya da Wittig reaksiyonu ile TPA çekirdekli ve benzotiyazol yüzey ünitesine sahip π -konjuge donör-akseptör stilbenoid dendrimeler başarılı şekilde yüksek verimle sentezlenmektedir. Sentezlenen bu moleküllerde TPA donör benzotiyazol akseptör olarak kullanılmaktadır. Stilbenoid dendrimelerin UV-vis absorpsiyonu, stilil biriminde π -konjugasyon uzunluğunun artmasıyla molar sönme katsayısının da arttığını gösterir.

Molar sönme katsayısı, konjuge π -köprülerinin sayısındaki artışla artar. Tüm stilbenoid dendrimeler, döngüsel voltametrede yarı çevrilebilir oksidasyon azaltma

sinyali sergiler. Yüksek oranda π -konjuge stilbenoid dendrimerler, boyaya duyarlı güneş pillerinde katkı maddesi olarak kullanıldıklarında diğer dendrimerlerden daha iyi akım üretme kapasitesi ve ışık enerjisi toplama verimliliği gösterir. Aşağıdaki 7 numaralı molekül 5.8% maksimum güç dönüştürme verimliliğine sahiptir.

Boyaya duyarlı güneş pilleri (dye-sensitized solar cells) (DSSCs) çalışmaları, π -konjugasyon uzunluğunun artırılması ve trifenilamin çekirdeğinde elektron çeken brom ve fenil halkasının bulunmasıyla daha iyi güneş pili performansının elde edilebileceğini açıkça ortaya koymaktadır ve bu gözlem, elektrokimyasal empedans ile de desteklenmektedir. Şekil 2.10'da verilen 7 numaralı molekül % 5.8 maksimum güç dönüştürme verimliliğine sahiptir [45].





Şekil 2.10. Stilbenoid dedirmelerin dönör-akeptör moleküler yapısı 1-9

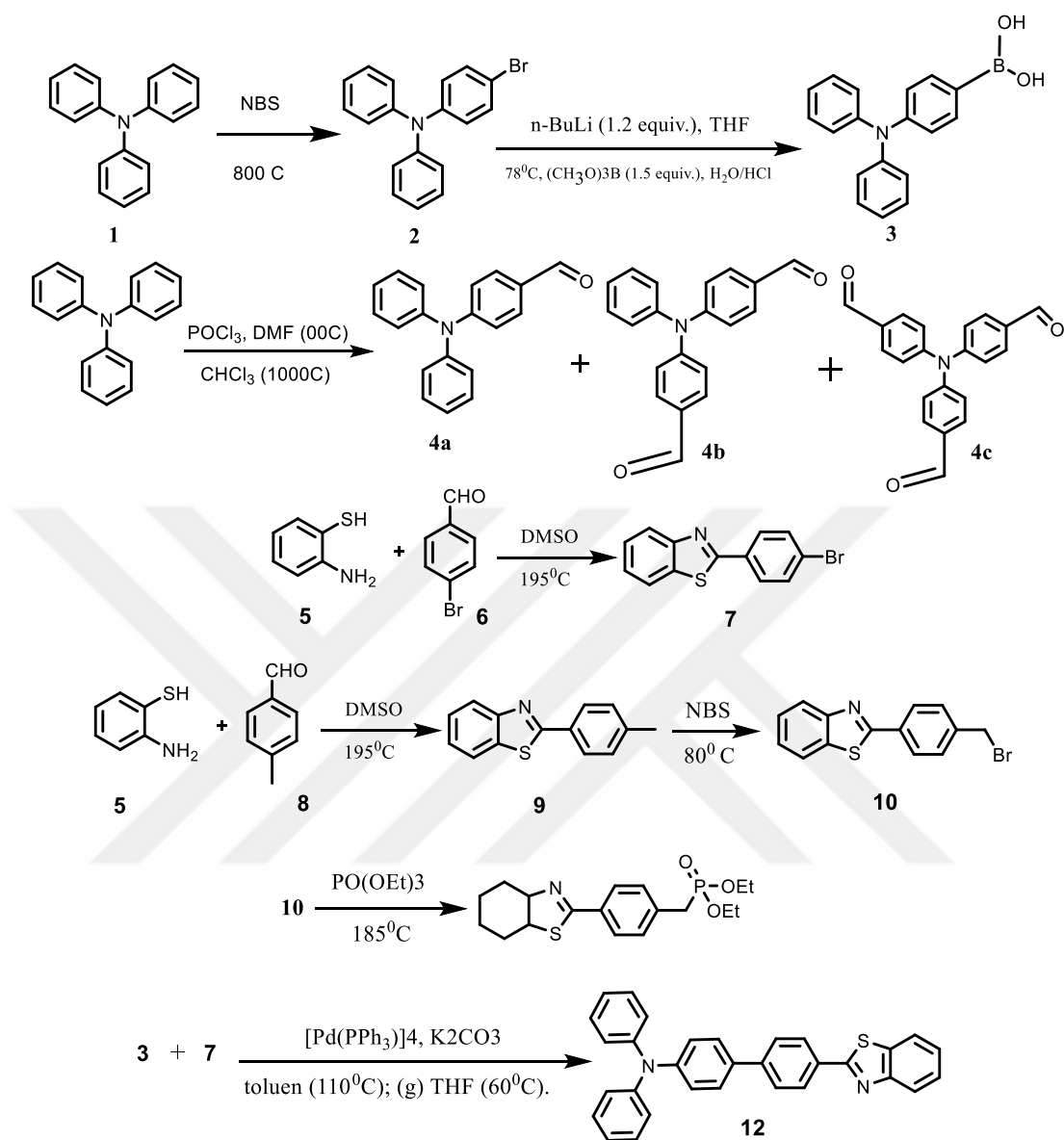
Trifenilamin, iyi elektron verme ve taşıma kabiliyetinin yanı sıra yıldız tipli moleküler yapı oluşturma kabiliyeti nedeniyle opto ve elektro-aktif malzemelerin sentezi için yaygın olarak kullanılmaktadır. Trifenilamin bazlı dendrimer, güneş enerjisi toplama verimliliğinin, [47] molekül içi yük transferi, moleküler eşdüzlemsizlik, titreşimsel eşleşme, yüksek kararlılık ve yük taşıyıcı hareketliliğinin artırılmasında önemli bir rol oynar [48].

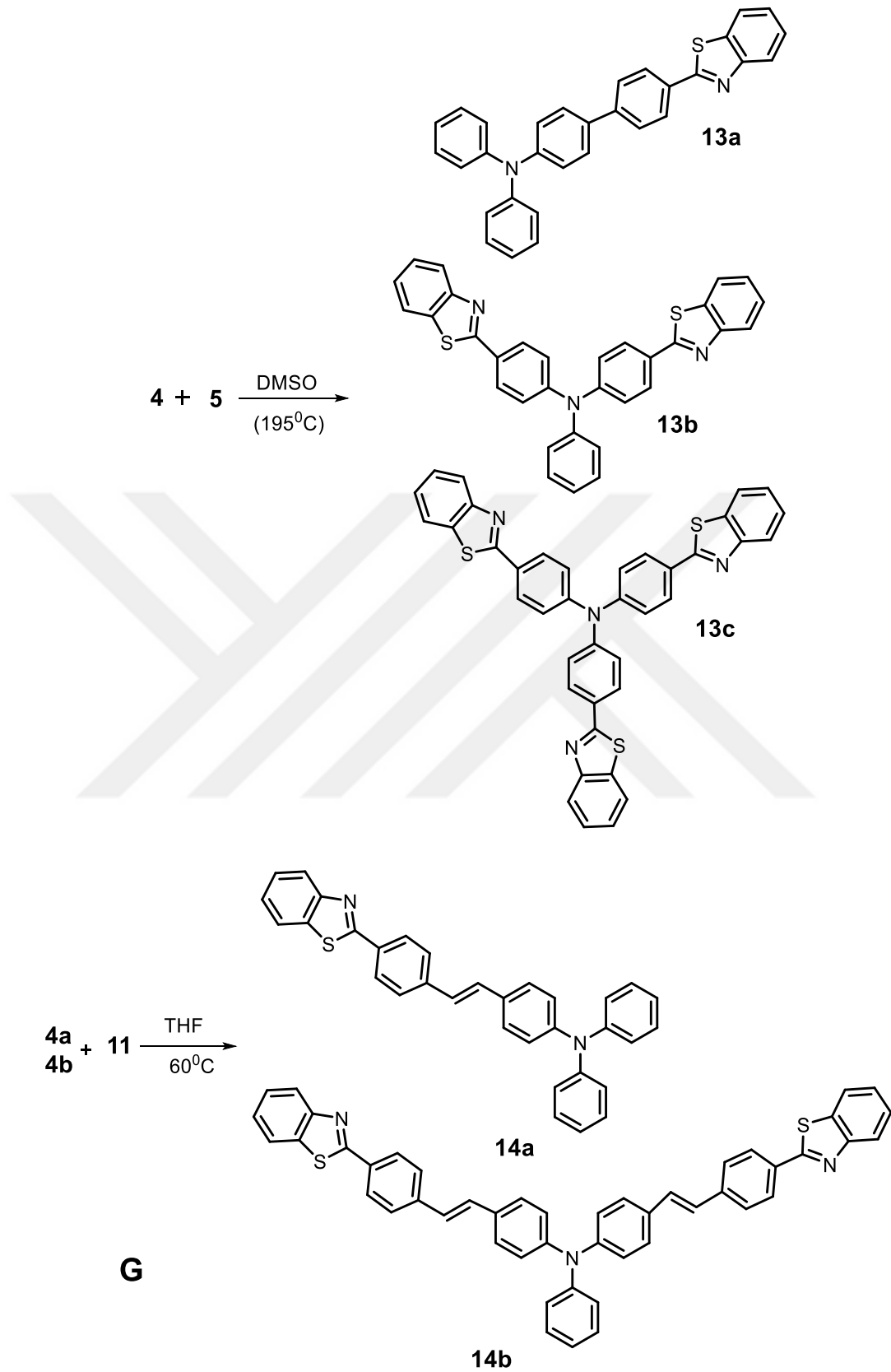
D-A etkilerini arttırmak için benzotiazol, benzoksazol ve benzotiyazol gibi heterohalkalı bileşikler kullanılmaktadır. Benzotiazol, çözeltilerde ve katı halde iki foton absorpsiyon kesiti ve güçlü lüminesans sergileyebilir [45].

Benzoksazol ve benzotiyazol gibi azot içeren heterosikller, boya duyarlı güneş pilleri (dye-sensitized solar cells) (DSSC)'lerin performansını artırmak için elektrolit çözeltisinde katkı maddesi olarak kullanılır.

TPA ve Benzotiyazol içeren bileşikler, yüksek sönme katsayıları, yüksek kuantum verimleri ve mükemmel termal kararlılık özellikleri gösterirler. Beklendiği gibi, optik özellikler, bu bileşiklerin floresans emisyon özelliklerinin büyük ölçüde moleküler yapıya bağlı olduğunu açıkça göstermektedir. D-A etkileşimi, molekül içindeki alternatif biçimde veya gizli bloklarda önemli bir rol oynar [48].

Şekil 2.11'de Hai-Ying Wang ve arkadaşları tarafından trifenilamin donör ve benzotiyazol akseptör birimleri kullanarak sentezlenen bazı bipolar Akseptör-Donör(A–D), Akseptör-Donör-Akseptör (A–D–A) ve Akseptör- π -Donör (A– π –D) tipi **12,13a, 13b, 13c, 14a, 14b** numaralı bileşikler sentezlenmiştir [49]. Elektron bakımından zengin kükürt ve azot atomuna sahip heterosiklik aromatik bir molekül olan benzotiyazol, kromoforlardaki D-A etkilerini artırmak için kullanılmıştır [41][49].

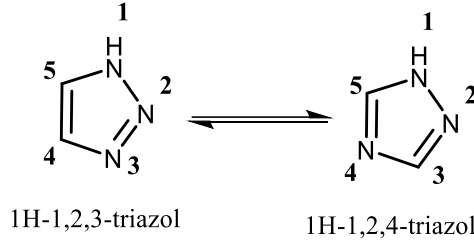




Şekil 2.11. 12, 13a-c, 14a-b için sentetik yöntemler

2.4. Triazoller

Triazol bileşiği daha fazla çeşitlerle farmakolojik aktivite sergileyen çok önemli bir heterosiklik bileşiktir. Bu halk üç azot atomu içeren beş üyeli, doymamış sistemdir. (Şekil 2.12)'de gösterilen 1,2,3-triazol ve 1,2,4-triazol olmak üzere iki izomerik formu vardır [50][51].



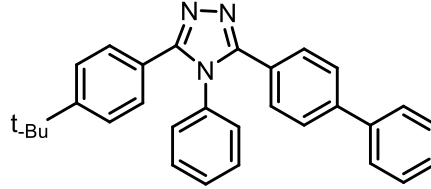
Şekil 2.12. Triazolun izomerleri

1,2,4-triazoller elektron eksikliği olan C ve N arasında çift bağı (C=N) hetero halka yapılarıdır. Triazol türevlerinden oluşan konjuge polimerler akseptör olarak organik ışık yayan diyotlarda ve boya duyarlı güneş pillerinde (DSSC) kullanılmıştır [52].

1,2,4-triazol sistemi, yüksek elektron eksikliği sayesinde elektron transferini oldukça iyi gerçekleştirir. Malzeme biliminde triazoller, geçiş metali komplekslerinde veya metal organik çerçevelerde (MOF'ler) yaygın olarak kullanılmaktadır. Son yıllarda, metal içermeyen 1,2,4-triazol türevleri de malzeme mühendisliği alanında ilginç ve kullanışlı özellikler sergilemiştir. Işık yayan cihazlarda küçük moleküller veya polimerler olarak bu türevlerin kullanımı, mükemmel özelliklere sahip OLED'lerin, PHOLED'lerin ve PLED'lerin üretilmesine yol açmıştır. Diğer taraftan triazoller sıvı kristal veya optik dalga kılavuzu davranışı göstermiştir veya proton değişim zarı yakıt hücresi (proton exchange membrane fuel cell) (PEMFC)'lerde, organik fotovoltaiik hücrelerde ve veri depolama cihazlarında uygulamalar bulmuştur [29].

OLED cihazlarını değerlendirmek için ana kriter, elektriği ışığa dönüştürme verimliliğidir. OLED'lerde en yüksek verimi elde etmek için dengeli bir yük taşıyıcı kombinasyonu gereklidir. Bununla birlikte, delik taşıma malzemelerinin (HTMs) delik hareketlilikleri genellikle elektron taşıma malzemelerinin (ETMs) elektron hareketliliklerinden yaklaşık 2-3 kat daha yüksektir. Bu olay, daha yüksek elektron hareketliliklerine sahip elektron taşıma malzemelerinin geliştirilmesine sebep olmaktadır.

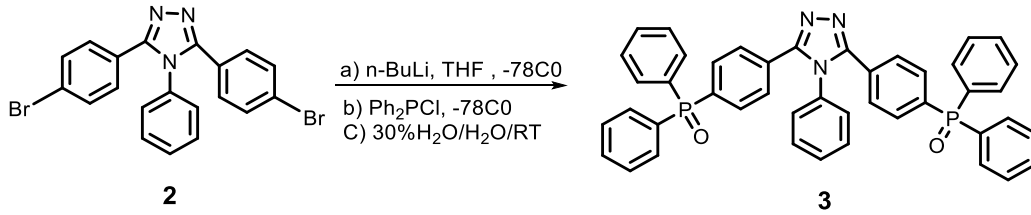
1993 yılında Okuyama ve arkadaşları, 3-([1,1'-bifenil]-4-il)-5-(4-(tert-butil)fenil)-4-fenil-4H-1,2,4-triazol'un (Şekil 2.13) elektron taşıma katmanı olarak kullanımını gösterdi ve çok katmanlı tip elektrominesans hücrelerde delik bloke edici malzemesi olduğunu bildirdi. Triazol grubunun bu özelliğinin elektron eksikliğinden kaynaklandığı bilinmektedir [29].



Şekil 2.13. 3-([1,1'-bifenil]-4-il)-5-(4-(tert-butil)fenil)-4-fenil-4H-1,2,4-triazol

Angel Díaz-Ortiz ve arkadaşları, (şekil 2.14)'deki bileşiğin 4 konumunda olan nitrojen üzerindeki fenil grubunun, kompleksler ve yük transfer kompleksleri gibi komplekslerin oluşumunu engelleyecek kadar hacimli olabileceğini hem de bu bileşiğin 1,2,4-triazolu delikleri bloke etmede 1,3,4-oksadiazol türevlerinden daha etkili olduğunu bulmuşlardır [53].

π -sistemlerinin uzunluğu arttıkça enerji boşluğu ve üçlü enerjisinin azaldığı iyi bilinmektedir. Bu anlamda, Li, Shen ve Zhou, yüksek üçlü enerjili bir elektron taşıma materyali, 3,5-bis [4- (difenilfosforil) fenil] - 4 fenil-4H-1,2, 4-triazol bileşiğini sentezlemiştir (Şekil 2.14) [54].



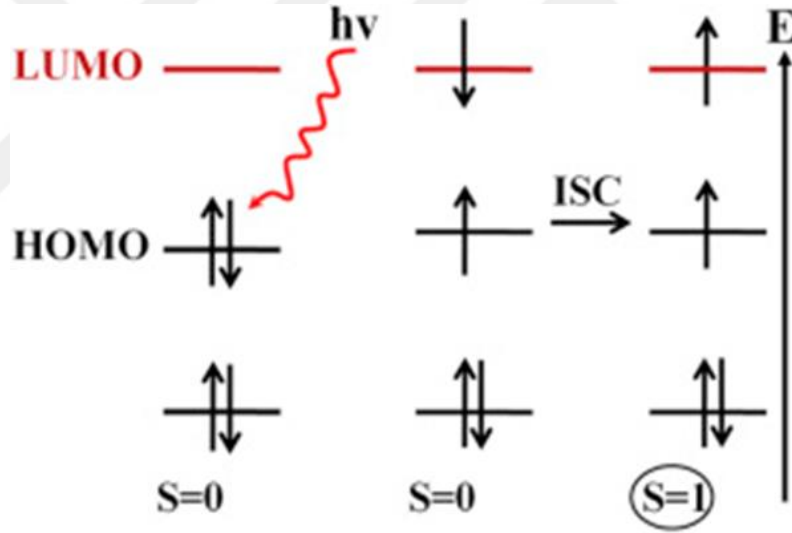
Şekil 2.14. 3,5-bis[4-(difenilfosforil)fenil]-4fenil-4H-1,2,4-triazol

1,2,4-triazol grubunun mavi ışık veren OLED'lerde ve PHOLED'lerde verimli bir elektron taşıma ve delik engelleme katmanı olarak kullanımı yaygındır. Yakın zamanda yapılan bir çalışmada, OLED cihazlarının üretiminde elektron taşıma katmanı olarak 1,2,4-triazol türevleri kullanılmıştır ve %25'e varan harici kuantum verimlilikleri elde edilmiştir [55].

Karbazol ve tri-fenilamin gibi elektronca zengin triaril aminler, yüksek delik kabiliyetleri nedeniyle delik taşıma malzemeleri olarak yaygın şekilde kullanılmaktadır.

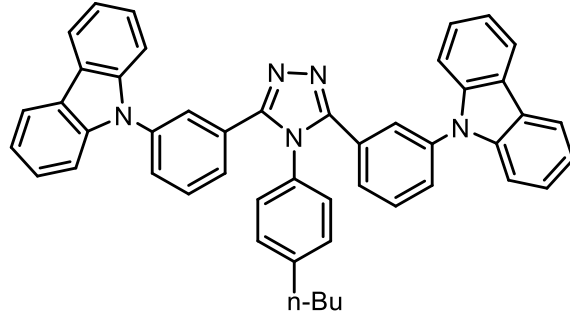
Örneğin, Kim ve Yoon, mavi ışık yayan elektrofosforesans cihazlar için 1,2,4-triazol ile 9-fenilkarbazol bazlı bir dizi konak materyali sentezlemiştir [38][39]. 3,5-bis- [3- (9-karbazolil)fenil]-4-(4-butilfenil)-4H-1,2,4-triazol elektron hareketliliği delik hareketliliğinde 10 kat daha fazladır. Bu davranış, 1,2,4-triazol parçasının elektron taşıma/bloke etme özelliklerinden kaynaklanmaktadır. Bu konak malzemeler, 2,8 ila 3,0 eV aralığında üçlü enerji seviyeleri sağlamaktadır.

Üçlü enerji seviyesi, Şekil 2.15'te gösterildiği gibi, farklı moleküler orbitallerdeki iki elektronun paralel dönüşlere sahip olduğu bir elektronik durumdur. Mavi POLED'lere bir ana madde tasarımı için üçlü enerji seviyeleri, HOMO-LUMO seviyeleri, şarj taşıma yeteneği ve termal kararlılığı gibi birkaç gereksinimlere dikkat edilmelidir. Mavi POLED'lerde yüksek verim elde etmek, hem mükemmel delik taşıma ve elektron taşıma yeteneklerine sahip olmanın yanı sıra, konak malzemelerin üçlü enerjilerinin genellikle en az 2.65 eV'den yüksek olması gerekir [37][56].



Şekil 2.15. Temel moleküler orbitalleri, uyarılmış singlet ($S=0$) ve triplet ($S=1$) durumları [91].

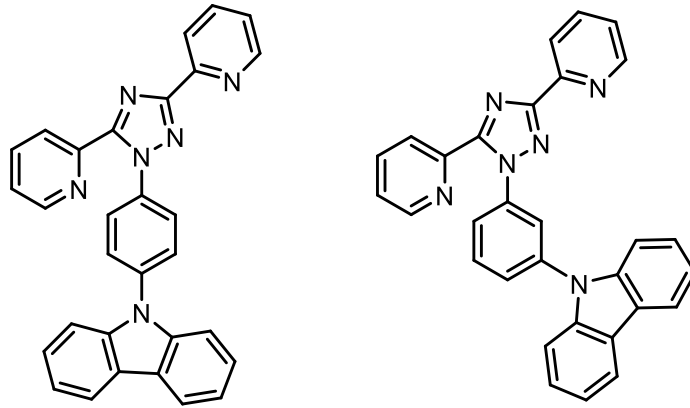
HOMO (en yüksek dolu moleküler orbital); ISC (sistemler arası geçiş); LUMO (en düşük boş moleküler orbital). 3,5-bis- [3- (9-karbazolil) fenil] -4- (4-butilfenil) -4H-1,2,4-triazol bileşiğinin çeşitli bifenil analoglarının sentezi 2012'de rapor edilmiştir [31]. Bu yeni malzemeler geniş bir enerji aralığına (3.29-3.52 eV), yüksek üçlü enerjiye (2.56-2.76 eV), yüksek termal stabiliteye (426-454 °C), yüksek camsı geçiş sıcaklığına (116-156 °C) sahiptir ve mükemmel radar film yapım özelliklerini gösterir [56][57][58][59].



Şekil 2.16. 3,5-Bis-[3-(9-karbazoil)fenil]-4-(4-bütilfenil)-4H-1,2,4-triazol

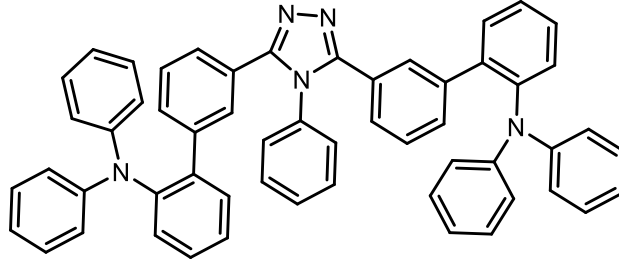
Hong ve Chi, fosforlu OLED'lerin üretimi için fenilkarbazol ve 3,5-bis (2-piridil) -1,2, 4-triazol içeren iki bipolar konak materyalin hazırlandığını bildirmiştir [92]. Meta izomer ile yapılan cihazlar, mavi için %8,8, yeşil için 16,7, sarı için 17,5 ve kırmızı yayan OLED'ler için 16.7 maksimum harici kuantum verimliliğine sahiptir.

Yukarıda bahsedildiği gibi, tasarlanan moleküllere delik taşıyan trifenilamin biriminin ve elektron taşıyan triazol parçasının dahil edilmesi, iki kutuplu yük taşıma özellikleri sağlayabilir. Böylece, triazol ve trifenilamin sistemleri arasında çeşitli bağlantılara sahip bir dizi yeni 1,2,4-triazol çekirdekli trifenilamin türevleri Suzuki çapraz kenetlenme (Suzuki cross-coupling) reaksiyonları ile sentezlenmiştir [42]. Termal ve morfolojik stabilite (sırasıyla 480-531 °C ve 106-155 °C), sert triazol sistemi ile önemli ölçüde tasarlanmıştır. Meta ve orto bağlı bileşikler, para-bağlı izomerlerinden daha yüksek üçlü enerji ve daha iyi elektrofosforesan performans sergilediği görülmüştür. Bu durum, araştırmacılar tarafından konak ve delik taşıma katmanı arasındaki uyumlu enerji seviyelerine, konağın yüksek üçlü enerjisine ve HOMO-LUMO enerji seviyelerinin tam uzamsal ayrımına atfedilmiştir (Şekil 2.17) [92].



Şekil 2.17. Bazı 1,2,4-triazol türevlerinin yapıları

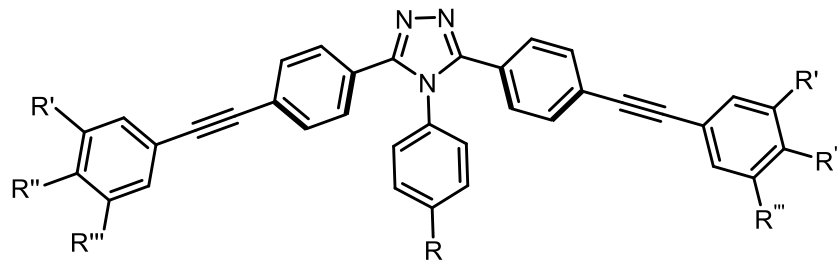
Optimize edilmiş yapı ile üretilen cihaz, en iyi elektrolüminesans (EL) performansını göstermiştir (Şekil 2.18).



Şekil 2.18. 3,3'''-(4-fenil-4H-1,2,4-triazol-3,5-di-il)bis(N,N-difenil-[1,1'-bifenil]-2-amin)

π -konjuge sistemlerin, izole konjuge bağ içeren moleküllere kıyasla gelişmiş optik ve/veya elektronik özellikler sergileyebilen değerli, organize supramoleküler yapılar sağladığı bilinmektedir. 1D supramoleküler yapıların umut verici bir uygulaması, gelen ışığın bu yapılar üzerinde verimli bir şekilde yayılmasını ve işlenmesini içeren optik dalga kılavuzluğundan oluşur [60]. Optik dalda kılavuzu ışık sinyalleri veya ışık enerjisinin yönlendirilmiş iletimini, ve fotonik aygıtların aktif bölgelerindeki ışık dalgalarının yerelleştirmesini (lokalizasyonu) sağlayan dalga kılavuzudur [61].

Prieto ve Sánchez, 1,2,4 triazol çekirdeğini kullanarak, 4-aril-3,5-bis(ariletinil) aril-4H-1,2,4-triazol sentezini (Şekil 2.20) ve optik dalga kılavuzları olarak hareket eden ve fotolüminesans yayan şerit benzeri kümeler halinde kendi kendine birleştiklerini bildirmiştir [62][63].



Şekil 2.19. 4-aril-3,5-bis(ariletinil)aril-4H-1,2,4-triazollerin yapısı

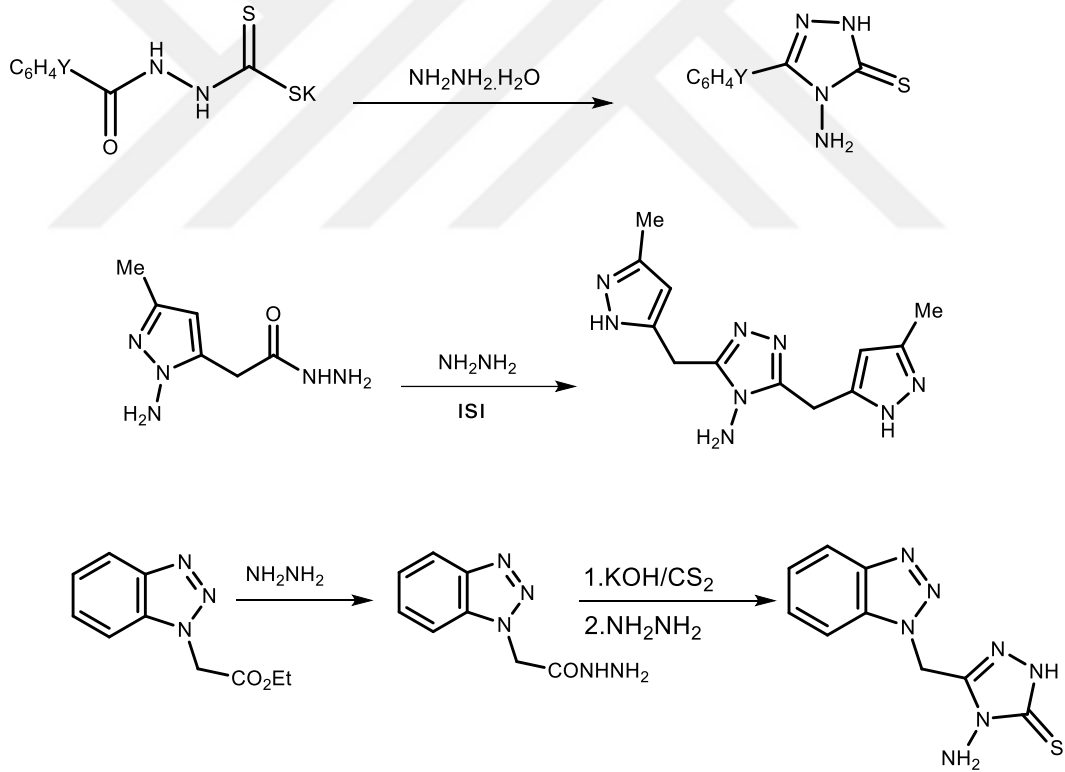
2.4.1. H-1,2,4-triazol bileşiklerinin sentezi

Aşağıda 1,2,4-triazol halkasını oluşturmak için yaygın olarak kullanılan, literatürde daha önce rapor edilmiş dört yöntem verilmiştir:

1. Hidrazin türevlerini kullanan yöntemler
2. Nitril imin ve triazin ile 1,2,4-triazollerin sentezi
3. Diğer heterosiklik sistemlerin transformasyonu ile triazollerin sentezi
4. 1,2,4-triazollerin mikrodalga ışıması altında sentezi

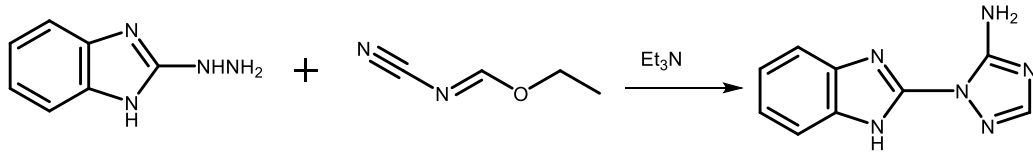
2.4.1.1. Hidrazin türevlerini kullanan yöntemler

En yaygın hidrazin türevlerinin kullanıldığı yöntemlerdir. Bu yöntemde hidrazin veya sübsitüe hidrazinler uygun elektrofillerle reaksiyona sokulmaktadır (Şekil 2.20) [62][35].



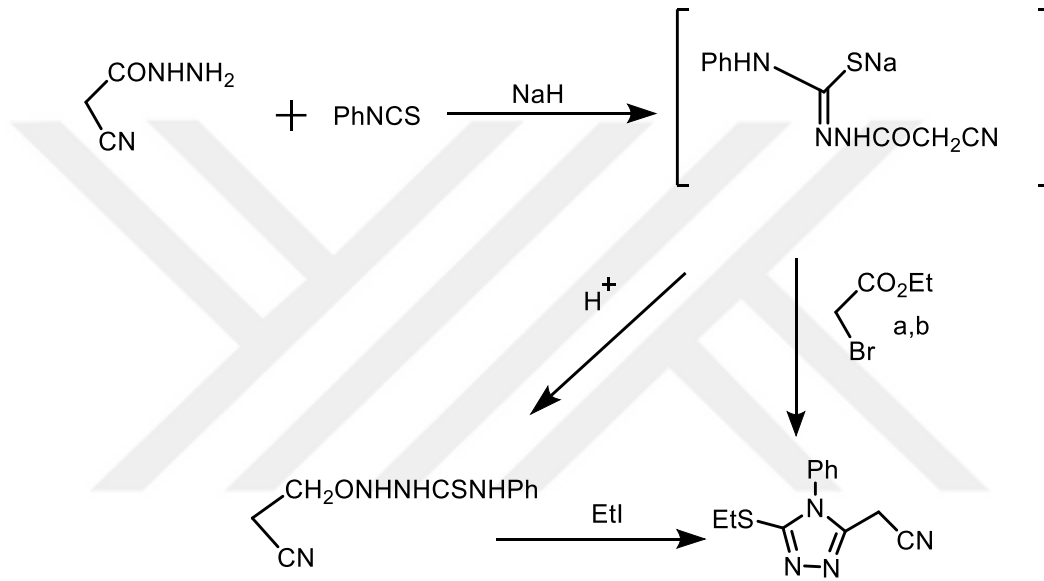
Şekil 2.20. Hidrazin kullanılarak farklı triazol türevlerinin eldesi

Bu tür reaksiyonun bir başka örneği, karşılık gelen 5-aminotriazol'ü vermek üzere etil N-siyanoformimidat($\text{N}\equiv\text{N}=\text{O}-\text{CH}_2\text{CH}_3$), trietilamin içindeki hidrazin türevi ile etkileşimidir (Şekil 2.21).



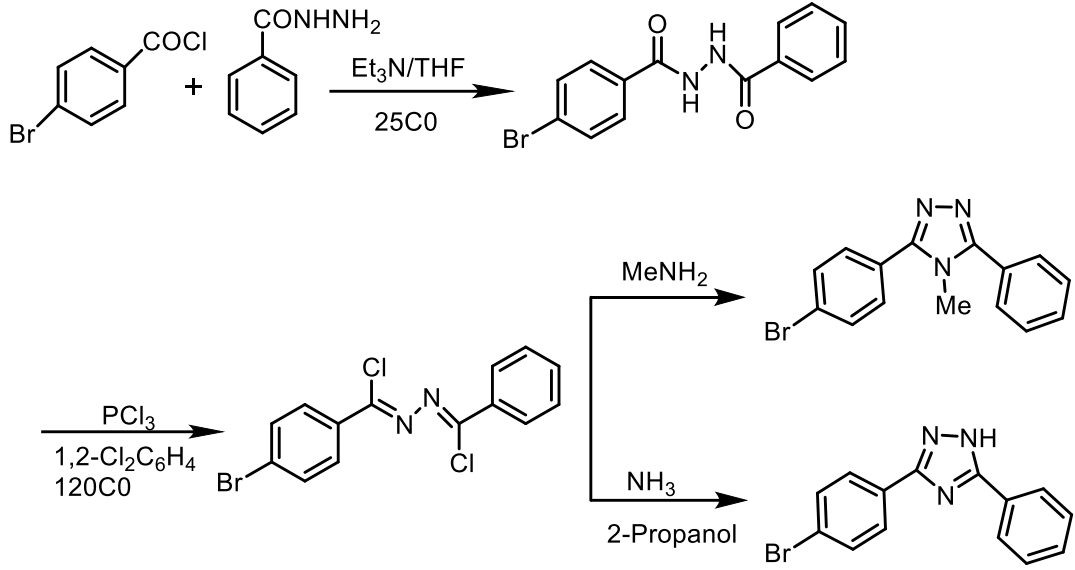
Şekil 2.21. 2-(1H-benzo[d]imidazol-2-il)-2,4-dihidro-3H-1,2,4-triazol-3-imin molekülünün elde etme reaksiyonu

3-Alkiltiyo-1,2,4-triazol türevleri fenil izotiyosiyanatın 2-siyanoasetohidrazid ile ara madde üzerinden halkalaşma tepkimesiyle sentezlenmektedir (Şekil 2.22) [59][65].



Şekil 2.22. 3-Alkiltiyo-1,2,4-triazol türevlerinin sentez yöntemi

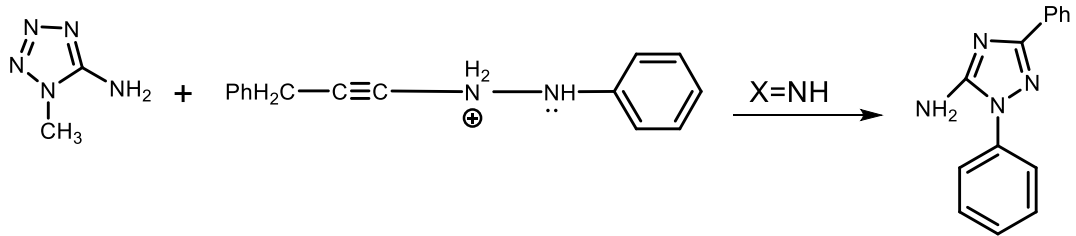
Colanceska-Ragenovic ve arkadaşları yakın zamanda tiyosemikarbazidlerin oksidatif halkalaşma reaksiyonu ile bir dizi 4-süstitüe 5-aril 1,2,4-triazol sentezlemiştir [65][58]. Carlsen ve arkadaşları Şekil 6.4'te ana hatları verilen değiştirilmiş bir prosedürü kullanarak daha önce tarif edilen simetrik olmayan bis (para-alkilaminobenziliden) Hidrazin çeşitli triazol bileşikleri hazırlamıştır [56].



Şekil 2.23. Simetrik olmayan bazı 1,2,4-triazol türevlerinin sentetik yöntemi

2.4.1.2. Nitril imin ve triazin ile 1,2,4-triazollerin sentezi

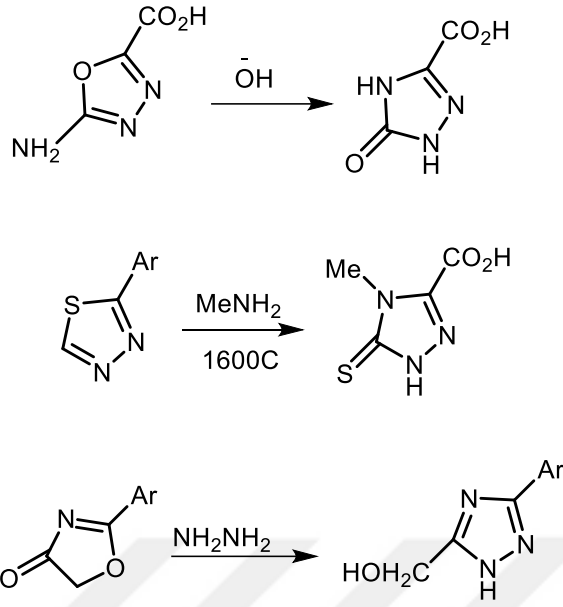
1,2,4-triazollerin elde etmek için kullanılan bir diğer yöntem ise nitril imin ve triazinlerin kullanıldığı reaksiyonlardır. 1,3-Dipolar siklo katılma reaksiyonu triazollerin sentezi için yaygın olarak kullanılmıştır. Bu yöntemin bir örneği, 1-metil-1H-tetrazol-5-amin ve 2-fenil-1- (3-fenilprop-1-in-1-il) hidrazin-1-yum ile reaksiyona girerek 1,3-difenil-1H-1,2,4-triazol-5-amin bileşiğini vermesidir. (Şekil 2.24) [56].



Şekil 2.24. Triazollerin 1,3-Dipolar siklo katılma reaksiyonu sonucu eldesi

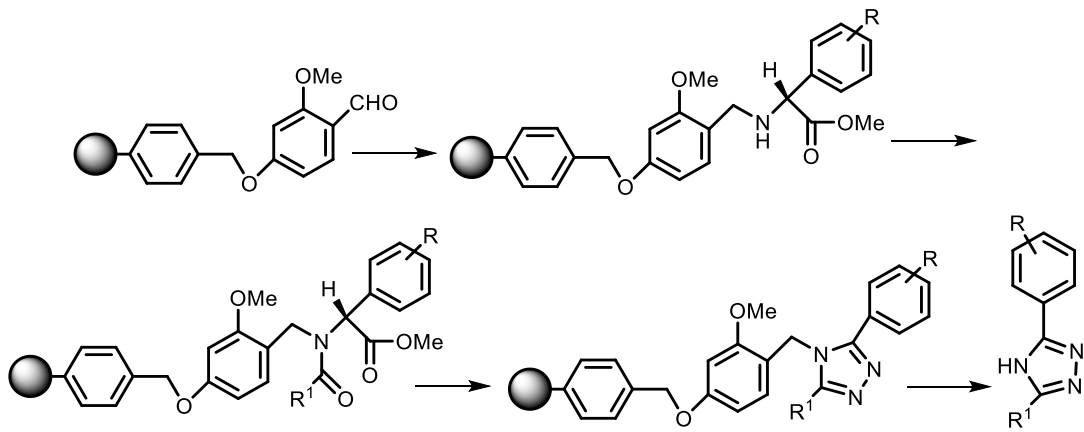
2.4.1.3. Diğer heterosiklik sistemlerin transformasyonu ile triazollerin sentezi

Genellikle beş üyeli halkalı bir sistemin bir triazol halkasına dönüştürülmesi, başka bir azot sübstitüenti içeren bir grubun yardımıyla gerçekleşir. Bu tür reaksiyonlar triazol grubu içermeyen diğer hetroatomlu heterosiklik bileşikler için de geçerli olabilir. Bu reaksiyonlar heterosiklik halkanın nükleofilik atakla açılması, ardından halka kapanması ve diğer atomun kaybını içerir. 1984'te Polya [65] tarafından incelendikten sonra bu alanda çok az yeni malzeme ortaya çıkmış ve sadece birkaç tipik örneğe rastlanmaktadır (Şekil 2.25) [41][65].



Şekil 2.25. Triazol olmayan bir halka sisteminin bir triazole dönüştürülmesi

Süstitüe 1,2,4-triazollerin katı faz sentezi hakkında şimdiye kadar sadece birkaç yayınlanmış çalışma vardır. Katritzky, bir asil hidrazit ile süstitüe amidinler arasındaki kondenzasyon reaksiyonuna dayalı katı desteği üzerinde tri-süstitüeli 1,2,4-triazollerin sentezini açıklamıştır. Saflığı triazole süstitüe gruplara bağlı olarak değişen ürünlerin verimleri %37-90 arasında değişmektedir [65] gösterildiği gibi, 1,3-dipolar siklokatılma reaksiyonunda kilit ara maddeler olarak hareketsizleştirilmiş mesoiyonik 1,3-oksazolyum 5-oksitler (münchnones) kullanılır.

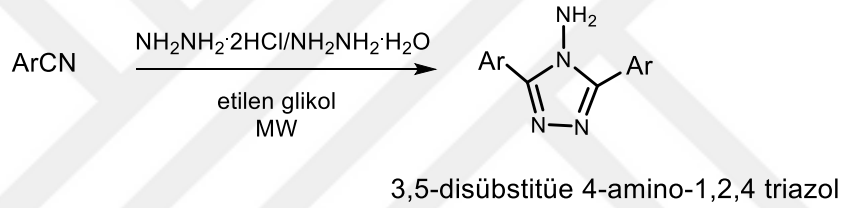


Şekil 2.26. Triazol olmayan bir halka sisteminin bir triazole dönüştürülmesi

2.4.1.4. 1,2,4-Triazollerin mikrodalga ısıması altında sentezi

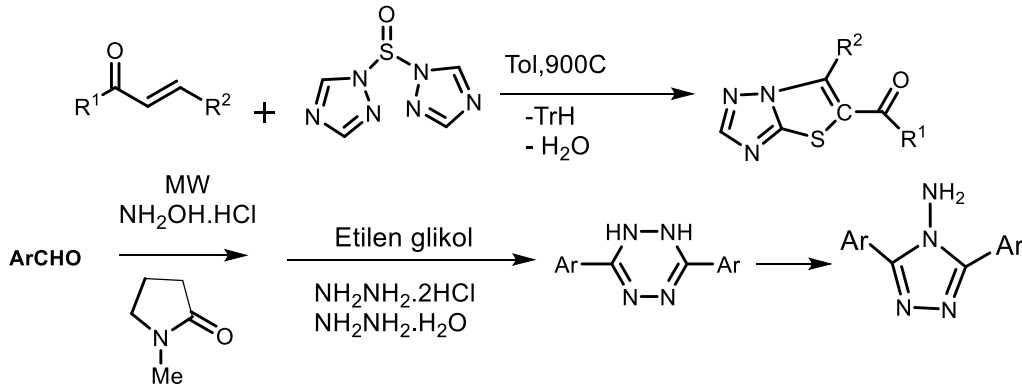
Mikrodalga ısıma, birçok yararlı organik bileşiği, iyi verimde ve yüksek seçicilik ile hızlı bir şekilde sentezlemek için yaygın olarak kullanılan bir yöntemdir [68][69][70][71].

Kappe ve arkadaşları [61][72] bu yöntemi organik moleküllerinin sentezi için kapsamlı bir şekilde kullanmışlardır; Bu arada Molteni ve Ellis [73] mikrodalga destekli alanda 1994'ten beri yürütülen çalışmaları gözden geçirip yayınlamışlardır. Mikrodalga ısımanın heterosiklik bileşiklerin sentezi ve bir heteroatomun heterosiklik bir çekirdeğe yol açan bağ oluşturma sürecine doğrudan etkisi olduğu görülmüştür. Mikrodalga ısıma yöntemi uygulanarak, yakın zamanda birkaç 1,2,4-triazol türevi rapor edilmiştir. Bentiss ve arkadaşları [62] Mikrodalga ısıması altında etilen glikol ortamında, varlığında bir aromatik nitril ile $\text{NH}_2\text{NH}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ / $\text{NH}_2\text{NH}_2 \cdot 2\text{HCl}$ reaksiyonundan 3,5-disüstitüe 4-amino-1,2,4 triazol sentezlemişlerdir (Şekil 2.27).

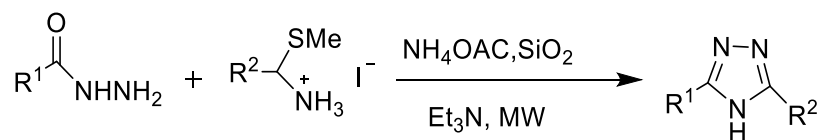


Şekil 2.27. 3,5-disüstitüe 4-amino-1,2,4 triazol sentezi

Kalkonların bis (1,2,4 triazolil) sülfoksit [74] ile reaksiyonundan tiazolo[3,2-b]-1,2, 4-triazolün tek aşamalı yeni bir sentez yöntemi rapor edilmiştir. Başka bir çalışmada ise kalkonların simetrik 3-süstitüe 4-amino-1,2,4-triazollerini oluşturmak üzere mikrodalga ısıması altında iki aşamalı reaksiyonlarla hızlı bir şekilde hazırlandığı tespit edilmiştir (Şekil 2.28) [75].

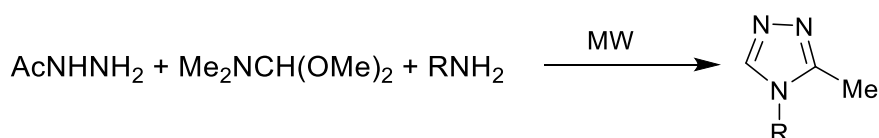


Şekil 2.28. 3,5-disüstitüe 4-amino-1,2,4 triazolun Mikrodalga Isıması Altında Sentez yöntemi



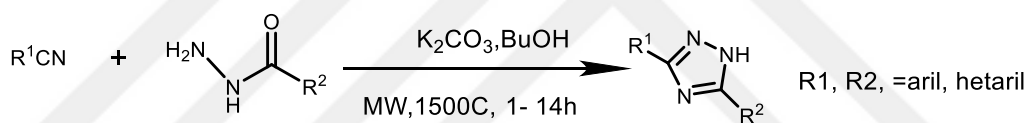
Şekil 2.29. 1,2,4-triazollerin amonyum asetat ve silika jel yüzeyi üzerinde yoğunlaştırarak elde etme yöntemi

Birincil aminler kullanılarak 1,2,4-triazollerin mikrodalga destekli verimli bir tek kap ve üç bileşenli sentezi gerçekleştirilmiştir (Şekil 2.30) [36].



Şekil 2.30. Sübstitüe 1,2,4-triazollerin mikrodalga destekli elde edilmesi

Jung ve arkadaşları tarafından yakın zamanda yayınlanan çalışmada ise [63] mikrodalga ışıması altında nitril ve hidrazid ile bazik ortamda 3,5-sübstitüe 1,2,4-triazolün tek aşamalı, katalize edilmiş bir sentezi rapor edilmiştir (Şekil 2.31).



Şekil 2.31. 3,5-sübstitüe 1,2,4-triazolün tek aşamalı ve katalizör varlığında sentezi

2.5. Bazı Önemli Hesaplama Yöntemleri

Bu tez çalışması kapsamında M1-M6 moleküllerinin hesaplamaları, bir kuantum mekanik yöntem olan Yoğunluk Fonksiyon Teorisi (YFT, Density Functional Theory-DFT) Yöntemi kullanılarak yürütülmüştür. Bu kısımda bilgisayar destekli kimyasal hesaplamalarla ilgili verilecek kuramsal temeller daha çok bu yöntemi ele alacaktır.

2.5.1. Moleküler özelliklerin hesaplanması

Kuantum mekaniğine (QM), dayalı birçok yöntem moleküler mekaniği (MM) ve kullanılan hibrit yaklaşımları (QM / M) bileşiklerin moleküler özelliklerini hesaplamak için kullanır. MM yöntemlerinde sadece çekirdek yapısı ile ilgilenildiğinden elektronların katkıları ihmal edilir. QM Yöntemi, molekülün hem çekirdek hem de elektronik yapısı ile ilgilenir. Bu nedenle, QM yöntemlerinin doğruluğunun MM yöntemlerinden daha fazla olduğu düşünülmektedir. QM yöntemler esas olarak Schrödinger denkleminin çözümüne dayanmaktadır. Bu durum, QM yöntemlerin uygulanabilirliğini birkaç yüz atomla sınırlamaktadır.

QM yöntemlerinden Ab initio, ilk baştan başlamak anlamına gelir. Teorik prensipler üzerine kurulu ve deneysel hiçbir verinin kullanılmadığı bu yöntemlerin doğruluğu molekülün küçülmesiyle artar. Ab initio kullanılan hesaplamalar için harcanan zaman fazladır. Bu sebeple hesaplama maliyetini düşürmek araştırmacıların odak noktası olmuştur.

Yarı deneysel (semi-empirik) yöntemler Ab initio yöntemlere bir alternatif olmuşlardır. Yarı deneysel yöntemler yaklaşık olarak MM yöntemleri kadar hızlıdır. Yarı deneysel yöntemler kullanışlı mevcut deneysel veri ile doğru hesaplama verileri kullanılarak ab initio yöntemleri elde etmek için parametreleştirilmiştir. QM yöntemleriyle bağ oluşumu/ ayrışmasını içeren reaksiyonlar veya binlerce atom içeren enzimlerde ve proteinlerde elektronik uyarımlar araştırılmaz çünkü QM yöntemlerde elektronların katkısı esas alındığından sağlıklı karışık sonuçlar elde edilir. Bu tür sistemler için hibrit QM/MM yöntemleri geliştirilmiştir. QM/MM yöntemleri çok atomlu sistemlerde reaksiyonun gerçekleştiği bölgeye QM, büyük moleküler sistemin geri kalan kısmına MM yöntemi uygular. Bu şekilde reaksiyonlar, özellikle biyolojik araştırmalarda kendi doğal protein / enzim ortamında hesaplama uygulanarak araştırılabilir [74][75].

Bilgisayar destekli kimya hesaplamalarında dikkat edilmesi gereken en önemli işlemlerden biri moleküler geometrinin dengesidir. Tüm hesaplamalar, önceden optimize edilmiş bir moleküler geometri üzerinde gerçekleştirilmelidir. Güvenilir bir potansiyel yüzey haritası elde etmek ve böylelikle istikrarlı sabit noktaları bulmak için kullanılan birkaç hesaplamalı algoritma mevcuttur. Enerji ve analitik kullananlar için ilk türevler önemli ölçüde daha verimlidir. Enerji türevleri diğer moleküler özelliklerin belirlenmesi için de yararlıdır. Üçüncü harmonik yaklaşımı dahilinde, dördüncü ve daha yüksek türevler titreşim frekanslarına bazı düzeltmeler verir. Enerji türevlerinin sadece nükleer koordinatlarla sınırlandırılmasına gerek yoktur. Bazen enerji türevlerini elektrik alana göre dikkate almakta fayda vardır [74][75].

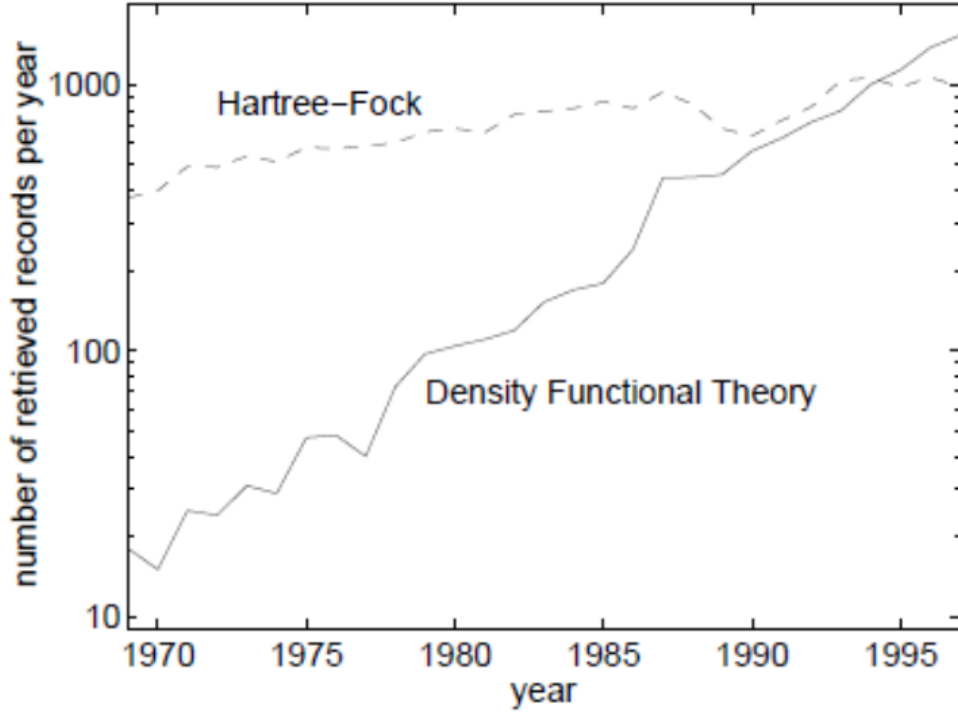
2.5.2. Yoğunluk fonksiyonel teorisi

Moleküler elektronik yapı, bir molekülün fiziksel özelliklerini doğrudan etkilemektedir. Maddelerin elektronik yapılarını araştırmak için çok parçacıklı sistemler için Schrödinger denklemi çözümüne gidilebilir ancak birtakım yaklaşımlar olmadan çözüm olanaksızdır. Schrödinger denkleminin yaklaşık olarak çözülmesini sağlayan yöntemler arasında DFT de yer almaktadır. DFT çok elektronlu sistemlerde temel hal elektronik yapısı hakkında detaylı bilgi verir. Burada temel değer çok parçacıklı fonksiyon yerine uzayda birim hacim başına düşen elektron yoğunluğudur. DFT için ilk çalışmalar Thomas ve Fermi modeli ile başlamıştır. Hohenberg-Kohn ve Kohn-Sham [79][77] teoremleri ile geliştirilmiştir.

DFT yöntemi hem deneysel çalışmaları desteklemek hem de deneysel çalışma öncesinde sonuçları öngörmek için kullanılan bir yöntemdir. Sentezi gerçekleştirilmemiş bir bileşiğin birçok özelliği hesaplanarak yapılacak çalışmalara ışık tutulabilir.

DFT yöntemi ab-initio ve SE yöntemler gibi Schrödinger denklemine dayanır ancak 1960'larda Kohn, Hohenberg ve Sham Tarafından verilen formülasyonda elektron yoğunluğu $\rho(r)$ birçok elektron dalga fonksiyonunun $\Psi(R,r)$ yerini alır.

DFT hesaplamalarının düşük maliyeti ve makul doğruluğu son yıllarda literatürdeki birçok çalışmada kullanılmasına sebep olmuştur. Moleküllerin bağlama veya atomizasyon enerjileri olarak çeşitli özellikleri tahmin etmek için, moleküllerin boyutları, katıların kristal yapıları, çeşitli işlemlerin önündeki enerji bariyerleri vb. özellikler DFT yardımı ile incelenmektedir. Bu yöntem, 1980'lerin ortalarında iyi geliştirilmiş Hartree-Fock gibi dalga fonksiyonu tekniklerine çekici bir alternatif haline geldi. Özellikle konjüge moleküllerin hesaplanan fiziksel ve kimyasal özellikleri deneysel verilerle karşılaştırıldığında DFT yönteminin iyi sonuç verdiği bilinmektedir. Son otuz yılda giderek artan hale gelen Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT) problemlerin çözümü için tercih edilen yöntem yöntemdir (Şekil 2.23). Bu yöntemin çifte avantajı, birçok problemi yeterince yüksek bir doğrulukla girdirebilmenin yanı sıra hesaplama açısından basit (Hartree şemasından bile daha basit) olmasıdır [79][77].



Şekil 2.32. DFT ve Hartree-Fock büyümesinin paralel bir şekilde karşılaştırılması

Şekil 2.32’deki grafik INSPEC veri tabanlarından “yoğunluk”, “fonksiyonel” ve “teori” anahtar kelimeleri aranarak alınan kayıt sayısı ve DFT’nin artan kullanımının bir göstergesidir. Bu çalışmada INSPEC veri tabanlarının genel büyümesine paralel olan (herhangi bir yıl için, kayıtların yaklaşık %0,3’ü Hartree–Fock anahtar sözcüklerine sahip) benzer bir “Hartree” ve “Fock” anahtar sözcükleri aramasıyla karşılaştırılmıştır [76][77][79].

2.5.2.1. Zamana bağlı olan yoğunluk fonksiyonel teorisi

Zamana bağlı yoğunluk-fonksiyonel teori (TD-DFT), elektrik veya manyetik alan gibi zamana bağlı potansiyellerin varlığında çok kütleli sistemlerinin özelliklerini ve dinamiklerini araştırmak için fizik ve kimyada kullanılan bir kuantum mekanik teorisidir. Zamana bağlı yoğunluk-fonksiyonel teorisi (TDDFT), temel hal yoğunluk-fonksiyonel teorisinin (DFT) temel fikirlerini uyarılma veya daha genel zamana bağlı olayların iyileştirilmesine kadar genişletir. TDDFT, zamana bağlı kuantum mekaniğinin alternatif bir formülasyonu olarak görülebilir, ancak dalga fonksiyonlarına ve çok kütleli Schrödinger denkleminin dayanan normal yaklaşımın aksine, temel değişkeni tek kütle elektron yoğunluğudur, $n(r, t)$.

TDDFT, spektroskopik deneylerde yer alan elektronik uyarıları incelemeye izin verir ve temel hal yoğunluk fonksiyonel teorisi ile karşılaştırılabilir bir hesaplama ortaya koyar [80]. Bu tez kapsamında tasarlanan ve yarı iletken olma potansiyeli gösterdiği düşünülen M1-M5 moleküllerine TDDFT yöntemi uygulanmıştır. Bu sistemlerde absorpsiyon ve band enerji aralıklarının nasıl değişim gösterdikleri tartışılmıştır.

2.5.3. Temel setler

Atomik yörüngelerin matematiksel olarak ifade edilmesine temel setler denir. Moleküler yapı hesaplamalarının başarısı kullanılan yöntem ve doğru setin seçimine bağlıdır. Bir s-tipi kabuk tek, p-tipi kabuk üç, sp-tipi kabuk ise bir tane s ve üç tane p-tipi olmak üzere dört tane baz fonksiyonu içerir. Tek bir Gaussian-tip fonksiyondan oluşan baz fonksiyonuna ise kısaltılmamış Gaussian-tipi fonksiyon denir. Büyük baz setleri büyük ve daha çok baz fonksiyonu içerirler. Dolayısıyla, bu baz setleri daha fazla hesaplama kaynakları gerektirir ve doğru moleküler dalga fonksiyonu için daha iyi bir yaklaşım sağlarlar. Moleküler orbitaller atomik orbitallerin doğrusal bileşiminden elde edilir. Atom ve küçük yapıdaki moleküler sistem için en yaygın kullanılan temel setler Slater tipi orbitaller (STO) ve Gaussian tipi orbitallerdir (GTO) dir. Temel fonksiyonların lineer birleşimi yaklaşımında bulunulmuş MO'lar geleneksel AO'lar olmak zorunda değildir.

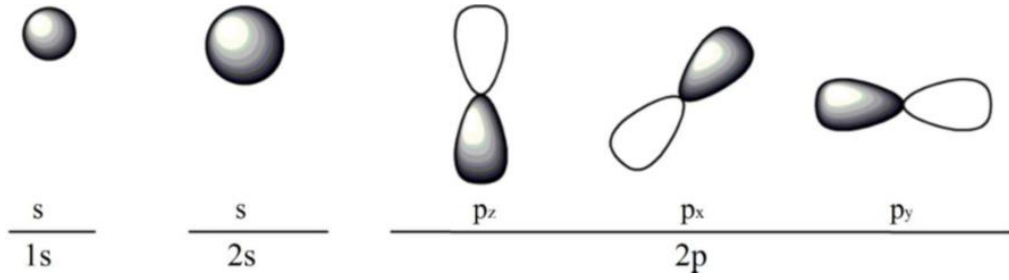
Kapsama tabanlı kaba kümelerde kavramların minimal ve maksimal tanımları iki önemli kavramdır. Kapsama tabanlı kaba kümelerdeki birçok konu (örneğin, indirgemeler, yaklaşımlar, vb.) bunlarla ilgilidir. Geniş ölçekli bir yaklaşım uzayında minimum ve maksimum açıklamaları hesaplamak için küme temsilleri kullanıldığında zaman alıcı ve hataya açık olduğu iyi bilinmektedir. Bu sorunu çözmek için, hesaplamaların bilgisayarlar tarafından kolaylıkla uygulanabileceği matris tabanlı yöntemler önerilmiştir [81][82][7].

2.5.3.1. Minimal temel setler

Gaussian tipi orbitaller (GTO)'ların lineer kombinasyonu kullanılarak elde edilen en basit fonksiyonlar minimal temel setleridir ve STO-nG ile gösterilirler. Burada n, doğrusal bileşimde kullanılacak olan GTO sayısını temsil eder. Bu temel setleri her bir atom için ihtiyaç duyulan minimum sayıda temel fonksiyonu içerir. Minimal temel setleri, sabit hacimde atomik orbitaller kullanırlar. Örneğin, bu temel seti hidrojen atomu için bir, karbon atomu için beş fonksiyon kullanır (Şekil 2.33) [83].

H: 1s

C: 1s,2s,2p_x,2p_y,2p_z



Şekil 2.33. Metan molekülün minimal temel setleri

Minimal temel setler, orbitallerin doğru temsil etmek ve kimyasal bağlar oluşturmak, çekirdekler arasındaki elektron dağılımını tanımlamak için yeterince esnek değildir [82].

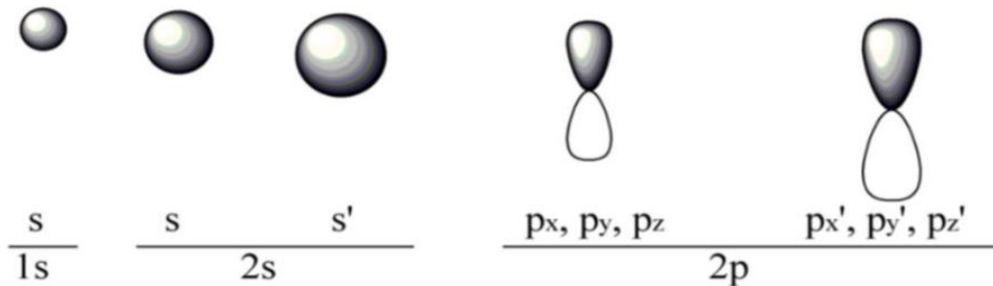
2.5.3.2. Ayrılmış-değerlik temel setler

Değerlik temel setleri periyodik tablonun ilk sıra elemanlarının Gaussian 3-21SP ve 4-22SP programı da içerir. Daraltılmış bölünmüş değerlik tipi Gaussian temel fonksiyonları, kuantum kimyasında Ditchfield, Hehre ve Pople tarafından tanıtılmıştır [82].

Atomun her bir değerlik orbitalini birden fazla baz fonksiyonuyla tanımlayan temel setlere bölünmüş değerlik temel setleri denir. Bu sayede, daha geniş bir temel set oluşturulmuş olur. Bölünmüş değerlik temel seti olan 3-21G, Şekil 2.35'te verildiği gibi karbon atomu için dokuz fonksiyon kullanmaktadır.

Her bir değerlik orbitali 2 temel fonksiyonla tanımlanırsa değerlik 2'li bölünmüş temel set, 3 temel fonksiyonla tanımlanırsa değerlik 3'lü bölünmüş temel set olarak isimlendirilir. Yaygın olarak kullanılan bölünmüş değerlik temel setlerinden bazıları 3-21G, 6-31G, 6-311G olarak sıralanabilir [7][83].

Ayrılmış-değerlik temel setlerinde orbital boyutları değişebilirken şekilleri sabit kalır. 3-21G, 4-31G, 6-21G, 6-31G ve 6-311G bu tip temel setlere birer örnektir [7].



C: 1s,2s,2s',2px,2py,2pz,2px',2py',2pz'

Şekil 2.34. Karbon atomunda bölünmüş değerlik temel setlerinin etkisi

2.5.3.3. Polarizasyon temel setler

Polarize fonksiyonlar yüksek açısal momentum kuantum sayısına sahip atom orbitallerini tanımlar ve çekirdekten uzakta bulunan elektronların düzenli olmayan yer değiştirmeleri için kullanılır. Modern hesaplamalarda birden fazla polarizasyon fonksiyonu seti kullanma eğilimini kabul ederek, Pople temel setleri için standart isimlendirme artık tipik olarak yıldız isimlendirmesi yerine bu fonksiyonların açık bir listesini içerir.

Polarize temel setleri karbon atomlarına d, geçiş metallerine ise f-tipi fonksiyonlar eklemektedir. Bunun yanında, bazı polarize baz setleri hidrojen atomlarına da p-tipi fonksiyon eklerler. Karbon atomuna d-tipi fonksiyon eklenmesinin nedeni; orbitallerin hibritleşmesidir. Hidrojen atomunun köprü atom olduğu sistemlerde iyi sonuçlar verir. Bu baz seti ağır atomlara d, hidrojen atomlarına ise p-tipi fonksiyonlar ekler. Mesela, karbon atomu için sp³ hibrit orbitalleri 2s ve 2p orbitalleri ile oluşur.

6-31G(d) baz seti polarize bir baz seti ve her ağır atoma eklenen altı d-tipi basit gaussian fonksiyonları ile incelenen 6-31G baz setini ifade eder. Bu baz seti karbon atomu fonksiyon (1s, 2s, 3s, 2p, 3p, 3d) olduğu taktirde 15 fonksiyon içerir. 6-31G* temel seti orta büyüklükteki sistemlerde yaygın olarak kullanılır. 6-31G** temel seti ya da 6-31G(d,p) şeklinde ifade edilen yaygın şekilde kullanılan diğer bir polarize baz setidir [79][82].

2.5.3.4. Yayılmış temel setler

Yayılmış temel setler s ve p-tipi fonksiyonların daha geniş ve büyük olan versiyonlarıdır. Anyonların en yüksek enerjili MO'ları, yüksek derecede uyarılmış elektronik durumlar ve gevşek supramoleküler kompleksler...Vs bulunur. Bir temel set, zayıf bağlı bir elektronun kalan yoğunluktan uzakta lokalize olmasına izin vermek için gerekli esnekliğe sahip olmadığında, enerji ve diğer moleküler özelliklerde önemli hatalar meydana gelebilir. Bu sınırlamayı ele almak için, standart temel setler, kullanımları garanti edildiğinde genellikle yaygın temel işlevlerle artırılır.

6-31G+(d) baz seti ağır atomlara eklenen difüze fonksiyonlarla 6-31G(d) baz setini ifade eder. Böylece, 6-31+G(d), ağır atomların artırıldığını gösterir.

6-311++G(3df,2pd) deki ikinci artı, H üzerinde yaygın s fonksiyonlarının varlığını gösterir. Pople temel setleri için yaygın fonksiyonların temel setler, anyonik tek-ağır atomlu hibritler üzerinde varyasyonel olarak optimize edilir. Örneğin BH₂ – hidratının anyonik tek ağır atomu üzerinde varyasyonel olarak optimize edilmiştir ve bu durum 3-21G, 6-31G ve 6-311G için de aynıdır. Özellikle asitliklerin ve elektron ilgilerinin hesaplanması için difüz

fonksiyonlar mutlaka gereklidir. Örneğin, HF bileşiğinin asitliği, artırılmamış 6-31G(d) yerine 6-31+G(d) bazlı set kullanıldığında 44 kcal/mol artar [79].

2.5.4. Yarı iletkenler için yoğunluk fonksiyonel teorisi

Yarı iletken malzemelerin iletkenlik özellikleri yalıtkan malzemeler ile iletkenler arasında yer alır. Temel halde yalıtkan özellik gösteren bu malzemeler ışık, ısı, manyetik etki altında veya bu malzemelere herhangi bir gerilim uygulandığında değerlik elektronlarının serbest hale gelmesiyle iletkenlik kazanırlar. Kazanılan bu iletkenlik özelliği yarı iletkenliktir ve geçici bir durumdur. Işık, ısı, manyetik etki veya gerilim gibi dış etkiler ortadan kalktığında, serbest haldeki elektronlar tekrar temel hal seviyesine dönerler. Elektronların uyarılmasıyla yarı iletkenlik özelliği kazanan malzemelere belirli iyileştirmeler yapıldığında, bu malzemelerin iletkenlik özellikleri arttırılabilir. Son yıllarda ışık teknolojisi için yapılan birçok çalışma yarı iletken olma özelliği gösteren bu malzemelere konjüge veya kromofor grupların katkılarıyla yapılmış iyileştirme çalışmalarını kapsar. Bu çalışmaların büyük bir kısmı yarı iletken özelliği gösterecek moleküllerin tasarımı ve bilgisayar destekli hesaplamalarını içermektedir. Gerçekleştirilen bu hesaplamalarda kullanılan DFT yönteminin gerçeğe en yakın değerler gösterdiği bilinmektedir [78][79][85][86].

Adam Olejniczak ve arkadaşları I-III-VI tipi yarı iletken metal organik kümelerinin tüm hesaplamalarında Yoğunluk Fonksiyonel metodunu kullanmışlar. Bu yarı iletkenlerin hesaplamasını Gaussian 09 programı yardımıyla 6-31G(d,p) temel seti kullanarak B3LYP (Becke'nin üç parametrelili Lee-Yang-Parr) fonksiyoneli ile DFT hesabı yapmışlardır [86].

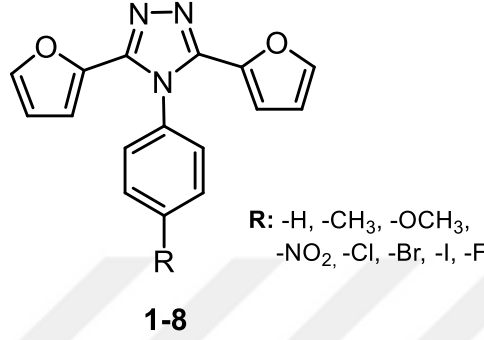
A-In-X₂ yapılı yarı iletken kuantum noktalarının (A=Cu, Ag; X=S, Se) sentezinde yaygın olarak kullanılan dört metal organik molekül, üçlü yarı iletken kuantum noktalarının DFT hesabını yapmışlardır. İkili yarı iletkenlerin başarılı kariyerine rağmen, sınırlı dar aralıklı üçlü ve dörtlü bileşiklere artan ilgi gözlemlenmektedir. Sınırlı ikili yarı iletkenlerin başarılı kariyerine rağmen, son yıllarda kuantum sınırlı dar aralıklı üçlü ve dörtlü bileşiklere sürekli artan bir ilgi gözlemlenebilir, örneğin üçlü yarı iletkenler grubu (I-III-VI) CuInS₂, AgInS₂, CuGaS₂ için geçerlidir. Bu yarı iletkenler güneş ışığını soğurması, orta IR doğrusal olmayan optikler için frekans dönüştürücüler veya terahertz üretimi için umut verici malzemeler olarak uygulanabilmesinden dolayı iyi bilinmektedir [86].

Shamsa Bibi ve arkadaşları floresan olarak fenotiyazin bazlı türevlerinde B3LYP/6 31G+(d) teorisi seviyesinde optimize etmişler ve absorpsiyon hesaplamalarını ise TD-B3LYP/6-31G+(d) seviyesinde gerçekleştirmişler. Ayrıca referans molekülün geometrik optimizasyonu ve absorpsiyon hesaplamalarını da sonuçları gerenti altına almak için beş farklı yöntemi (PBE0, B3LYP, WB97XD, B3P86 ve CAM-B3LYP) kullanmışlar. B3LYP yöntemi ile temel hem de uyarılmış durum hesaplamaları için en uygun sonuçlara ulaşılmıştır [85].

Yongchul Lee ve arkadaşları benzo[b] tiyeno[2,3-d] tiyofen (BTT) türevlerinin, 2 (tiyofen-2-il) benzo[b] tiyeno[2,3-d] tiyofen, 2- (5- (2-etilheksil) tiyofen 2il) benzo[b] tiyeno[2,3 d] tiyofen, 2- (5-octylthiophene-2 yl) benzo[b] tiyeno[2,3-d] tiyofen sentezlemesinin teorik hesaplamasında DFT, B3LYP hesabını 6-31 G(d) temel seti kullanarak Gaussian 09W programında gerçekleştirmişlerdir [86].

3. HESAPLAM, YÖNTEM VE SONUÇLAR

2019 yılında çalışma grubumuz tarafından güneş pillerindeki kullanılabilir potansiyeli araştırılmak üzere furan süstitüe 1,2,4- triazol tabanlı bileşikler sentezlenmiş ve bilgisayar destekli kimyasal hesaplamaları yapılmıştır. Gerçekleştirilen bu çalışmada, ilgili bileşiklere konjuge gruplarla yapılacak katkılama ile daha düşük bant enerji aralığı elde edilebileceği rapor edilmiştir [93].



Şekil 3.1. Daha önce sentezlenen 1-8 bileşikleri

Bu bilgiden yola çıkarak, bu tez çalışmasında, furan süstitüe 1,2,4- triazol tabanlı bileşiklerin konjugasyonu artırılarak çeşitli moleküller tasarlanmıştır. Tasarlanan moleküllerin bilgisayar destekli kimyasal hesaplamaları yapılmış ve uyarılmış enerji hesaplamaları gerçekleştirilmiştir. İlgili bileşiklerin her bir furan halkasının 5. konumuna bir elektron donörü olan trifenilamin D-A-D konjuge yapısını oluşturmak için bağlanmıştır. İncelenen her bir molekülün (M1-M5) geometrik optimizasyonları yapıldıktan sonra elde edilen en düşük enerjili üç konformasyonu üzerinden bilgisayar destekli hesaplamaları gerçekleştirilmiştir.

3.1. Donanım Ve Yöntem

Bu tez çalışması M1-M5 moleküllerinin tasarımı ve bilgisayar destekli kimya hesaplamaları üzerine kurgulanmıştır. Basit hesaplama yöntemlerinden başlanarak, karmaşık ve zor yöntemlere doğru ilerleyen bilgisayar destekli hesaplama sürecinde kuantum kimyasal hesaplamaları için Gaussian 16Rev A.03 [88] programı kullanılmıştır. Gaussian 16Rev A.03 moleküllerin yapısal, spektroskopik, elektronik ve doğrusal olmayan optik özelliklerinin teorik hesaplamasında en çok tercih edilen bir programdır. Bu hesaplamalar sonucu moleküler orbital enerjileri, atomik yükleri, iyonlaşma enerjileri, elektrostatik potansiyel, spin yoğunluğu ve elektron yoğunluğu haritaları gibi atomların ve moleküllerin detaylı özelliklerini inceleyebileceğimiz veriler elde edilmektedir [94].

Konformasyonel analizler Chem Axon Marvin Suite [89] programı ile gerçekleştirilmiştir. Moleküllerin dijital ortama aktarılması ve moleküler mekanik hesaplarında Chemoffice [90] paket programlarından yararlanılmıştır.

Gauss View 6.0.16 programı molekülün üç boyutlu tasarımını yapmak için Gaussian 16RevA.03 [88] programında giriş dosyalarını hazırlamak ve elde edilen sonuçları görselleştirmek için kullanılan bir grafik ara yüzüdür. Bu program desteğiyle Gaussian programında hesaplanmış olan moleküllerin üç boyutlu yapılarını, bağ uzunluğu, bağ açıları vb grafiksel özellikleri inceleme olanağı sağlamaktadır.

Tez çalışması süresince tüm hesaplamalar, 1 adet Lenovo GEFORCE GTX ideapad, AMD ryzen, 10th Gen 3.8 GHz işlemci, 16 GB RAM, 64 bit işletim sistemi, 8 çekirdek, Windows 10 home single language kişisel dizüstü bilgisayar ve Intel Core i7 Extreme 3970x 3.50 GHz 6 çekirdek 12 izlek işlemci, 64GB (8x8GB) DDR3 1333 MHz RAM, Intel x79 çipset LGA2011 soket masaüstü bilgisayar ile gerçekleştirilmiştir.

Bilgisayar destekli hesaplamalarla M1-M5 moleküllerinin sırasıyla, geometri optimizasyonu, frekans hesaplaması, uyarılmış enerji hesaplamaları gaz ve çözücü fazında gerçekleştirilmiştir. M1-M5 moleküllerinin laboratuvar ortamında sentezlenmesi durumunda, hangi çözücüler içerisinde çözüneceği öngörülerek, bu çözücü ortamlarında hesaplamalar gerçekleştirilmiştir. Kuantum kimyasal hesaplamalarda kullanılan çözücüler kloroform (CHCl₃) ve dimetil sülfoksit (DMSO) olarak seçilmiştir.

Hesaplamalar sonucunda M1-M5'e ait maksimum absorbans (λ_{maks}), elektron geçiş yüzdeleri (T), bant eşik enerjileri (E_{gap}), dipol momentleri, elektronik ve termal serbest enerjilerinin toplamı (ΔG) verileri elde edilmiştir.

3.2. Geometri Optimizasyonu

Geometri optimizasyonu, basit bir ifade ile, molekülün minimum enerjili yapısını bulmak için kullanılır. Bu durum matematiksel olarak, enerjinin koordinatlara göre birinci türevinin (gradyent) sıfır ve ikinci türevinin (kuvvet sabiti) pozitif olması anlamına gelmektedir. Bu çalışma kapsamında M1-M5 moleküllerinin en kararlı konfirmasyonlarını belirlemek amacıyla Potansiyel Enerji Yüzeyi taraması (PES SCAN) çalışması yapılmıştır. Bu çalışmadan alınan veriler doğrultusunda, M1-M5 moleküllerinin her biri için en kararlı üç konformer seçilmiş ve hesaplamalar bu konformerler üzerinden gerçekleştirilmiştir. Belirlenen her bir konformerin temel haldeki geometri optimizasyonu, B3 değiş-tokuş korelasyonu ve LYP korelasyon

fonksiyonelinin bir arada kullanımıyla (B3LYP) hibritleştirilmiş DFT yöntemle yapılmış olup bu hesaplamalarda temel set olarak 6-31G(d,p) temel seti tercih edilmiştir.

3.3. Frekans Hesaplamaları

M1-M5 moleküllerinin potansiyel enerji yüzeyi taraması çalışmasının ardından her bir bileşik için elde edilen en düşük enerjili 3 konformerin gaz fazı ve belirlenen çözücüler içerisindeki dipol moment, serbest enerji değerleri, kısmi atomik yükler ve titreşim frekansları geometri optimizasyonunu takip eden frekans hesaplamalarının sonuç (.log) dosyalarından elde edilmiştir.

Tablo 3.1. M1-M5 için hesaplanan dipol moment ve Elektronik ve Termal Serbest Enerjilerinin Toplamı değerleri

Molekü l	Solvent	ΔG (kcal/mol)	Dipole Moment (Debye)	Mole kül	Solvent	ΔG (kcal/mol)	Dipole Moment (Debye)
M11	Gaz	-2427.38	5.61	M21	Gaz	-2466.70	6.24
	CHCl ₃	-2427.40	7.40		CHCl ₃	-2466.66	7.20
	DMSO	-2427.40	8.03		DMSO	-2466.70	8.71
M12	Gaz	-2427.38	6.11	M22	Gaz	-2466.68	6.56
	CHCl ₃	-2427.40	8.06		CHCl ₃	-2466.70	8.60
	DMSO	-2427.40	8.95		DMSO	-2466.70	9.65
M13	Gaz	-2427.38	6.40	M23	Gaz	-2466.68	6.80
	CHCl ₃	-2427.40	8.01		CHCl ₃	-2466.67	9.23
	DMSO	-2427.40	9.45		DMSO	-2466.70	10.14
M31	Gaz	-2886.98	3.56	M41	Gaz	-2526.62	4.06
	CHCl ₃	-2888.00	5.00		CHCl ₃	-2526.61	7.12
	DMSO	-2887.00	5.55		DMSO	-2526.64	6.29
M32	Gaz	-2886.98	4.42	M42	Gaz	-2526.62	4.86
	CHCl ₃	-2887.00	5.95		CHCl ₃	-2526.61	6.50
	DMSO	-2887.00	6.51		DMSO	-2526.65	7.21

Tablo 3.1: (Devam) M1-M5 için hesaplanan dipol moment ve Elektronik ve Termal Serbest Enerjilerinin Toplamı değerleri

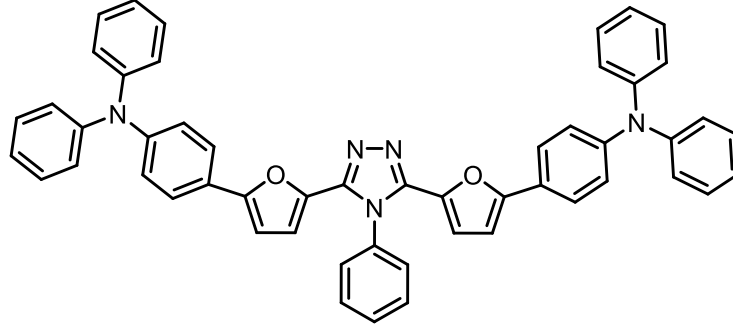
M33	Gaz	-2886.99	5.08	M43	Gaz	-2526.62	5.33
	CHCl ₃	-2887.00	6.60		CHCl ₃	-2526.63	7.17
	DMSO	-2887.00	7.15		DMSO	-2526.64	7.80
M51	Gaz	-4998.49	3.69				
	CHCl ₃	-4998.51	5.20				
	DMSO	-4998.52	5.74				
M52	Gaz	-4998.50	4.65				
	CHCl ₃	-4998.51	6.20				
	DMSO	-4998.52	6.77				
M53	Gaz	-4998.50	4.64				
	CHCl ₃	-4998.51	6.70				
	DMSO	-4998.52	7.55				

Uyarılmış enerji hesaplamalarına geçmeden önce ilgili konformerlerin serbest enerji değerleri kontrol edilmiş ve en kararlı olanların her bir bileşik için birinci konformerlerin olduğu tespit edilmiştir. Daha önce de belirtildiği gibi literatürde rapor edilmiş akseptörlerin bir kısmının konformasyonel analizlerinde muz şekilli oldukları gözlemlenmektedir. M1-M5 bileşiklerinin kararlı birinci konformerlerinin de muz şeklinde bir kıvrılma gösterdikleri görülmektedir. Diğer konformerlerde böyle bir düzenlenme söz konusu değildir.

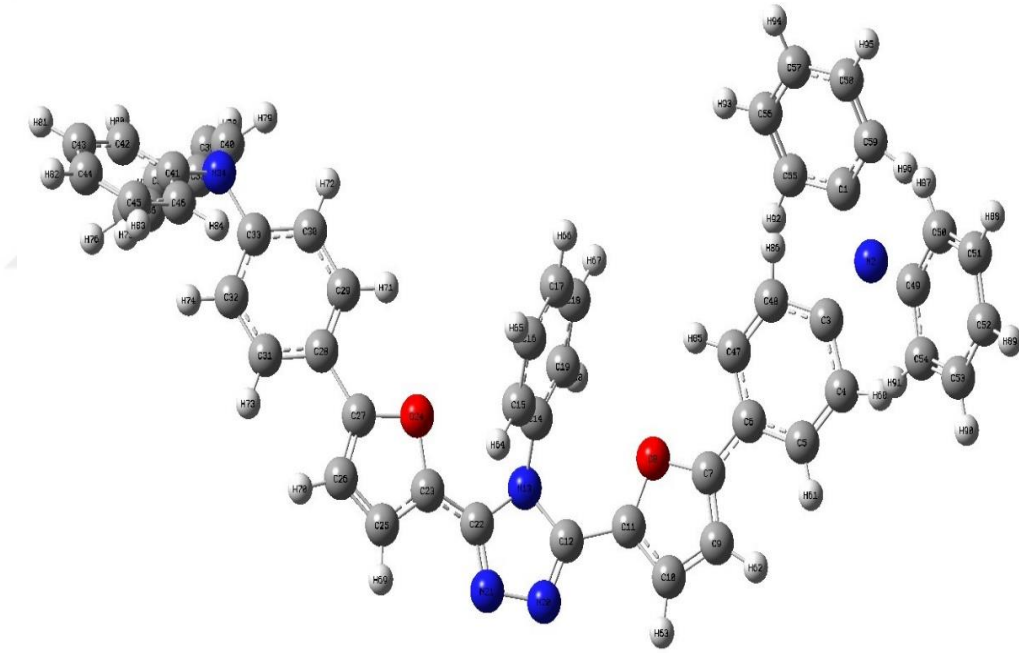
Tasarlanan moleküllerin yük dengelerini ve reaktif kısımları belirlemek amacı ile tüm konformerlerin Mulliken yük dağılımları hesaplanmıştır. Bu hesaplamalar ileride yapılacak katkılama çalışmalarında geliştirilecek yeni moleküller için oldukça önemlidir.

Mulliken yük dağılımlarında her bir atomun rengi, taşıdığı yük açısından farklılık göstermektedir. Yeşil renkli kısımlar atomların daha elektropozitif, kırmızı kısımların ise elektronegatif özellik gösterdiği görülmektedir. Nitekim kırmızı renkli atomların azot ve oksijen atomları olduğu belirgindir. Bu atomlara bağlı grupların ise yeşil olduğu buna bağlı olarak üzerlerindeki pozitif yük yoğunluğunun kısmen arttığı anlaşılmaktadır. Yük dağılımlarında siyaha yakın renkli atomların daha nötr özellik gösterdiği bu konumların reaktivitesinin daha düşük olduğu düşünülmektedir.

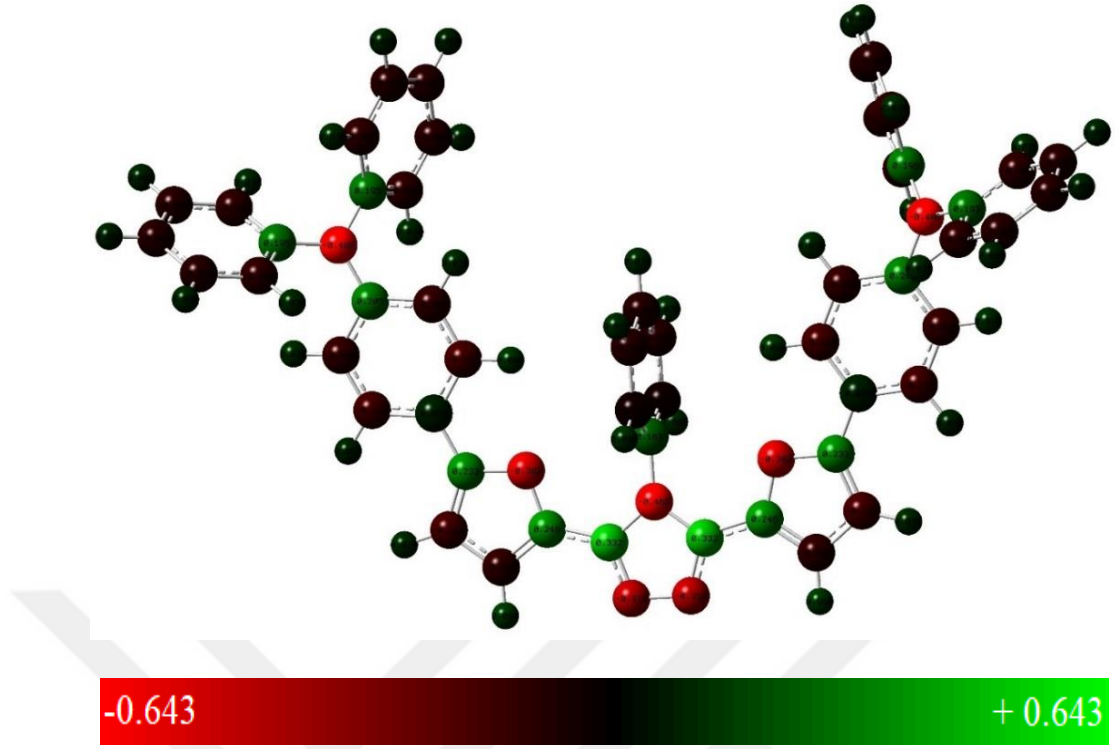
Aşağıda M1-M5 bileşiklerinin en kararlı konformerine ait iki ve üç boyutlu molekül yapıları ve Mulliken yük dağılımları verilmiştir. M1-M5'e ait diğer konformelerin yük dağılımları **EK-5**'te verilmiştir



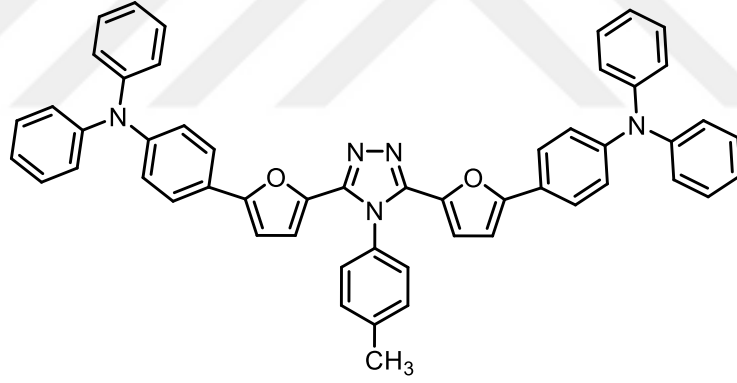
Şekil 3.2. **M1**: 4,4'-((4-fenil-4H-1,2,4-triazol-3,5-di-il))bis(furan-5,2-diyl))bis(N,N-difenilanilin)



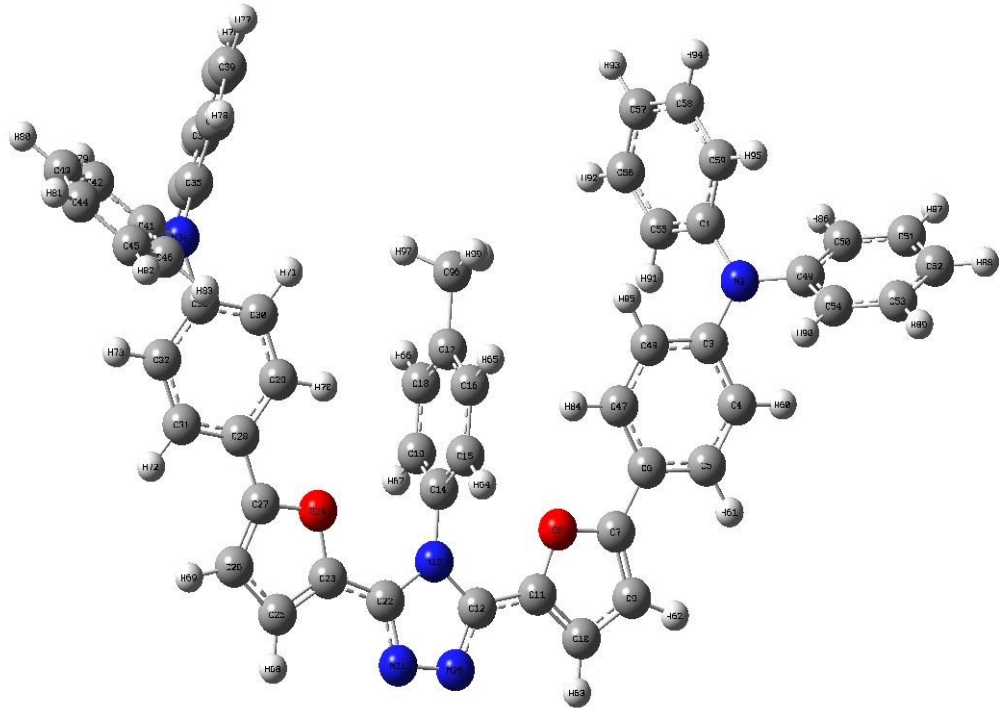
Şekil 3.3. **M1** molekülünün birinci konformerinin (**M11**) 3 boyutlu yapısı



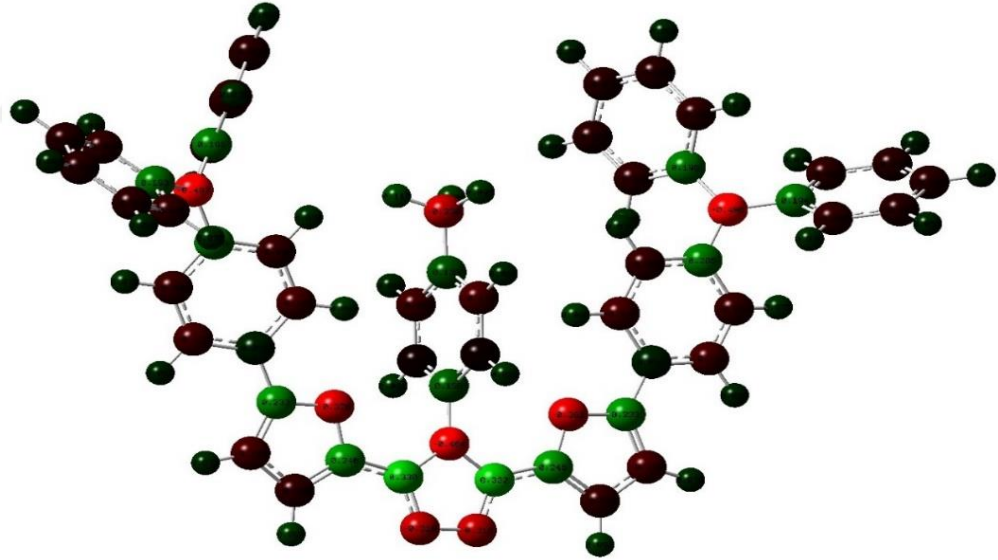
Şekil 3.4. M11 konformerinin Mulliken yük dağılımı



Şekil 3.5. M2: 4,4'-((4-(p-tolil)-4H-1,2,4-triazol-3,5-di-il))bis(furan-5,2-diyl))bis(N,N-difenilanilin)



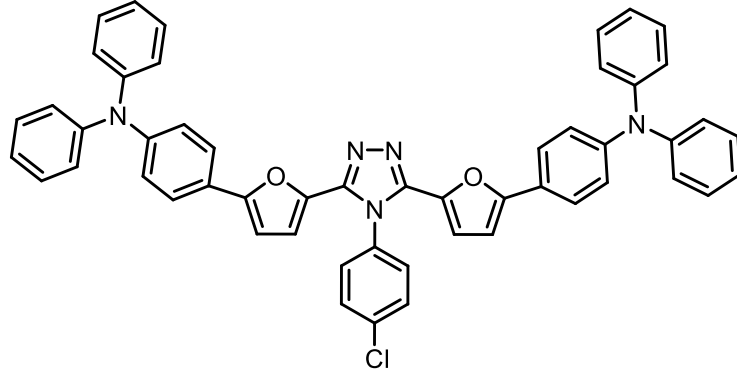
Şekil 3.6. M2 molekülünün birinci konformerinin (M21) 3 boyutlu yapısı



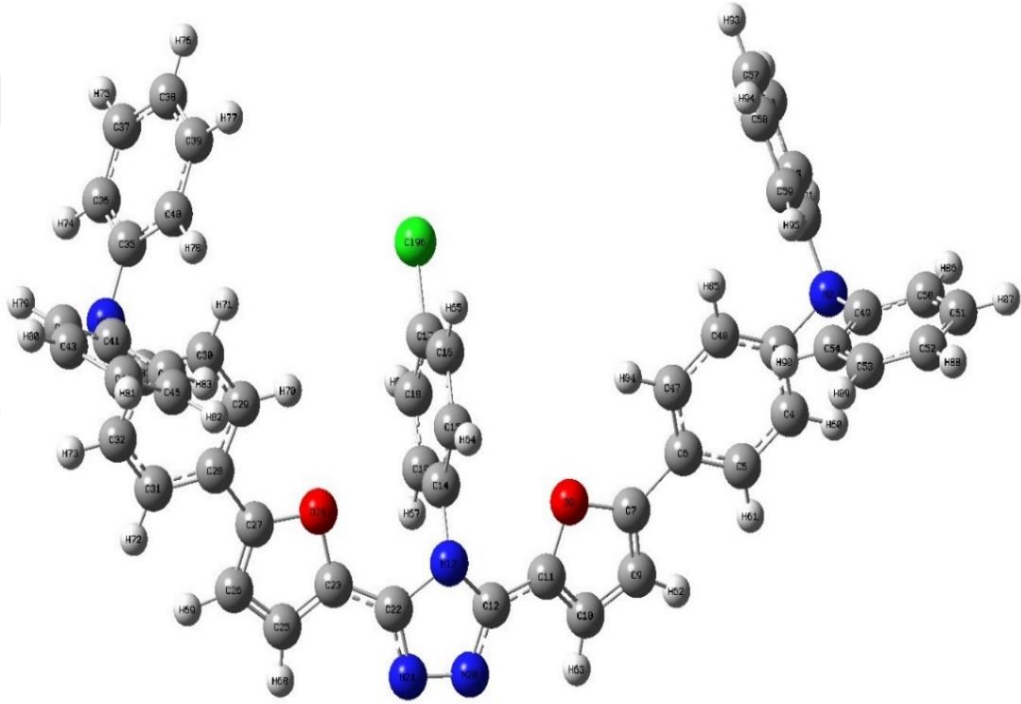
-0.643

+ 0.643

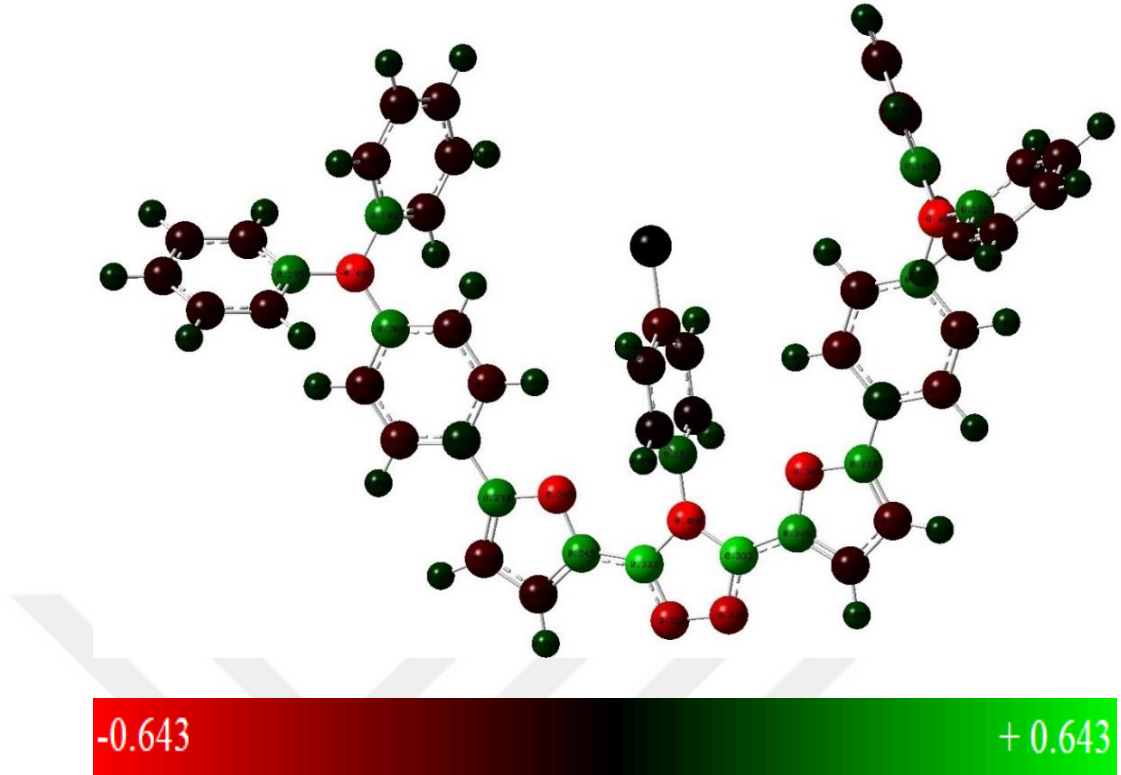
Şekil 3.7. M21 konformerinin Mulliken yük dağılımı



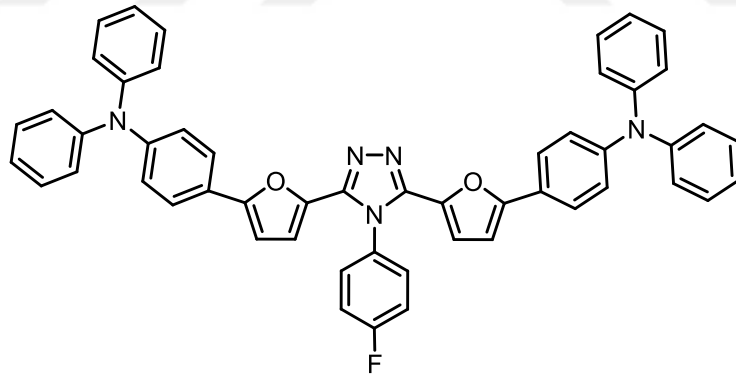
Şekil 3.8.M3: 4,4',4'-((4-(4-klorofenil)-4H-1,2,4-triazol-3,5-di-il))bis(furan-5,2-diyl))bis(N, N-difenilanilin)



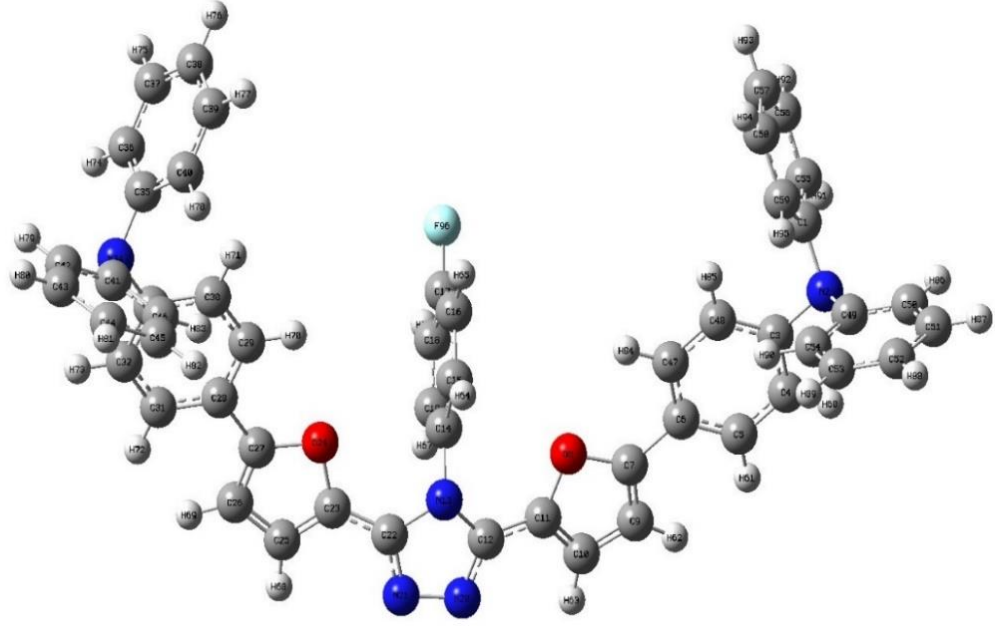
Şekil 3.9. M3 molekülünün birinci konformerinin (M31) 3 boyutlu yapısı



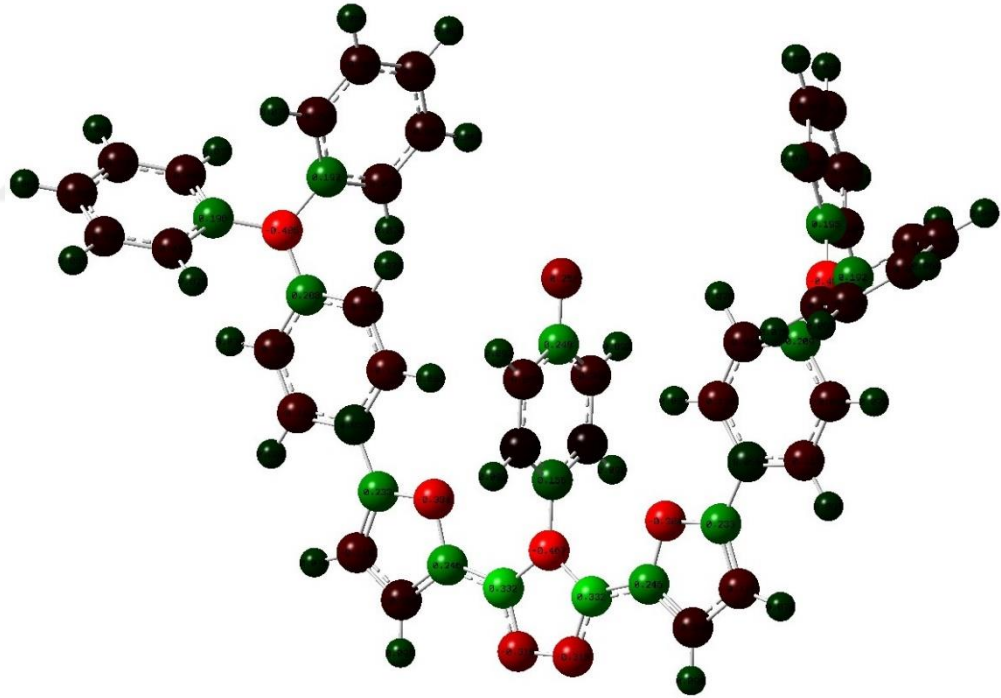
Şekil 3.10. M31 konformerinin Mulliken yük dağılımı



Şekil 3.11. **M4**: 4,4'-((4-(4-florofenil)-4H-1,2,4-triazol-3,5 di-il))bis(furan-5,2-di-il))bis(N,N-difenilanolin)



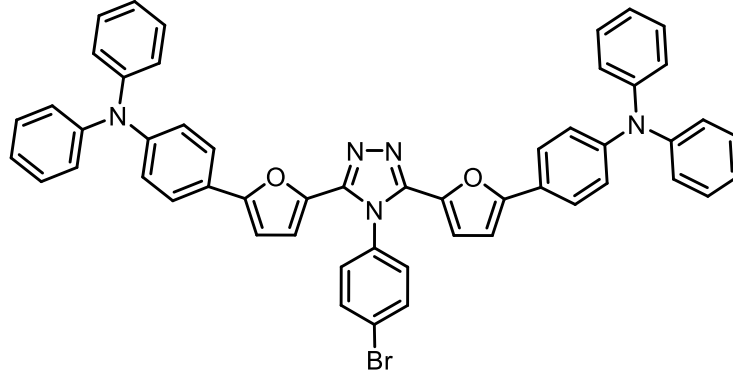
Şekil 3.12. *M4* molekülünün birinci konformerinin (*M41*) 3 boyutlu yapısı



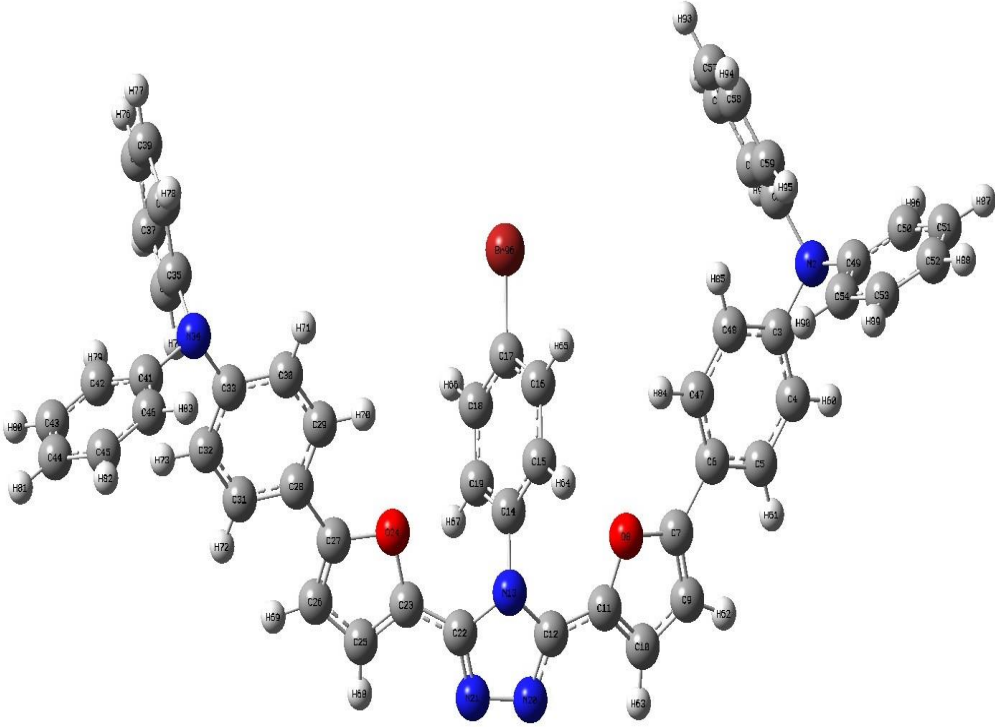
-0.643

+ 0.643

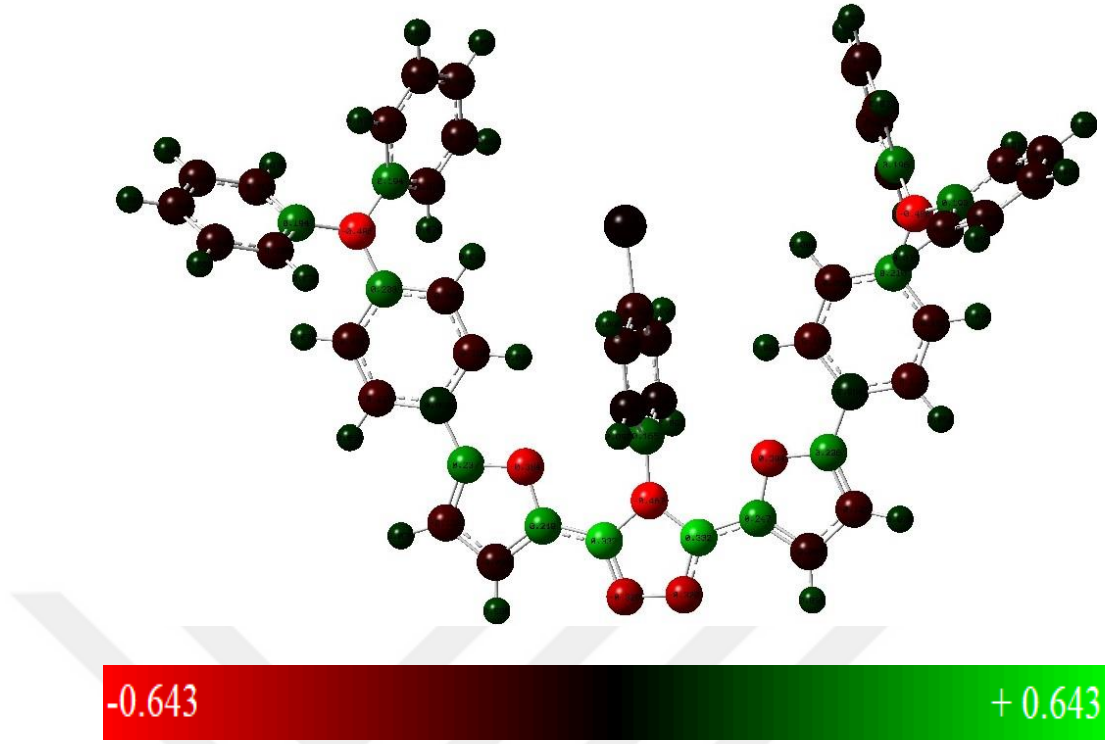
Şekil 3.13. *M41* konformerinin Mulliken yük dağılımı



Şekil 3.14. *M5*). 4,4'-((4-(4-bromofenil)-4H-1,2,4-triazol-3,5-di-il))bis(furan-5,2-di-il))bis(*N,N*-difenilanilin)



Şekil 3.15. *M5* molekülünün birinci konformerinin (*M51*) 3 boyutlu yapısı



Şekil 3.16. M51 konformerinin Mulliken yük dağılımı

3.4. Uyarılmış Enerji Hesaplamaları

Moleküllerin dikey geçiş enerjileri, B3LYP 6-31G(d,p) temel seti kullanılarak Tamm-Dancoff yaklaşımı (TD-DFT/TDA) zamana bağlı yoğunluk fonksiyonel teorisi ile hesaplanmıştır.

Tablo 3.2’de M1-M5 moleküllerine ait uyarılmış enerji hesaplamalarından elde edilen maksimum absorbans (λ_{maks}), elektron geçiş yüzdeleri (T) ve bant eşik enerjileri (Egap) verilmiştir.

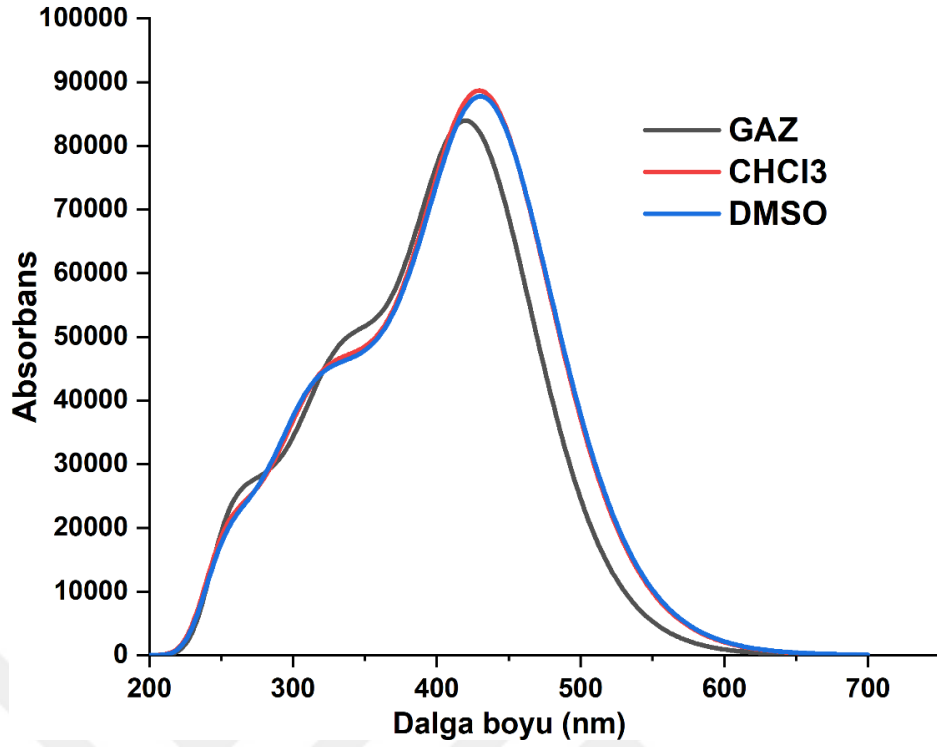
Tablo 3.2. M1-M5 için hesaplanan dalga boyları (λ),elektron geçiş yüzdeleri (T) ve bant eşik enerjileri (Egap)

Bileşik	Çözücü	λ (nm)	T (%)	Egap (eV)
M11	Gaz	426.14	96.08	2.91
	CHCl ₃	437.96	95.44	2.83
	DMSO	439.03	95.44	2.82
M12	Gaz	430.09	95.87	2.85
	CHCl ₃	463.83	97.07	2.67
	DMSO	439.03	95.44	2.82
M13	Gaz	434.88	96.56	2.85
	CHCl ₃	446.33	96.44	2.78
	DMSO	447.69	96.45	2.77
M21	Gaz	425.19	96.05	2.92
	CHCl ₃	437.13	95.41	2.84
	DMSO	438.29	95.42	2.83
M22	Gaz	429.42	95.75	2.89
	CHCl ₃	439.91	95.66	2.82
	DMSO	440.40	95.78	2.82
M23	Gaz	432.62	96.50	2.87
	CHCl ₃	443.58	96.38	2.80
	DMSO	445.13	96.39	2.79
M31	Gaz	429.19	96.16	2.89
	CHCl ₃	440.53	95.52	2.81
	DMSO	441.23	95.53	2.81
M32	Gaz	433.21	96.04	2.86
	CHCl ₃	444.34	95.83	2.79
	DMSO	445.06	95.94	2.79

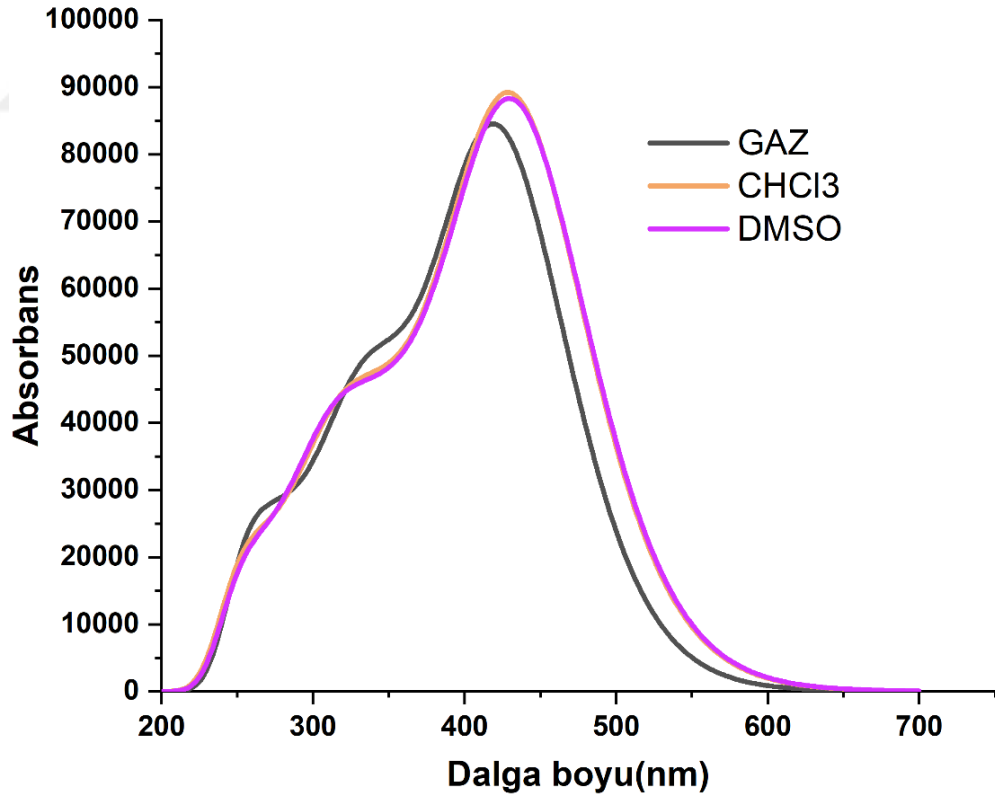
Tablo 3.2: (Devam) M1-M5 için hesaplanan dalga boyları (λ),elektron geiş yzdeleri (T) ve bant eřik enerjileri (Egap)

M33	Gaz	438.68	96.66	2.83
	CHCl ₃	449.54	96.50	2.76
	DMSO	450.24	96.51	2.75
M41	Gaz	427.95	96.14	2.90
	CHCl ₃	439.36	95.48	2.82
	DMSO	440.14	95.49	2.82
M42	Gaz	431.97	95.97	2.87
	CHCl ₃	443.08	95.78	2.80
	DMSO	443.91	95.90	2.79
M43	Gaz	437.20	95.94	2.84
	CHCl ₃	448.15	96.48	2.77
	DMSO	449.04	96.49	2.76
M51	Gaz	429.08	96.15	2.89
	CHCl ₃	440.50	95.52	2.81
	DMSO	441.24	95.53	2.81
M52	Gaz	432.39	96.07	2.87
	CHCl ₃	443.55	95.86	2.80
	DMSO	444.36	95.94	2.79
M53	Gaz	437.58	96.71	2.83
	CHCl ₃	447.75	96.50	2.77
	DMSO	448.52	96.51	2.76

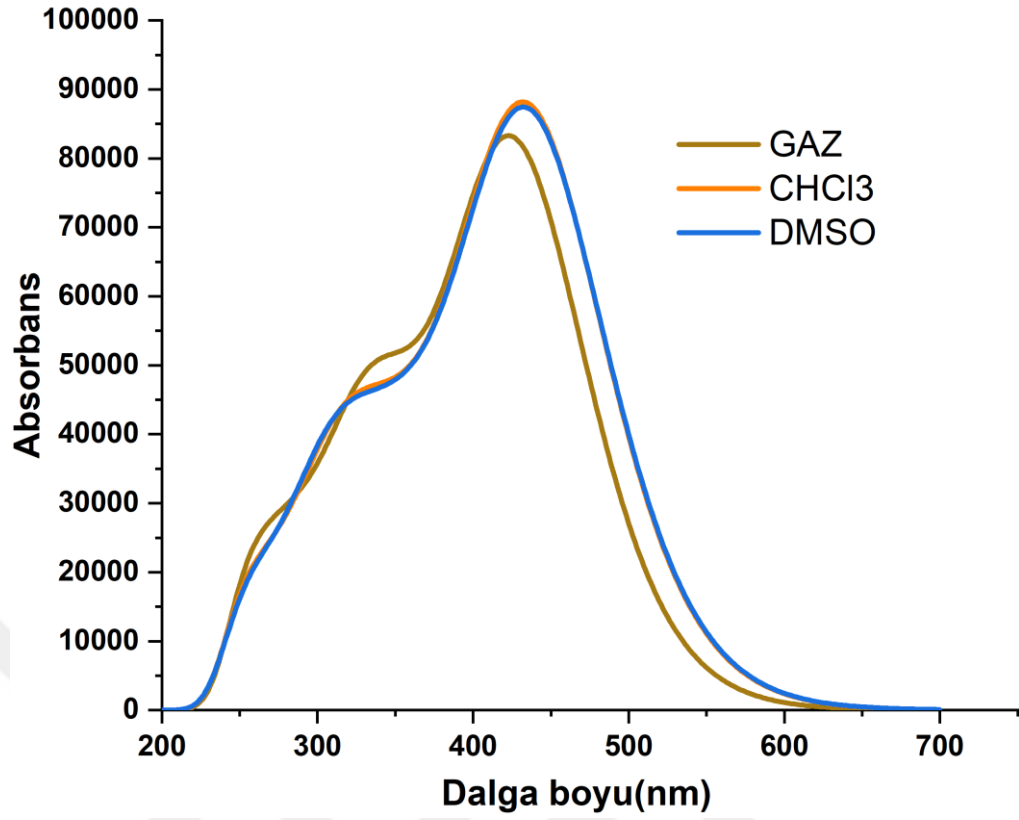
M1-M5 molekllerinin kararlı konformerlerine ait (M11,M21,M31,M41,M51) maksimum absorbansa karřı gelen dalga boyunun kullanılan zcye gre deėiřimi uyarılmıř enerji hesaplamaları sonucu elde edilen UV–Vis spektrumlarında (řekil 3.17 – 21) grlmektedir. Diėer konformerlerin spektrumları **Ek-4** kısmında verilmiřtir.



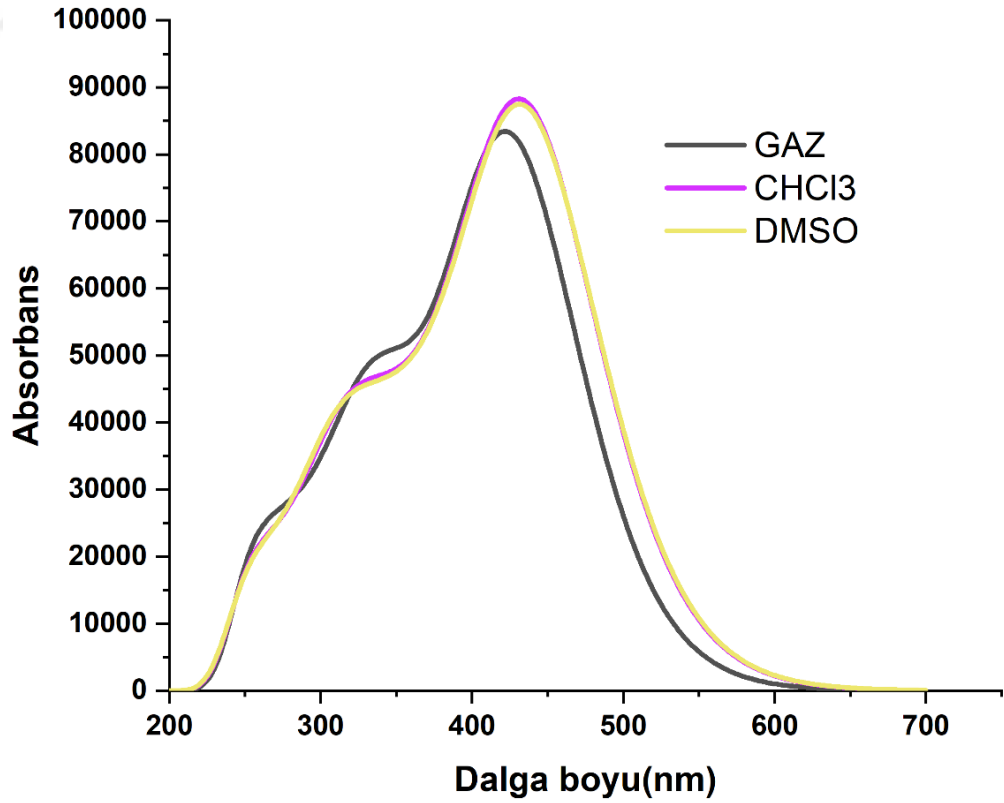
Şekil 3.17. M11 konformerinin hesaplanan UV-Vis spektrumları



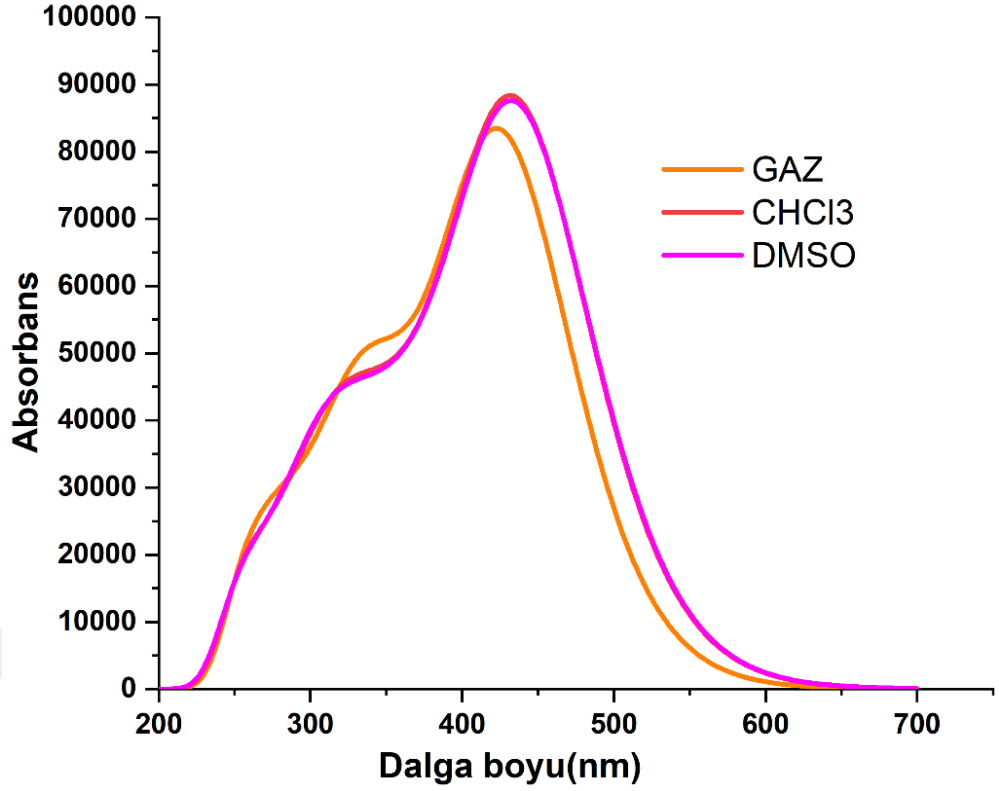
Şekil 3.18. M21 konformerinin hesaplanan UV-Vis spektrumları



Şekil 3.19. M31 konformerinin hesaplanan UV-Vis spektrumları



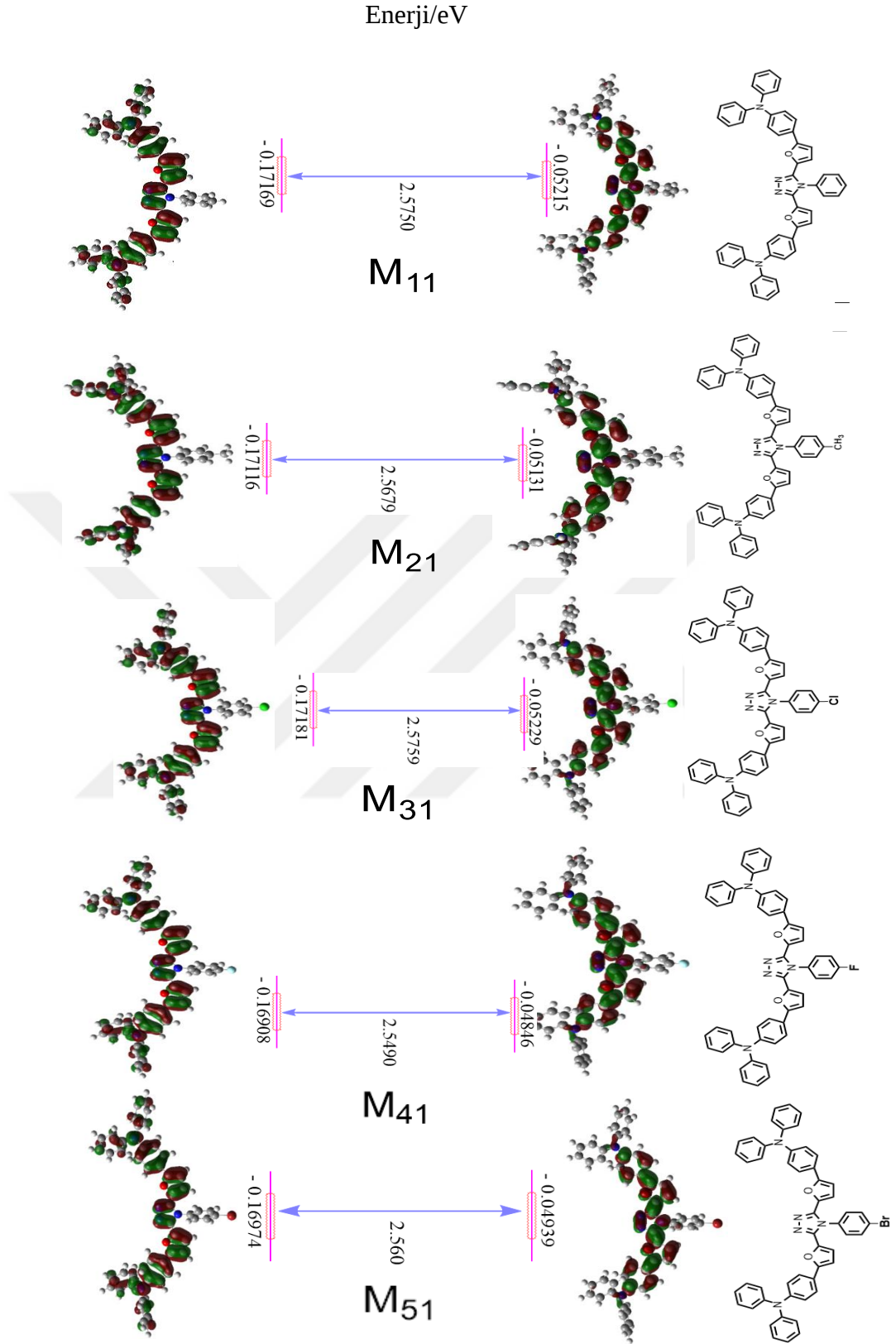
Şekil 3.20. M41 konformerinin hesaplanan UV-Vis spektrumları



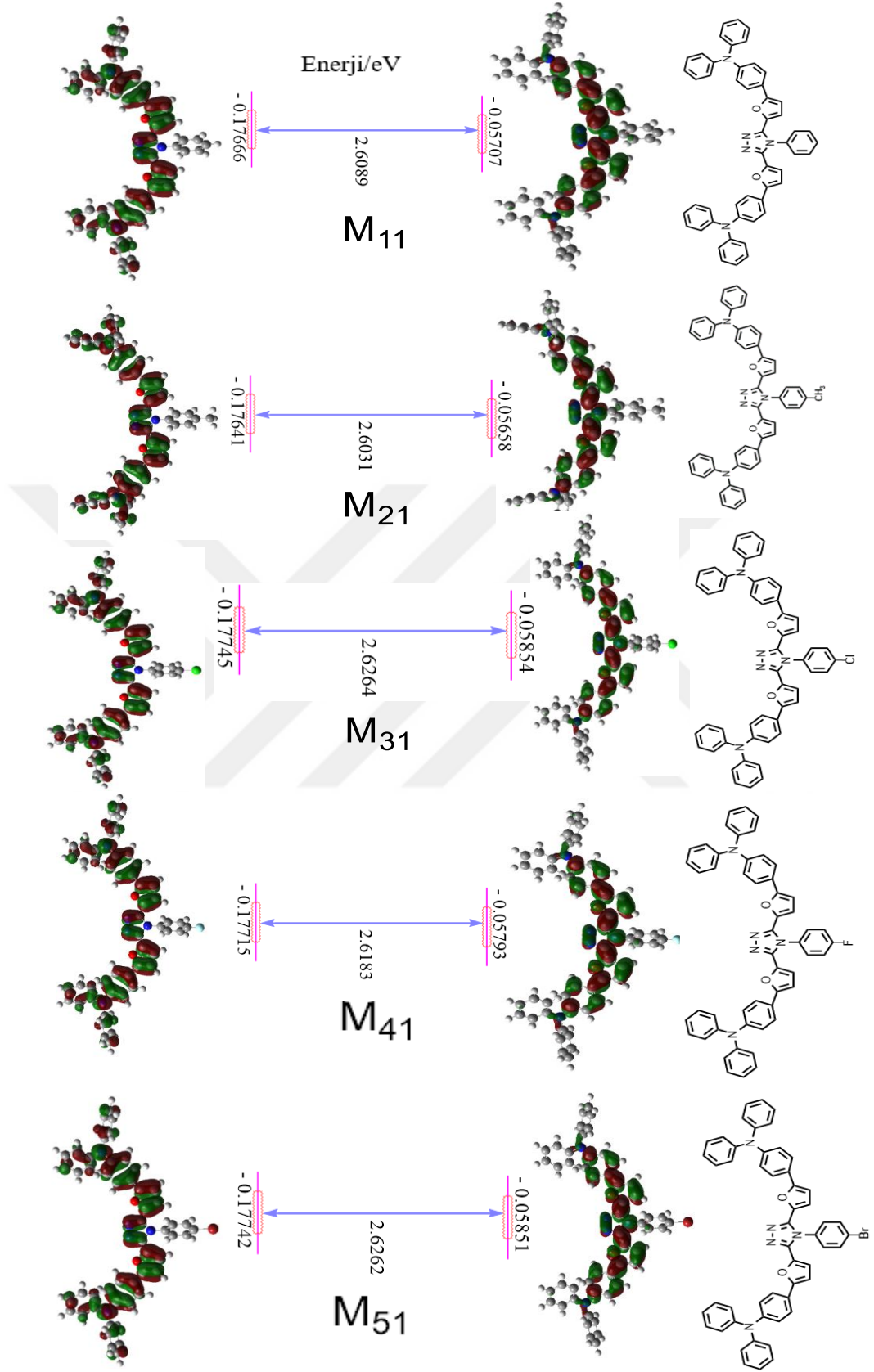
Şekil 3.21. M51 konformerinin hesaplanan UV-Vis spektrumları

Hesaplamalardan elde edilen gaz fazı spektrumlarına kıyasla bileşiklerin CHCl₃ veya DMSO ortamında vermiş oldukları spektrumlarda birkaç nm'lik kırmızıya kayma gözlenmektedir. Ancak CHCl₃ ile DMSO ortamındaki spektrumlar kendi aralarında kıyaslandığında kırmızıya kaymanın hiç olmadığı görülmektedir.

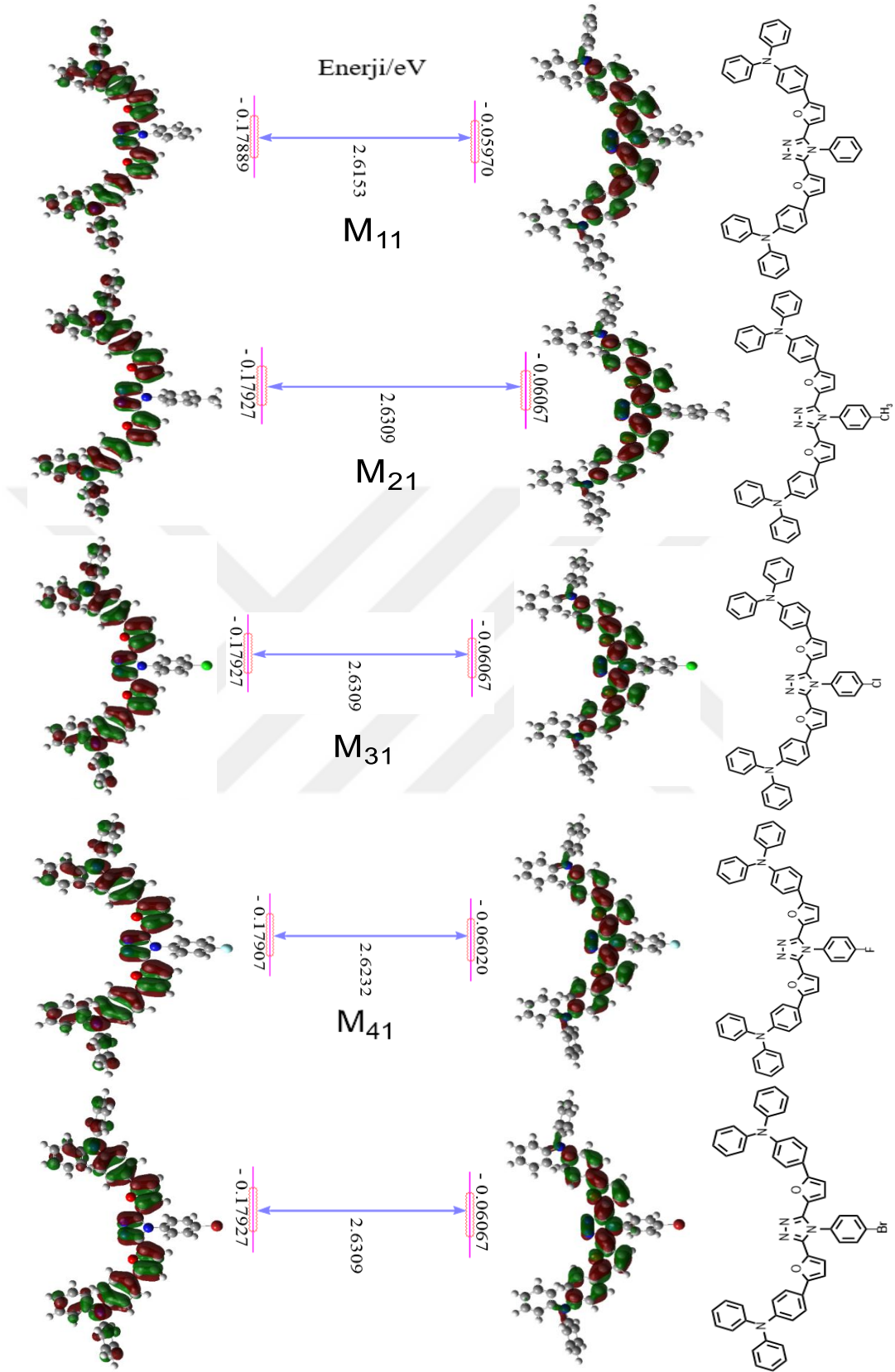
Frekans ve uyarılmış enerji hesaplamalarından yararlanarak hedef moleküllerin HOMO-LUMO sınır orbitalleri görüntülenebilmektedir. Sınır orbitallerin görüntüleri, moleküldeki elektron yoğunluğunun hangi bölgelerde toplandığını ve yük taşıyıcı grupları belirleyebilmek açısından oldukça önemlidir. Bu doğrultuda M1-M5 moleküllerinin en kararlı konformerlerinin, gaz fazı, CHCl₃ ve DMSO ortamında hesaplanan sınır orbitalleri Şekil 3.22-24'te verilmiştir.



Şekil 3.22. M₁₁- M₅₁ Konformerlerinin gaz fazındaki HOMO-LUMO sınır orbitalleri ve bant enerji



Şekil 3.23. M₁₁- M₅₁ Konformerlerinin CHCl₃ fazındaki HOMO-LUMO sınır orbitalleri ve bant enerji aralıkları



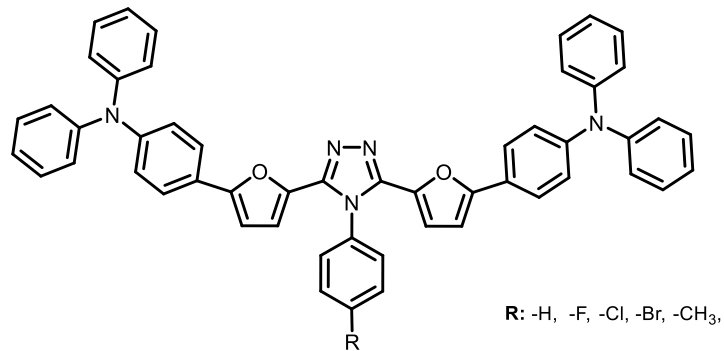
Şekil 3.24. M11- M51 Konformerlerinin DMSO fazındaki HOMO-LUMO sınır orbitalleri ve bant enerji aralıkları

4. SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu tez çalışmasında 1,2,4 triazol molekülü merkez alınarak fulleren içermeyen organik küçük akseptör bileşikler, D-A-D yapısı ile tasarlanmıştır (**M1-M5**). Literatürde fullerensiz küçük akseptör bileşikler daha çok muz tipli, merdiven tipli, yıldız tipli vb. geometride karşımıza çıkmaktadır. Bu çalışma kapsamında gerçekleştirilen bilgisayar destekli kimyasal hesaplamalarda DFT yöntemi B3LYP 6-31G(d,p) temel seti seçilerek gerçekleştirilmiş. Gerçekleştirilen PES SCAN ve optimizasyon hesaplamalarında **M1-M5** moleküllerine ait en kararlı konformerlerin (M11-M51) geometrik düzenlenmelerinin muz tipli olduğu anlaşılmıştır.

Daha önce araştırma grubumuz tarafından furan süstitüe 1,2,4-triazol bileşiklerinin (**1-8**) sentezi ve bilgisayar destekli hesaplamaları gerçekleştirilmiştir [103] (Şekil 3.1). Deneysel ve hesaplanan veriler karşılaştırıldığında, verilerdeki artış ve azalışların örtüştüğü görülmektedir. Ancak gerçekleştirilen uyarılmış enerji hesaplamalarında ve deneysel analizlerde elde edilen HOMO-LUMO band gap enerji değerleri oldukça yüksektir.

Bant enerji aralığının genişlemesi moleküllerin yalıtkan malzemelere daha yakın özellik göstermesi olarak öngörülebilir. Fotovoltaik cihazlarda kullanılmak üzere tasarlanan moleküllerin yarı iletken özellikli taşımaları gerekmektedir. Bunun için iki yol vardır: Çekirdek yapıya yüksek konjugasyona sahip gruplar ile katkılama yapmak ya da moleküllere çeşitli kromofor gruplar bağlayarak itme çekme etkilerini arttırmaktır. Bu bilgiden yola çıkarak, bu tez çalışmasında Merve Akış tarafından gerçekleştirilen 1-5 (Şekil 4.1) bileşiklerine, TPA donör grubu kullanılarak katkılama yapılmıştır. Bu katkılama ile konjugasyon artırılmış olup buna bağlı olarak moleküllerin band enerji aralıklarının nasıl değiştiği araştırılmıştır.



Şekil 4.1. Tez çalışması kapsamında tasarlanan M1-M5 molekülleri

Tasarlanan donör–akseptör sistemler için hesaplamalar sonucu elde edilen verilerin tutarlılığı bu moleküllerin sentezlenmiş bileşikler olmayışından ötürü herhangi bir deneysel veri ile kıyaslamaya tabi tutulamamaktadır. M1-M5 üzerindeki Mulliken kısmi atomik yüklerin ve HOMO–LUMO sınır orbitalleri üzerindeki yük taşıyıcıların dağılımı öngörülen ile uyumlu olması hesaplamaların güvenilirliğini ortaya koymaktadır. Öte yandan daha önce çalışılan 1-5 bileşiklerinin HOMO–LUMO sınır orbitalleri ve band enerji aralıkları iyi bir rehber niteliğindedir. Bir örnek üzerinden ifade etmek gerekirse; katkılamadan önce DMSO içerisindeki bileşik **1**, deneysel 3.66 eV ve hesaplanan 3,93 eV bant enerji aralığına sahipken, yapıya TPA eklendikten sonra (**M1**) aynı yöntemle hesaplanan bant enerji aralığı 2.62 eV’a düşmüştür. Bant enerji aralığındaki bu düşüş eğilimi **M2**, **M3** ve **M4** moleküllerinde de gözlenmiştir. Aynı durum CHCl₃ ortamında gerçekleştirilen hesaplamalarda da gözlemlenmiştir. CHCl₃ içerisindeki bileşik **1**, deneysel 3.66 eV ve hesaplanan 3,92 eV bant enerji aralığına sahipken, **M1** molekülüne ait aynı yöntemle hesaplanan bant enerji aralığı 2.62 eV’a düşmüştür.

Hesaplamalarda çalışılacak çözücü ortamının belirlenmesi için iki farklı bakış açısı benimsenmiştir. Birincisi M1-M5 moleküllerinin sentezlenmesi durumunda bu moleküllerin CHCl₃ veya DMSO içerisinde çözünmesi varsayılmıştır. Bunun yanı sıra, bu iki çözücünün dielektrik sabitlerinin sırasıyla 4.81 ve 46.68 olması birinin apolara yakın diğerinin ise oldukça polar olduğunu göstermektedir. Bu sebeple farklı polariteye sahip bu iki çözücü içerisinde moleküllerin davranışlarını incelemek önemlidir. Yukarıda anlatıldığı üzere hesaplamalar sonucunda çözücü etkisinin bant enerji aralıklarına etki etmediği sınır orbitallerindeki yük dağılımının değişmediği gözlemlenmiştir.

Bu sonuçlar göz önünde bulundurulduğunda daha önce sentezlenen 1-5 bileşiklerine yapılan katkılama ile bant enerji aralığının düşmesi bu tez çalışmasının amacına ulaştığının göstergesidir.

Moleküler orbitallerin temel haldeki görüntülerine bakıldığında (Şekil 8.66-68), molekül boyunca doğrusal olarak elektronların delokalize olduğu görülmektedir. Bu durum molekül boyunca yük aktarımının gerçekleştiği anlamına gelmektedir. Öte yandan triazol halkasına az da olsa elektron sağlayan, diğer bir grup ise, bu halkaya 1 konumundan bağlanan benzen ve benzene süstitüe olan gruplardır. Moleküler orbitallerin uyarılmış hal görüntülerine bakıldığında elektronların triazol halkasına doğru bir lokalleşme gösterdikleri görülmektedir. Böylece TPA gruplarının, triazol halkasına

elektron sağladığı ve bu elektron aktarımı sırasında furan halkalarının bir π köprüsü karakterinde olduğu anlaşılmaktadır.

İlerleyen çalışmalarda M1-M5 moleküllerindeki TPA gruplarına ya da triazol halkasına 1 konumundan bağlı benzen/sübstitüe benzen halkalarına elektron çeken kromofor gruplarla bant enerji aralığının daha da daraltılması için çalışmalar yapılacaktır.



KAYNAKÇA

- [1] G. Gogoi Et Al., “New Donor-Acceptor-Donor Type Of Organic Semiconductors Based On The Regioisomers Of Diketopyrrolopyrroles: A Dft Study,” *Mater. Today Commun.*, Vol. 25, No. May, 2020, Doi: 10.1016/J.Mtcomm.2020.101364.
- [2] M. Akram Et Al., “End-Capped Engineering Of Bipolar Diketopyrrolopyrrole Based Small Electron Acceptor Molecules For High Performance Organic Solar Cells,” *Comput. Theor. Chem.*, Vol. 1201, No. February, P. 113242, 2021, Doi: 10.1016/J.Comptc.2021.113242.
- [3] H. Chen, “Electron-Deficient Core Fused-Ring Based Non-Fullerene Acceptor Enables Over 15% Efficiency In Single Junction Organic Solar Cells,” *Sci. China Chem.*, Vol. 62, No. 4, Pp. 403–404, 2019, Doi: 10.1007/S11426-019-9431-8.
- [4] And J. H. Huifeng Yao, Yong Cui, Runnan Yu, Bowei Gao, Hao Zhang, “Design, Synthesis, And Photovoltaic Characterization Of A Small Molecular Acceptor With An Ultra-Narrowband Gap,” *Photovolt. Mater.*, 2016.
- [5] S. O. K. Soonnam Kwon, Kyung Ryang Wee, Ae-Li Kim, “Bis(4-(4,5-Diphenyl-4h-1,2,4-Triazol-3-Yl)Phenyl)Dimethylsilane As Electron Transport Material For Blue Phosphorescent Oleds,” *Korea Univ. Korea*.
- [6] Tyler Blain Fleetham, “Organic Optoelectronic Devices Employing Small Molecules,” 2014.
- [7] Öner, U.(2020). *Kuantum Kimyasal Hesaplamalar İle Konjuge Monomerlerin Tasarımı*.Yayımlanmamış Yüksek Lisans Tezi. Eskişehir: Eskişehir Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü.
- [8] I. C. Hsing-Yin Chen, “Effect Of Perfluorination On The Charge-Transport Properties Of Organic Semiconductors: Density Functional Theory Study Of Perfluorinated Pentacene And Sexithiophene,” *Elsevier*, 2004.
- [9] Y. Hamakawa, *Thin-Film Solar Cells: Next Generation Photovoltaics And Its Applications*, 1st Ed. Germany: Springer, 2004.
- [10] M. S. Dresselhaus And I. L. Thomas, “Alternative Energy Technologies,” 2001.
- [11] J. Li, B. Qiao, S. Zhao, D. Song, C. Zhang, And Z. Xu, “Investigation On Oleds Efficiency Roll-Off With Interfacial Charge Storage And Their Time-Resolved

- Emission Spectra,” *Org. Electron.*, Vol. 83, No. March, P. 105756, 2020, Doi: 10.1016/J.Orgel.2020.105756.
- [12] H. Chen And Z. Xu, “Oled Panel Radiation Pattern And Its Impact On Vlc Channel Characteristics,” *Ieee Photonics J.*, Vol. 10, No. 2, Pp. 1–10, 2018, Doi: 10.1109/Jphot.2017.2774241.
- [13] Y. Wang Et Al., “A Periphery Cladding Strategy To Improve The Performance Of Narrowband Emitters , Achieving Deep-Blue Oleds With $C_{ie} Y < 0.08$ And External Quantum Efficiency Approaching 20 %,” Vol. 97, No. June, 2021.
- [14] M. Yaşar, “Increasing The Efficiency Of Dye-Sensitized Solar Cells Using Ionim Liquid Based Electrolytes,” 2018.
- [15] P. Kumar, N. Agrawal, V. K. Pandey, A. K. Gautam, S. K. Sharma, And S. D. Chaudhary, “Highly-Efficient Oled With Cesium Fluoride Electron Injection Layer,” *Solid. State. Electron.*, Vol. 183, No. May, P. 108031, 2021, Doi: 10.1016/J.Sse.2021.108031.
- [16] Y. Li, G. Xie, S. Gong, K. Wu, And C. Yang, “Dendronized Delayed Fluorescence Emitters For Non-Doped, Solution-Processed Organic Light-Emitting Diodes With High Efficiency And Low Efficiency Roll-Off Simultaneously: Two Parallel Emissive Channels,” *Chem. Sci.*, Vol. 7, No. 8, Pp. 5441–5447, 2016, Doi: 10.1039/C6sc00943c.
- [17] S. Eok Jang, S. Ok Jeon, Y. Joo Cho, K. Soo Yook, And J. Yeob Lee, “Stable Efficiency Roll-Off In Red Phosphorescent Organic Light-Emitting Diodes Using A Spirofluorenebenzofluorene Based Carbazole Type Host Material,” *J. Lumin.*, Vol. 130, No. 11, Pp. 2184–2187, 2010, Doi: 10.1016/J.Jlumin.2010.06.017.
- [18] J. Zhao Et Al., “Reducing Efficiency Roll-Off Of Phosphorescent Organic Light Emitting Diodes By Using Phosphor Assisted Energy Funneling,” *Org. Electron.*, Vol. 87, No. September, P. 105985, 2020, Doi: 10.1016/J.Orgel.2020.105985.
- [19] A. Güney, M. B. Yelten, O. Ferhanoglu, And N. Kahraman, “Experimental And Modeling Studies Of Automotive-Qualified Oleds Under Electrical Stress,” *Microelectron. Reliab.*, Vol. 111, No. June, 2020, Doi: 10.1016/J.Microrel.2020.113704.

- [20] S. Tongsuk Et Al., “Enhancement Of Performance Of Oleds Using Double İndolo[3,2-B]İndole Electron-Donors Based Emitter,” J. Lumin., Vol. 238, No. April, P. 118287, 2021, Doi: 10.1016/J.Jlumin.2021.118287.
- [21] H. W. Bae Et Al., “Efficiency Enhancement İn Fluorescent Deep-Blue Oleds By Boosting Singlet Exciton Generation Through Triplet Fusion And Charge Recombination Rate,” Org. Electron., Vol. 70, No. March, Pp. 1–6, 2019, Doi: 10.1016/J.Orgel.2019.03.018.
- [22] Y. Yuan, “Supporting Information Bipolar Phenanthroimidazole Derivatives Containing Bulky Polyaromatic Hydrocarbons For Non-Doped Blue Electroluminescence Devices With High Efficiency And Low Efficiency Roll-Off Figure S1 . Tga Curves For Ttp-Tp1 , Dpt-Tp1 And Dpf-,” Chem. Mater, Vol. 25, No. 24, 2013.
- [23] K. Akedo, A. Miura, H. Fujikawa, And Y. Taga, “Flexible Oleds For Automobiles Using Sinx/Cnx:H Multi-Layer Barrier Films And Epoxy Substrates,” Journal Of Photopolymer Science And Technology, Vol. 19, No. 2. Pp. 203–208, 2006, Doi: 10.2494/Photopolymer.19.203.
- [24] V. C. Bender Et Al., “Modeling And Characterization Of Organic Light-Emitting Diodes Including Capacitance Effect,” Vol. 62, No. 10, Pp. 3314–3321, 2015.
- [25] L. Liu, S. Li, Y. M. Zhou, L. Y. Liu, And X. A. Cao, “High-Current Stressing Of Organic Light-Emitting Diodes With Different Electron-Transport Materials,” Microelectron. Reliab., Vol. 71, Pp. 106–110, 2017, Doi: 10.1016/J.Microrel.2017.03.002.
- [26] E. Kollár, L. Pohl, A. Poppe, And Z. Kohári, “Nonlinear Electro-Thermal And Light Output Modeling And Simulation Of Oleds,” Period. Polytech. Electr. Eng. Comput. Sci., Vol. 58, No. 2, Pp. 43–53, 2014, Doi: 10.3311/Ppee.7477.
- [27] Demirci, İ. (2021). *Bazı Tiyenotiyofenlerin Sentezi Ve Uygulamaları*. Yayınlanmamış Yüksek Lisans Tezi. Eskişehir: Eskişehir Teknik Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü.
- [28] J. Lee, J. I. Lee, J. Y. Lee, And H. Y. Chu, “Stable Efficiency Roll-Off İn Blue Phosphorescent Organic Light-Emitting Diodes By Host Layer Engineering,”

- Org. Electron., Vol. 10, No. 8, Pp. 1529–1533, 2009, Doi: 10.1016/J.Orgel.2009.08.020.
- [29] L. L. Yan, C. Han, B. Shi, Y. Zhao, And X. D. Zhang, “A Review On The Crystalline Silicon Bottom Cell For Monolithic Perovskite/Silicon Tandem Solar Cells,” Mater. Today Nano, Vol. 7, P. 100045, 2019, Doi: 10.1016/J.Mtnano.2019.100045.
- [30] S. Liu Et Al., “High-Efficiency Organic Solar Cells With Low Non-Radiative Recombination Loss And Low Energetic Disorder,” Nat. Photonics, Vol. 14, No. 5, Pp. 300–305, 2020, Doi: 10.1038/S41566-019-0573-5.
- [31] A. Mahmood Et Al., “Introducing Four 1,1-Dicyanomethylene-3-Indanone End-Capped Groups As An Alternative Strategy For The Design Of Small-Molecular Nonfullerene Acceptors,” J. Phys. Chem. C, Vol. 122, No. 51, Pp. 29123–29128, 2018, Doi: 10.1021/Acs.Jpcc.8b09336.
- [32] H. Bai Et Al., “An Electron Acceptor Based On Indacenodithiophene And 1,1-Dicyanomethylene-3-Indanone For Fullerene-Free Organic Solar Cells,” J. Mater. Chem. A, Vol. 3, No. 5, Pp. 1910–1914, 2015, Doi: 10.1039/C4ta06004k.
- [33] C. He Et Al., “Near-Infrared Electron Acceptors With Unfused Architecture For Efficient Organic Solar Cells,” Acs Appl. Mater. Interfaces, Vol. 12, No. 14, Pp. 16700–16706, 2020, Doi: 10.1021/Acsami.0c00837.
- [34] S. Du Et Al., “Nonfullerene Acceptors From Thieno[3,2-B]Thiophene-Fused Naphthalene Donor Core With Six-Member-Ring Connection For Efficient Organic Solar Cells,” Dye. Pigment., Vol. 185, No. Pa, P. 108892, 2021, Doi: 10.1016/J.Dyepig.2020.108892.
- [35] X. W. Zhu, K. Lu, H. Li, R. M. Zhou, And Z. X. Wei, “Naphthodithiophene-Based Donor Materials For Solution Processed Organic Solar Cells,” Chinese Chem. Lett., Vol. 27, No. 8, Pp. 1271–1276, 2016, Doi: 10.1016/J.Cclet.2016.06.015.
- [36] M. Asif, “A Brief Study Of Various Synthetic Methods Of Triazoles Derivatives And Their Biological Potential,” Moroccan J. Chem., Vol. 2, No. 3, Pp. 2–3, 2014.
- [37] Kui Jiang, Qingya Wei, Joshua Yuk Lin Lai, ..., Harald Ade, Yingping Zou, He Yan, “Alkyl Chain Tuning Of Small Molecule Acceptors For Efficient Organic

Solar Cells.

- [38] L. D. A Zuo Xiao A, 1, Xue Jia A, 1, Dan Li A, B, Shizhe Wang A, Xinjian Geng A, Feng Liu C,†, Junwu Chen D,†, Shangfeng Yang B,†, Thomas P. Russell E, “26 Ma Cm² Jsc From Organic Solar Cells With A Low-Bandgap Nonfullerene Acceptor,” *Sci. Bull. J.*, Vol. 62, Pp. 1494–1496 Contents, 2017.
- [39] B Nevena Marinova A, Silvia Valero A, Juan Luis Delgado A, “Organic And Perovskite Solar Cells: Working Principles, Materials And Interfaces,” *J. Colloid Interface Sci. J. Homepage*, Vol. 488, Pp. 373–389, 2017, Doi: 10.1016/J.Jcis.2016.11.021.
- [40] B. Kan Et Al., “Asymmetrical Side-Chain Engineering Of Small-Molecule Acceptors Enable High-Performance Nonfullerene Organic Solar Cells,” *Nano Energy*, Vol. 67, No. October 2019, P. 104209, 2020, Doi: 10.1016/J.Nanoen.2019.104209.
- [41] Q. Fan Et Al., “Chlorine Substituted 2d-Conjugated Polymer For High-Performance Polymer Solar Cells With 13.1% Efficiency Via Toluene Processing,” *Nano Energy*, Vol. 48, No. April, Pp. 413–420, 2018, Doi: 10.1016/J.Nanoen.2018.04.002.
- [42] X. Li Et Al., “Design A Thieno[3,2-B]Thiophene Bridged Nonfullerene Acceptor To Increase Open-Circuit Voltage, Short-Circuit Current-Density And Fill Factor Via The Ternary Strategy,” *Chinese Chem. Lett.*, Vol. 31, No. 5, Pp. 1243–1247, 2020, Doi: 10.1016/J.Cclet.2019.10.029.
- [43] T. Fujita, T. Matsui, M. Sumita, Y. Imamura, And K. Morihashi, “Theoretical Study On Naphthobischalcogenadiazole Conjugated Polymer Systems And C61 Derivative As Organic Photovoltaic Semiconductors,” *Chem. Phys. Lett.*, Vol. 693, Pp. 188–193, 2018, Doi: 10.1016/J.Cplett.2018.01.021.
- [44] J. L. Peng Gu, Dingyu Yang, Xinghua Zhu, Hui Sun And Research, “Graphical Abstract Toc,” *Chem. Phys. Lett.*, Vol. 693, Pp. I–VIII, 2018, Doi: 10.1016/S0009-2614(18)30067-8.
- [45] K. Rajavelu And P. Rajakumar, “Synthesis And Dssc Application Of Donor-Acceptor Stilbenoid Dendrimers With Triphenylamine As Core And

- Benzothiazole As Surface Unit,” *Org. Electron.*, Vol. 56, No. December 2017, Pp. 192–200, 2018, Doi: 10.1016/J.Orgel.2018.02.020.
- [46] P. Rajakumar, A. Thirunarayanan, S. Raja, S. Ganesan, And P. Maruthamuthu, “Photophysical Properties And Dye-Sensitized Solar Cell Studies On Thiadiazole-Triazole-Chalcone Dendrimers,” *Tetrahedron Lett.*, Vol. 53, No. 9, Pp. 1139–1143, 2012, Doi: 10.1016/J.Tetlet.2011.12.098.
- [47] Z. Yang, C. Liu, C. Shao, C. Lin, And Y. Liu, “First-Principles Screening And Design Of Novel Triphenylamine-Based D--A Organic Dyes For Highly Efficient Dye-Sensitized Solar Cells,” *J. Phys. Chem. C*, Vol. 119, No. 38, Pp. 21852–21859, 2015, Doi: 10.1021/Acs.Jpcc.5b05745.
- [48] Y. Wan Et Al., “Intramolecular Charge Transfer Induced Emission From Triphenylamine-O-Carborane Dyads,” *Rsc Adv.*, Vol. 7, No. 56, Pp. 35543–35548, 2017, Doi: 10.1039/C7ra06237k.
- [49] H. Y. Wang, G. Chen, X. P. Xu, And S. J. Ji, “Synthesis And Characterization Of Triphenylamine-Benzothiazole-Based Donor And Acceptor Materials,” *Synth. Met.*, Vol. 160, No. 9–10, Pp. 1065–1072, 2010, Doi: 10.1016/J.Synthmet.2010.02.028.
- [50] T. Yasuda, K. Namekawa, T. Iijima, And T. Yamamoto, “New Luminescent 1,2,4-Triazole/Thiophene Alternating Copolymers: Synthesis, Characterization, And Optical Properties,” *Polymer (Guildf.)*, Vol. 48, No. 15, Pp. 4375–4384, 2007, Doi: 10.1016/J.Polymer.2007.05.061.
- [51] R. Rishikesan Et Al., “Synthesis Of Some Novel Piperidine Fused 5-Thioxo-1h-1,2,4-Triazoles As Potential Antimicrobial And Antitubercular Agents,” *J. Chem. Sci.*, Vol. 133, No. 1, 2021, Doi: 10.1007/S12039-020-01872-4.
- [52] B. Zhao Et Al., “Synthesis And Photovoltaic Properties Of The Polymers Base On Thiophene Derivatives With Electron-Deficient 3-Nitro-1,2,4-Triazole Side Chains,” *Thin Solid Films*, Vol. 539, Pp. 267–273, 2013, Doi: 10.1016/J.Tsf.2013.04.152.
- [53] A. Diaz-Ortiz, P. Prieto, J. R. Carrillo, R. Martin, And I. Torres, “Applications Of Metal-Free 1,2,4-Triazole Derivatives In Materials Science,” *Curr. Org. Chem.*,

Vol. 19, No. 7, Pp. 568–584, 2015, Doi: 10.2174/1385272819666150309234921.

- [54] A. S. Kostyuchenko, V. L. Yurpalov, A. Kurowska, W. Domagala, A. Pron, And A. S. Fisyuk, “Synthesis Of New, Highly Luminescent Bis(2,2’-Bithiophen-5-Yl) Substituted 1,3,4-Oxadiazole, 1,3,4-Thiadiazole And 1,2,4-Triazole,” *Beilstein J. Org. Chem.*, Vol. 10, Pp. 1596–1602, 2014, Doi: 10.3762/Bjoc.10.165.
- [55] Y. Zhang, W. Haske, D. Cai, S. Barlow, B. Kippelen, And S. R. Marder, “Efficient Blue-Emitting Electrophosphorescent Organic Light-Emitting Diodes Using 2-(3,5-Di(Carbazol-9-Yl)Phenyl)-5-Phenyl-1,3,4-Oxadiazole As An Ambipolar Host,” *Rsc Adv.*, Vol. 3, No. 45, Pp. 23514–23520, 2013, Doi: 10.1039/C3ra43720e.
- [56] J. H. Kim, D. Y. Yoon, J. W. Kim, And J. J. Kim, “New Host Materials With High Triplet Energy Level For Blue-Emitting Electrophosphorescent Device,” *Synth. Met.*, Vol. 157, No. 18–20, Pp. 743–750, 2007, Doi: 10.1016/J.Synthmet.2007.08.001.
- [57] J. Of, “One-Pot And Two-Pot Methods For Chalcone Derived Pyrimidines Synthesis And Applications Saba,” *J. Heterocycl. Chem.*, Vol. 58, No. 6, Pp. 1205–1208, 2021, Doi: 10.1002/Jhet.4034.
- [58] K. Colanceska-Ragenovic, V. Dimova, V. Kakurinov, D. G. Molnar, And A. Buzarovska, “Synthesis, Antibacterial And Antifungal Activity Of 4-Substituted-5-Aryl-1, 2,4-Triazoles,” *Molecules*, Vol. 6, No. 10, Pp. 815–824, 2001, Doi: 10.3390/61000815.
- [59] N. Y. Khromova, M. M. Fedorov, S. I. Malekin, And A. V. Kutkin, “Synthesis Of 3,5-Disubstituted 1,2,4-Triazoles Containing An Amino Group,” *Russ. J. Org. Chem.*, Vol. 52, No.10, Pp. 1490–1495, 2016, Doi: 10.1134/S1070428016100195.
- [60] M. Law, D. J. Sirbuly, J. C. Johnson, J. Goldberger, R. J. Saykally, And P. Yang, “Nanoribbon Waveguides For Subwavelength Photonics İntegration,” *Science* (80-.), Vol. 305, No. 5688, Pp. 1269–1273, 2004, Doi: 10.1126/Science.1100999.
- [61] **http-1:**[http://www.Bilsenbesergil.Blogspot.Com/P/Optik-Dalga KlavuzuOptical-Waveguide. html](http://www.Bilsenbesergil.Blogspot.Com/P/Optik-Dalga%20KlavuzuOptical-Waveguide.html) (Eriřim tarihi 4.07.2021)
- [62] D. Cáceres Et Al., “Optical Waveguides From 4-Aryl-4h-1,2,4-Triazole-Based

- Supramolecular Structures,” *Chem. Commun.*, Vol. 49, No. 6, Pp. 621–623, 2013, Doi: 10.1039/C2cc37381e.
- [63] R. Martín Et Al., “Colored Optical Waveguides In Self-Assembled Thiadiazole-Based Materials,” *Dye. Pigment.*, Vol. 151, No. January, Pp. 327–334, 2018, Doi: 10.1016/J.Dyepig.2018.01.001.
- [64] G. Zou And K. M. Ok, “Novel Ultraviolet (Uv) Nonlinear Optical (Nlo) Materials Discovered By Chemical Substitution-Oriented Design,” *Chem. Sci.*, Vol. 11, No. 21, Pp. 5404–5409, 2020, Doi: 10.1039/D0sc01936d.
- [65] I. A. Al-Masoudi, Y. A. Al-Soud, N. J. Al-Salihi, And N. A. Al-Masoudi, “1,2,4-Triazoles: Synthetic Approaches And Pharmacological Importance. (Review),” *Chem. Heterocycl. Compd.*, Vol. 42, No. 11, Pp. 1377–1403, 2006, Doi: 10.1007/S10593-006-0255-3.
- [66] J. Vihar And B. Sambalpur, “4-Thiazolidinones,” *Indian J. Chem*, 1979.
- [67] O. P. Shvaika And N. A. Kovach, “Structure And Characteristics Of The Ionic Forms Of Heteroarenium Salts In Organic Solvents (Review),” *Chem. Heterocycl. Compd.*, Vol. 45, No. 11, Pp. 1287–1301, 2009, Doi: 10.1007/S10593-010-0424-2.
- [68] E. Palaska, G. Şahin, P. Kelicen, N. T. Durlu, And G. Altinok, “Synthesis And Anti-Inflammatory Activity Of 1-Acylthiosemicarbazides, 1,3,4-Oxadiazoles, 1,3,4-Thiadiazoles And 1,2,4-Triazole-3-Thiones,” *Farmaco*, Vol. 57, No. 2, Pp. 101–107, 2002, Doi: 10.1016/S0014-827x(01)01176-4.
- [69] Z. Zhao, S. Reischauer, B. Pieber, And M. Delbianco, “Carbon Dot/Tio2 Nanocomposites As Photocatalysts For Metallaphotocatalytic Carbon-Heteroatom Cross-Couplings,” *Green Chem.*, 2021, Doi: 10.1039/D1gc01284c.
- [70] A. Singh Et Al., “A Mini Review On Synthesis Of Pyrazinoindole: Recent Progress And Perspectives,” *Mini. Rev. Org. Chem.*, Vol. 17, No. January, Pp. 504–514, 2020, Doi: 10.2174/1570193x17999200806151209.
- [71] G. I. Koldobskii, A. Hrabalek, And K. A. Esikov, “1-Substituted 5-Alkyl(Aryl)Sulfanyltetrazoles And Their Derivatives,” *Russ. J. Org. Chem.*, Vol. 40, No. 4, Pp. 447–461, 2004, Doi: 10.1023/B:Rujo.0000036061.40446.49.

- [72] C. O. K. And A. Stadler, New Methodologies And Techniques For A Sustainable Organic Chemistry. Hungary: Springer, 2005.
- [73] F. Fages, Topics In Current Chemistry: Preface, Vol. 256. 2005.
- [74] S. Alfalah, Quantum Dynamics Of Photochemical Model Reactions Via Conical Intersections Quantendynamik Photochemischer Modellreaktionen Entlang Konischer Durchschneidungen. 2010.
- [75] C. Hättig, W. Klopper, A. Köhn, And D. P. Tew, “Explicitly Correlated Electrons In Molecules,” Chem. Rev., Vol. 112, No. 1, Pp. 4–74, 2012, Doi: 10.1021/Cr200168z.
- [76] S. Liu, P. Süle, R. López-Boada, And Á. Nagy, “Applications To Atoms, Ions, And Molecules Of A Novel Form Of The Correlation Energy Density Functional,” Chem. Phys. Lett., Vol. 257, No. 1–2, Pp. 68–74, 1996, Doi: 10.1016/0009-2614(96)00515-5.
- [77] Gupta, V.P. (2016). *Principles And Applications Of Quantum Chemistry*, Principles-And-Applications, India, Elsevier.
- [78] Gürkan, B. (2020). *Yarı İletken Kalkogenid Bileşiklerin Yapısal,Fonon Ve Elektronik Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi İle İncelenmesi*. Yayınlanmamış Doktora Tezi. Gebze: Gebze Teknik Üniversitesi,Fen Bilimleri Enstitüsü.
- [79] L. Nucci, D. Narvaez, And T. Krettenauer, Essentials of Computational Chemistry, No. June. 2004.
- [80] And E. K. U. G. S Kurth, M A L Marques, “Density-Functional Theory,” Elsevier Ltd, 2005.
- [81] Parlak,C. (2009). *1-Fenilpiperazin Molekülünün Titreşim Bandlarının Kuantum Kimyasal Hesaplamalarla Belirlenmesi ve Bu Moleküle Ait Hofmann Tipi Kompleks ve Klatratların Titreşim Spektroskopisiyle incelenmesi*. Yayınlanmamış Doktora tezi. Eskişehir: Anadolu Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü.
- [82] Tamer, Ö. (2016). *2-Piridinkarboksilik Asit İçeren Bazı Geçiş Metal Komplekslerinin Sentezi Yapılarının Analizi Ve Doğrusal Olmayan Optik*

Özelliklerinin İncelenmesi. Yayınlanmamış Doktora Tezi. Sakarya: Sakarya Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü.

- [83] G. Zhang, G. Liu, L. Wang, And J. T. S. Irvine, “Inorganic Perovskite Photocatalysts For Solar Energy Utilization,” *Chem. Soc. Rev.*, Vol. 45, No. 21, Pp. 5951–5984, 2016, Doi: 10.1039/C5cs00769k.
- [84] F. Kracke, I. Vassilev, And J. O. Krömer, “Microbial Electron Transport And Energy Conservation - The Foundation For Optimizing Bioelectrochemical Systems,” *Front. Microbiol.*, Vol. 6, No. Jun, Pp. 1–18, 2015, Doi: 10.3389/Fmicb.2015.00575.
- [85] S. Bibi, F. Farooq, Shafiq-Ur-Rehman, F. Q. Bai, And H. X. Zhang, “Dft And Td-Dft Studies Of Phenothiazine Based Derivatives As Fluorescent Materials For Semiconductor Applications,” *Mater. Sci. Semicond. Process.*, Vol. 134, No. February, 2021, Doi: 10.1016/J.Mssp.2021.106036.
- [86] Y. Lee Et Al., “Derivatives As Solution-Processable Organic Semiconductors For Organic Field-Effect Transistors,” *Synth. Met.*, Vol. 282, No. September, Pp. 1–8, 2021.
- [87] J. Liu, Y. Sun, And Z. Li, “Ag Loaded Flower-Like Batio 3 Nanotube Arrays: Fabrication And Enhanced Photocatalytic Property,” *Crystengcomm*, Vol. 14, No. 4, Pp. 1473–1478, 2012, Doi: 10.1039/C1ce05949a.
- [88] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. vd., “Gaussian’16 {R}evision {A}.03”. 2019.
- [89] ChemAxon Marvin Suite “Pushing the limit of logP prediction accuracy: ChemAxon’s results for the SAMPL 6 blind challenge”. ChemAxon (<https://www.chemaxon.com>), 2019.
- [90] PerkinElmer ChemOffice Suite.v20.1.1.125, 2021
- [91] Triplet State Energy - An Overview, Sciencedirect Topics
- [92] Hung, W.Y.; Tu, G.M.; Chen, S.W.; Chi, Y. Phenylcarbazole-Dipyridyl Triazole Hybrid As Bipolar Host Material For Phosphorescent Oleds. *J. Mater. Chem.*, 2012, 22, 5410-5418.

- [93] Akış, M . (2019) . *Furaan Sübsitüe Konjuge Triazol Bişiklerinin Sentezi Ve Kuantum Kimyasal Hesaplamaları*. Yayınlanmamış Yüksek Lisans Tezi, Eskişehir, Andolu Üniversitesi, Fen Bilimler Enstitüsü.
- [94] Foresman, J.B. Frisch, E. (1993) Exploring Chemistry With Electronic Structure Methods, Gaussian Inc., Pittsburgh, Pa, Usa.



EKLER

EK-1: M11,M12 kodlu bileşiklerin çalışılan çözücü fazları için hesaplanmış Mulliken atomik yükleri.

M11				M21			
Atom	GAZ	CHCl3	DMSO	Atom	GAZ	CHCl3	DMSO
1-C	-0.10	0.11	-0.10	1-C	-0.10	-0.12	-0.11
2-C	-0.10	0.11	0.11	2-C	-0.10	-0.11	-0.11
3-C	-0.08	0.10	-0.09	3-C	-0.09	-0.10	-0.10
4-C	-0.09	0.11	0.11	4-C	-0.10	-0.11	-0.11
5-C	-0.08	0.11	0.11	5-C	-0.10	-0.11	-0.11
6-C	-0.09	0.11	-0.10	6-C	-0.10	-0.11	-0.11
7-C	-0.10	0.11	-0.11	7-C	-0.10	-0.11	-0.11
8-C	-0.08	0.10	0.10	8-C	-0.08	-0.10	-0.10
9-C	-0.09	0.11	-0.11	9-C	-0.10	-0.11	-0.11
10-C	-0.08	0.11	-0.10	10-C	-0.10	-0.11	-0.11
11-C	0.22	0.24	0.24	11-C	0.24	0.24	0.24
12-C	0.20	0.24	0.24	12-C	0.24	0.24	0.24
13-C	-0.63	-0.64	0.64	13-N	-0.64	-0.64	-0.64
14-C	-0.13	-0.14	-0.13	14-C	-0.13	-0.14	-0.14
15-C	-0.13	-0.12	0.12	15-C	-0.11	-0.12	-0.12
16-C	0.25	0.27	0.27	16-C	0.26	0.27	0.27
17-C	-0.10	-0.13	0.13	17-C	-0.12	-0.13	-0.13
18-C	-0.12	-0.14	0.14	18-C	-0.13	-0.14	-0.14
19-C	-0.08	-0.11	0.11	19-C	-0.10	-0.11	-0.11
20-C	-0.09	-0.11	0.11	20-C	-0.10	-0.11	-0.11
21-C	-0.08	-0.10	0.10	21-C	-0.08	-0.10	-0.10
22-C	-0.10	-0.11	0.11	22-C	-0.10	-0.11	-0.11
23-C	-0.10	-0.11	0.11	23-C	-0.10	-0.11	-0.11
24-C	-0.08	-0.11	-0.11	24-C	-0.10	-0.11	-0.10
25-C	-0.09	-0.11	0.11	25-C	-0.10	-0.11	-0.11
26-C	-0.08	-0.10	-0.09	26-C	-0.09	-0.10	-0.10
27-C	-0.10	-0.11	0.11	27-C	-0.10	-0.11	-0.11
28-C	-0.10	-0.11	-0.10	28-C	-0.10	-0.11	-0.11
29-C	0.20	0.24	0.24	29-C	0.24	0.24	0.24
30-C	0.22	0.24	0.24	30-C	0.24	0.24	0.24
31-N	-0.63	-0.64	-0.64	31-N	-0.64	-0.64	-0.64
32-C	-0.12	-0.14	-0.13	32-C	-0.12	-0.14	-0.14

EK-1: (Devam) M11,M12 kodlu bileşiklerin çalışılan çözücü fazları için hesaplanmış Mulliken atomik yükleri

33-C	-0.10	-0.13	-0.12	33-C	-0.12	-0.13	-0.13
34-C	0.25	0.27	0.27	34-C	0.26	0.27	0.27
35-C	-0.13	-0.12	-0.12	35-C	-0.11	-0.12	-0.12
36-C	-0.13	-0.14	0.14	36-C	-0.13	-0.14	-0.14
37-C	0.06	0.04	0.040	37-C	0.05	0.042	0.04
38-C	0.06	0.04	0.040	38-C	0.05	0.042	0.04
39-C	-0.05	-0.07	0.067	39-C	-0.06	-0.07	-0.07
40-C	-0.10	-0.11	-0.10	40-C	-0.14	-0.14	-0.11
41-C	-0.07	-0.08	0.080	41-C	0.13	0.13	-0.08
42-C	-0.10	-0.11	-0.10	42-C	-0.14	-0.14	-0.11
43-C	-0.08	-0.07	-0.06	43-C	-0.06	-0.07	-0.07
44-C	0.16	0.15	0.14	44-C	0.16	0.14	0.18
45-O	-0.50	-0.50	0.51	45-C	-0.49	-0.50	-0.51
46-C	0.30	0.31	0.31	46-C	0.32	0.31	0.31
47-C	-0.16	-0.18	-0.17	47-C	-0.17	-0.18	-0.18
48-C	-0.15	-0.16	-0.16	48-C	-0.16	-0.16	-0.16
49-C	0.34	0.34	0.34	49-C	0.34	0.34	0.34
50-N	-0.64	-0.63	-0.62	50-N	-0.63	-0.63	-0.63
51-C	0.42	0.45	0.46	51-C	0.44	0.45	0.46
52-N	-0.34	-0.41	0.42	52-N	-0.36	-0.41	-0.42
53-N	-0.34	-0.41	0.42	53-N	-0.36	-0.41	-0.42
54-C	0.42	0.45	0.46	54-C	0.44	0.45	0.48
55-O	-0.50	-0.50	-0.50	55-O	-0.49	-0.50	-0.52
56-C	0.34	0.34	0.34	56-C	0.34	0.34	0.33
57-C	-0.15	-0.16	-0.16	57-C	-0.16	-0.16	-0.14
58-C	-0.16	-0.18	-0.17	58-C	-0.17	-0.18	-0.18
59-C	0.30	0.31	0.31	59-C	0.32	0.31	0.31
60-H	0.10	0.11	0.11	60-H	0.10	0.11	0.11
61-H	0.09	0.10	0.11	61-H	0.09	0.10	0.11
62-H	0.08	0.10	0.10	62-H	0.08	0.10	0.10
63-H	0.09	0.10	0.11	63-H	0.09	0.10	0.11
64-H	0.10	0.11	0.11	64-H	0.10	0.11	0.11
65-H	0.10	0.11	0.11	65-H	0.10	0.11	0.11
66-H	0.09	0.10	0.11	66-H	0.09	0.10	0.11
67-H	0.09	0.097	0.10	67-H	0.08	0.10	0.10

EK-1: (Devam) M11,M12 kodlu bileşiklerin çalışılan çözücü fazları için hesaplanmış Mulliken atomik yükleri

68-H	0.09	0.10	0.11	68-H	0.09	0.10	0.11
69-H	0.10	0.11	0.11	69-H	0.10	0.11	0.11
70-H	0.12	0.12	0.11	70-H	0.13	0.12	0.12
71-H	0.11	0.11	0.11	71-H	0.11	0.11	0.11
72-H	0.10	0.11	0.11	72-H	0.10	0.11	0.11
73-H	0.09	0.10	0.11	73-H	0.08	0.10	0.11
74-H	0.10	0.11	0.11	74-H	0.10	0.11	0.11
75-H	0.09	0.10	0.11	75-H	0.09	0.10	0.11
76-H	0.08	0.10	0.10	76-H	0.08	0.10	0.10
77-H	0.09	0.10	0.11	77-H	0.09	0.10	0.11
78-H	0.10	0.11	0.11	78-H	0.09	0.11	0.11
79-H	0.10	0.11	0.11	79-H	0.09	0.11	0.11
80-H	0.09	0.10	0.11	80-H	0.09	0.10	0.11
81-H	0.08	0.10	0.10	81-H	0.08	0.10	0.10
82-H	0.09	0.10	0.11	82-H	0.09	0.10	0.11
83-H	0.10	0.11	0.11	83-H	0.10	0.11	0.11
84-H	0.09	0.10	0.11	84-H	0.08	0.104	0.11
85-H	0.10	0.11	0.11	85-H	0.10	0.11	0.11
86-H	0.11	0.11	0.11	86-H	0.11	0.11	0.11
87-H	.12	0.12	0.11	87-H	0.13	0.12	0.11
88-H	0.12	0.13	0.13	88-H	0.11	0.12	0.13
89-H	0.10	0.12	0.12	89-H	0.09	0.11	0.12
90-H	0.10	0.11	0.12	90-H	0.09	0.11	0.12
91-H	0.10	0.12	0.12	91-H	0.11	0.12	0.12
92-H	0.12	0.13	0.13	92-H	0.10	0.12	0.13
93-H	0.10	0.12	0.13	93-H	0.11	0.13	0.13
94-H	0.11	0.13	0.13	94-H	0.11	0.13	0.13
95-H	0.11	0.13	0.13	95-H	0.10	0.12	0.13
96-H	0.10	0.12	0.13	96-C	-0.38	-0.39	0.13
				97-H	0.12	0.13	-0.11
				98-H	0.135	0.14	-0.11
				99-H	0.121	0.13	-0.10

EK-2: M31,M41 kodlu bileşiklerin çalışılan çözücü fazları için hesaplanmış Mulliken atomik yükleri

M31				M41			
Atom	GAZ	CHCl3	DMSO	Atom	GAZ	CHCl3	DMSO
1-C	0.10	-0.11	-0.11	1-C	-0.10	-0.11	-0.11
2-C	0.10	-0.11	-0.11	2-C	-0.10	-0.11	-0.11
3-C	0.09	-0.10	-0.10	3-C	-0.09	-0.11	-0.10
4-C	-0.10	-0.11	-0.11	4-C	-0.10	-0.11	-0.11
5-C	-0.10	-0.11	-0.11	5-C	-0.10	-0.11	-0.11
6-C	-0.10	-0.11	-0.11	6-C	-0.10	-0.11	-0.11
7-C	-0.10	-0.11	-0.11	7-C	-0.10	-0.11	-0.11
8-C	-0.08	-0.10	-0.10	8-C	-0.08	-0.10	-0.10
9-C	-0.10	-0.11	-0.11	9-C	-0.10	-0.11	-0.11
10-C	-0.10	-0.11	-0.11	10-C	-0.10	-0.11	-0.11
11-C	0.24	0.24	0.24	11-C	0.24	0.24	0.24
12-C	0.24	0.24	0.24	12-C	0.24	0.24	0.24
13-N	-0.64	-0.64	-0.64	13-N	-0.64	-0.64	-0.64
14-C	-0.13	-0.14	-0.14	14-C	-0.13	-0.14	-0.14
15-C	-0.11	-0.12	-0.12	15-C	-0.11	-0.12	-0.12
16-C	0.27	0.27	0.28	16-C	0.27	0.27	0.27
17-C	-0.12	-0.13	-0.13	17-C	-0.12	-0.13	-0.13
18-C	-0.13	-0.14	-0.14	18-C	-0.13	-0.14	-0.14
19-C	-0.10	-0.11	-0.11	19-C	-0.10	-0.11	-0.11
20-C	-0.10	-0.11	-0.11	20-C	-0.10	-0.11	-0.11
21-C	-0.08	-0.10	-0.10	21-C	-0.08	-0.10	-0.10
22-C	-0.10	-0.11	-0.11	22-C	-0.10	-0.11	-0.11
23-C	-0.10	-0.11	-0.11	23-C	-0.10	-0.11	-0.11
24-C	-0.10	-0.11	-0.11	24-C	-0.10	-0.11	-0.11
25-C	-0.10	-0.11	-0.11	25-C	-0.10	-0.11	-0.11
26-C	-0.09	-0.10	-0.10	26-C	-0.09	-0.10	-0.10
27-C	-0.10	-0.11	-0.11	27-C	-0.10	-0.11	-0.11
28-C	-0.10	-0.11	-0.11	28-C	-0.10	-0.11	-0.11
29-C	0.24	0.24	0.24	29-C	0.24	0.24	0.24
30-C	0.24	0.24	0.24	30-C	0.24	0.24	0.24

EK-2: (Devam) M31,M41 kodlu bileşiklerin çalışılan çözücü fazları için hesaplanmış Mulliken atomik yükleri

31-N	-0.64	-0.64	-0.64	31-N	-0.64	-0.64	-0.64
32-C	-0.13	-0.14	-0.14	32-C	-0.13	-0.14	-0.14
33-C	-0.12	-0.13	-0.13	33-C	-0.12	-0.13	-0.13
34-C	0.27	0.27	0.28	34-C	0.27	0.27	0.27
35-C	0.11	-0.12	-0.12	35-C	-0.11	-0.12	-0.12
36-C	0.13	-0.14	-0.14	36-C	-0.13	-0.14	-0.14
37-C	0.046	0.042	0.041	37-C	0.046	0.042	0.041
38-C	0.05	0.04	0.04	38-C	0.05	0.04	0.04
39-C	0.05	-0.06	-0.06	39-C	-0.06	-0.07	-0.07
40-C	0.09	-0.09	-0.09	40-C	-0.16	-0.15	-0.15
41-C	0.08	-0.09	-0.09	41-C	0.36	0.37	0.37
42-C	0.09	-0.09	-0.09	42-C	-0.16	-0.15	-0.15
43-C	0.05	-0.06	-0.06	43-C	-0.06	-0.07	-0.07
44-C	0.15	0.15	0.14	44-C	0.15	0.14	0.14
45-O	-0.49	-0.50	-0.51	45-C	-0.49	-0.50	-0.51
46-C	0.32	0.31	0.31	46-C	0.32	0.31	0.31
47-C	0.17	-0.18	-0.18	47-C	-0.17	-0.18	-0.18
48-C	0.16	-0.16	-0.16	48-C	-0.16	-0.16	-0.16
49-C	0.35	0.34	0.34	49-C	0.35	0.34	0.34
50-N	-0.66	-0.64	-0.63	50-N	-0.64	-0.11	-0.63
51-C	0.44	0.45	0.46	51-C	0.44	-0.11	0.46
52-N	-0.36	-0.40	-0.42	52-N	-0.36	-0.10	-0.42
53-N	0.36	-0.40	-0.42	53-N	-0.36	-0.11	-0.42
54-C	0.44	0.45	0.46	54-C	0.44	-0.11	0.46
55-O	0.49	-0.50	-0.51	55-O	-0.49	-0.11	-0.51
56-C	0.35	0.34	0.34	56-C	0.35	-0.11	0.34
57-C	0.16	-0.16	-0.16	57-C	-0.16	-0.10	-0.16
58-C	-0.16	-0.18	-0.18	58-C	-0.17	-0.11	-0.18
59-C	0.32	0.31	0.31	59-C	0.32	-0.11	0.31
60-H	0.10	0.11	0.11	60-H	0.10	0.24	0.11
61-H	0.09	0.10	0.11	61-H	0.09	0.24	0.10

EK-2: (Devam) M31,M41 kodlu bileşiklerin çalışılan çözücü fazları için hesaplanmış Mulliken atomik yükleri

62-H	0.08	0.10	0.10	62-H	0.08	-0.64	0.10
63-H	0.09	0.10	0.11	63-H	0.09	-0.14	0.11
64-H	0.10	0.11	0.11	64-H	0.10	-0.12	0.11
65-H	0.099	0.11	0.11	65-H	0.10	0.27	0.11
66-H	0.09	0.10	0.11	66-H	0.10	-0.13	0.11
67-H	0.08	0.10	0.10	67-H	0.10	-0.14	0.10
68-H	0.09	0.10	0.106	68-H	0.09	-0.11	0.11
69-H	0.100	0.10	0.108	69-H	0.10	-0.11	0.11
70-H	0.126	0.12	0.114	70-H	0.13	-0.10	0.11
71-H	0.105	0.11	0.11	71-H	0.11	-0.11	0.11
72-H	0.101	0.11	0.11	72-H	0.10	-0.11	0.11
73-H	0.084	0.10	0.11	73-H	0.08	-0.11	0.11
74-H	0.10	0.11	0.11	74-H	0.10	-0.11	0.11
75-H	0.089	0.10	0.11	75-H	0.09	-0.10	0.11
76-H	0.085	0.10	0.10	76-H	0.08	-0.11	0.10
77-H	0.088	0.10	0.11	77-H	0.09	-0.11	0.11
78-H	0.099	0.11	0.11	78-H	0.10	0.24	0.11
79-H	0.099	0.10	0.11	79-H	0.10	0.24	0.11
80-H	0.088	0.10	0.11	80-H	0.09	-0.64	0.11
81-H	0.083	0.10	0.10	81-H	0.08	-0.14	0.10
82-H	0.088	0.10	0.11	82-H	0.09	-0.13	0.11
83-H	0.100	0.11	0.11	83-H	0.10	0.27	0.11
84-H	0.084	0.10	0.11	84-H	0.08	-0.12	0.11
85-H	0.101	0.11	0.11	85-H	0.10	-0.14	0.11
86-H	0.106	0.11	0.11	86-H	0.11	0.042	0.11
87-H	0.126	0.14	0.11	87-H	0.13	0.042	0.11
88-H	0.126	0.14	0.14	88-H	0.13	-0.07	0.14
89-H	0.125	0.14	0.14	89-H	0.12	-0.15	0.14
90-H	0.125	0.14	0.14	90-H	0.12	0.37	0.14
91-H	0.126	0.14	0.14	91-H	0.12	-0.15	0.14
92-H	0.099	0.12	0.13	92-H	0.10	-0.065	0.13
93-H	0.11	0.13	0.13	93-H	0.11	0.14	0.13

EK-2: (Devam) M31,M41 kodlu bileşiklerin çalışılan çözücü fazları için hesaplanmış Mulliken atomik yükleri							
94-H	0.11	0.13	0.13	94-H	0.11	-0.50	0.13
95-H	0.10	0.12	0.13	95-H	0.10	0.31	0.13
96-Cl	0.01	-0.02	-0.02	96-F	-0.29	-0.18	-0.30

EK-3: M51 kodlu bileşiklerin çalışılan çözücü fazları için hesaplanmış Mulliken atomik yükleri

M51			
Atom	GAZ	CHCL₃	DMSO
1-C	-0.10	-0.11	-0.11
2-C	-0.10	-0.11	-0.11
3-C	-0.09	-0.10	-0.10
4-C	-0.10	-0.11	-0.11
5-C	-0.10	-0.11	-0.11
6-C	-0.10	-0.11	-0.11
7-C	-0.10	-0.11	-0.11
8-C	-0.08	-0.10	-0.10
9-C	-0.10	-0.11	-0.11
10-C	-0.10	-0.11	-0.11
11-C	0.24	0.24	0.24
12-C	0.24	0.24	0.24
13-N	-0.64	-0.64	-0.64
14-C	-0.13	-0.14	-0.14
15-C	-0.11	-0.12	-0.12
16-C	0.27	0.27	0.28
17-C	-0.11	-0.13	-0.13
18-C	-0.13	-0.14	-0.14
19-C	-0.10	-0.11	-0.11
20-C	-0.10	-0.11	-0.11
21-C	-0.08	-0.10	-0.10
22-C	-0.10	-0.11	-0.11
23-C	-0.10	-0.11	-0.11
24-C	-0.10	-0.11	-0.11
25-C	-0.10	-0.11	-0.11
26-C	-0.09	-0.10	-0.10
27-C	-0.10	-0.11	-0.11

EK-3: (Devam) M51 kodlu bileşiklerin çalışılan çözücü fazları için hesaplanmış Mulliken atomik yükleri.

28- C	-0.10	-0.11	-0.10
29-C	0.24	0.24	0.24
30-C	0.24	0.24	0.24
31-N	-0.64	-0.64	-0.64
32-C	-0.13	-0.14	-0.14
33-C	-0.12	-0.13	-0.13
34-C	0.27	0.27	0.28
35-C	-0.11	-0.12	-0.12
36-C	-0.13	-0.14	-0.14
37-C	0.05	0.04	0.04
38-C	0.05	0.04	0.04
39-C	-0.06	-0.06	-0.06
40-C	-0.11	-0.10	-0.10
41-C	0.06	0.06	0.06
42-C	-0.11	-0.10	-0.10
43-C	-0.06	-0.06	-0.06
44-C	0.16	0.15	0.14
45-C	-0.49	-0.50	-0.51
46-C	0.32	0.31	0.31
47-C	-0.17	-0.18	-0.18
48-C	-0.16	-0.16	-0.16
49-C	0.35	0.34	0.34
50-N	-0.64	-0.64	-0.63
51-C	0.44	0.46	0.46
52-N	-0.36	-0.40	-0.42
53-N	-0.36	-0.41	-0.42
54-C	0.44	0.47	0.46
55-O	-0.49	-0.52	-0.51
56-C	0.35	0.33	0.34
57-C	-0.16	-0.14	-0.17
58-C	-0.17	-0.18	-0.18
59-C	0.32	0.313	0.31

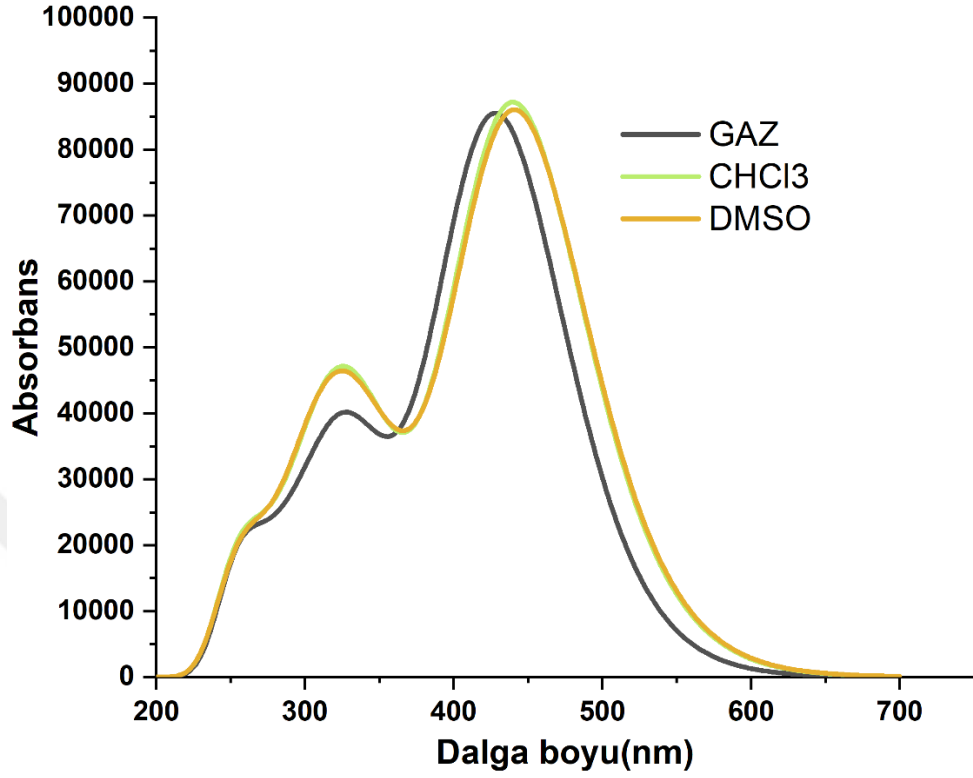
EK-3: (Devam) M51 kodlu bileşiklerin çalışılan çözücü fazları için hesaplanmış Mulliken atomik yükleri.

60-H	0.10	0.11	0.11
61-H	0.09	0.10	0.11
62-H	0.08	0.10	0.10
63-H	0.09	0.10	0.11
64-H	0.10	0.11	0.11
65-H	0.10	0.11	0.11
66-H	0.09	0.10	0.11
67-H	0.08	0.10	0.10
68-H	0.09	0.10	0.11
69-H	0.10	0.11	0.11
70-H	0.13	0.11	0.11
71-H	0.11	0.11	0.11
72-H	0.10	0.11	0.11
73-H	0.08	0.11	0.11
74-H	0.10	0.11	0.11
75-H	0.09	0.10	0.11
76-H	0.09	0.10	0.10
77-H	0.09	0.10	0.11
78-H	0.10	0.11	0.11
79-H	0.10	0.11	0.11
80-H	0.09	0.10	0.11
81-H	0.08	0.10	0.10
82-H	0.09	0.10	0.11
83-H	0.10	0.11	0.11
84-H	0.08	0.10	0.11
85-H	0.10	0.12	0.11
86-H	0.11	0.11	0.11
87-H	0.13	0.12	0.11
88-H	0.13	0.14	0.14
89-H	0.12	0.14	0.14
90-H	0.12	0.14	0.14
91-H	0.13	0.14	0.14

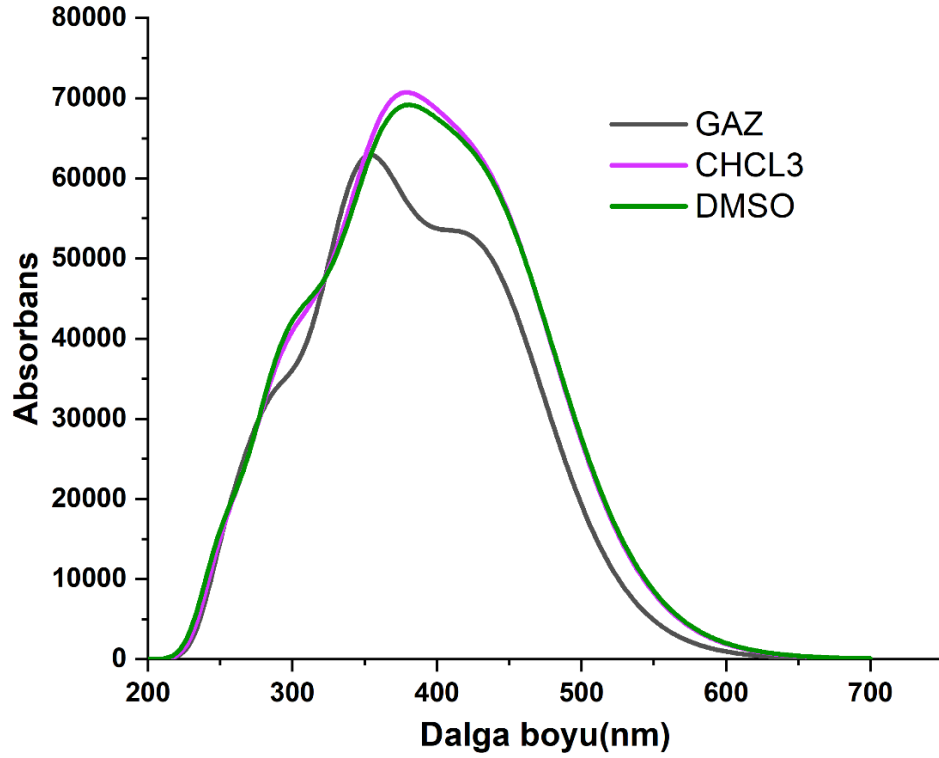
EK-3: (Devam) M51 kodlu bileşiklerin çalışılan çözücü fazları için hesaplanmış Mulliken atomik yükleri

92-H	0.10	0.12	0.13
93-H	0.11	0.13	0.13
94-H	0.11	0.13	0.13
95-H	0.10	0.12	0.13
96-Br	-0.10	-0.11	-0.12
97-H	0.09	0.10	0.11

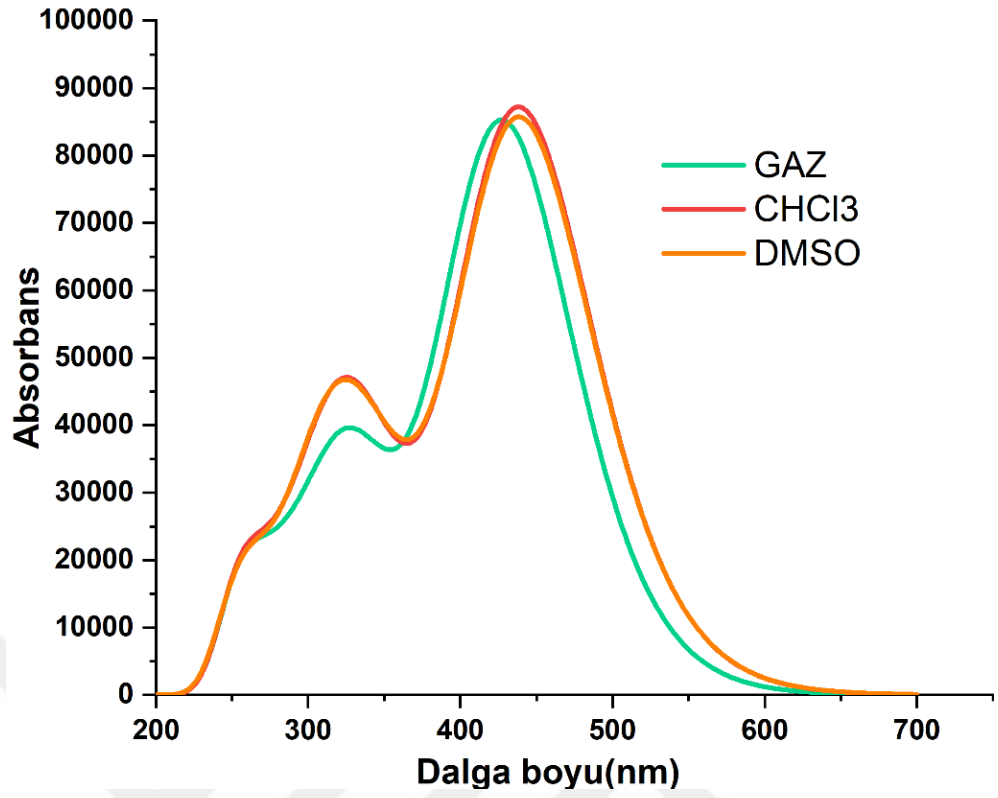
EK-4: M12,M13,M22,M23,M32,M33,M42,M43,M52,M53 konformelerinin teorik UV–Vis spektrumları



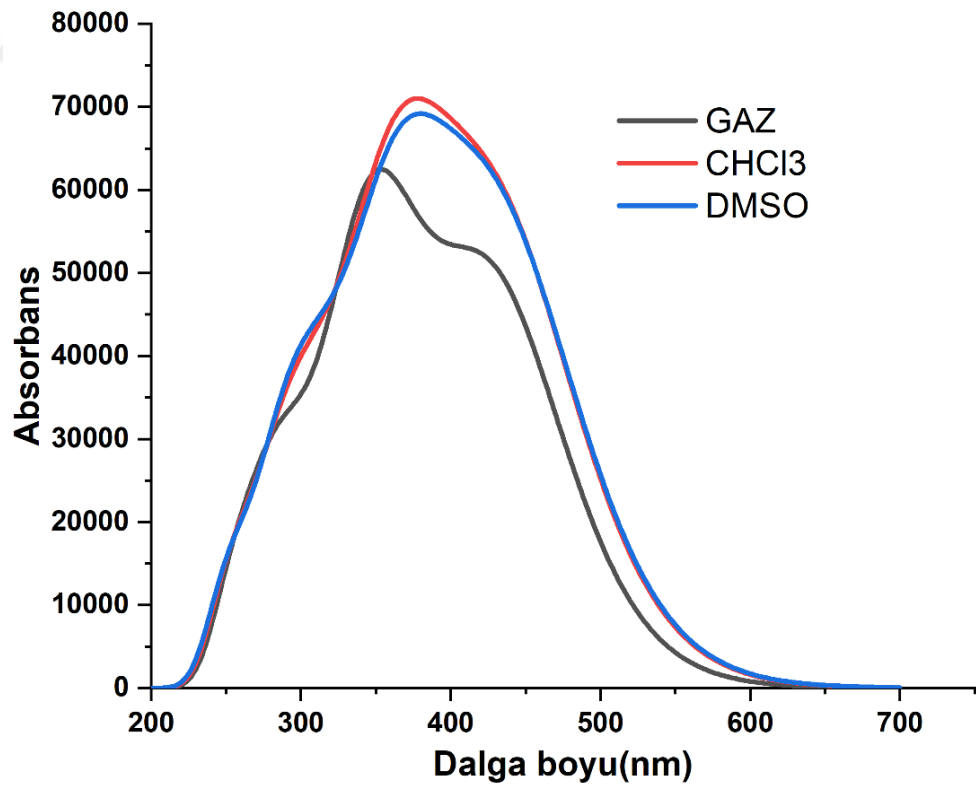
M12 konformerinin teorik UV–Vis spektrumları



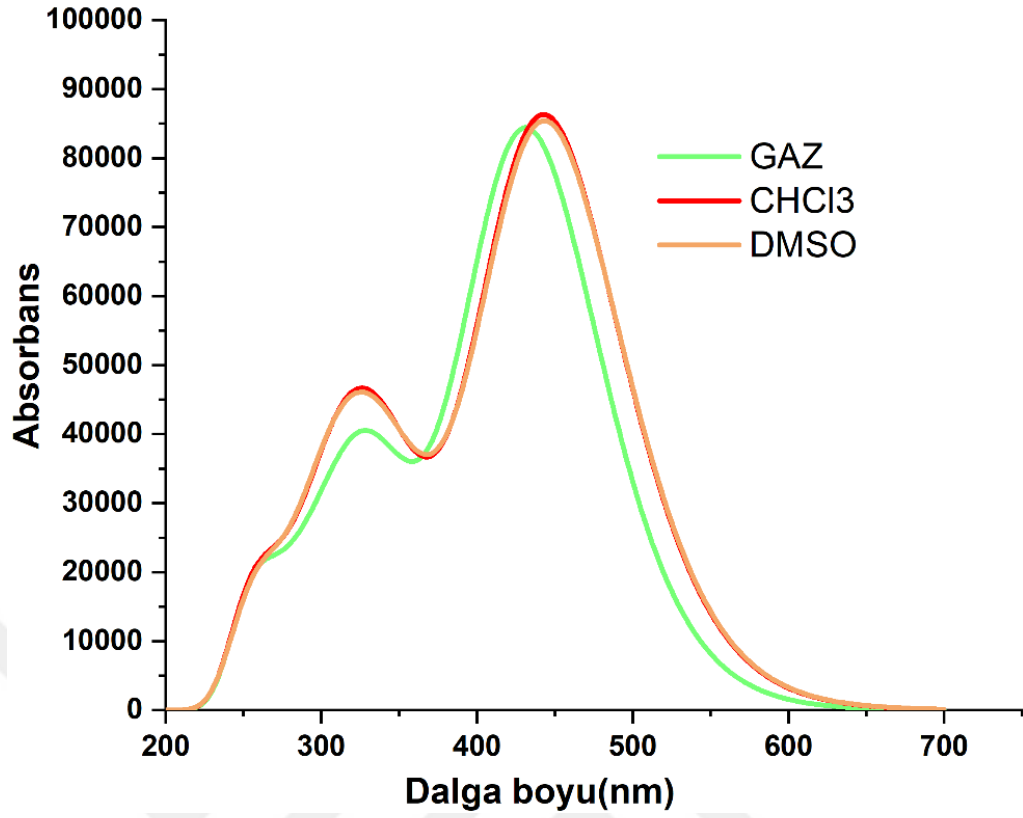
M13 konformerinin teorik UV–Vis spektrumları



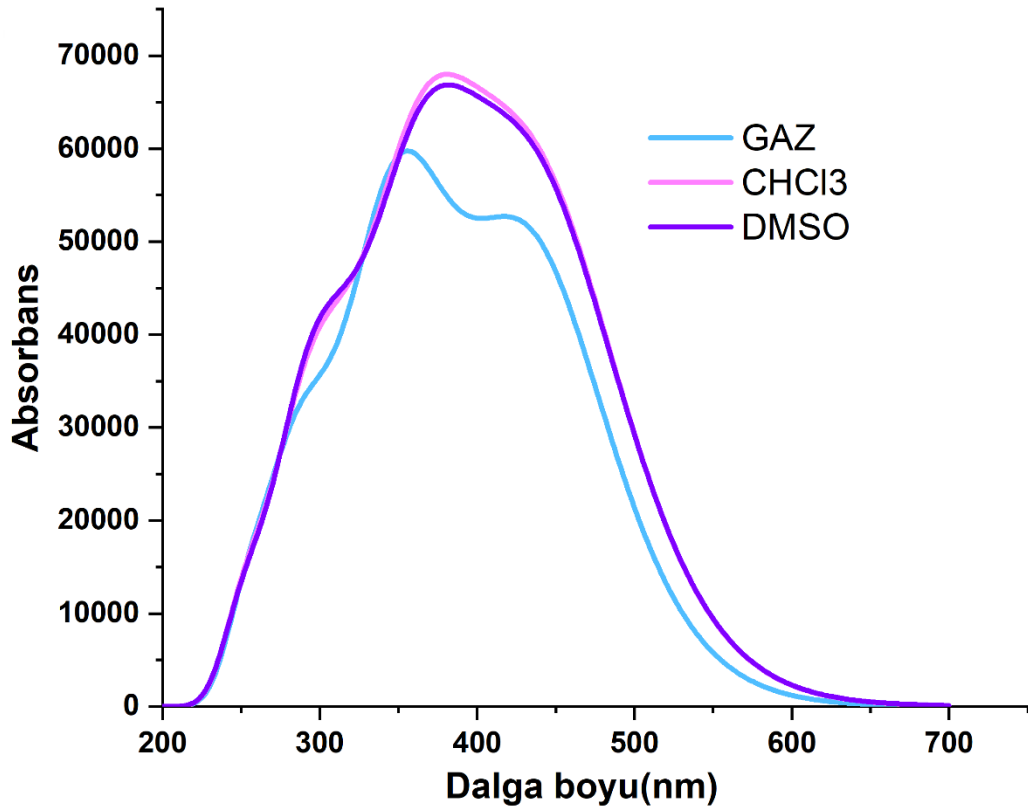
M22 konformerinin teorik UV-Vis spektrumları



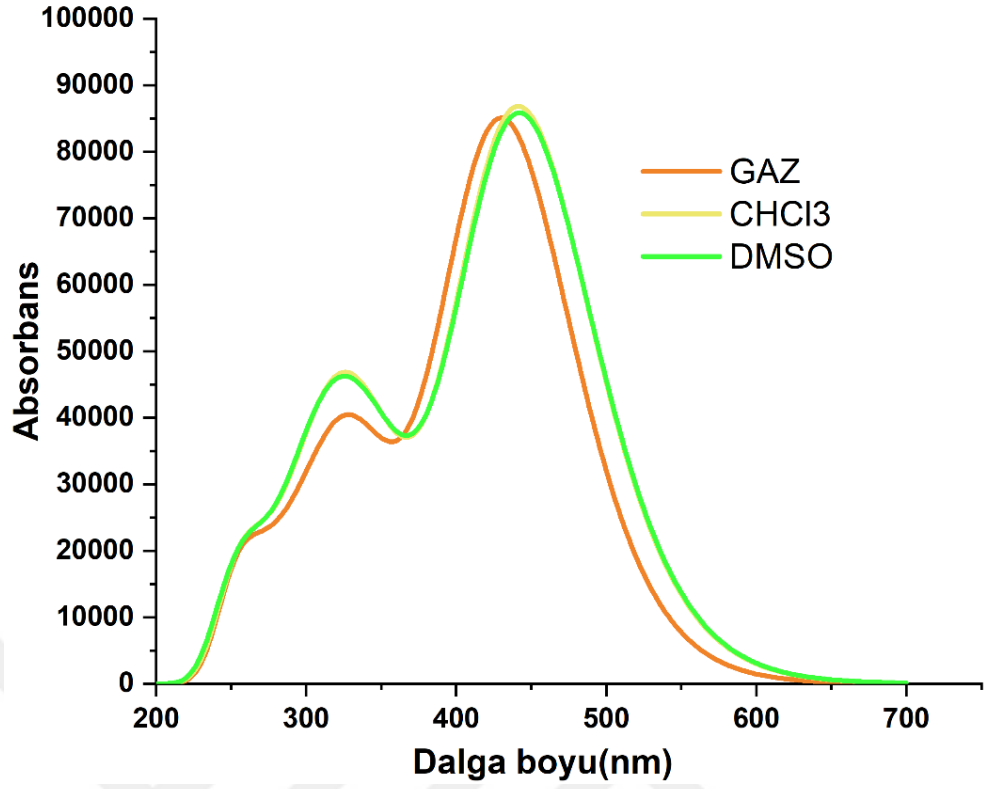
M23 konformerinin teorik UV-Vis spektrumları



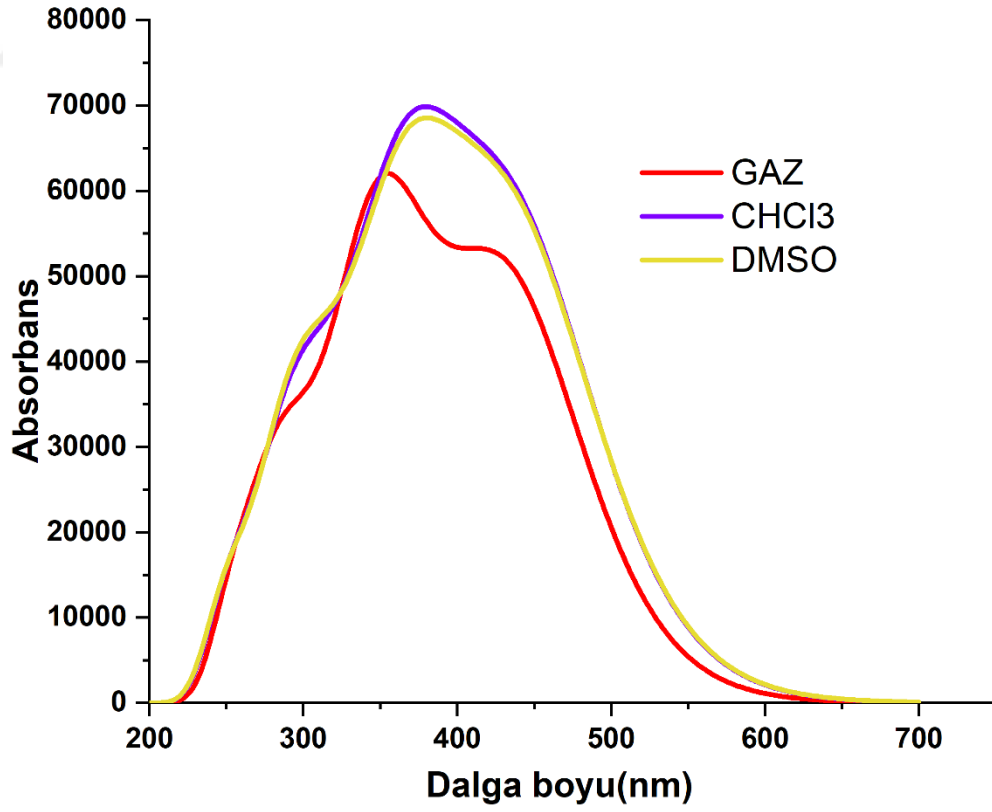
M32 konformerinin teorik UV-Vis spektrumları



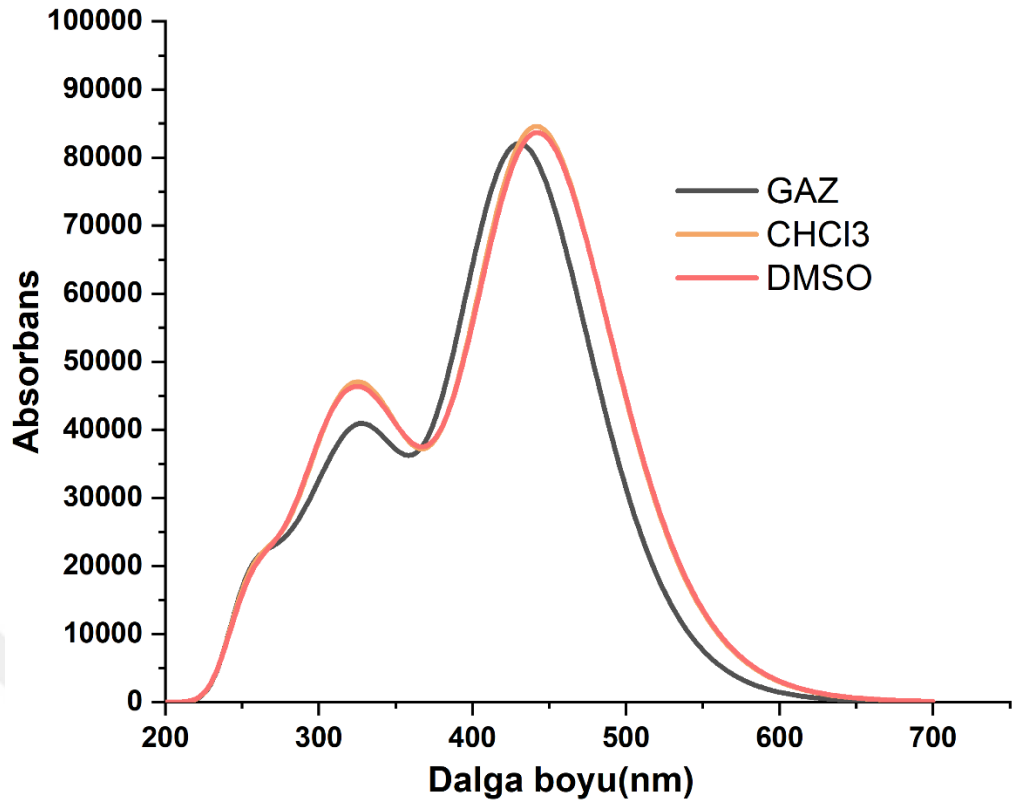
M33 konformerinin teorik UV-Vis spektrumları



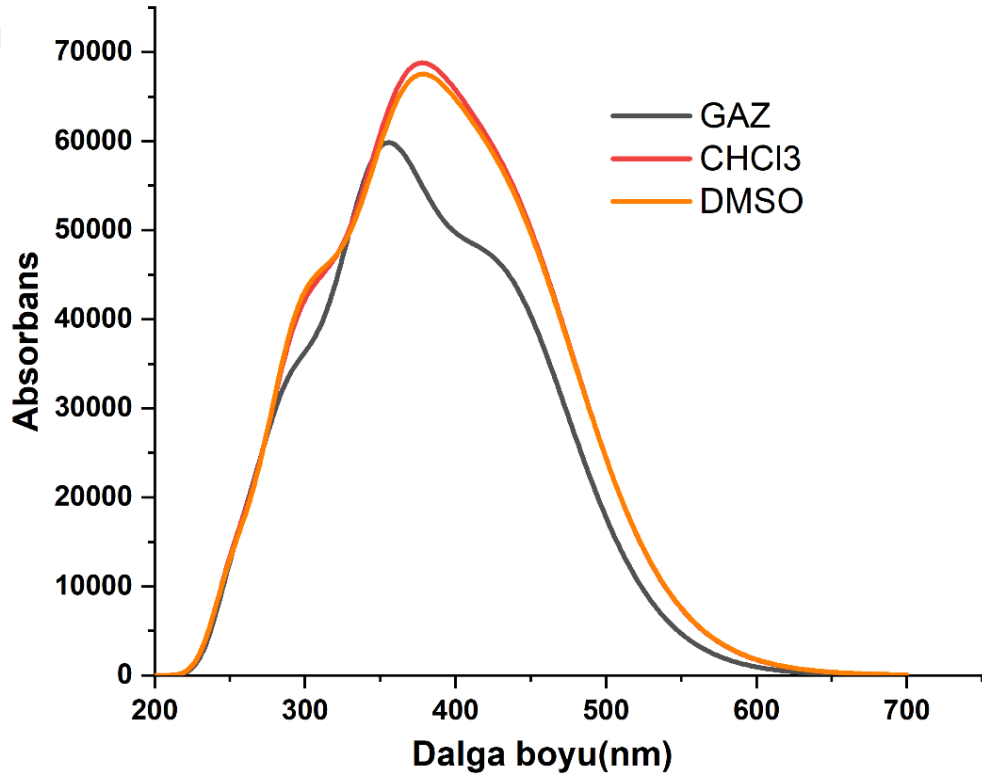
M42 konformerinin teorik UV-Vis spektrumları



M43 konformerinin teorik UV-Vis spektrumları

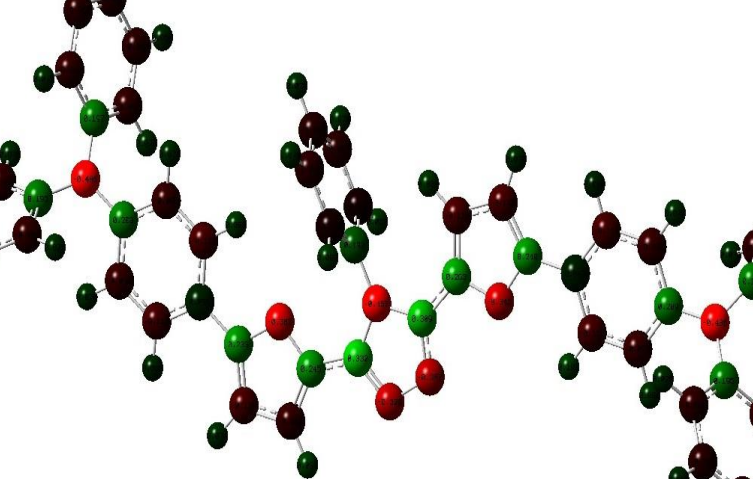


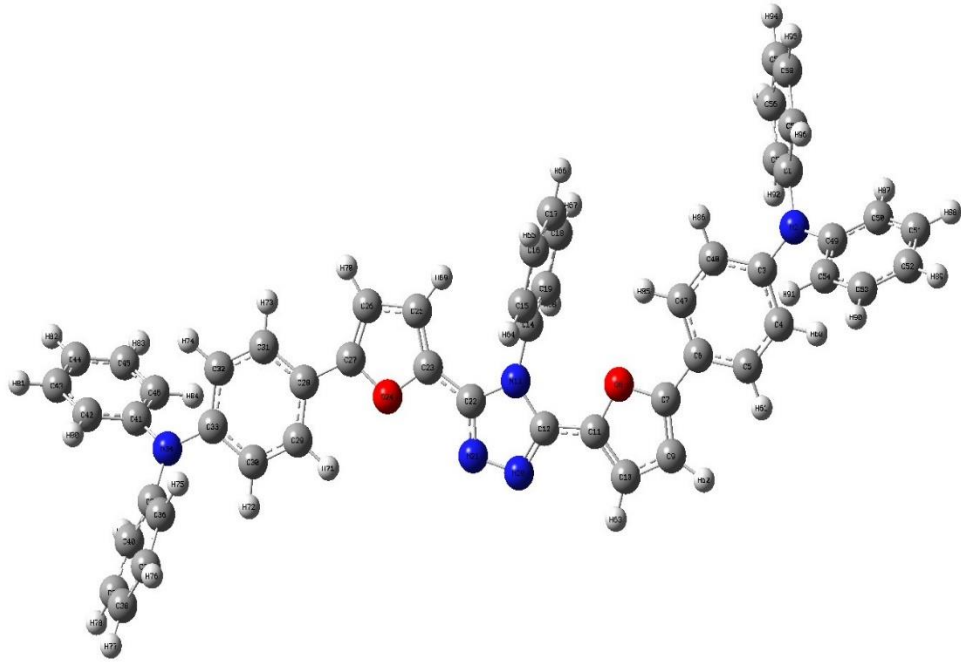
M52 konformerinin teorik UV-Vis spektrumları



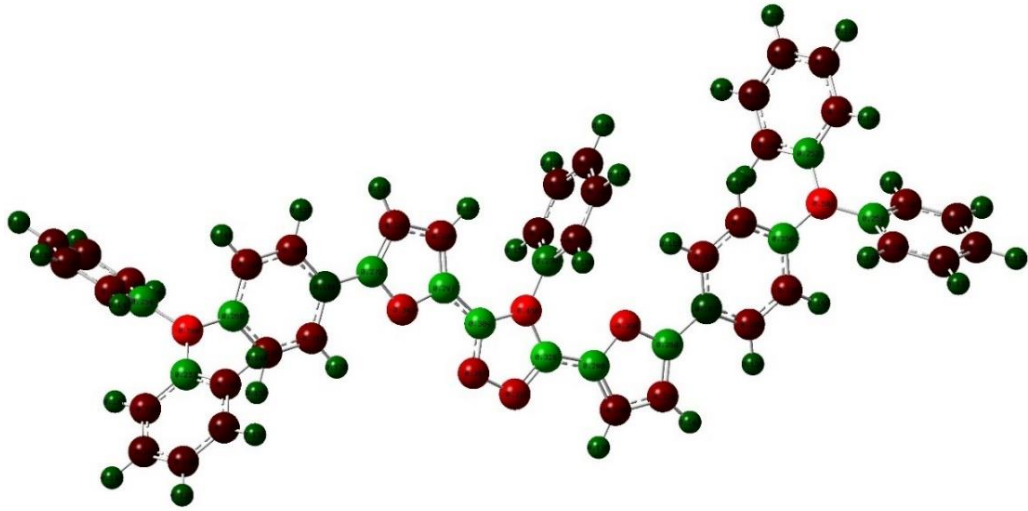
M53 konformerinin teorik UV-Vis spektrumları

The ORTEP diagram illustrates the molecular structure of 2,2,4,4-tetrakis(4-oxo-4H-chromen-3-yl)-6,6-dimethyl-1,3-dioxane-5,5-diol. The structure is shown with thermal ellipsoids at the 50% probability level. The molecule features a central 1,3-dioxane ring substituted with four chromone units and two methyl groups. The atoms are labeled with their respective symbols and numbers, and the structure is presented in a perspective view.





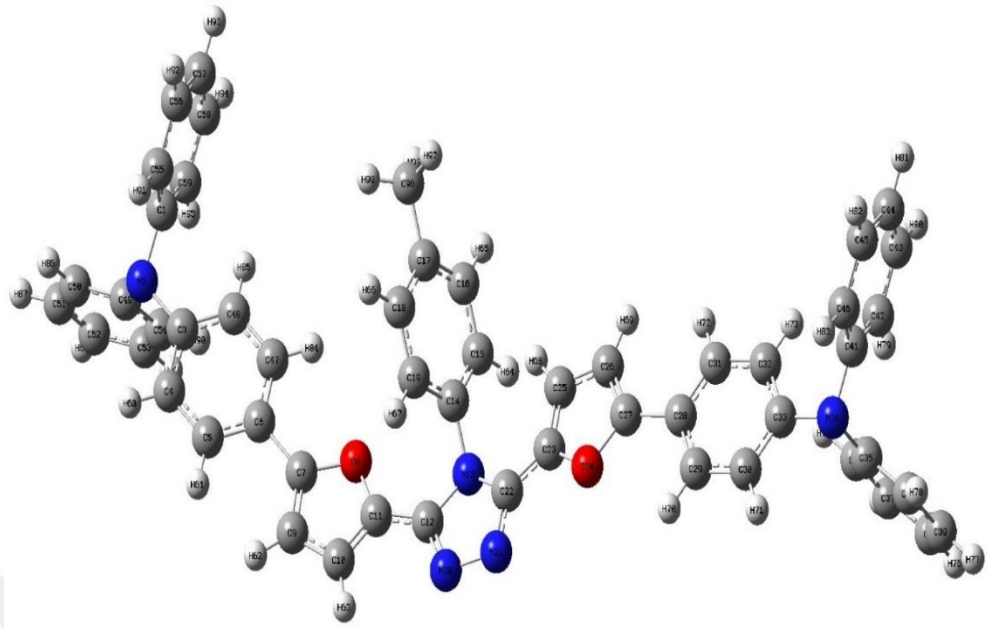
M1 molekülünün üçüncü konformerinin (M13) 3 boyutlu yapısı



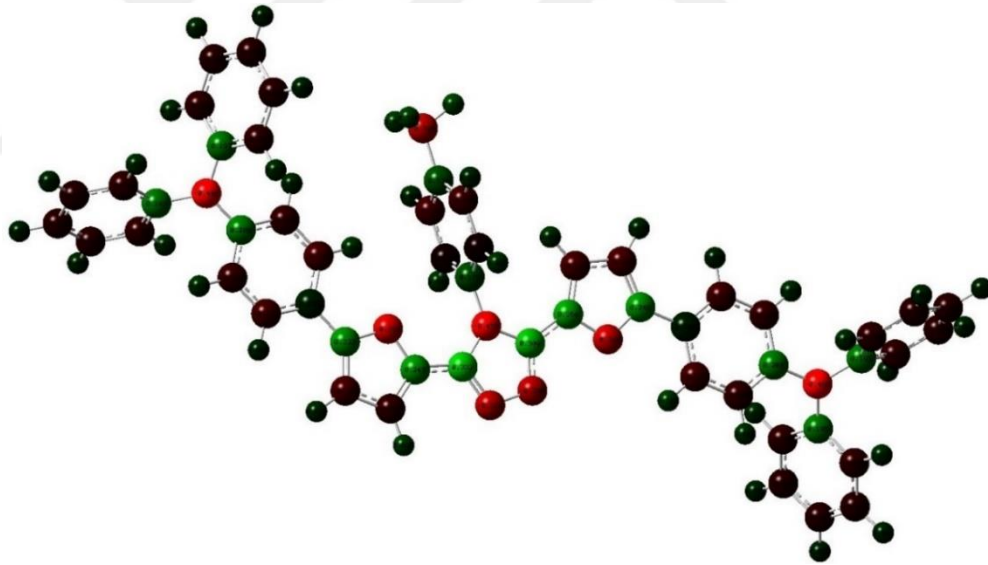
-0.650

+ 0.650

M13 konformerinin Mulliken yük dağılımı



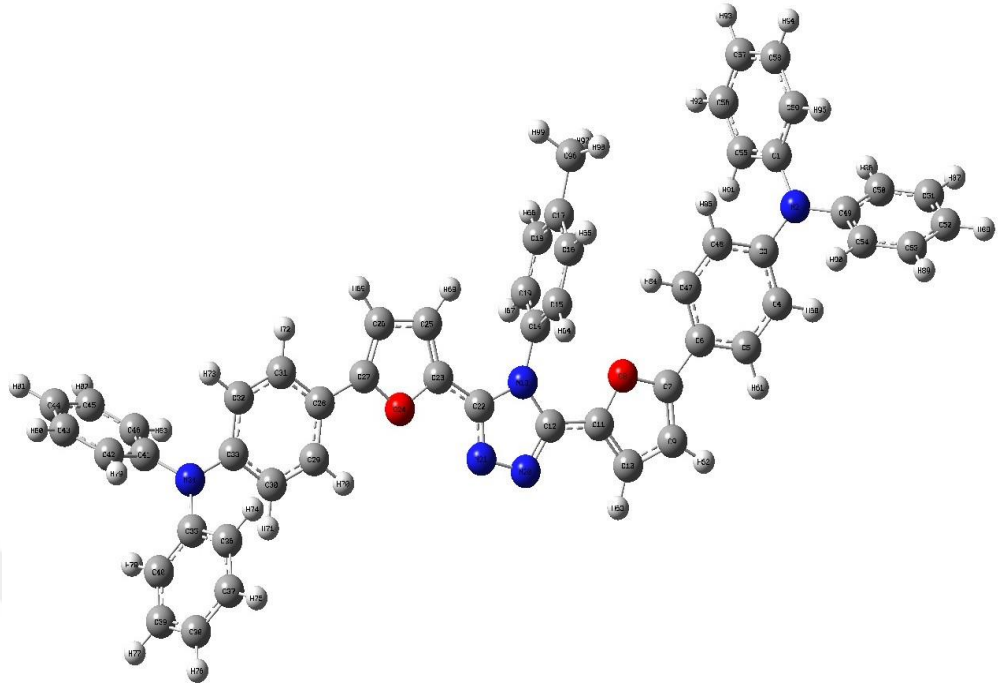
M2 molekülünün ikinci konformerinin (**M22**) 3 boyutlu yapısı



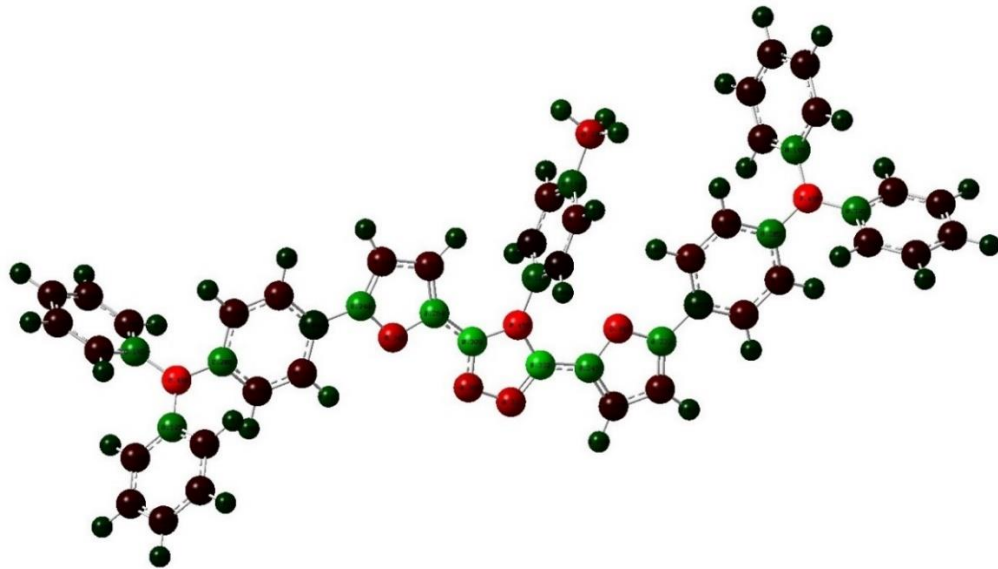
-0.643

+ 0.643

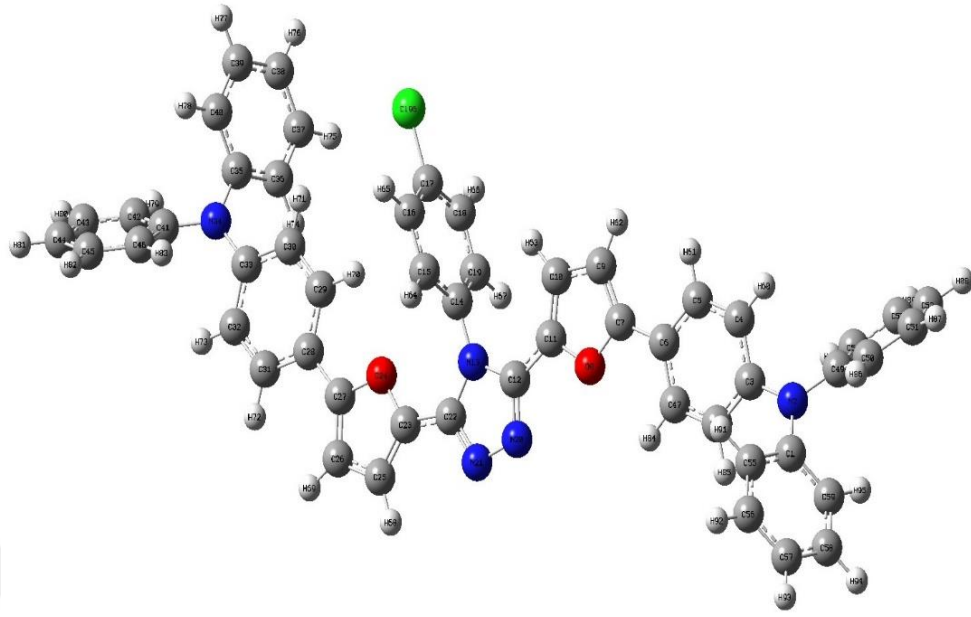
M22 konformerinin Mulliken yük dağılımı



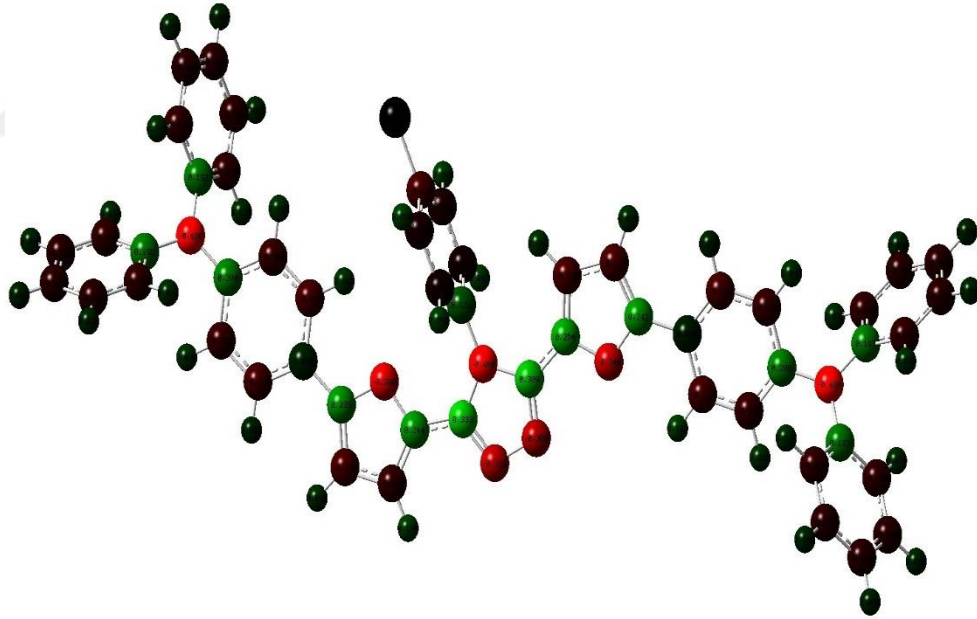
M2 molekülünün üçüncü konformerinin (M23) 3 boyutlu yapısı



M23 konformerinin Mulliken yük dağılımı



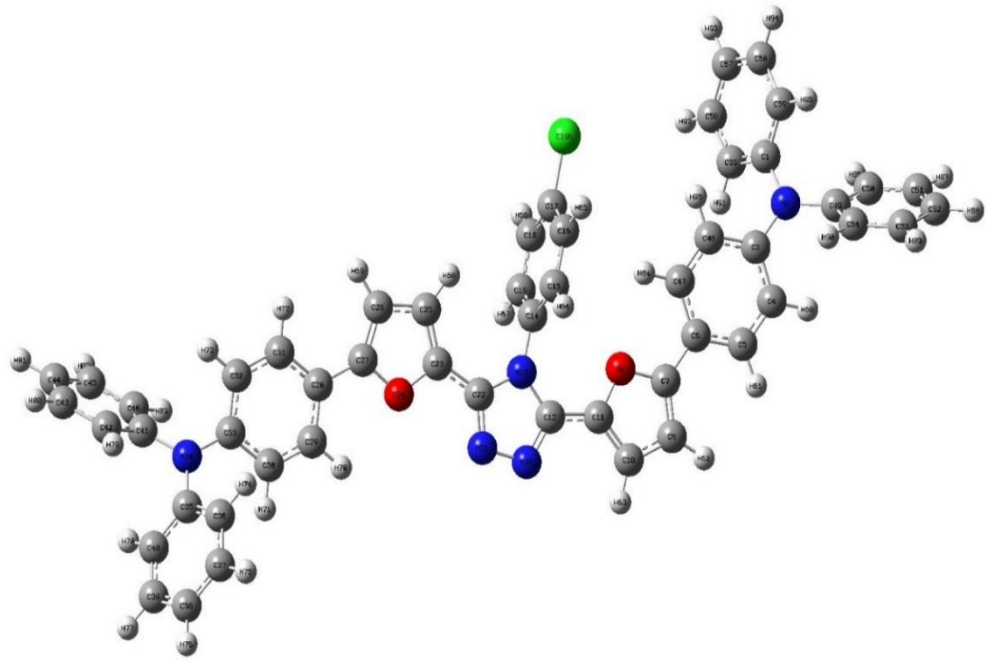
M3 molekülünün ikinci konformerinin (*M32*) 3 boyutlu yapısı



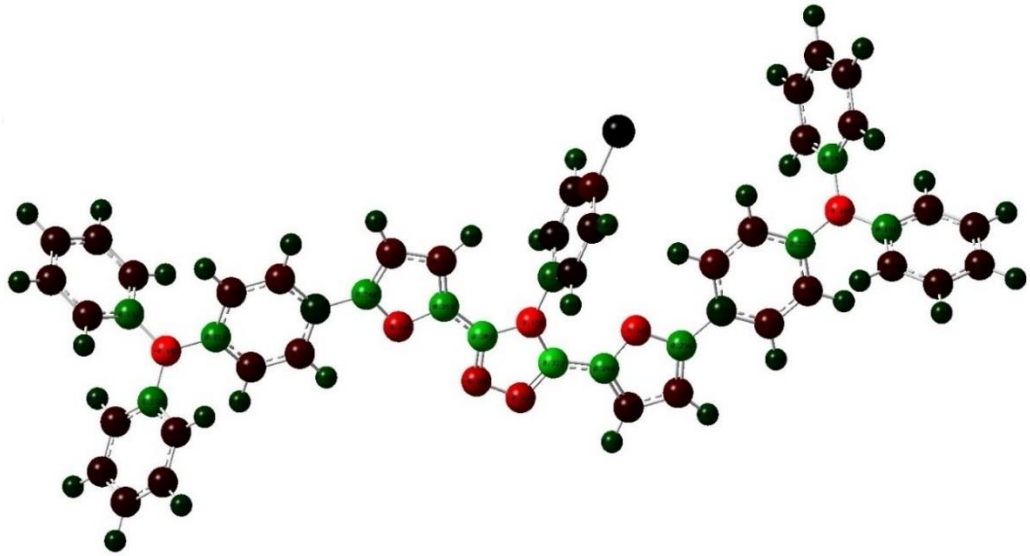
-0.645

+ 0.645

M32 konformerinin Mulliken yük dağılımı



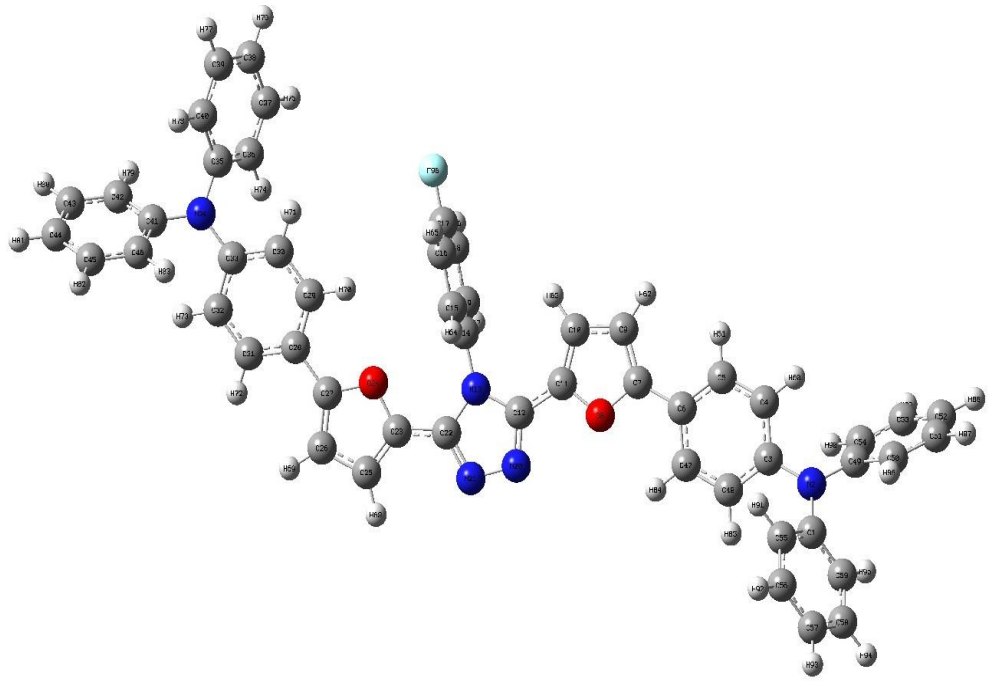
M3 molekülünün üçüncü konformerinin (M33) 3 boyutlu yapısı



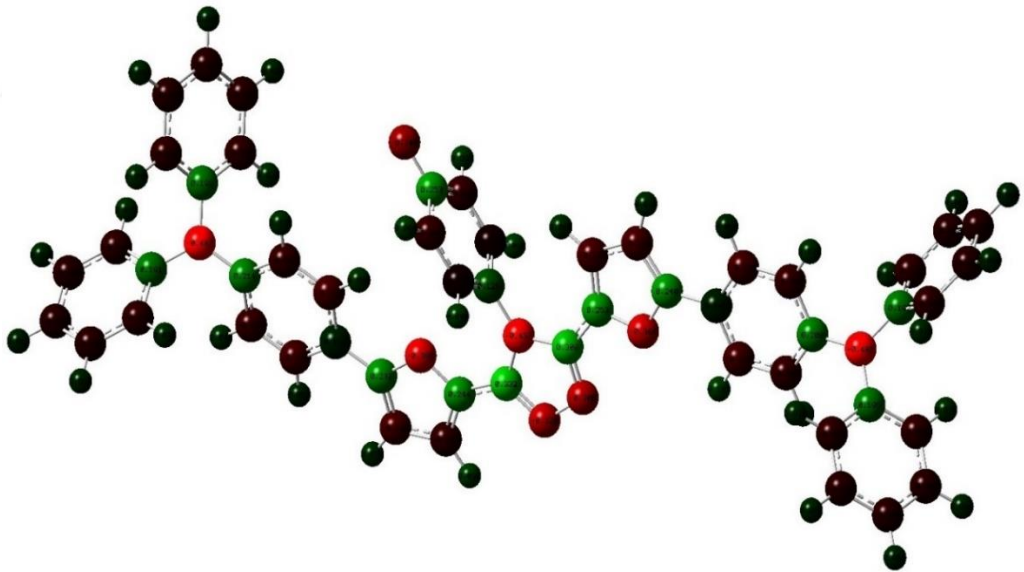
-0.653

+0.653

M33 konformerinin Mulliken yük dağılımı



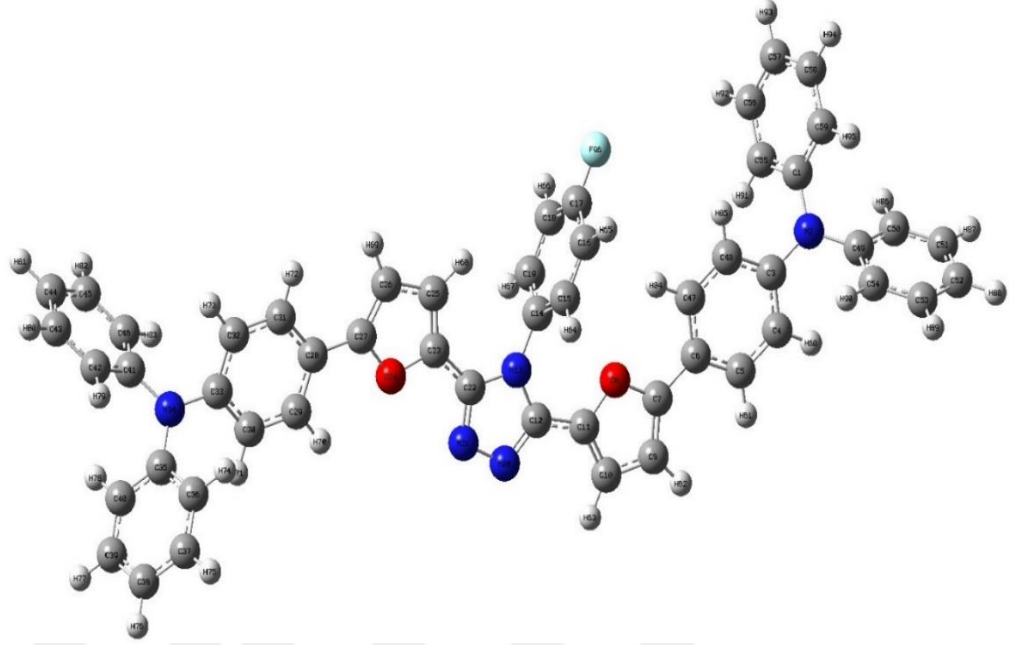
M4 molekülünün ikinci konformerinin (M42) 3 boyutlu yapısı



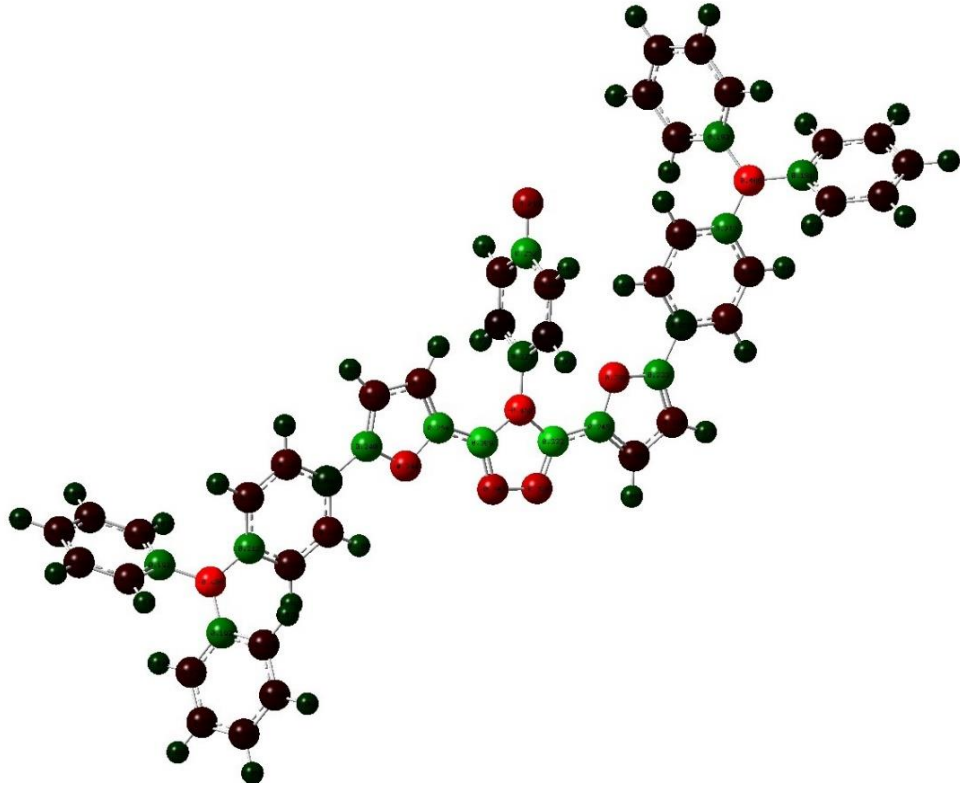
-0.644

+0.644

M42 konformerinin Mulliken yük dağılımı



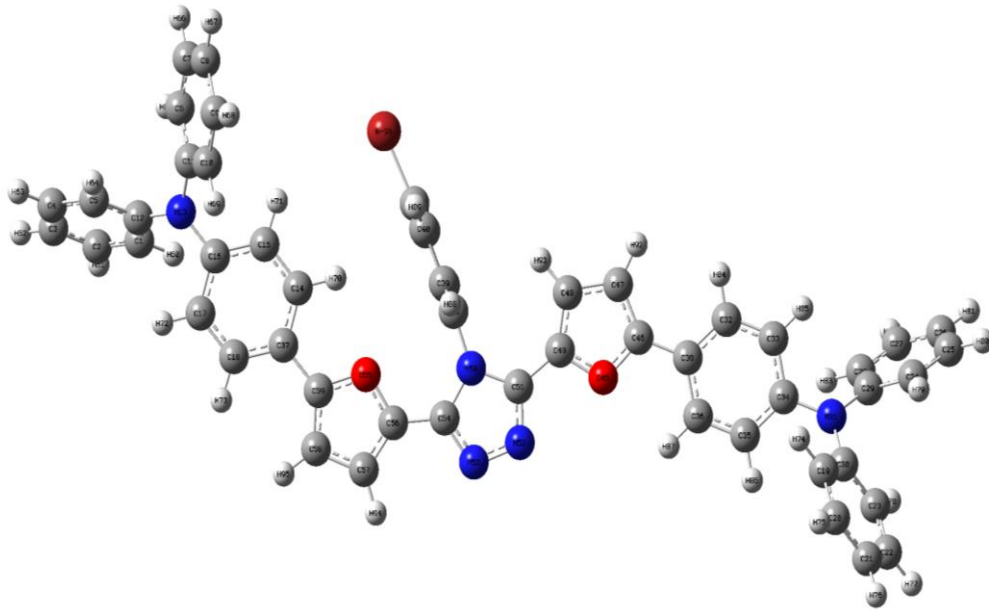
M4 molekülünün üçüncü konformerinin (*M43*) 3 boyutlu yapısı



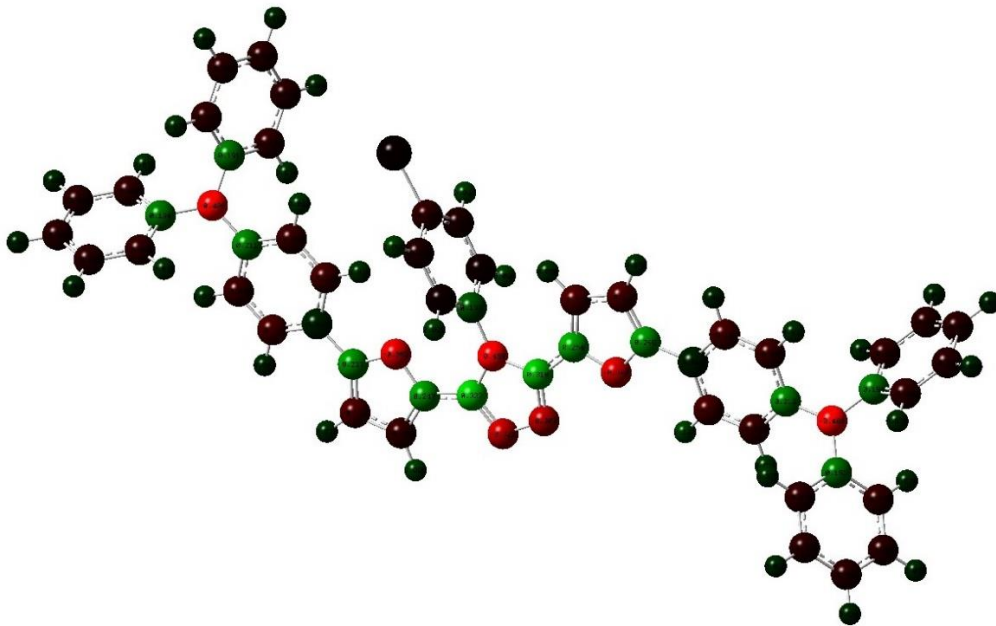
-0.652

+0.652

M43 konformerinin Mulliken yük dağılımı



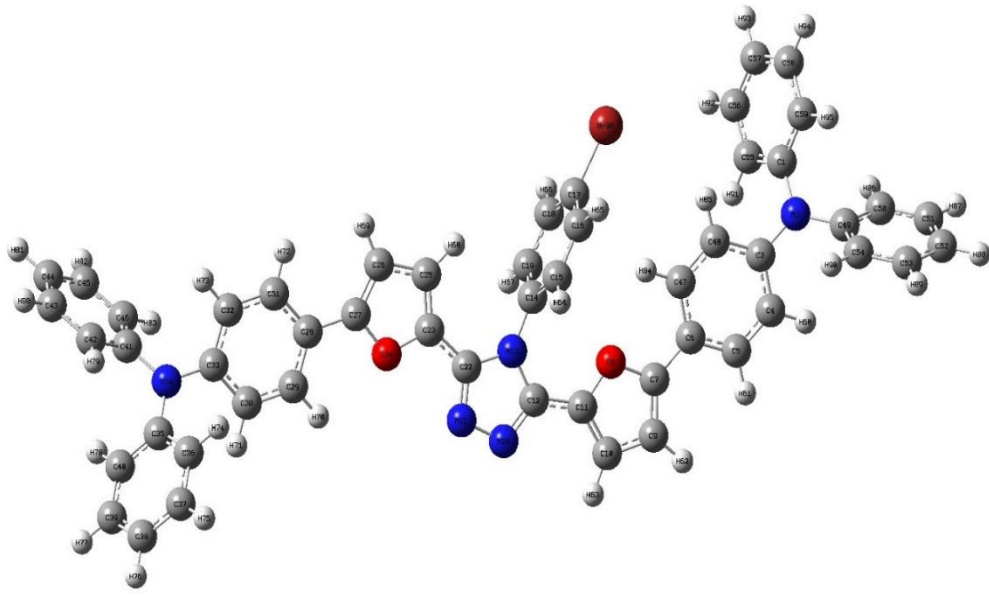
M5 molekülünün ikinci konformerinin (M52) 3 boyutlu yapısı



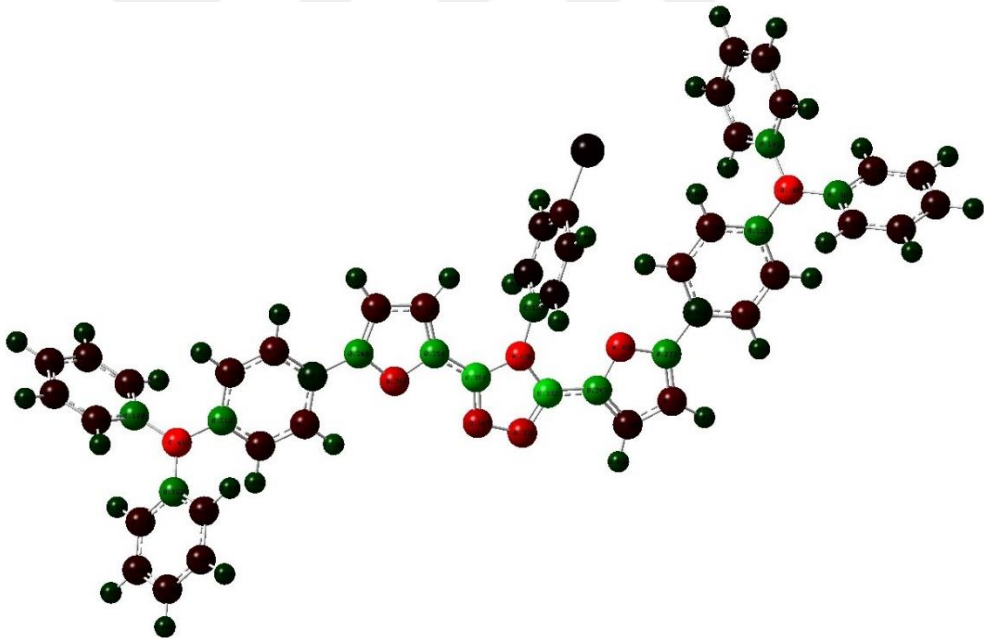
-0.644

+ 0.644

M52 konformerinin Mulliken yük dağılımı



M5 molekülünün üçüncü konformerinin (M53) 3 boyutlu yapısı



M53 konformerinin Mulliken yük dağılımı

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Abdul Manan ZAHİR

Ana Dili: Özbekçe

Yabancı Dil : İngilizce , Arapça , Türkçe , Farsça , Peştunca

Eğitim ve Mesleki Geçmiş

- 2019-2021, Eskişehir Teknik Üniversitesi, Lisansüstü Eğitim Enstitüsü, Organik Kimya Tezli Yüksek Lisans
- 2020-2021, Hacı Hilmi Efendi Hafızlık Kur'an-ı Kerim Kursu Mezunu
- 2018-2019, Anadolu Üniversitesi, TÖMER
- 2009-2013, Jawzjan Üniversitesi, Kimya mühendislik Fakültesi.
- 07/03/2012, Behzad English Language Academic Center , mezunu
- 01/11/2010 – 30/04/2011, Independent Administrative Reform and Civil Service Commission
- 2007, Zahir Faryabi(Balkh) Lisesi Mezunu

Sertifikalar

- 2016, Workshop on Critical Thinking Skills Development , USAID Jawzjan University, Şebirgan
- 2019, Akademik Türkçe, Katılım Sertifikası, Anadolu TÖMER, Eskişehir
- 2021, Kur'an-ı Kerim Hafızlık Belgesi TC Diyanet İşleri Başkanlığı Tarafından